

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Главная задача Лаборатории информационных технологий состоит в обеспечении теоретических и экспериментальных исследований, проводимых в институтах стран-участниц ОИЯИ и других научно-исследовательских центрах, современными телекоммуникационными, сетевыми, информационными ресурсами и математической поддержкой.

В 2004 г. научная программа лаборатории определялась, главным образом, двумя темами первого приоритета Проблемно-тематического плана научных исследований и международного сотрудничества ОИЯИ. Сотрудники лаборатории участвовали в исследованиях по 13 темам совместно с другими лабораториями Института на уровне проектов и по 17 темам в рамках сотрудничества. Основная цель лаборатории — выполнение исследований в рамках тем «Информационная, компьютерная и сетевая поддержка деятельности ОИЯИ» (тема 09-6-1048-2003/2007, рук. В. В. Иванов, П. В. Зрелов и В. В. Кореньков) и «Компьютерная физика для теоретических и экспериментальных исследований» (тема 09-6-1041-2002/2004, рук. И. В. Пузынин и А. Полянский). Результаты исследований, выполненных в рамках указанных тем, были опубликованы более чем в 140 научных статьях в реферируемых журналах, трудах научных конференций и в виде препринтов.

Ряд научных проектов, представленных сотрудниками ЛИТ, получил гранты INTAS, Комиссии европейского сообщества в рамках сотрудничества России и ЕС, а также 13 грантов Российского фонда фундаментальных исследований. Семь проектов относятся к созданию и развитию информационных, вычислительных и телекоммуникационных ресурсов для выполнения фундаментальных исследований, шесть остальных представляют собой инициативные научные проекты.

В 2004 г. ЛИТ была организатором двух международных конференций. С 25 по 31 января в ОИЯИ проходила XI Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Целью таких конференций является объединение усилий российских и иностранных ученых, специалистов и преподавателей, направленных на развитие науки и высшего образования в России и других странах СНГ, а также сохранение традиций российской науки и образования и их интеграции в международное сообщество.

С 29 июня по 2 июля проходила международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании». Конференция явилась первой в России, которая была посвящена обсуждению вопросов, связанных с использованием грид- и распределенных вычислений в различных областях.

ИНФОРМАЦИОННАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И СЕТЕВАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

Внешние телекоммуникации

В настоящее время ОИЯИ арендует канал компьютерной связи в 45 Мбит/с до Москвы у Российского государственного унитарного предприятия «Космическая связь» (ГПКС «Дубна»); таким образом, ОИЯИ имеет доступ к российским сетям и

информационным ресурсам, а также доступ к международному каналу через сети RBNNet+RUNNet в общем потоке данных 2,5 Гбит/с. Увеличение пропускной способности канала Дубна–Москва до 1 Гбит/с запланировано на 2005 г. На рис. 1 показано ближайшее будущее внешних каналов ОИЯИ.

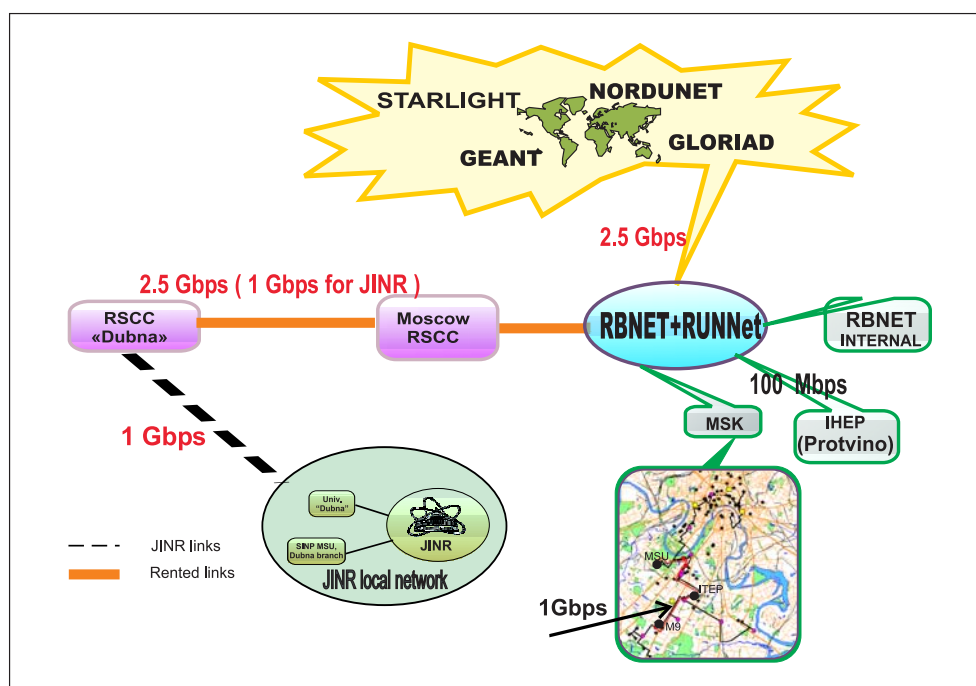


Рис. 1. Запланированные внешние каналы ОИЯИ

Общий объем входящего трафика за 2004 г. составил 36,1 Тбайт (19,89 Тбайт в 2003 г.), а исходящего трафика — 43,64 Тбайт (24,43 Тбайт в 2003 г.).

В табл.1 приведено распределение трафика между подразделениями ОИЯИ и университетом «Дубна» (> 500 Гбайт по входящему трафику).

Таблица 1

Потребители	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт	Входящий трафик, %	Исходящий трафик, %
ЛИТ	8,5	11,24	23,54	25,75
ЛЯП	5,34	6,24	14,8	14,29
ЛЯР	3,98	4,01	11,03	9,2
Серверы	3,96	1,31	10,98	3,0
ЛФЧ	3,6	3,86	9,98	8,85
ЛВЭ	2,4	1,6	6,64	3,66
Университет «Дубна»	2,26	2,09	6,26	4,78
ЛТФ	2,23	2,0	6,17	4,59
ЛНФ	1,73	8,42	4,78	19,3
Управление ОИЯИ	0,66	1,53	1,79	3,5

Локальная вычислительная сеть ОИЯИ (ЛВС ОИЯИ)

В настоящее время база данных IP-адресов содержит 4801 зарегистрированный элемент ЛВС ОИЯИ (4506 — в 2003 г.).

Спектр действий, нацеленных на создание надежной, защищенной и быстродействующей локальной сети ОИЯИ, включает:

- разработку устойчивой к сбоям архитектуры опорной сети ОИЯИ;

- создание системы контроля и управления ЛВС ОИЯИ;
- принятие организационных и технических мер, направленных на обеспечение скорости передачи данных 1 Гбит/с в лабораториях ОИЯИ;
- создание системы безопасности ЛВС ОИЯИ;
- оптимизацию информационного трафика локальной сети ОИЯИ.

В 2003 г. была полностью завершена прокладка оптоволоконного кабеля для формирования транспортной среды локальной сети ОИЯИ, основанной на технологии Gigabit Ethernet.

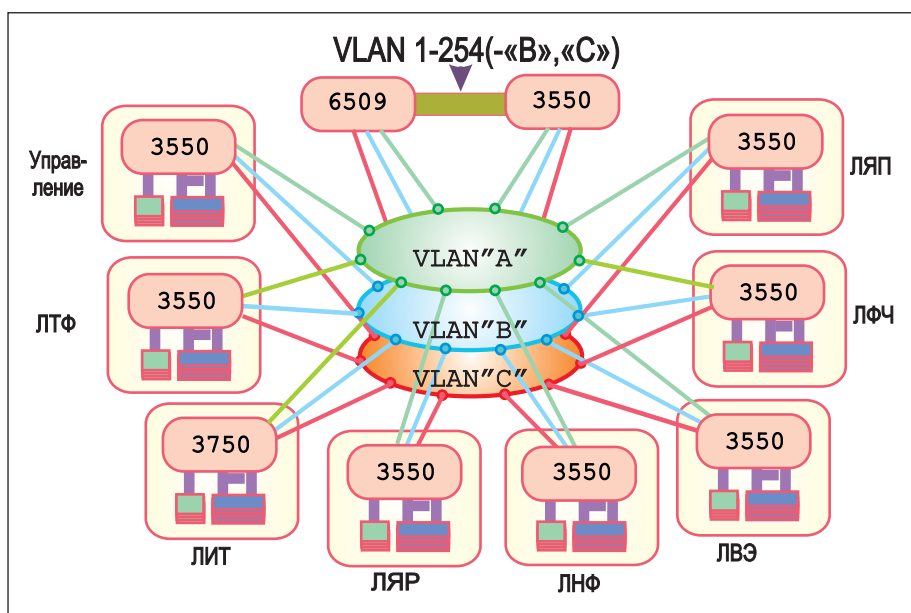


Рис. 2. Логическая схема ЛВС ОИЯИ

В первом квартале 2004 г. работа, необходимая для запуска сети на этой технологии, была завершена: протестирован новый одномодовый оптоволоконный кабель линии связи, созданы файлы конфигурации коммутаторов и проведена проверка надлежащего функционирования первых фрагментов этой структуры и затем всей локальной сети Gigabit Ethernet ОИЯИ.

Локальная сеть ОИЯИ на базе Gigabit Ethernet стала доступна для пользователей в марте 2004 г. Коммутаторы 3550 установлены в восьми основных подразделениях ОИЯИ. Все сегменты, связанные между собой оптическим волокном, восходят к центральному коммутатору со свойствами маршрутизатора Cisco Catalyst 6509 в ЛИТ, формируя звездообразную топологию опорной сети ОИЯИ на основе технологии Gigabit Ethernet (рис. 2).

Продолжены исследования сетевого трафика. Метод главных компонентов, а именно подход «Гусеница»-SSA, применен для анализа измерений информационного трафика. Этот подход оказался очень эффективным для понимания основных особенностей составляющих, формирующих сетевой трафик. Статистический анализ главных компонентов показал, что уже несколько компонентов формируют основную часть информационного трафика. Остаточные компоненты, которые не следуют основному закону сетевого трафика, могут быть интерпретированы как случайный шум. На основе использования характерных особенностей остаточных компонентов разработан статистический метод от-

бора таких компонентов с целью их исключения из всего набора главных компонентов [1].

Разработана модификация кинетического уравнения Пригожина–Хермана, применимая к сетевому трафику. Решение этого уравнения для однородных, независимых от времени условий и целевой функции распределения скоростей в форме логнормального распределения указывает на существование двух режимов, отвечающих свободному (режим слабой концентрации) и коллективному (режим «затора») движению пакетов. В случае слабой концентрации наблюдается почти линейная зависимость потока информации от его концентрации. В то же время чем выше скорость прохождения информации, тем при меньшей концентрации достигается максимальный поток информации. При приближении к критической концентрации не наблюдается заметной разницы в потоках для различных средних скоростей, в то время как в областях свободного движения пакетов наблюдаются весьма заметные различия [2].

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ

Около 450 сотрудников ОИЯИ и других научно-исследовательских центров являются пользователями Центрального информационно-вычислительного комплекса ОИЯИ (ЦИВК ОИЯИ). В табл. 2 приведено распределение пользователей ЦИВК ОИЯИ по подразделениям:

Таблица 2

ЛИТ	ЛЯП	ЛФЧ	ЛЯП	ЛЯР	ЛТФ	Другие организации	ЛНФ	Управление ОИЯИ
157	100	52	42	28	14	24	12	8

Таблица 3

ЛИТ	ЛЯР	ЛЯП	ЛФЧ	ЛНФ	ЛТФ	ЛВЭ	Сеансы массового моделирования	Прочие цели
7	1	14	15	3	14	8,0	36	2

ЦИВК ОИЯИ является составной частью российского сегмента грид, который используется для работ по проекту LHC и других приложений.

В настоящее время ЦИВК ОИЯИ включает: интерактивный кластер общего доступа; вычислительную ферму для выполнения задач моделирования и обработки данных для больших экспериментов с участием ОИЯИ; вычислительную ферму для задач экспериментов на LHC; вычислительную ферму для выполнения параллельных вычислений на основе современных сетевых технологий (Myninet, SCI и т. д.); вычислительную ферму LCG-2, включенную во всемирную вычислительную инфраструктуру; ресурсы памяти большой емкости на дисковых RAID-массивах.

Общая производительность ферм ЦИВК ОИЯИ составляет 8,0 kSPI95, дисковое пространство 14,0 Тбайт. Среднегодовая загрузка составила 32 %. Средняя загрузка фермы общего доступа составила 50 % в течение года и 82,25 % в апреле 2004 г.

Ресурсы ЦИВК ОИЯИ использовались в экспериментах E391A (KEK), KLOD, COMPASS, D0, DIRAC, HARP, CMS, ALICE, ATLAS, HERAb, H1, NEMO, OPERA, HERMES, IREN для массовой генерации событий, моделирования и анализа данных.

В табл. 3 представлено использование процессорного времени на вычислительных фермах ЦИВК по подразделениям ОИЯИ в процентах.

Вычислительный сервис и создание грид-сегмента ОИЯИ

Проект «Дубна-грид» разработан в 2004 г. в сотрудничестве ЛИТ, Университета «Дубна», дирекции программ развития наукограда Дубна, Университета Чикаго (США) и Университета Лунда (Швеция). Главная цель проекта — создание тестовой грид-инфраструктуры на базе ресурсов научных и образовательных учреждений г. Дубны, в том числе лабораторий ОИЯИ, Международного университета «Дубна», средних школ и других организаций. Этот проект позволит использовать более 1000 процессоров на основе грид-технологий для вычислительных задач.

В 2004 г. в ЛИТ были продолжены работы по созданию вычислительного сервиса и внедрению грид-технологий в обработку данных. Осуществлялась адаптация и поддержка новых версий библиотеки ANAPHE (прежней LHC++) на платформах Linux, Windows и Sun Solaris. Продолжена техническая и программная поддержка разработки математического обеспечения для экспериментов на LHC. Реализо-

вано сопровождение программного обеспечения для LHC-экспериментов (ATLAS, ALICE, CMS и LHCb) и для экспериментов, не связанных с LHC.

В течение 2004 г. ОИЯИ участвовал в сеансах массового моделирования событий для экспериментов ALICE, ATLAS, CMS и LHCb. Велись работы в рамках проекта LCG (LHC Computing Grid). Проведено тестирование данных, передающихся в соответствии с GridFTP-протоколом (GlobusToolKit 3); установлен сервер для мониторинга российских сайтов LCG; изучены возможности систем мониторинга GridICE и MapCenter; разработана система GoToGrid для автоматической установки и настройки пакета LCG-2; создано программное обеспечение для установки и управления клиентов MonaLisa на основе RMS (Remote Maintenance Shell).

Получил дальнейшее развитие веб-портал LCG: внедрена новая система сбора, хранения и визуализации результатов мониторинга данных по использованию процессоров и дисковых ресурсов на российских сайтах LCG; включен новый информационный блок по ресурсам, которые являются доступными на российских сайтах LCG.

Создана база данных событий и хранилище генераторов событий. Разработана динамическая домашняя страница <http://herweb.jinr.ru> для тестирования монте-карло-генераторов физических процессов. Эта страница также дает возможность оценивать основные свойства адрон-ядерных и ядро-ядерных взаимодействий (включает модели FRITIOF, HIJING, а также инструментарий для вычисления с использованием приближений Глаубера и Редже).

Продолжалось сопровождение библиотеки программ ОИЯИ (JINRLIB), которое включает в себя реализацию в ОИЯИ электронного доступа к CPCLIB, CERLIB (<http://www.jinr.ru/programs/>), адаптацию программ на компьютерных платформах ОИЯИ и пополнение библиотеки JINRLIB (добавлено и протестировано 20 новых программ).

Базы данных и WWW-сервис

В 2004 г. осуществлялась систематическая поддержка и обслуживание ранее созданных баз данных и информационных систем с учетом потребностей пользователей, в том числе:

- система учета и статистика работы базовых установок Института (<http://iis.jinr.ru/basic-fac>);
- информационная система «Проблемно-тематический план ОИЯИ» (<http://www.jinr.ru/plan/ptp-2004/title.htm>);

- электронный каталог в научно-технической библиотеке ОИЯИ (<http://lib.jinr.ru/dmitry/uni/rus/simple.html>);
- система рассылки в режиме реального времени списков препринтов, сообщений ОИЯИ в НТБ ОИЯИ (<http://lib.jinr.ru/maillist/newslstru.html>).

Осуществлялась постоянная поддержка одного из главных FTP-серверов общего назначения: faxe.jinr.ru. Этот сервер также использовался для поддержки и загрузки по запросу антивирусных программ на персональные компьютеры ОИЯИ.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА ДЛЯ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Развитие методов моделирования и обработки экспериментальных данных

В рамках сотрудничества с ЛВЭ разработан новый алгоритм Jetfinder, основанный на вейвлет-анализе. Он предназначен для реконструкции ливней в условиях интенсивного фона. Алгоритм работает в пространстве угловых координат ϕ и псевдоскорости η , используя в качестве весов либо поперечные импульсы для STAR TPC, либо энергии, полученные в ECAL. Главные преимущества алгоритма Jetfinder по сравнению со стандартной процедурой LUCCELL (UA1), которая использует три параметра, состоят в использовании единственного управляющего параметра λ и замечательной робастности этого алгоритма. Помимо этого Jetfinder анализирует все масштабы автоматически за один проход алгоритма [3].

Выполнено моделирование процессов мультифрагментации и расщепления в реакциях изотопов Sn с пучками протонов и дейтронов с энергиями 0,6; 3,5 и 8,1 ГэВ/нуклон. Результаты моделирования приведены в сравнении с экспериментальными данными, полученными на синхрофазотроне ЛВЭ [4].

Разработан пакет программ для визуализации наблюдений профиля первичного пучка и его местоположения на мишени для эффективной работы фрагмент-сепаратора COMBAS. Пакет предназначен для визуализации данных как в режиме on-line, так и off-line. При запуске пакета появляется окно, содержащее центральную область обзора профиля пучка и две вспомогательные области для его проекции на оси X и Y (рис. 3). Посредством небольших модификаций пакет можно применить для широкого класса установок, которые используют пучки ускорителя [5].

В микромодели оптического приближения теории Глаубера–Ситенко рассчитаны полные сечения ядро-ядерных реакций. Получено согласие с имею-

Сотрудники ЛИТ выполнили все необходимые работы для НТО АСУ ОИЯИ по программному обеспечению и централизованной поддержке баз данных административного профиля, включая модернизацию интерфейса и содержимого базы данных «Кадры ОИЯИ», поддержку программного обеспечения бухгалтерии ОИЯИ и бухгалтерий подразделений Института, обработку информации по пенсионному обеспечению в ОИЯИ для пенсионного фонда и т. д.

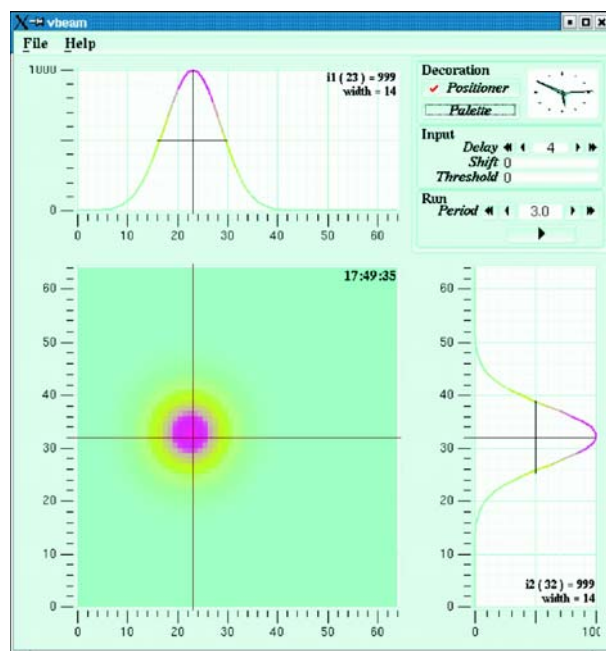


Рис. 3. Визуализация профиля пучка

щимися экспериментальными данными при энергиях выше 50 МэВ/нуклон без введения свободных параметров. На базе разработанного подхода проведены численные исследования полных сечений реакции ${}^6,8\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ при промежуточных энергиях. Результаты расчетов сравниваются с имеющимися экспериментальными данными (рис. 4). Рассмотрены вклады в сечение за счет искажения траектории и влияния ядерной среды [6].

Выполнен феноменологический и полумикроскопический анализ данных, полученных в экспериментах по упругому и неупругому рассеянию альфа-частиц с энергией 50 МэВ, возникающему при их соударениях с ядрами ${}^{112,114,120,124}\text{Sn}$ [7].

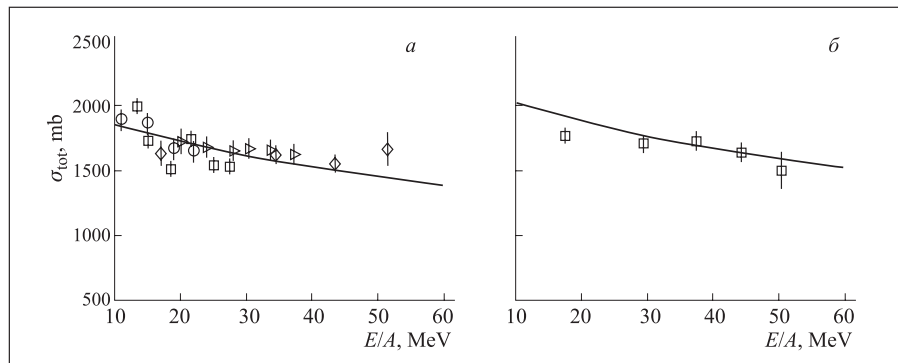


Рис. 4. Полное сечение реакций ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ (а) и ${}^8\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ (б), рассчитанных в рамках высокоэнергетического приближения

В рамках модели Намбу–Иона–Лазинио с тремя кварками изучены аномальные распады π^0 , $\eta \rightarrow \gamma\gamma$ как в вакууме, так и в β -равновесной кварковой материи. Найдено, что поведение основных наблюдаемых существенно зависит от частичного восстановления киральной симметрии в нестранном и странном секторах. Вероятность этих распадов уменьшается с ростом плотности, указывая на то, что аномальные мезонные взаимодействия зависят от среды [8].

Изучено поведение нейтральных псевдоскалярных мезонов в горячей и плотной материи в рамках модели Намбу–Иона–Лазинио, включая взаимодействие 'т Хофта, которое разрушает $U_A(1)$ -симметрию. Обнаружено, что появление странных кварков выше определенной плотности приводит к значительным изменениям в различных наблюдаемых, особенно в материи с β -равновесием. Проведен анализ поведения мезонов в T - ρ -плоскости в связи с возможными сигнатурами восстановления симметрий [9].

Проведено теоретическое и численное исследование реакций фотон-фотонного рассеяния $\gamma p \rightarrow \gamma' \pi'$, $\gamma p \rightarrow \pi^0 p'$ и $\gamma p \rightarrow \gamma' \pi^0 p'$ в рамках одночастичной теоретико-полевой модели [10].

Создание численных методов и программного обеспечения для математического моделирования сложных физических систем

Впервые проведено численное исследование некоторых решений релятивистского уравнения для скалярных частиц в гравитационном поле массивного точечного источника. Изучены основное и несколько следующих состояний и соответствующие им собственные значения при различных значениях момента скалярных частиц. Существенной новой чертой полученных решений является зависимость их физических свойств от гравитационного дефекта массы точечного источника гравитационного поля [11].

На основе модели разделенных формфакторов выполнен анализ параметров полидисперсной популяции однослойных везикул DMPC. Для описания

плотности длины рассеяния нейтрона поперек мембраны используется флуктуационная модель липидного бислоя. Распределение молекул воды в бислое описывается сигмоидной функцией. Результаты фитирования экспериментальных данных (рис. 5), полученных на малоугловом спектрометре SANS-I, PSI (Швейцария), следующие: средний радиус везикул $(272 \pm 0,4) \text{ \AA}$, полидисперсность радиуса 27%, толщина мембраны $(50,6 \pm 0,8) \text{ \AA}$, толщина области углеводородных хвостов $(21,4 \pm 2,8) \text{ \AA}$, количество молекул воды на одну молекулу липида 13 ± 1 , поверхность молекулы DMPC $(59 \pm 2) \text{ \AA}^2$. Вычисленная функция распределения воды поперек мембраны напрямую объясняет, почему молекулы воды легко проникают через липидную мембрану [12].

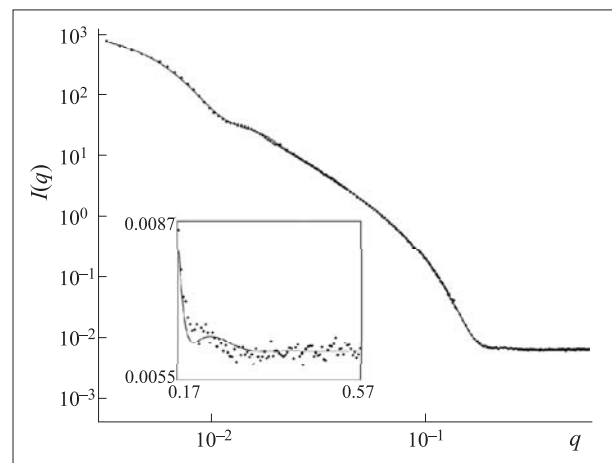


Рис. 5. Результаты фитирования экспериментальных данных, полученных на малоугловом спектрометре SANS-I, PSI (Швейцария). Точки — экспериментальные данные; сплошная кривая — результаты численного счета

Получены четные собственные неустойчивые моды регулярных стационарных решений системы уравнений, описывающей систему взаимодействующих сферически-симметричных полей Янга–Миллса калибровочной группы $SU(2)$ и дилатонного поля в пространстве Минковского размерности $3+1$. Соот-

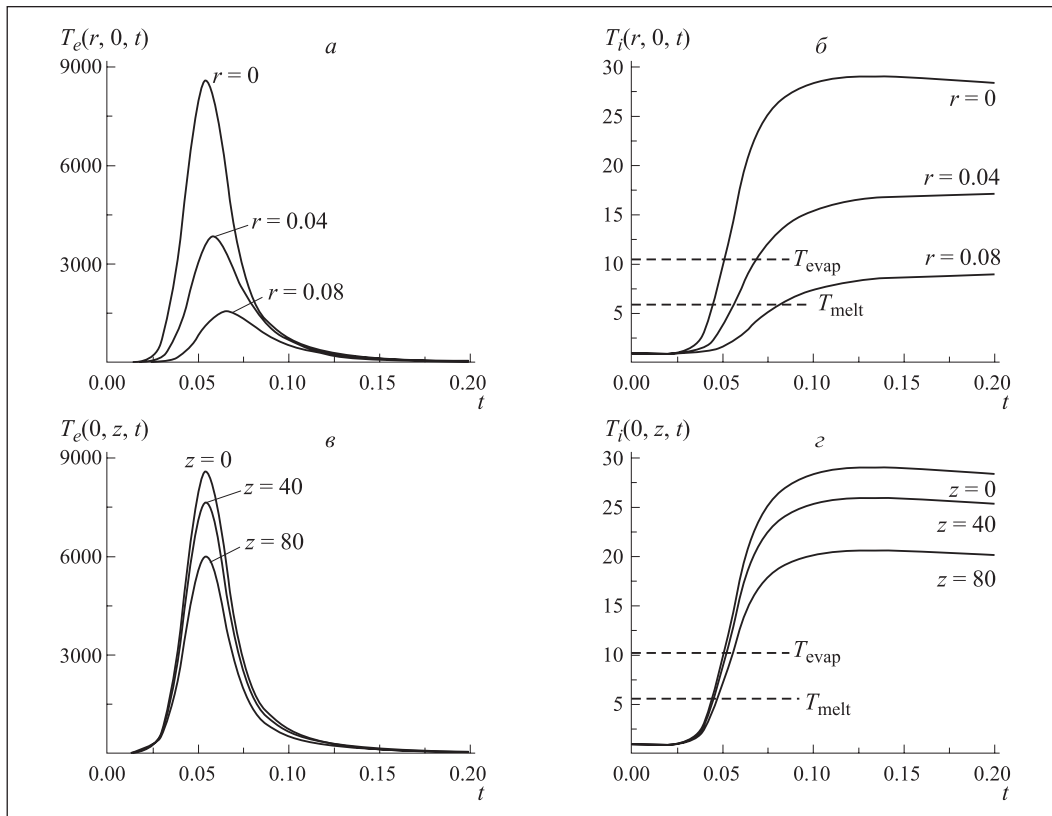


Рис. 6. Зависимость от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на поверхности ($z = 0$) никеля, облучаемого ионами урана для различных расстояний от оси трека. Зависимости от времени температур электронного газа (в) и решетки (г) в месте прохождения иона урана через поверхность ($r = 0$) для различных глубин z в мишени. Штриховые прямые линии на б, г показывают температуры плавления T_{melt} и испарения T_{evap}

ветствующие задачи (краевая задача и матричная задача Штурма–Лиувилля) решались численно с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Разработан эффективный алгоритм и создан программный комплекс для решения системы нелинейных уравнений [13].

Исходя из принципов классической гидродинамики и ньютоновского тяготения предложена теория гидрогравитации, сформулированная подобно гидромагнитной теории. В рамках этой теории проведены расчеты гравитационного воздействия глобальных пульсаций нейтронной звезды на движения окружающей ее газовой пылевой оболочки. Особое внимание уделено газодинамическим колебаниям, вызванным вариациями гравитационных напряжений, возбуждаемых пульсациями нейтронной звезды в неограниченной сферической оболочке газа и пыли. Выяснено, что вычисленные в длинноволновом приближении периоды мод этих колебаний, называемых квазистатическими гидрогравитационными колебаниями, пропорциональны периодам собственных гравитационных колебаний нейтронной звезды [14].

Система уравнений для температуры электронного газа и решетки вокруг и вдоль траектории тяжелого иона урана с энергией 700 МэВ в никеле при постоянных значениях теплоемкости и теплопровод-

ности, взятых при комнатной температуре, решена численно в аксиально-симметрической цилиндрической системе координат. На основе полученных зависимостей температуры решетки от радиуса вокруг траектории иона и глубины можно сделать вывод о том, что ионизационные потери энергии иона урана в никеле достаточны для плавления и испарения материала с поверхности (рис. 6). Сделаны оценки размера областей с максимальным радиусом и глубиной в мишени, где происходят процессы плавления и испарения материала мишени [15].

Изучены когерентные моды бозе-газа в ловушках. Выявлены условия появления резонансных возбуждений этих мод [16].

Развитие методов, алгоритмов и программного обеспечения компьютерной алгебры

Традиционный двухдневный семинар по компьютерной алгебре состоялся в Дубне 25–26 мая 2004 г. Этот семинар был посвящен памяти выдающегося российского физика и организатора науки М. Г. Мещерякова.

Разработан метод эффективного распараллеливания алгоритмов для вычисления инволютивных полиномиальных базисов типа Жана и для целочислен-

ных коэффициентов неограниченной длины. Кроме базисов Жана, параллельная версия алгоритма может также использоваться для вычисления редуцированных базисов Гребнера. При этом нет необходимости в дополнительных редуциях, так как редуцированные базисы Гребнера образуют внутренне заданные подмножества инволютивных базисов [17].

Показано, что техника базисов Гребнера является универсальным алгоритмическим инструментом для приведения к базисным интегралам многопетлевых фейнмановских интегралов при характеристике последних системой рекуррентных отношений, получаемой методом интегрирования по частям. В этой связи рассматриваются характерные рекуррентные отношения, когда пропагаторы обладают произвольной степенью целого числа — символической переменной для таких отношений [18].

Разработан и проанализирован ряд дискретных алгоритмов для аналитического вычисления топологических фаз в оптическом интерференционном микроскопе. Все эти алгоритмы реализованы в виде пакетов программ на языках Maple и Mathematica [19].

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

ОИЯИ в сотрудничестве с семью российскими институтами (ИФВЭ, ИМПБ РАН, ИТЭФ, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша, «Курчатовский институт», ПИЯФ РАН и НИИЯФ МГУ) участвует в проекте EGEE (Enabling Grid for E-science), который стартовал 1 апреля 2004 г. В рамках этого проекта создан и в настоящее время работает первый прототип для ресурсного центра в ОИЯИ. Ферма состоит из 20 процессоров; на ней установлено программное обеспечение LCG-2. Сайт JINR-LCG2 был включен в GOC Grid monitoring (<http://goc.grid.sinica.edu.tw/gstat/lcgce01.jinr.ru/>) и активно используется некоторыми экспериментами на ЛНС для тестирования и моделирования данных.

В сотрудничестве с Техническим университетом г. Кошице (Словацкая Республика) и Лабораторией вычислительной и статистической физики (Академия Sinica, Тайвань) проведено математическое моделирование процессов формирования трехмерных структур белков. Для изучения термодинамических свойств и трехмерной структуры макромолекул типа белка требуется эффективный алгоритм вычисления доступной для растворителя поверхности и объема макромолекул, помещенных в растворитель. Разработан метод построения специальной закрытой поверхностной области, состоящей из треугольников, который позволяет определить, находится ли данная

Задача решения уравнения Шредингера для связанных состояний в пространстве размерности D изучена для центральных потенциалов полиномиального типа и с коэффициентами, зависящими от $2q$ произвольных постоянных. Путем численно-аналитического решения алгебраической системы уравнений, эквивалентной уравнению Шредингера (система Магьяри), обнаружены интересные закономерности в распределении и поведении корней этой системы в зависимости от величины D . В частности, при достаточно больших значениях D энергетический спектр становится эквидистантным [20].

С помощью программы, реализующей оригинальный алгоритм, были исследованы кохомологии ограниченных алгебр Ли гамильтоновых векторных полей. Такие ограниченные или p -алгебры Ли векторных полей являются конечномерными аналогами соответствующих классических алгебр, определенные над полями положительной характеристики p . Их конечномерность снимает целый ряд трудностей, возникающих при вычислении кохомологий классических алгебр Ли векторных полей [21].

точка внутри молекулы или же вне ее. Новый аналитический метод, ранее предложенный для нахождения площади и объема макромолекул, адаптирован для расчетов с учетом возможного существования внутримолекулярных полостей [22].

В соответствии с соглашением о сотрудничестве между ОИЯИ и Кейптаунским университетом ведется теоретическое и численное исследование частицеподобных возбуждений в нелинейных диссипативных системах в различных моделях нелинейной оптики и конденсированных состояний. В 2004 г. в результате численного исследования нелинейного уравнения Шредингера с диссипацией и накачкой, имеющего множество приложений в газовой и гидродинамике, нелинейной оптике, теории ферромагнитов и т. д., найдены новые решения, представляющие собой связанные состояния двух и более одиночных солитонов. Выполнено исследование движущихся диссипативных солитонов этого уравнения для случая параметрической накачки [23].

Совместно с Международным Сольвеевским институтом физики и химии, факультетом математики Университета Аристотеля в Салониках, Греция, и МИФИ проведены исследования подхода к эффективному распределению ресурсов в экономике на основе энтропии. Получено обобщение схемы, разработанной ранее по эффективному распределению ресурсов в экономических системах с малым числом

элементов на основе энтропии. Для учета асимметричного распределения ресурсов введен новый набор интерполяционных функций с двумя параметрами. Показано, что максимальное значение энтропии достигается только в случае асимметричного распределения ресурсов. Первые результаты ис-

пользования такого обобщенного подхода для анализа распределения доходов населения Швеции и России показали, что новая схема позволяет давать эффективную оценку состояния анализируемой системы и контролировать процесс распределения ресурсов [24].

ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Совместно с Институтом теоретической и экспериментальной биофизики и Институтом белка РАН (г. Пушино) изучалась проблема классификации промоторов *E. coli* по их электростатическим потенциалам. Классификация промоторов и других функционально важных элементов генома по их нуклеотидным последовательностям и физико-химическим свойствам является ключевым фактором для понимания процессов транскрипции генов, редупликации, рекомбинации и их регуляции. Разработан подход, позволяющий вычислять электростатические потенциалы длинных нуклеотидных последовательностей ДНК как для прокариот, так и для эукариот. Вычислены электростатические потенциалы промоторов *E. coli* и периодических последовательностей. Сделано предположение о том, что электростатические характеристики промоторов генома совместно с первичной структурой обеспечивают их надежную классификацию [25].

Получены результаты исследований по выявлению новых статистических закономерностей, характеризующих мировые рынки ценных бумаг. На основе анализа большого количества акций различных компаний показано, что распределение цен закрытия, нормированных на соответствующие объемы сделок (показатель, названный авторами «Price/Volume ratio»), с высокой точностью отвечает логнормальному закону. Для значительной части акций это соответствие достигается без дополнительной процедуры вычитания тренда. Для другой части акций распределение имеет более сложный характер и в большинстве случаев описывается взвешенной суммой нескольких функций логнормального распределения. Вместе с тем после применения процедуры вычитания тренда все рассмотренные данные можно описать одним логнормальным распределением [26].

Рассмотрена проблема надежного извлечения тренда и хаотических компонент из временного ряда рынка ценных бумаг. Предложенные методы также позволяют извлекать часть хаотических компонент, так называемого аномального элемента, вызванного переходными кратковременными волнами

с высокими амплитудами. Это обеспечивает более точное определение трендовой компоненты. Методы базируются на М-оценке с функциями решения типа Тьюки и Хубера. Оптимальный уровень извлечения хаотической компоненты определяется в соответствии с новой численной схемой, основанной на фрактальной размерности хаотической компоненты анализируемой серии. Рассмотрена схема прогноза, которая использует реализованную часть исследуемого ряда и априорную экспертную информацию [27].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Antoniou I. et al. // Part. Nucl., Lett. 2004. V. 1, No. 4 (121). P. 87–100.
2. Antoniou I. et al. // Discrete Dynamics in Nature & Society. 2004. V. 1 P. 19–34.
3. Ososkov G. A., Stadnik A. V. // Information Technologies and Computing Systems. M., 2004. No. 1. P. 103–125.
4. Balabekyan A. R., Musulmanbekov G. // Nucl. Phys. A. 2004. V. 735. P. 267–276.
5. Soloviev A., Kaminsky G., Musulmanbekov G. // Part. Nucl., Lett. (submitted).
6. Lukyanov V. K., Zemlyanaya E. V., Slovinsky B. // Izv. RAN. Ser. fiz. 2004. V. 68, issue 2. P. 162–166; Lukyanov V. K. et al. // IJMP. 2004. V. 13, No. 3. P. 573–584.
7. Kuterbekov K. A. et al. // Ukr. Phys. J. 2004. V. 49, No. 9. P. 841–850.
8. Costa P., Ruivo M. C., Kalinovsky Yu. L. // Phys. Lett. B. 2004. V. 581. P. 274–275.
9. Costa P. et al. // Phys. Rev. C. 2004. V. 70. P. 025204; Blaschke D., Kalinovsky Yu., Yudichev V. // Lect. Notes Phys. 2004. V. 647. P. 366–375.
10. Machavariani A. // Ann. Phys. 2004. V. 39. P. 49–92; Machavariani A. // Phys. Rev. C (in press).
11. Fiziev P. P., Boyadjiev T. L., Georgieva D. A. gr-qc/0406036; Препринт ОИЯИ P11-2004-120. Дубна, 2004; JCM&CP (submitted).
12. Zemlyanaya E. V., Kiselev M. A., Vinod A. // Crystallography Rep. 2004. Suppl. 1. P. S131–S136.
13. Streltsova O. I. et al. gr-qc/0408060; JINR Preprint E11-2004-151. Dubna, 2004; JCMP (submitted).

14. *Bastrukov S. I. et al.* // JETP. 2004. V. 99. P. 449–459;
Bastrukov S. I. et al. // Intern. J. Mod. Phys. A. 2004 (in press).
15. *Amirkhanov I. V. et al.* // Crystallography Rep. 2004. V. 49, Suppl. 1. P. S118–S123;
Amirkhanov I. V. et al. // J. The Surface. 2004. No. 10;
Амирханов И. В. и др. // Препринт ОИЯИ Р11-2004-165. Дубна, 2004; Письма в ЭЧАЯ (направлено).
16. *Yukalov V. I., Yukalova E. P.* // Part. Nucl. 2004. V. 35, No. 3. P. 640–708;
Yukalov V. I., Marzlin K. P., Yukalova E. P. // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. P. 023620-16;
Yukalov V. I., Marzlin K. P., Yukalova E. P. // Laser Phys. 2004. V. 14. P. 565–570;
Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Laser Phys. Lett. 2004. V. 1. P. 50–53.
17. *Gerdt V. P., Yanovich D. A.* // Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2004), Garching, 2004. P. 185–194.
18. *Gerdt V. P.* // Nucl. Phys. B. Proc. Suppl. 2004. V. 135. P. 232–237.
19. *Rostovtsev V. A. et al.* // Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2004), Garching, 2004. P. 233–241.
20. *Znojil M., Yanovich D.* // Proc. of Inst. of Math. of NAS of Ukraine. 2004. V. 50, Part 2. P. 1010–1017.
21. *Kornyak V. V.* // Programming. 2004. V. 30, issue 3. P. 52–60;
Kornyak V. V. // Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2004), Garching, 2004. P. 307–311.
22. *Hayryan S. et al.* // J. Comp. Chemistry. 2005. V. 26, No. 4. P. 334–343;
Busa J. et al. // Comp. Phys. Commun. 2005. V. 165, No. 1. P. 59–96.
23. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V.* // SIAM J. Appl. Math. 2004. V. 64, No. 3. P. 800;
Zemlyanaya E. V., Barashenkov I. V. // Math. Modelling. 2004. V. 16, No. 10. P. 3–14.
24. *Antoniou I. et al.* // Physica A. 2004. V. 336. P. 549–562.
25. *Polozov R. V. et al.* // Part. Nucl., Lett. 2005. V. 2, No. 4(127).
26. *Antoniou I. et al.* // Physica A. 2004. V. 331. P. 617–638.
27. *Antoniou I. et al.* // Ibid. V. 336. P. 538–548.