



Молекулярное моделирование – важное направление современной биофизики



Развитие компьютеринга для экспериментов на LHC

На заседании объединенного семинара коллаборации RDMS CMS «Физика на Большом адронном коллайдере» директор ЛИТ профессор В. В. Кореньков рассказал о создании компьютерной инфраструктуры для LHC. Напомнив основные этапы развития глобаль-

ной грид-инфраструктуры, докладчик представил анализ развития модели компьютеринга для экспериментов на LHC в соответствии с требованиями виртуальных организаций и пользователей, а также статистический анализ использования ресурсов, распределения потоков

Сегодня в номере

В Дубне завершилось международное совещание «Компьютерное и теоретическое моделирование биомолекулярных взаимодействий».

Совещание было посвящено проблемам изучения макромолекул и сложных молекулярных соединений, структуры белка, прорывам в молекулярном моделировании, задачам моделирования экологической и радиационной биофизики и другим. Совещание работало в Дубне и Москве, где участники познакомились с кафедрой биофизики биологического факультета МГУ.

Читайте интервью на 2–3-й стр.

задач и данных в мире, России и ОИЯИ. В докладе были представлены наиболее значимые проекты по развитию систем грид, обозначены новые решения и перспективы нового направления Big Data. Особое внимание уделено работам по созданию центра уровня Tier1 в России для обработки, хранения и анализа данных для экспериментов на LHC на базе «Курчатовского института» и ОИЯИ.

Подробности – на 4–5-й стр.

Семинар памяти Румяны Калпакчиевой пройдет сегодня в конференц-зале Лаборатории ядерных реакций имени Г. Н. Флерова

Р. Калпакчиева родилась в 1946 году в Софии (Болгария). После окончания физического факультета Софийского университета имени Климента Охридского она работала в Институте ядерных исследований и ядерной энергетики Болгарской академии наук. В 1973 году Р. Калпакчиева была направлена на работу в ОИЯИ, и почти 40 лет ее научной деятельности было связано с Лабораторией ядерных реакций. Удивительно скромный, обаятельный человек, Румяна обладала даром притягивать к себе людей. Она была всегда готова прийти на помощь коллегам как в науч-

ной работе, так и в житейских вопросах.

После защиты в 1980 году кандидатской диссертации Р. Калпакчиева стала одним из пионеров в исследованиях свойств легких экзотических ядер вблизи границы нуклонной стабильности. Она активно участвовала в международном сотрудничестве ученых из разных стран и горячо содействовала его развитию. Многие из полученных результатов включены в справочники и базы данных. Эти исследования стали основой ее докторской диссертации, которую она блестяще защитила в 2009 году.

Р. Калпакчиева – автор более 140 научных работ, в том числе трех монографий. Ей многократно присуждались премии на конкурсах научных работ ОИЯИ. С 1996 года она была заместителем председателя Научно-технического совета ЛЯР, непременным ученым секретарем большинства школ-семинаров и других международных конференций, организуемых лабораторией. В 1997–2003 гг. работала в составе Совета по ядерной физике Европейского физического общества. На посту заместителя

(Окончание на 2-й стр.)

**(Окончание.
Начало на 1-й стр.)**

директора ЛЯР по научной работе Р. Калпакчиева особое внимание уделяла работе с молодыми сотрудниками и учеными лаборатории, их научному росту, решению научных и бытовых проблем.

На открытии семинара выступят директор ЛЯР С. Н. Дмитриев, научный руководитель лаборатории Ю. Ц. Оганесян, заместитель председателя Агентства ядерного регулирования Республики Болгария Л. Костов.

Коллеги Румяны Калпакчиевой



Ю. Э. Пенионжкевич, С. А. Карапян, Х. Зодан, В. Фон Оертцен, К. Борча, С. М. Лукьянов расскажут об этапах ее научной деятельности, поделятся воспоминаниями о совместной работе.

Докладчики расскажут о ядерной спектроскопии с помощью эффекта Доплера, низкоэнергетическом делении ядер, супернейтронно-избыточных ядрах тяжелых элементов, эмиссии быстрозаряженных частиц вблизи кинематического предела, об экспериментах на ускорительном комплексе DRIBs.

(Окончание. Начало на 1-й стр.)

Председатель оргкомитета член-корреспондент РАН А. Б. Рубин (МГУ): Это совещание проводит научный совет по биофизике РАН при поддержке ИУРАВ. Такие совещания проводятся регулярно, а в Дубне уже несколько раз. Их основная тема – математическое моделирование сложных биологических систем. В чем идея? Что могут сделать физики для решения биологических проблем? Оказывается, очень много, давая не только методы, но и физические идеи. Но самое интересное в том, что физики не имеют готовых решений, а, занимаясь биологическими задачами, они развиваются и свою область знаний. Это совещание посвящено молекулярному моделированию процессов внутри сложных молекул. Белок – сложная большая молекула, но ее функционирование вполне предсказуемо. Вопрос: как движение всех этих плотно упакованных атомов за секунды, а иногда за миллиардные доли секунды, сохраняет определенный порядок, как оно вообще происходит? Ответ на этот вопрос имеет теоретическое и прикладное значение. Например, для ныне развивающихся нанотехнологий – создание биологических нанодвигателей, нанороботов для медицины. Наноразмерные объекты подчиняются другим принципам, нежели макрообъекты. И вообще нет фундаментальной и прикладной науки, и как раз здесь это очень хорошо видно.

Чем, на ваш взгляд, может завершиться это совещание?

Конечная цель – совместная работа, но очень важно само обсуждение проблемы со всех сторон. Здесь единственная возможность кооперироваться. Мы все моделируем – кто в биологии, кто в физике. Белок – не занимается моделированием, не решает уравнений, а производит определенный физико-химический процесс. Вообще природа не делится на отдельные науки. Это мы, получив разное образование, решаем по-разному проблемы там, где нет никакого разделения.

К. Маркс (Университет Массачусетса, США): Об этом совещании я узнал от сотрудника нашего университета Валерия Барсегова, с которым мы работаем в одном проекте. Оно заинтересовало меня, поскольку это мое направление исследований, и я не разочарован, потому что даже в первый день услышал кое-что новое. Здесь я встретился с Ильей Коваленко (МГУ), с которым уже раньше общался на конференциях в США, возможно, завяжутся еще какие-то знакомства.

О музеях Подмосковья

С 31 мая по 4 июня в Доме художников на Крымском мосту проходил Международный фестиваль музеев.

Надо отметить, что в последний год внимание к музейному делу со стороны властей значительно выросло – мы, музейные работники, часто получаем приглашения на различные семинары, выставки, конференции не только в Москву, но и в другие города страны. И в этот раз меня пригласили выступить на заседании круглого стола министерства культуры Московской области, который был организован совместно с Союзом развития наукоградов. Тема была означена конкретно: «Музеи Подмосковья. Чем и как привлечь посетителей в региональный музей», – и предполага-

ла отсутствие длинных и пространственных рассуждений. Организаторы свели повестку дня к презентациям образовательных программ для детей и молодежи. Опыт наших коллег из Клина, Сергиева Посада, Балашихи, Каширы и других городов Подмосковья показал истинно творческий подход к работе с дошкольниками, школьниками и студентами.

Все проекты направлены на воспитание уважения и любви к своему краю, народным традициям. А сколько выдумки даже в названиях программ: «Музей в чемодане» (для сельских школ – Руза), «Детский клуб любителей астрономии» (Лыткарино), «Серебристые облака» (Кашира), «Приручение набойки» (Павловско-Посадский музей истории русского платка и шали), «Чаепитие в Мытищах», «Щит предков» (Серпухов) и многие другие. Всего на этой секции выступили с презентациями пятнадцать музеев.

Затем настала очередь наукоградов Подмосковья. Было представлено шесть докладов, два из них – из Дубны: «Музей истории науки и техники ОИЯИ в контексте программы развития наукограда Дубна» (автор этих строк) и «Особенности развития небольшого вузовского музея на примере университета «Дубна» (Л. Черемных). Коллега из Троицка Л. Коневских рассказала об интерактивном музее «Физическая кунсткамера», который работает на базе Дома ученых Троицкого научного центра.

Надежда КАВАЛЕРОВА,
**директор музея истории науки
и техники ОИЯИ**

ДУБНА
наука
служба
прогресс

Еженедельник Объединенного института ядерных исследований

Регистрационный № 1154
Газета выходит по пятницам

Тираж 1020

Индекс 00146

50 номеров в год

Редактор Е. М. МОЛЧАНОВ

АДРЕС РЕДАКЦИИ:

141980, г. Дубна, Московской обл., ул. Франка, 2.

ТЕЛЕФОНЫ:

редактор – 62-200, 65-184;

приемная – 65-812

корреспонденты – 65-181, 65-182.

e-mail: dns@ Dubna.ru

Информационная поддержка –
компания КОНТАКТ и ЛИТ ОИЯИ.

Подписано в печать 11.06.2013 в 15.00.

Цена в розницу договорная.

Газета отпечатана в Издательском отделе
ОИЯИ.

Молекулярное моделирование – важное направление современной биофизики

Можно ли ждать в биофизике в ближайшие годы каких-то прорывных, революционных открытий?

В ближайшее время, возможно, на основе теоретических расчетов, которые мы делаем, появятся новое понимание на системном уровне биологических и биофизических процессов и более ясная интерпретация функций отдельных молекул.

Я. Планте (Центр космических исследований имени Джонсона НАСА, США): Здесь уже прозвучали интересные доклады, мне самому еще предстоит рассказать о моей работе по моделированию взаимодействия радиации с веществом. Я занимаюсь изучением космических видов излучений в плане той опасности, которую они представляют для здоровья астронавтов. Свои исследования мы проводим на ускорителе в Брукхейвенской национальной ускорительной лаборатории. С работами коллег из ЛРБ я знаком, хотя совместных проектов у нас нет.

В. Барсегов (Массачусетский университет, США): Мне кажется, если бы было больше участников и совещание работало три дня, было бы лучше. Сюда приехали специалисты из многих центров – США, Европы, Азии, России, и для молодых российских ученых участие в таком мероприятии станет хорошим импульсом в развитии. Они варятся в собственном соку, не зная о мировых стандартах. А для некоторых иностранцев Россия остается закрытой страной, да и приехав сюда, они теряются: нет указателей на английском, доехать из Шереметьево до Дубны можно только с провожатым и так далее. Или вот Кеннет Маркс рассказывал: стоял он на Лубянской площади, фотографировал на айфон здание КГБ. Подошел полицейский и попросил фотографии удалить. К чему это? Ведь фотографии чего угодно есть в Интернете. Если бы в Россию приезжало больше туристов, то вы бы от этого только выиграли. А так, заманиваете на совещание экскурсиями в Сергиев Посад, ведь на научных конференциях в Европе и в США никаких исторических достопримечательностей не показывают.

Я понял, на каком уровне находится биофизика в России, – она отстает от мировой. При этом есть ученые, которые это понимают и что-то делают, чтобы поднять науч-

ный уровень, а есть такие, которые как делали что-то свое, так и продолжают, – это распределение по способностям и стремлению к чему-то новому заметно. Есть неплохие проекты, но Россия, на мой взгляд, все-таки остается в изоляции. Продолжает работать советский стереотип: «Мы – лучше всех, мы сделаем не хуже других». Нужно признать, что хуже, и перенимать все лучшее.

Г. Ю. Ризниченко представляла на этой конференции не только МГУ, но и IUPAC – Международный союз чистой и прикладной биофизики.

В Дубне больше знают о IUPAC и IUPAP, расскажите, пожалуйста, немного о биофизическом союзе.

Эта международная ассоциация чистой, то есть фундаментальной, и прикладной биофизики существует уже давно, лет сорок. В нее входят около 50 национальных биофизических ассоциаций, участвовал и СССР, а теперь Россия. Союз выпускает специальный журнал, посвященный проблемам биофизики. Основная деятельность союза связана с организацией ассамблей – они проводятся довольно редко, раз в 7–10 лет, конгрессов, которые проводятся раз в три года. Последний, в котором участвовали и мы с Андреем Борисовичем Рубиным, проходил в Пекине. Его проводили в Олимпийском центре, а где еще разместить свыше 2000 участников? Из других стран приехали, правда, членов 700, остальные были китайцы. На конгресс обычно с докладом приглашается Нобелевский лауреат, работает много секций.

Вообще, биофизика – очень широкопрофильная наука, содержащая разные направления, и молекулярное моделирование – важное и активно развивающееся. На совещании только что прозвучал доклад испанского биофизика Наталии Стенли, который в своих расчетах использовал грид. Грид позволяет моделировать процессы, происходящие в очень сложных биомолекулах, что раньше сделать было просто невозможно. Теперь можно моделировать, начиная с атомов, имея первичные уравнения взаимодействия и начальные данные, полученные из рентгеноструктурного анализа, и понять, как будет двигаться сама молекула. Но это очень сложный подход, далекий от моделирования в реальном времени. Чтобы упростить, применяют так назы-

ваемые крупнозернистые модели: используют обобщенные уравнения для не очень важных частей молекулы, а существенные части описывают подробнее.

Как вы оцениваете уровень прозвучавших докладов?

Уровень очень высокий, мы пригласили лекторов, представляющих передний край науки, – из Массачусетского, Бостонского университетов и Университета Мэриленда США, университетов Нидерландов, Испании, Кореи, МГУ, МФТИ и Московского института биоорганической химии. Доклады приглашенных лекторов были сами по себе очень интересные, к тому же специально подготовлены как лекции – изложены понятным языком, без углубления в узкую специализацию. Очень большую помочь нам оказал американец, выходец из России Валерий Барсегов. С яркими докладами, знакомящими с ОИЯИ, выступили Т. А. Стриж (ЛИТ), О. В. Белов и Х. Т. Холмуродов (ЛРБ). Среди участников молодежь составила две трети, причем российские участники были не только из МГУ и Дубны, но даже с Дальнего Востока. IUPAC поддерживает такие мероприятия, стремится привлекать молодежь. Еще для молодых очень эффективны свободные дискуссии, которые здесь постоянно возникают, возможность беседовать с профессорами, чем они и пользуются. У всех остались очень хорошие впечатления от совещания, предлагаю продолжать такие встречи.

Х. Т. Холмуродов (ЛРБ): Хочу отметить, что ОИЯИ в последние годы постепенно превращается в достаточно известный центр в совершенно новой области научно-прикладных исследований – компьютерном молекулярном изучении физических, химических и, в особенности, биологических структур и систем. То есть мы сейчас имеем совершенно новую картину в истории развития нашего Института. А все началось в 2004 году, когда по инициативе и при активной поддержке Алексея Норайровича Сисакяна в ЛРБ ОИЯИ образовался новый сектор – компьютерного молекулярного моделирования, которым я и руковожу. С 2004 года мы пять раз провели уникальное российско-японское совещание по молекулярно-динамическому изучению в науках о веществе и биологии (MSSMBS – Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences).

Именно эти совещания послужили основой и мотивацией для коллег из МГУ провести нынешнее совещание в Дубне.

**Ольга ТАРАНТИНА,
перевод Олега БЕЛОВА**

Современные параметры грид

Я хотел бы начать с отрывка из выступления директора ЦЕРН на семинаре 4 июля прошлого года, который был посвящен открытию новой частицы. Р.-Д. Хойер тогда выделил три составляющие успеха: великолепный ускоритель, очень хорошие детекторы и третью – грид-инфраструктура, которая позволила обрабатывать, хранить и анализировать данные, полученные на LHC.

Концепция организации компьютеринга на LHC базируется на грид-технологии. Грид-системы появились еще в прошлом веке и сразу стали рассматриваться как основные технологии для будущего LHC. В начале этого века в Европе были запущены крупные проекты, в основном все они были направлены на создание надежной вычислительной инфраструктуры для обработки, анализа и хранения данных, получаемых в экспериментах на LHC, и других масштабных задач, которые имеют дело с колоссальным объемом информации, – в биологии, медицине, науках о Земле и других.

Первый крупный проект в этой области – EU DataGrid – заложил архитектурные решения, но инфраструктура еще не была создана. Второй проект, который начался примерно в это же время, WLCG (Worldwide LHC Computing Grid) – проект грид для Большого адронного коллайдера, в рамках которого и развивается активность по обработке и хранению данных. Самый большой европейский проект EGEE (The Enabling Grids for E-sciencE) – развертывание грид-систем для научных исследований. Он финансировался Европейским Союзом в течение 6 лет, с 2004 по 2010 годы, и в рамках этого проекта была создана достаточно устойчиво работающая грид-инфраструктура, которая поддерживала в том числе ресурсные центры виртуальных организаций LHC.

С 2010 года было принято решение о том, что каждая страна должна создать свою национальную грид-инфраструктуру, а проект EGI-InSPARE будет объединять региональные центры. К сожалению, многие страны не смогли этого сделать. Как правило, все успешно участвовали в объединении в грид-федерацию, а когда пришло время создавать свою инфраструктуру, некоторые страны не смогли этого сделать и за 2-3 года.

Хочу отметить еще один очень важный проект с точки зрения грида, он тоже финансировался Европейским Союзом, – EMI (инициатива по разработке европейского про-

Развитие компьютеринга для экспериментов на LHC



межуточного программного обеспечения грида). Начиная с 2003-2004 годов стало создаваться много технологий так называемого промежуточного программного обеспечения (ППО). Трудно стало решать задачи обработки и анализа данных LHC, потому что многие организации и страны создали свою грид-инфраструктуру на своей платформе и объединение платформ было сложно осуществлять. Например, только в Европе использовались ППО ARC, gLite, UNICORE и dCache, объединение которых в единый продукт стало целью проекта EMI, что и было успешно реализовано.

Напомню, какие потоки данных идут со всех 4 экспериментов: CMS – 220 Мб/с, ATLAS – 320 Мб/с, ALICE – 100 Мб/с, LHCb – 50 Мб/с. Эти потоки первичных данных поступают в инфраструктуру ЦЕРН, которая называется Tier0. Здесь записывается информация, выполняются прием исходных данных, начальная реконструкция и распределение по грид-сайтам следующего уровня. Чтобы не все пользователи обращались в Tier0 (иначе никакие коммуникации не выдержат и эффективность работы обеспечить невозможно), необходимо создать центры хранения данных. В настоящее время таких центров хранения 11, они составляют уровень Tier1. Каждый из центров имеет прямой выделенный канал с ЦЕРН, чтобы получать данные с высокой скоростью и обеспечить их прием и постоянное хранение. Они также выполняют функции реконструкции и обработки и, факультативно, функции анализа.

Однако их главное предназначение – получить все, что идет из ЦЕРН, обеспечить хранение и выполнять запросы центров следующего уровня на данные, то есть они должны обеспечить доставку данных в центры уровня Tier2 для обработки и анализа. Tier2 центры (их около 200) занимаются моделированием и анализом данных. В принципе, они могут не иметь большой системы хране-

ния, им требуется больше вычислительная мощность, чтобы анализировать данные.

Несколько цифр, чтобы показать, каких параметров достигла объединенная грид-инфраструктура к марта 2013 года: 372 612 ядер в 315 ресурсных центрах, 180 петабайт дискового пространства и 167 петабайт в роботизированных ленточных хранилищах в 56 странах. По количеству задач, которые выполняются каждый день: 1,67 миллиона (2,25 с учетом локальных задач). Эта грид-инфраструктура обслуживает разные виртуальные организации, физика на LHC, конечно же, является главным потребителем – в среднем 70 процентов ресурсов, на втором месте медицина.

Грид в России

В 2003–2004 годах в России была создана так называемая RDIG (Russian Data Intensive Grid), национальная грид-федерация в проекте EGEE. В нее в разные периоды входило разное количество центров, причем специалисты ОИЯИ способствовали не только подключению российских центров, но и СНГ – Белоруссии, Украине. К сожалению, не все центры, которые входили в федерацию раньше, сейчас функционируют, некоторые просто сбавили темп. В настоящее время RDIG-инфраструктура состоит из 16 ресурсных центров, в которых доступно около 9000 процессоров и более 5000 ТВ дискового пространства.

Использование грид-инфраструктуры для решения задач анализа и обработки данных LHC разными странами можно посмотреть на специальном испанском портале. Я хотел прокомментировать информацию на март (когда проходил семинар – Г. М.) 2013 года, когда прошло чуть больше 14 месяцев с момента запуска коллайдера. За это время пользователям на LHC было выдано 20 млрд часов, выполнено более 700 млн задач. Россия в этом списке находится на почетном 10-м месте,



примерно 2 процента ресурсов, это 410 млн часов, 23 млн решенных задач. Лидер – США, 33 процента, далее Великобритания, Италия, Германия, Франция, Швейцария, Канада, Нидерланды, Испания. Конечно, это не то место, которое должна занимать Россия, последние 3–4 года доля нашей страны снижалась, а сейчас, можно сказать, стабилизировалась, и думаю, начала усиливаться, поэтому есть перспективы, и эти перспективы хорошие.

Если посмотреть, как эти ресурсы распределены по четырем виртуальным организациям LHC, то 54 процента приходится на ATLAS, 29 процентов CMS, 10 процентов ALICE и 7 – LHCb. В России, надо сказать, ситуация изменилась. Раньше 5–6 центров были почти одинаковые по ресурсам, сейчас наблюдается очень резкое разделение, обозначились 3 основных центра, на которые приходится более 80 процентов ресурсов. Это ОИЯИ (45 процентов), «Курчатовский институт» (20) ИФВЭ в Протвино (19), остальные по несколько процентов. Очень обидно за НИИЯФ МГУ – если раньше он был в первой пятерке, то сейчас его доля снизилась практически до нуля. Не стало среди активных центров МИФИ, Института прикладной математики имени Келдыша и многих других. Распределение в России между виртуальными организациями более равномерное, чем в мире: ATLAS (37 процентов), CMS (27), ALICE (25) и LHCb (11). Что касается ОИЯИ, то CMS у нас составляет 61 процент от всего, что делается в России.

Об инфраструктуре ОИЯИ

У нас 4 года назад был создан канал Дубна–Москва на 20 Гбит/с. В этом году показатель будем увели-

чивать для нашего будущего проекта NICA. Наша опорная локальная сеть полностью переведена на технологию 10 Гигабит Ethernet, все лаборатории подключены по достаточно большой скорости. Наш центр является центром уровня Tier2, занимающимся анализом и обработкой информации. Имеет хорошие показатели: более 2,5 тысяч вычислительных узлов, дисковое хранилище около 2 петабайт, самое большое хранилище в России. По 2012 году у нас вполне хорошие показатели не только на уровне России – мы в пятерке лучших грид-сегментов Европы и в первой десятке мира; по количеству ресурсов, выданных нам на одно вычислительное ядро, мы находимся примерно в первой тройке. Эта инфраструктура у нас используется не только для LHC, мы поддерживаем другие виртуальные организации, в том числе СВМ и PANDA, biomed, предоставляем ресурсы другим виртуальным организациям и, конечно, локальным пользователям. В этом особенность и сложность нашей инфраструктуры – мы поддерживаем очень много классов задач пользователей. Еще одним очень важным элементом является учебно-тестовая инфраструктура. На нашей учебной инфраструктуре мы поддерживаем разные среды, она состоит из 10 ресурсных центров (Россия, Украина, Болгария, Узбекистан, Казахстан, Монголия) и служит для обучения и тренинга пользователей, системных администраторов и разработчиков грид-приложений и программного обеспечения.

Огромная работа была проведена по созданию систем удаленного управления для ATLAS и CMS, можно сказать, во всех направлениях созданы инфраструктуры для эфек-

тивной работы, обучения, тестирования и анализа работы установки и детекторов.

WLCG

В этом проекте мы участвуем 10 лет, подписано соответствующее соглашение Россия–ЦЕРН–ОИЯИ. Перечислю несколько работ, выполненных в рамках этого проекта.

RDIG monitoring&accounting – система, которая была сделана лет семь назад и до сих пор находится в эксплуатации, обеспечивает понимание, где и как работают российские грид-центры. Очень хорошая, можно сказать пионерская работа FTS (FILE TRANSFER SERVICE) – система мониторинга передачи файлов.

Еще один важный проект Dashboard Google Earth, потому что он обеспечивает хорошую визуализацию работы WLCG в реальном времени. В ЦЕРН это приложение видят достаточно часто и хорошо, везде висят плазменные мониторы. Это позволяет следить в реальном времени за тем, что происходит во всем мире – передача файлов, запуск задач, возвращение результатов и загрузка каждого грид-сайта.

Очень важную работу мы делали полтора года назад для ATLAS. В 2010 году возникла серьезная проблема – не успевали обеспечить целостность хранения информации во всей глобальной грид-инфраструктуре. Централизованный каталог и грид-сайты, на которых хранилась информация, в какой-то момент оказались несоответствующими друг другу; из 150 петабайт дискового пространства больше 30 процентов в реальности были, а в каталоге отсутствовали. Ситуация осложнялась с каждым днем. ЦЕРН обратился к нам, я считаю, что задача была быстро и хорошо решена, создан новый сервис, который обеспечивает целостность хранения информации в географически распределенной среде. Данные эксперимента ATLAS распределены более чем на 130 грид-сайтах с общим объемом дискового пространства более 120 петабайт, в котором хранятся сотни миллионов файлов. Недельный объем удаляемых данных составляет 2 петабайта (20 000 000 файлов).

Еще одна важная работа в рамках этого проекта, в которой участвует только наша команда, это разработка следующего инфраструктурного слоя. Мы говорили об уровнях Tier1, Tier2. В какой-то момент оказалось, что все четыре виртуальные организации LHC запускают свои задачи и в центрах Tier2 стали обра-

(Окончание на 6-й стр.)

(Окончание. Начало на 4–5-й стр.)

зовываться очереди. Многие группы и лаборатории начали создавать свои небольшие кластеры, центры и так далее. Для чего? Они из Tier2 закачивали данные и сами их анализировали, без конкуренции. Образовался, можно сказать, неуправляемый конгломерат комплексов, которые включают разное программное обеспечение, аппаратные решения и т. д. И самое главное, было непонятно, что делается по обработке данных экспериментов. Нас попросили все это упорядочить. Мы провели анкетирование в американских и европейских центрах, систематизировали уровень Tier3, провели исследование. Создали у себя много виртуальных аналогов или моделей Tier3, исходя из этого анкетирования, для всех сделали дистрибутивы, как эту конфигурацию устанавливать, если кому понадобится. Далее инсталлировали систему локального мониторинга, которая собирает информацию, как функционирует Tier3, причем очень много пришлось делать заново. И в конце концов сделали систему глобального мониторинга – от каждого Tier3 собирается информация, она накапливается в ЦЕРН, и менеджеры всех экспериментов теперь знают, кто работает на уровне Tier3, какие данные использует, что анализирует и какие дополнительные ресурсы требуются. Задача была выполнена, система прошла тестирование, в конце прошлого года сдана в эксплуатацию. Это достижение нашей команды послужило продолжением Tier3-мониторинга – переходу на очень популярный протокол работы с данными XRootD, которым мы тоже теперь занимаемся.

Последний проект, который мы делали в рамках WLCG, это глобальная система мониторинга передачи данных в WLCG. Провести мониторинг по всем протоколам, по всем сервисам и виртуальным организациям всех экспериментов сложно, потому что используется много собственного ПО. Хотелось бы, чтобы по всем протоколам и системам были созданы свои коллекторы, которые собирают информацию обо всех передачах, систематизируют, записывают в одну базу и дают возможность посмотреть, какое количество данных передавалось, были ли ошибки в разных системах. Система оказалась достаточно сложной, мы вначале думали, что количество переданных данных примерно петабайт в день, оказалось больше. Сейчас система находится в опытной эксплуатации.

Что предстоит сделать

Анализ процесса обработки данных LHC показал, что предложенная модель недостаточно эффективна. Такая иерархическая древообразная среда приводит к огромному количеству потоков данных, которые передаются по разным центрам. Конечно, и скорости передачи данных существенно увеличились, и появились новые технологии, которые пока еще не апробированы на компьютеринге LHC. Поэтому сейчас активно работает команда по проработке концепции и архитектуры усовершенствованной компьютерной модели. Одно из направлений – это как раз переход от иерархической структуры к более связной; второе направление – Tier0 тоже решили сделать распределенным, причем не только в ЦЕРН, но и в Будапеште. Думаю, к концу 2014 года модель компьютеринга очень существенно изменится по сравнению с тем, что есть.

Если говорить об эволюции систем, то будут использоваться грид, облачная инфраструктура, параллельные вычисления; все это начинает очень тесно взаимодействовать и уже много проектов используют суперкомпьютеры для анализа данных. Пока это кажется утопической идеей, но на самом деле она и приведет к результату. Чтобы показать, как это все развивается, можно привести пример: в прошлом году между Будапештом и ЦЕРН создано два канала по 100 Гбит/с – первичная информация будет собираться в ЦЕРН, но часть функций Tier0 будет переложена на Будапешт.

И самое важное для нас – в 2011 году было направлено письмо министра образования и науки РФ директору ЦЕРН с предложением рассмотреть проект создания центра Tier1 в России. Практически весь 2012 год велась подготовительная работа. 28 сентября 2012 года на наблюдательном совете проекта WLCG был одобрен проект создания Tier1 центра на базе «Курчатовского института» и ОИЯИ. Будет создаваться, условно говоря, один центр, состоящий из двух частей, – одна площадка в КИ, другая в ОИЯИ. Мы уже создали два прототипа – Tier1 в КИ будет направлен на обеспечение ATLAS, в ОИЯИ – на обеспечение CMS. Нам в этом году предстоит решить очень серьезную задачу – к концу года мы должны полностью создать Tier1 центр. Хотя LHC не функционирует, но Tier1 будет работать, его параметры совершенствоваться, и к 2014 году мы должны быть полностью готовы к следующему этапу экспериментов на LHC.

Расскажу, какие сейчас делаются работы в этом направлении. Если раньше структура напоминала «звезду», от Tier0 данные шли к Tier1, а Tier1 между собой не соединялись, то несколько лет назад была сделана Connectivity (plan) – защищенная сеть, к которой подключаются только ресурсные центры Tier0 и Tier1 и некоторые большие центры Tier2. Что касается сети – мы сейчас активно прорабатываем способ, как соединяться с ЦЕРН. Есть такой вариант – делаем кольцо КИ-Дубна-Амстердам-Будапешт-КИ, дублированный канал. В Амстердаме установлено черновое оборудование, мы просто к нему подключаемся и считаем, что попали в ЦЕРН. Будапешт – это, по сути, Tier0. Таким образом, у нас получается дублированный канал по всем уровням, и если с одним что-то случается, есть альтернативный маршрут. Сейчас мы работаем с сетевыми провайдерами и имеем два предложения на реализацию этого проекта. К концу года мы должны реализовать два канала по 10 Гбит/с. Это наши планы, цифры «Курчатовского института» побольше, потому что они не только ATLAS будут обслуживать, но и ALICE и LHCb.

В 2013 году у нас будет примерно 2-2,5 тысячи вычислительных узлов, примерно столько же имеем на Tier2 сейчас, но на Tier1 будет гораздо больше (в два раза) дискового пространства. И еще должен быть запущен в эксплуатацию ленточный робот на 6 петабайт, с каждым годом он будет увеличивать свои масштабы. То есть года через три-четыре мы должны иметь 10 тысяч узлов, 10 петабайт на дисках, 20 петабайт на ленточном роботе. Мы не оставляем Tier2, он продолжит работать. Таким образом, мы будем вторым центром в мире (сейчас только Лион), который поддерживает Tier1, и Tier2. Мы понимаем, что это очень сложная задача, но от этой идеи не отказываемся. Можно сказать, что с точки зрения полигона мы задачу уже выполнили, теперь предстоит полномасштабная работа по Tier1.

И несколько слов о других перспективах. Сейчас активно развивается новое направление «Большие данные» (Big Data). Фактически основа этой технологии заложена на LHC, сейчас это направление развиваются такие компании, как Google, Facebook и научные центры. В Америке финансируется очень крупный проект – импортирование ПО с LHC для решения вычислительных задач на суперкомпьютерах.

**Материал подготовила
Галина МЯЛКОВСКАЯ**

На волнах нашей памяти

(Окончание. Начало в № 22.)

Это были самые светлые страницы истории радиоклуба ОИЯИ. Однако кончилось «время собирать камни». Настали смутные перестроечные времена. На помещения и собственность радиоклуба (телефизионная 50-метровая вышка, выкупленная в ОИЯИ), стали объявляться новые претенденты. Все шефы, включая главного, в лице ДОСААФ, прекратили свое существование и финансирование. Пришлось заниматься коммерцией для поддержания учебного процесса в секциях радиоклуба. На базе малого персонального компьютера, разработанного под руководством Александра Неганова из Лаборатории ядерных проблем и запущенного в производство на заводе «Тензор», был укомплектован компьютерный класс с преподавателями. Он пользовался большим успехом у мальчишек, которые постигали азы программирования. Это были дети сотрудников ОИЯИ: Тишин, Донец, Журавлев, Щинов, Попов, Волгин, Козин, Калмыков и многие другие. Все они стали высококвалифицированными специалистами. Теперь уже их дети посещают класс молодежного филиала радиоклуба «Дубна» при центре «Дружба». Так он теперь называется.

Мы гордимся тем, что есть доля и нашего участия в тех технических и творческих успехах, которых достигли наши бывшие и настоящие одноклубники. Жаль, что площади, на которых плодотворно процветал наш радиоклуб, сократились, как шагрневая кожа, до маленькой комнаты-класса в центре «Дружба», расположенному в старых мастерских школы № 4. С грустью следует признать, что детское техническое творчество в нашем городе науки в загоне. Закрыты дом детского технического творчества, клуб «Енот», где с детьми работали энтузиасты из ОИЯИ и были в основном технические кружки. И так везде. Преподавателям приходится оснащать такие классы своим личным оборудованием. К примеру, молодежный филиал радиоклуба в центре «Дружба» оснащен радиостанциями и антennами стоимостью в десятки тысяч долларов, и при этом почти невозможно выбрать средства даже на паяльники. А о компенсации отчислений по амортизации уникального оборудования даже не приходится говорить.

Но хватит о грустном. На праздновании Дня Победы у братских могил 9 мая радиоклуб «Дубна» развернул мобильную позицию с

радиостанциями и мачтами антенн. Операторами выступили младшие школьники из центра дополнительного образования детей «Дружба», где работает молодежный филиал радиоклуба. Мы располагались рядом с артиллерийскими орудиями. Наша позиция имела успех у посетителей и участников праздника. К нам подходили ветераны и бывшие военные связисты. Наш лозунг «Связь на фронте – залог Победы!» имел успех. Операторы возрастом от 10 до 12 лет провели более полутора сотен связей с радиостанциями из многих городов-героев и городов боевой славы. Эти яркие дни надолго останутся в памяти у юных операторов. Три года назад такую же позицию с радиостанциями мы устанавливали у мемориального комплекса с самолетом «ИЛ-2». Министерство связи для нашей радиостанции выделило специальный позывной сигнал R50DXC, так же, как во время празднования 50-летия города и ОИЯИ в 2006 году со спецпозвыенным R3DUBNA.

По случаю 50-летия радиоклуба «Дубна» мы провели 5-ю конференцию, на которой вспоминали полувековую историю нашего дружного коллектива. Почтили минутой молчания всех друзей, ушедших в вечный полет в эфире: Леонида Уварова, Николая Хованского и других. Всем участникам конференции были вручены праздничные дипломы радиоклуба ОИЯИ.

Пользуясь случаем, хочу поздравить юных радиолюбителей с высокими достижениями в радиоспорте. Ученик 9-го класса школы № 8 Алексей Самсонов, занимающийся в нашем центре «Дружба» радиосвязью на коротких волнах, завоевал в молодежном первенстве России второе место, опередив многих 19-

летних участников, и первое в Московской области. В другом зональном соревновании среди молодежи он выступил с таким же высоким результатом в европейской части России. У команды младших школьников 14-е место.

Всем радиолюбителям, объединенным в радиоклубе «Дубна», хочу пожелать успехов в радиоспорте и крепкого здоровья. Наш клуб в настоящее время существует как местное отделение Союза радиолюбителей России по Северному Подмосковью. Мы твердо удерживаем лидерство среди 18 местных отделений этого союза в Московской области. Стремимся соответствовать высокому статусу наукограда Дубна! Всем спасибо за хорошую работу.

Вячеслав СЕМЕНОВ,
преподаватель центра «Дружба»
и руководитель радиоклуба
«Дубна».



Пройдемся по Протонной, свернем на Электронную...

В названиях двух вновь образованных улиц на территории площадки ядерно-физических и нанотехнологий (правобережный участок № 2) особой экономической зоны появились элементарные частицы: новые улицы названы Протонной и Электронной. Как «построен» атом, в том числе из протонов и электронов, так и особая экономическая зона «Дубна» про-

должает свое строительство, приставая новыми корпусами резидентов (сейчас на участке ядерно-физических и нанотехнологий ведут строительство пять компаний), вновь образованными улицами, которые получают названия в традициях города физиков-атомщиков.

**По информации пресс-службы
ОАО «ОЭЗ ТВТ «Дубна»**

Письмо из редакции

Уважаемые подписчики еженедельника «Дубна»! Отвечая на ваши многочисленные вопросы о подписке на нашу газету на второе полугодие, сообщаем, что сроки ее проведения сдвигаются на вторую половину июня. Причина заключается в том, что Межрегиональное агентство подписки, которое осуществляет выпуск каталога российской прессы «Почта России», несвоевременно оформило договор

о включении нашей газеты в указанный каталог. И в связи с этим мы вынуждены в срочном порядке готовить все необходимые документы **заново**, чтобы вы имели возможность подписаться на газету во всех отделениях связи города, как это было всегда. Надеемся, что это обстоятельство не помешает вам оставаться нашими верными читателями.

Ваша редакция

Вас приглашают

ДОМ КУЛЬТУРЫ «МИР»

14 июня, пятница

18.30 Спектакль по мотивам произведения Памелы Трэверс «Мэри Поппинс».

16 июня, воскресенье

12.00 Цирковое представление.

18 июня, вторник

19.00 Дубненский симфонический оркестр, Московская государственная консерватория имени П. И. Чайковского представляют. Променад-концерт «Белые ночи в Дубне». Лауреат международных конкурсов Даниил Саямов (фортепиано). В программе произведения Мессиана, Равеля, Стравинского, Прокофьева.

**УНИВЕРСАЛЬНАЯ БИБЛИОТЕКА
ОИЯИ**

18, 25 июня, вторник

19.00 Киноклуб: арт-хаус, авторское кино, фильмы-лауреаты престижных премий.



**Ваши планы
и мечты доступны
с кредитом
МДМ Банка!**

* Ставка от 14,5% до 25,5% годовых (устанавливается Банком индивидуально в зависимости от платежеспособности, категории клиента, срока и суммы кредита). Сумма кредита — от 30 тыс. до 2,5 млн руб. Срок — от 1 до 5 лет. Без комиссий за предоставление, обслуживание и досрочное погашение кредита, получения наличных денежных средств через кассу или банкомат Банка. Комиссия при проведении операции через кассу или банкомат стороннего банка (без учета комиссий стороннего банка) — 1% от суммы операции, мин. 100 руб. Обеспечение требуется для сумм кредита от 500 001 руб. — поручительство от 1 до 3 физических лиц и / или залог от 1 до 3 транспортных средств. Предусмотрены штрафы (300-5000 руб.) за несоблюдение условий кредитного договора и договора залога транспортного средства. Прочие условия предоставления кредита — по тел. 8-800-2003-700 или в офисах Банка. Предложение действительно на момент публикации. ОАО «МДМ Банк». Ген. лиц. ЦБ РФ № 323 от 05.12.2012 г.



**ул. Сахарова, 8
тел.: 212-24-10
212-89-11**



Круглосуточная справочная служба
8 800 2003 700 (звонок по России бесплатный)
www.mdm.ru