

Веб-интерфейс на базе облачной инфраструктуры ОИЯИ для фитирования экспериментальных данных малоуглового рассеяния с использованием инструментов пакета ROOT

А. Г. Соловьев¹, Т. М. Соловьева¹, К. В. Лукьянов^{1,2}, Е. В. Земляная^{1,2*}

¹ Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

² ФГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна», г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19

* elena@jinr.ru

Аннотация

Получение структурной информации об органических нанообъектах на основе анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей основано на фитировании экспериментальных данных многопараметрическими теоретическими функциями, отражающими модельные представления об изучаемых объектах. Для решения подобных задач разработано веб-приложение FITTER_WEB, основанное на новых инструментах пакета ROOT и развернутое в облачной инфраструктуре ОИЯИ. Пользователю предоставляется полный контроль над процессом фитирования, а также возможность задействовать встроенные механизмы ROOT для распараллеливания этого процесса. В работе дается описание структуры веб-приложения FITTER_WEB и используемых для его разработки программных инструментов. Демонстрируются результаты применения FITTER_WEB для анализа данных малоуглового нейтронного рассеяния на образце полидисперсной популяции везикул на базе фосфолипидов в тяжелой воде.

Ключевые слова: малоугловое рассеяние, облачные технологии, параллельные вычисления, веб-технологии, ROOT

Благодарности: авторы статьи выражают благодарность сотрудникам Многофункционального информационно-вычислительного комплекса за вычислительную поддержку облачной инфраструктуры ОИЯИ.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования: Веб-интерфейс на базе облачной инфраструктуры ОИЯИ для фитирования экспериментальных данных малоуглового рассеяния с использованием инструментов пакета ROOT / А. Г. Соловьев [и др.] // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2024. Т. 20, № 3. С. 590-601. <https://doi.org/10.25559/SITITO.020.202403.590-601>

© Соловьев А. Г., Соловьева Т. М., Лукьянов К. В., Земляная Е. В., 2024



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.



A Web Interface Based on the JINR Cloud Infrastructure for Fitting Experimental Small-Angle Scattering Data Using the Tools of the ROOT Package

A. G. Soloviev^a, T. M. Solovjeva^a, K. V. Lukyanov^{a,b}, E. V. Zemlyanaya^{a,b*}

^a Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

Address: 6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation

^b Dubna State University, Dubna, Russian Federation

Address: 19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation

* elena@jinr.ru

Abstract

Obtaining structural information about organic nanoobjects based on the analysis of small-angle neutron and X-ray scattering data is based on fitting experimental data with multi-parametric theoretical functions reflecting model representations of the objects under study. To solve such problems, the FITTER_WEB web application has been developed, based on the new tools of the ROOT package and deployed in the JINR cloud infrastructure. The user is given full control over the citation process, as well as the ability to use the built-in ROOT mechanisms to parallelize this process. The paper describes the structure of the FITTER_WEB web application and the software tools used for its development. The results of using FITTER_WEB to analyze small-angle neutron scattering data on a sample of a poly-dispersed population of phospholipid-based vesicles in heavy water are demonstrated.

Keywords: small-angle scattering, cloud technologies, parallel computing, web technologies, ROOT

Acknowledgements: The authors express their gratitude to the staff of the Multifunctional Information and Computing Complex for the computational support of the JINR cloud infrastructure.

Conflict of interests: The authors declares no conflict of interest.

For citation: Soloviev A.G., Solovjeva T.M., Lukyanov K.V., Zemlyanaya E.V. A Web Interface Based on the JINR Cloud Infrastructure for Fitting Experimental Small-Angle Scattering Data Using the Tools of the ROOT Package. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2024;20(3):590-601. <https://doi.org/10.25559/SITITO.020.202403.590-601>



Введение

Одной из важных тенденций в области современных ИТ-технологий является создание веб-приложений, способных выполнять функции специализированных проблемно-ориентированных комплексов программ. Подобный подход облегчает широкому кругу лиц, не являющихся специалистами в области программирования и методов вычислений, возможность проводить численные исследования в онлайн-режиме, без установки на свой компьютер соответствующего программного обеспечения.

В качестве примера можно привести работы в Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований (ЛИТ ОИЯИ) по созданию виртуальных исследовательских сред для моделирования физических процессов в сверхпроводящих структурах на базе платформы HybriLIT [1], а также на базе облачной инфраструктуры [2] Многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК) ОИЯИ. Помимо широкого спектра возможностей, предоставляемых современными веб-интерфейсами (удобный ввод данных через систему меню, визуализации получаемых результатов и т.п.), подобные системы при их реализации на высокопроизводительных вычислительных платформах обеспечивают возможность существенного ускорения численного анализа за счет доступа к технологиям параллельных и векторных вычислений.

Настоящая работа посвящена разработанному в работах¹ [3-6] веб-приложению, ориентированному на анализ данных малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), требующий определения по этим данным параметров теоретической функции, моделирующей структуру изучаемого нано-объекта. Разработанное и развернутое на облачной инфраструктуре МИВК ОИЯИ веб-приложение FITTER_WEB основано на новых возможностях пакета ROOT, включая встроенные механизмы распараллеливания. В работе дано описание структуры веб-интерфейса и инструментов, использованных для его создания и развертывания на облачных ресурсах, демонстрируется пример его использования для анализа структуры везикулярных систем по данным МУРН и оценку потенциала параллелизма в созданном интерфейсе.

Структура и функционал веб-приложения FITTER_WEB

Приложение FITTER_WEB разработано с помощью новых инструментов ROOT7, активно внедряющих в графическую систему ROOT современные концепции, основанные на веб-технологиях². В предыдущих версиях фреймворка графический интерфейс пользователя GUI очень сильно зависел от опера-

ционной системы. Использование веб-платформ улучшает переносимость, поддержку удаленного отображения и многопоточности, обеспечивает более надежное обслуживание. FITTER_WEB представляет собой клиент-серверное компьютерное приложение, где сервер представляет собой стандартное приложение ROOT C++, а клиент запускается непосредственно в браузере.

Одним из важнейших компонентов на стороне сервера является THttpServer. Этот класс предоставляет HTTP-доступ к любому запущенному ROOT-приложению и отвечает за выполнение команд и методов. В ROOT для хранения объектов в файлах используется двоичное «потокковое» представление. Класс TBufferJSON, выполняя все необходимые операции ввода-вывода, преобразует ROOT-объекты в JSON (*JavaScript Object Notation*), который может быть проанализирован стандартными методами JavaScript. TBufferJSON может передавать не только целые объекты, но и определенные члены класса. Это обеспечивает доступ к любому члену объекта в текстовом, удобочитаемом виде. Класс RWebWindow – это объект на стороне сервера, отображающий окна в веб-браузере и управляющий соединениями с клиентами.

Клиентская часть написана на JavaScript и использует JSROOT, отвечающий за отображение объектов ROOT в веб-браузерах. JSROOT может читать бинарные данные, хранящиеся в файле специального root формата, и управлять отображаемыми объектами непосредственно в браузере. JSROOT полностью поддерживает формат JSON. Для реализации высокоуровневых виджетов используется фреймворк OpenUI5.

Приложение FITTER_WEB доступно по адресу <http://fitter.jinr.ru>. Окно веб-приложения, показанное на рис. 1, состоит из панели фитирования, расположенной слева, и окна с тремя вкладками: первая является областью графического вывода результатов фитирования; вторая – это текстовый редактор, использующийся для редактирования модельной функции на C++; в третью вкладку выводятся численные результаты фитирования.

В качестве функциональной основы использована разработанная ранее программа FITTER [7], предназначенная для фитирования экспериментальных данных малоуглового рассеяния нейтронов выбранной теоретической многопараметрической функцией. Фитирование или аппроксимация экспериментальных данных теоретической (целевой) функцией $f(x)$ проводится по методу наименьших квадратов. Согласно этому методу, если существует набор N независимых измерений в точках x_i ($i=1, \dots, N$) со значениями $y(x_i)$ и с ошибками измерен Δy_i , то оценка для N_{par} неизвестных параметров функции $f(x)$ сводится к нахождению минимума суммы квадратов отклонений:

$$\chi^2 = \frac{1}{N - N_{par}} \sum_{i=1}^N \left(\frac{f(x_i) - y_i}{\Delta y_i} \right)^2.$$

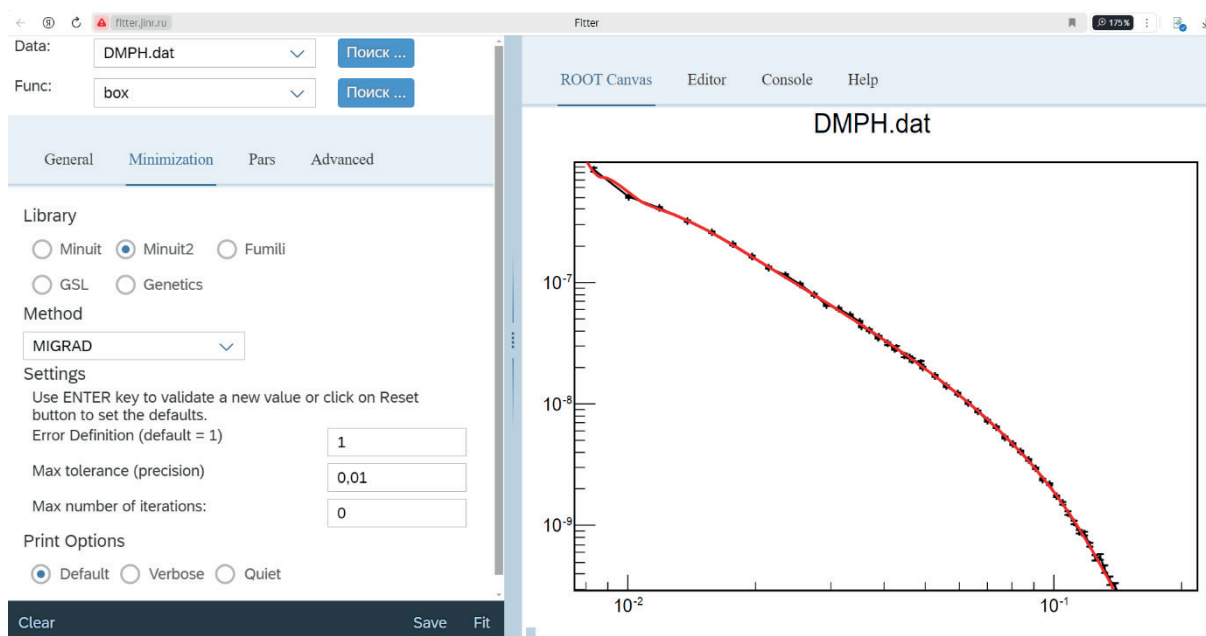
¹ Реализация обработки данных малоуглового рассеяния с использованием веб- и параллельных средств фреймворка ROOT / А. Г. Соловьев, Т. М. Соловьева, Е. В. Земляная // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ-2024) : Материалы XVIII Всероссийской научной конференции с международным участием. Короткие статьи и описания плакатов, Челябинск, 02-04 апреля 2024 года. Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2024. С. 158-164. EDN: EDHSQK; Разработка веб-приложения для фитирования данных спектрометра малоуглового рассеяния нейтронов / А. Г. Соловьев, Т. М. Соловьева, А. И. Ку克林, М. Балашов // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ-2023) : Короткие статьи и описания плакатов. Материалы XVII всероссийской научной конференции с международным участием, Санкт-Петербург, 28-30 марта 2023 года. Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2023. С. 206-214. EDN: QMSFDW

² Соловьев А. Г., Соловьева Т. М. FITTER_WEB – программа для фитирования экспериментальных данных, полученных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов, реализованная в виде Web-приложения [Электронный ресурс]. URL: http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/fitter_web/index.html (дата обращения: 15.05.2024).



Программа FITTER хорошо зарекомендовала себя как часть программного комплекса на малоугловом спектрометре ЮМО в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ. В ней были реализованы теоретические модели, характерные для анализа данных, получаемых на спектрометре ЮМО, а так-

же три функции фитирования, отражающие геометрические особенности исследуемых методами МУРН объектов: сферическая модель с полидисперсностью радиуса, эллипсоид и параллелепипед. Соответствующие формулы модельных функций приведены в [7].



Р и с. 1. Окно приложения FITTER_WEB

Fig. 1. FITTER_WEB Application window

Источник: здесь и далее в статье все таблицы и рисунки составлены авторами.

Source: Hereinafter in this article all tables and figures were made by the authors.

Панель фитирования основана на новой веб-версии FitPanel, являющейся компонентом ROOT7 и имеющей множество элементов управления опциями фитирования. Пользователь может выбрать метод и алгоритм минимизации, установить начальные значения параметров, диапазон их изменения и т.д. Нами добавлена возможность чтения пользовательских текстовых файлов: файла с экспериментальными данными и файла с ROOT-скриптом, задающим теоретическую функцию на языке C++. Пользователь может редактировать данный скрипт или создать новый, отвечающий его конкретной задаче. Результат фитирования может быть сохранен в виде текстовых файлов, содержащих значения теоретической функции и параметры фитирования, а также в виде изображения.

Развертывание приложения в облаке

Есть несколько причин использовать облачную инфраструктуру для такого рода веб-сервисов. С одной стороны, нам нужна производительность параллельных вычислений, в то время как большинство служб хостинга имеют ограничения для выполнения параллельных расчетов со стороны сервера. С другой стороны, многие кластеры для параллельных вычислений с использованием ROOT не имеют стандартной интерфейсной

интеграции с WWW. Выбор облачного сервиса позволяет получить полный контроль над программным обеспечением в сочетании с веб-доступом.

Немаловажным фактором является также то, что при установке веб-приложения на облачной инфраструктуре автоматически отпадает необходимость решения вопросов информационной безопасности, которая обеспечивается администраторами этого ресурса. В качестве контрпримера отметим, что созданная в [8] для установки под ОС Windows онлайн-система, позволяющая в режиме свободного удаленного доступа обрабатывать спектры МУРН на везикулярных системах, была отключена из-за многочисленных хакерских атак.

Облачная инфраструктура ОИЯИ входит в состав МИВК ОИЯИ [9, 10]. Для управления виртуальными образами используется стандартный интерфейс OpenNebula. Для развертывания приложения была запрошена виртуальная машина с восемью ядрами (процессор Intel Xeon E5-2650 v4 @ 2,20 ГГц) и 32 Гб оперативной памяти. Операционная система Ubuntu 22.04.1 была выбрана как одна из рекомендованных для использования с ROOT. Кроме этого, ее образ уже имелся в «магазине» программного обеспечения используемого облачного сервиса. Доступ был организован с использованием открытого ключа из соображений безопасности.



После настройки ПО ROOT и FITTER_WEB из git-сервиса ОИЯИ³ сайт был проверен на работоспособность и производительность в сопоставлении с аналогом приложения, ранее развернутого на шести ядрах гетерогенной платформы HybriLIT [11], а также с копией на персональном компьютере с процессором Intel Core™ i9 с десятью ядрами. Результаты проведенного тестирования, представленные в [5], подтверждают корректность и эффективность использования облачной инфраструктуры в качестве вычислительной основы для работы приложения FITTER_WEB.

Анализ структуры полидисперсной везикулярной системы в рамках модели разделенных форм-факторов с помощью FITTER_WEB

Метод малоуглового рассеяния рентгеновских частиц и нейтронов широко применяется при исследовании надатомной структуры неупорядоченных систем, таких как макромолекулы в растворе, аморфные сплавы, органические нанокристаллы и другие нанопористые вещества (см. обзор [12] и цитируемую литературу). В малоугловых экспериментах измеряется интенсивность рассеяния при малых величинах модуля вектора рассеяния, существенно меньших межатомных расстояний. Далее экспериментальная интенсивность сравнивается с расчетной кривой, полученной с использованием модельных тел, аппроксимирующих изучаемые объекты. В зависимости от характера изучаемых образцов могут использоваться как простые геометрические формы – сферы, параллелепипеды, эллипсоиды, так и более сложные модели, учитывающие детали внутренней структуры изучаемого объекта. Как правило, строится несколько моделей исследуемых частиц, а затем на основе сопоставления численных результатов с экспериментальными данными осуществляется выбор между ними.

В данном разделе представлен результат использования описанного в предыдущих разделах инструментария FITTER_WEB для обработки спектров малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) на полидисперсных популяциях везикулярных систем на основе модели разделенных форм-факторов (РФФ), активно используемой для исследования однослойных везикул различного типа (см., например, недавнюю работу [13] и цитируемую литературу). По сравнению с вышеупомянутыми стандартизованными теоретическими функциями, доступными в FITTER_WEB, модель включает большее количество параметров, требующих подгонки под данные экспериментов, что обусловлено довольно сложной структурой везикул и полидисперсностью их размеров в популяции.

Фосфолипидные везикулы используются в фармакологии и косметологии для транспорта лекарственных или косметически активных препаратов. Поэтому получение информации об их структуре и свойствах в различных средах имеет важное практическое значение. Однослойные везикулы представляют собой полые внутри нано-размерные объекты, имеющие близкую к сферической форму и образующие в воде или жидких растворах популяции, размеры которых в общем случае

могут быть разными. Оболочка везикул представляет собой бислой, состоящий из липидных молекул, имеющих гидрофильную полярную головку и длинные гидрофобные углеводородные цепочки [12]. При этом все неполярные углеводородные «хвосты» находятся в центральной части мембраны, в то время как полярные головки располагаются в наружных областях мембраны, соприкасаясь с молекулами воды (раствора) как снаружи, так и внутри везикулы.

Метод РФФ для анализа структуры везикулярных систем по данным МУРН подробно излагается в ряде работ, включая [12–14], и основан на факторизации выражения амплитуды МУРН на везикулярной системе в приближении сферической симметрии. В предположении, что все везикулы имеют одинаковый радиус R (монодисперсная популяция), толщину бислоя d и что $R \gg d$, сечение рассеяния на монодисперсной популяции однослойных везикул можно записать как

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega_{\text{mon}}}(q) = nF_s(q, R)F_b(q, \rho)S(q, R), \quad (1)$$

где q – модуль вектора рассеяния, n – число везикул в единице объема, $S \approx 1$ – структурный фактор, отражающий взаимодействие везикул в популяции [12], F_s – зависящий только от радиуса R формфактор сферической везикулы с бесконечно тонкой толщиной бислоя, а F_b – форм-фактор симметричного липидного бислоя, зависящий только от толщины бислоя d (с учетом $R \gg d$ мы пренебрегаем кривизной бислоя). Формфакторы $F_s(q, R)$ и $F_b(q, d)$ определяются следующими выражениями:

$$F_s(q, R) = \left(4\pi \frac{R}{q} \sin(qR) \right)^2, \quad (2)$$

$$F_b(q, \rho) = \left(\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \Delta\rho(x) \cos(qx) dx \right)^2 \quad (3)$$

В формуле (3) $\Delta\rho(x)$ – разность (контраст) между плотностью длины рассеяния фотона от липидного бислоя везикулы (ρ) и от окружающей жидкости (ρ_0). При использовании многих функций, часто применяемых для моделирования структуры бислоя поперек мембраны, интеграл (3) можно вычислить аналитически, что существенно упрощает расчеты.

Для учета полидисперсности радиуса везикул используется несимметричное распределение Шульца:

$$G(R, < R >) = \frac{R^m}{m!} \left(\frac{m+1}{< R >} \right)^{m+1} \exp \left[-\frac{(m+1)R}{< R >} \right] \quad (4)$$

Тогда макроскопическое сечение $d\Sigma(q)/d\Omega$ для полидисперсной популяции везикул среднего радиуса $< R >$ имеет вид:

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) = \frac{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} \frac{d\Sigma}{d\Omega_{\text{mon}}}(q, R, < R >) G(R, < R >) dR}{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} G(R, < R >) dR} \quad (5)$$

С учетом некогерентного фона I_b и разрешения спектрометра реально измеряемое значение макроскопического сечения $\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q)$ записывается как:

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q)_{\text{cor}} = \frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) + \frac{1}{2} \Delta^2 \frac{d^2}{dq^2} \left[\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) \right] + I_b. \quad (6)$$

³ YuMO / fitter-next [Электронный ресурс] // ОИЯИ, 2024. URL: <https://git.jinr.ru/yumo/fitter-next> (дата обращения: 15.05.2024).



Здесь Δ – второй момент функции разрешения спектрометра. Параметры подгоняются под экспериментальные данные МУРН путем минимизации невязки между экспериментальными и теоретическими значениями МУРН. Здесь $\delta(q_i)$ – ошибки экспериментальных данных; N – число экспериментальных точек; k – количество фитируемых параметров.

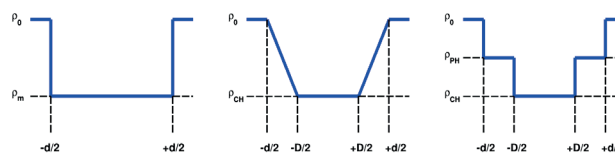
$$\chi^2 = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q_i) - \frac{d\Sigma}{d\Omega}(q_i)_{exp}}{\delta(q_i)} \right)^2 \quad (7)$$

В нашем случае параметрами, определяемыми при решении задачи фитирования, являются величины m , d , R , I_B , n , а также параметры функции, определяющей структуру бислоя. В данной работе мы рассмотрим три варианта функции, моделирующие плотность длины рассеяния поперек мембраны (бислоя) везикулы.

В данной работе представлены результаты РФФ-анализа спектра МУРН на полидисперсной популяции однослойных везикул димеристоида фосфатидилхолина (ДМФХ) в тяжелой воде. Измерения проведены на малоугловом спектрометре ЮМО в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ. Для анализа спектров МУРН на основе модели РФФ, определяемой формулами (1-7), производился вызов соответствующей C++ функции в рамках веб-приложения FITTER_WEB.

В расчетах использовались представленные на рис. 2 модели, наиболее часто используемые для анализа данных МУРН на везикулярных системах. В модели box предполагается однородная структура поперек бислоя: $\rho = \rho_m$ поперек бислоя. Такая плотность обычно используется для первоначальных расчетов с целью предварительной оценки значений толщины бислоя, среднего радиуса и полидисперсности везикул в образце. Гидрофобно-гидрофильная модель hh учитывает разницу между рассеянием в области полярных головок на границах бислоя (гидрофильная область) и в центральной области углеводородных цепочек (гидрофобная область). Здесь используется кусочно-линейная аппроксимация плотности в гидрофильной

области и введена в качестве параметра толщина области D углеводородных цепочек (CH). Ступенчатая модель step также учитывает различие между рассеянием в области полярных головок и углеводородных цепочек и предполагает, что молекулы раствора проникают только в область полярных головок бислоя на краях бислоя. Значения ρ_0 и ρ_{CH} – известны. Для данного эксперимента $\rho_0 = 6.37 \times 10^{+10}$, $\rho_{CH} = -0.36 \times 10^{+10}$.



Р и с. 2. Функция плотности поперек бислоя для модели box (слева), hh (в центре) и step (справа)

Fig. 2. Density function across the bilayer for the box (left), hh (center), and step (right) models

Полученные для каждой модели значения параметров, представленные в таблице 1, согласуются с результатами ранее проведенного анализа аналогичного спектра, опубликованными в работе [14]. Здесь приведены результаты, полученные с помощью встроенной в ROOT программы MINUIT [15].

Поскольку FITTER предоставляет возможность пользоваться различными методами и алгоритмами минимизации, мы провели сравнение параметров фитирования, полученных для модели box с помощью MINUIT, MINUIT 2 (параллельная версия MINUIT) и FUMILI. Представленные в таблице 2 данные показывают практическое совпадение результатов, полученных тремя разными минимизаторами. В первых двух случаях использовался алгоритм MIGRAD.

На рисунке 3 можно видеть хорошее согласие расчетной кривой с экспериментальными данными для всех трех моделей. Визуально отличия не видны.

Таблица 1. Параметры фитирования для моделей box, hh и step

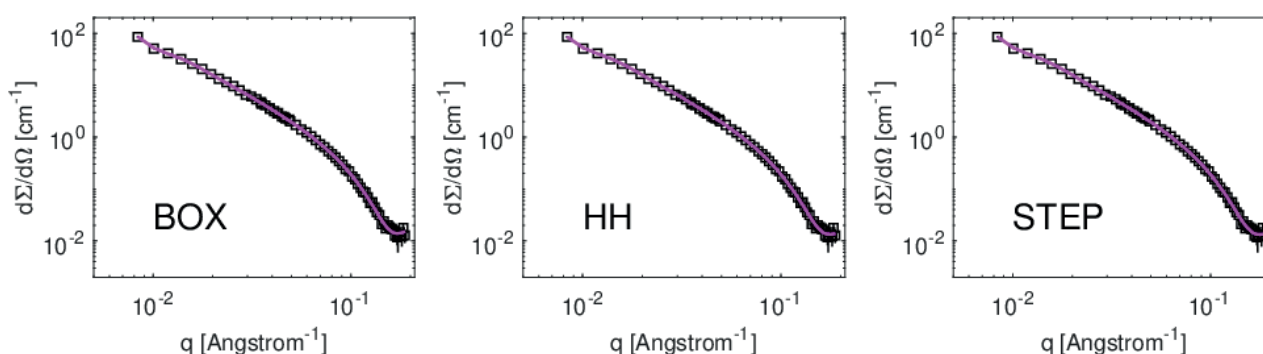
Table 1. Fitting parameters for box, hh and step models

Параметры	Значения для модели box	Значения для модели hh	Значения для модели step
χ^2	1.22	1.058	1.056
R , Å	264.6 ± 3.5	263.16 ± 5	263.2 ± 5
d , Å	36.9 ± 0.13	41.5 ± 0.4	41.2 ± 1.3
m	8.2 ± 0.5	8.2 ± 0.5	8.2 ± 0.5
n , см ⁻³	$(2.7 \pm 0.09) \times 10^{+14}$	$(1.98 \pm 0.16) \times 10^{+14}$	$(2.23 \pm 0.21) \times 10^{+14}$
I_B , см ⁻¹	$(1.42 \pm 0.08) \times 10^{-2}$	$(1.26 \pm 0.12) \times 10^{-2}$	$(1.26 \pm 0.12) \times 10^{-2}$
ρ , см ⁻²	$\rho_m = (5.27 \pm 0.09) \times 10^{+10}$		$\rho_{PH} = (2.19 \pm 0.54) \times 10^{+10}$
D , Å		28 ± 2.4	18.2 ± 0.99



Таблица 2. Параметры фитирования для модели box, полученные с помощью трех различных минимизаторов, реализованных в ROOT
Table 2. Fitting parameters for the box model obtained using three different minimizers implemented in ROOT

Параметры	MINUIT	MINUIT2	FUMILI
χ^2	1.23	1.23	1.23
R, Å	264.6 ± 3.53535	264.6 ± 3.52251	264.6 ± 5.18278
d, Å	36.8715 ± 0.131557	36.8715 ± 0.131521	36.8715 ± 0.132278
m	8.22683 ± 0.526022	8.22693 ± 0.52531	8.22693 ± 0.560987
n, см ⁻³	$(2.77057 \pm 0.09194) \times 10^{+14}$	$(2.86713 \pm 0.09534) \times 10^{+14}$	$(3.08134 \pm 0.09366) \times 10^{+14}$
Ib, см ⁻¹	$(1.42313 \pm 0.08309) \times 10^{-2}$	$(1.42312 \pm 0.08305) \times 10^{-2}$	$(1.42313 \pm 0.08356) \times 10^{-2}$
ρ_m , см ⁻²	$(5.27296 \pm 0.08749) \times 10^{+10}$	$(5.18342 \pm 0.08573) \times 10^{+10}$	$(5.0 \pm 0.0910865) \times 10^{+10}$



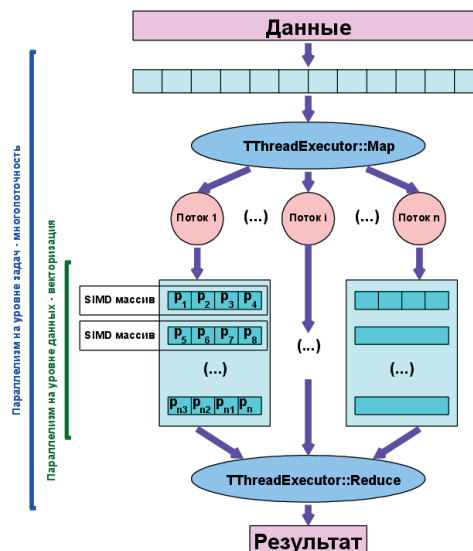
Р и с. 3. Сечения МУРН, рассчитанные по методу РФФ, в сравнении с экспериментальными данным для модели box (слева), hh (в центре) и step (справа)
Fig. 3. SANS cross-sections calculated using the RFF method, compared with experimental data for the box (left), hh (center) and step (right) models

Реализация параллелизма в приложении FITTER_WEB

Процедура фитирования хорошо поддается распараллеливанию с помощью встроенных механизмов ROOT:

- параллелизм на уровне задач,
- параллелизм на уровне данных.

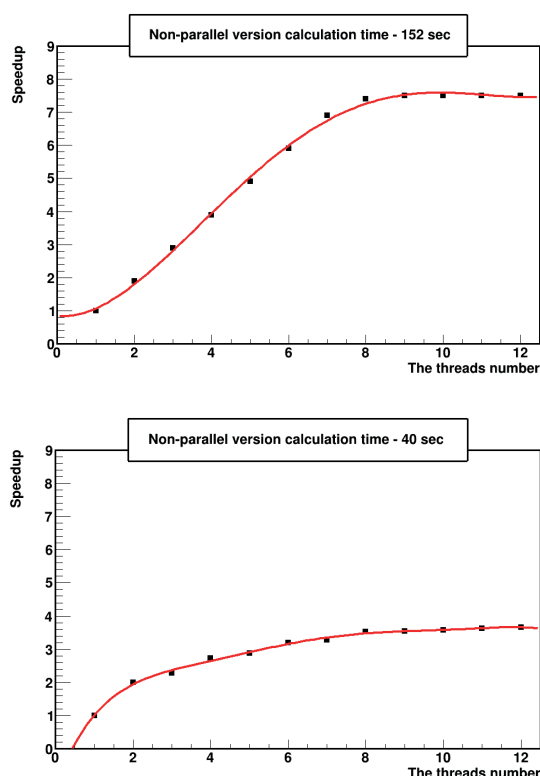
Возможность задействовать эти механизмы, как по отдельности, так и совместно, предоставляется самому пользователю. Параллелизм на уровне задач реализован в ROOT через многопоточность. По умолчанию ROOT работает в последовательном режиме. Но некоторые его компоненты, к которым относятся и фитирование, имеют дополнительные реализации, которые могут распределять работу по нескольким потокам, чтобы использовать несколько ядер машины. Чтобы активировать использование именно этих многопоточных реализаций, пользователь должен вызвать `ROOT::EnableImplicitMT()`. При использовании FITTER_WEB этот вызов можно поместить в скрипт с реализацией теоретической функции. Поскольку дальнейшее происходит «под капотом», параллелизмом управляет сам ROOT, в этом случае говорят о *неявной* многопоточности.



Р и с. 4. Схема работы встроенных механизмов ROOT для параллельной реализации фитирования

Fig. 4. The operation scheme of the built-in ROOT mechanisms for the parallel implementation of fitting





Р и с. 5. Зависимость коэффициента ускорения вычислений (speedup) от числа параллельных потоков при расчете параметров описанной выше модели РФФ на везикулярной системе ДМФХ (слева) и эллипсоидной модели наночастиц Fe304 в керосине (справа)

Fig. 5. Dependence of the speedup factor on the number of parallel threads when calculating the parameters of the above-described RFF model on the vesicular system of dimyristoylphosphatidylcholine (left) and the ellipsoid model of Fe304 nanoparticles in kerosene (right)

Параллелизм на уровне данных использует векторизацию [16]. Векторизация позволяет загрузить несколько значений определенного типа в SIMD массив и *одновременно* выполнить над ними одну и ту же операцию. Для того чтобы воспользоваться этим механизмом в FITTER_WEB, пользователь должен модифицировать скрипт теоретической функции, так чтобы ее аргумент и возвращаемое значение были векторными типами (ROOT определяет новые типы данных ROOT::Double_v и ROOT::Float_v, представляющие собой SIMD-векторы двойной и одинарной точности соответственно).

Процесс распараллеливания, выполняемый в каждом из этих алгоритмов, представлен на рис. 4. Реализация основана на шаблоне MapReduce [17]. На первом этапе происходит разбивка данных на фрагменты. Затем метод Map класса ROOT::TThreadExecutor распределяет обработку этих фрагментов по имеющимся потокам.

Если пользователь предоставил векторизованную функцию, которая принимает SIMD-типы ROOT в качестве параметров,

количество вызовов пользовательской функции при каждой такой обработке сокращается пропорционально размерности SIMD-массива.

На заключительном этапе, после того как все фрагменты данных обработаны, метод Reduce класса ROOT::TThreadExecutor объединяет результаты всех подзадач в общий результат. Для исследования эффекта параллелизма были проведены измерения времени работы веб-приложения при расчетах с разным количеством потоков (*threads*), задаваемых процедурой ROOT::EnableImplicitMT(*threads*). Расчеты производились при условии, что веб-приложение в каждую конкретную единицу времени обслуживает только одного пользователя. Результаты этих расчетов представлены на рис.5.

Слева показан график ускорения вычислений при увеличении количества потоков для случая РФФ-анализа структуры везикул ДМФХ, справа аналогичный расчет выполнен для фитирования параметров эллипсоидной модели по данным МУРН на образце феррожидкости с наночастицами Fe304 в керосине [4]. Видно, что в обоих случаях ускорение вычислений (*speedup*) по сравнению с расчетами в однопоточном режиме растет с увеличением числа потоков и достигает 7 раз на рисунке слева и 4 раз на рисунке справа, где представлены результаты для более простой эллипсоидной модели, требующей меньшего объема вычислений [18-25].

Заключение

Разработанное приложение FITTER_WEB предоставляет широкие возможности для решения задач, требующих подгонки параметров моделей, описываемых теоретическими функциями, по известным экспериментальным данным. Изначально данное приложение разрабатывалось для анализа данных МУРН на нано-размерных образцах различного типа, но благодаря реализованной возможности делать расчеты с использованием не только встроенных стандартных, но и задаваемых пользователем целевых функций, этот инструмент может использоваться для большого круга задач, выходящих за рамки исходно поставленной цели. По сути, FITTER_WEB представляет собой удобный интерфейс для работы с процедурами минимизации, реализованными в ROOT, с возможностью повышения производительности вычислений за счет параллелизма и векторизации, реализованных в рамках пакета ROOT.

Приложение было успешно апробировано для анализа структуры полидисперсных везикулярных систем на основе обработки данных МУРН. Для ускорения вычислений в приложении использовалась неявная многопоточность и векторизация функций. В рассмотренном здесь случае, когда экспериментальный спектр состоит из 70 точек, ускорение вычислений достигает величины более 7 раз, что является хорошим результатом с учетом того, что расчеты велись на 8-ядерной машине. Можно ожидать, что при анализе спектров данных с большим количеством точек на вычислительных системах с большим количеством ядер эффект от использования параллелизма будет более значительным.



Список использованных источников

- [1] Разработка виртуальной исследовательской среды для моделирования на платформе HybriLIT физических процессов в системах, основанных на джозефсоновских переходах / Ю. А. Бутенко, Д. М. Маров, А. В. Нечаевский [и др.] // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2020. Т. 16, № 3. С. 633-642. <https://doi.org/10.25559/SITITO.16.202003.633-642>
- [2] Балашов Н. А., Кутовский Н. А., Соколов И. А. Визуализация данных в облачном сервисе для научных расчетов // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2021. Т. 17, № 1. С. 109-115. <https://doi.org/10.25559/SITITO.17.202101.733>
- [3] SAS program for two-detector system: seamless curve from both detectors / A. G. Soloviev [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 848. P. 12-20. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/848/1/012020>
- [4] Облачный сервис ОИЯИ для научных и инженерных расчётов / Н. А. Балашов [и др.] // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2018. Т. 14, № 1. С. 61-72. <https://doi.org/10.25559/SITITO.14.201801.061-072>
- [5] Соловьев А. Г., Соловьева Т. М., Лукьянов К. В. Развертывание веб-приложения для фитирования экспериментальных данных в облачной инфраструктуре ОИЯИ // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2024. Т. 55, № 3. С. 627-631. EDN: FMOPBV
- [6] Balashov N., Kutovskiy N., Priakhina D., Sokolov I. Evolution and Perspectives of the Service for Parallel Applications Running at JINR Multifunctional Information and Computing Complex // EPJ Web of Conferences. 2020. Vol. 226. Article number: 03002. <https://doi.org/10.1051/epj-conf/202022603002>
- [7] Soloviev A. G., Murugova T. N., Islamov A. N., Kuklin A. I. FITTER. The package for fitting a chosen theoretical multiparameter function through a set of data points. Application to experimental data of the YuMO spectrometer // Journal of Physics: Conference Series. 2012. Vol. 351. Article number: 012027. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/351/1/012027>
- [8] Онлайн-интерфейс для исследования структуры фосфолипидных везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния нейтронов на основе модели разделенных формфакторов / Е. В. Земляная, М. А. Киселев, К. В. Лукьянов [и др.] // Системный анализ в науке и образовании. 2017. № 4. С. 1-10. EDN: NRYDRZ
- [9] IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high-performance computing and training of IT-specialists / G. Adam [et al.] // CEUR Workshop Proceedings. 2018. Vol. 2267. P. 638-644. URL: <https://ceur-ws.org/Vol-2267/638-644-paper-122.pdf> (дата обращения: 15.05.2024).
- [10] Кореньков В. В., Подгайный Д. В., Стрельцова О. И. Образовательная программа по технология МНРС на базе гетерогенного кластера HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ) // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2017. Т. 13, № 4. С. 141-146. <https://doi.org/10.25559/SITITO.2017.4.633>
- [11] Baranov A. V., Balashov N. A., Kutovskiy N. A., Semenov R. N. JINR cloud infrastructure evolution // Physics of Particles and Nuclei Letters. 2016. Vol. 13, issue 5. P. 672-675. <https://doi.org/10.1134/S1547477116050071>
- [12] Киселев М. А. Методы исследования липидных наноструктур на нейтронных и синхротронных источниках // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2011. Т. 42, № 2. С. 578-635. EDN: GEXNTI
- [13] Исследование возможностей анализа везикулярной структуры нанолечств на основе фосфолипидной транспортной наносистемы по данным малоуглового рассеяния нейтронов / М. А. Киселев, Е. В. Земляная, Е. И. Жабицкая [и др.] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 1. С. 3-8. <https://doi.org/10.31857/S1028096023010119>
- [14] Kiselev M. A., Zemlyanaya E. V., Aswal V. K., Neubert R. H. H. What can we learn about the lipid vesicle structure from the small-angle neutron scattering experiment? // European Biophysics Journal. 2006. Vol. 35, No. 6. P. 477-493. <https://doi.org/10.1007/s00249-006-0055-9>
- [15] James F., Roos M. Minuit: A System for Function Minimization and Analysis of the Parameter Errors and Correlations // Computer Physics Communications. 1975. Vol. 10, issue 6. P. 343-367. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(75\)90039-9](https://doi.org/10.1016/0010-4655(75)90039-9)
- [16] Valls X., Moneta L., Amadio G., Tsang A. New developments in the ROOT fitting classes // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 214. Article number: 05043. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921405043>
- [17] Dean J., Ghemawat S. MapReduce: simplified data processing on large clusters // Communications of the ACM. 2008. Vol. 51, No. 1. P. 107-113. <https://doi.org/10.1145/1327452.1327492>
- [18] Brun R., Rademakers F. ROOT – An Object-Oriented Data Analysis Framework // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 1997. Vol. 389. P. 81-86. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(97\)00048-X](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(97)00048-X)
- [19] Solovjeva T. M., Soloviev A. G. Comparative study of the effectiveness of PROOF with other parallelization methods implemented in the ROOT software package // Computer Physics Communications. 2018. Vol. 233. P. 41-43. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.06.020>
- [20] Solovjeva T. M. Analysis of the effectiveness of various methods for parallelizing data processing implemented in the ROOT package // CEUR Workshop Proceedings. 2021. Vol. 3041. P. 393-396. URL: <https://ceur-ws.org/Vol-3041/393-396-paper-72.pdf> (дата обращения: 15.05.2024).



- [21] Increasing Parallelism in the ROOT I/O Subsystem / G. Amadio [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1085, issue 3. Article number: 032014. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1085/3/032014>
- [22] Riley D., Jones C. Multi-threaded Output in CMS using ROOT // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 214. Article number: 02016. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921402016>
- [23] Amadio G., Canal P., Guiraud E., Piparo D. Writing ROOT Data in Parallel with TBufferMerger // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 214. Article number: 05037. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921405037>
- [24] Small-Angle X-Ray Scattering to Analyze the Morphological Properties of Nanoparticulated Systems / O. M. Londoño [et al.] // Handbook of Materials Characterization ; ed. by S. Sharma. Cham: Springer, 2018. P. 37-75. https://doi.org/10.1007/978-3-319-92955-2_2
- [25] Soloviev A., Solovjeva T., Lukyanov K. Deployment of a Web Application for Fitting Experimental Data at the JINR Cloud Infrastructure // Physics of Particles and Nuclei. 2024. Vol. 55. P. 489-491. <https://doi.org/10.1134/S1063779624030808>

Поступила 15.05.2024; одобрена после рецензирования 19.07.2024; принята к публикации 16.09.2024.

Об авторах:

Соловьев Алексей Геннадьевич, старший научный сотрудник сектора методов моделирования физических процессов и анализа данных наблюдений Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6), кандидат физико-математических наук, **ORCID:** <https://orcid.org/0009-0001-9170-362X>, solovjev@jinr.ru
Соловьева Татьяна Михайловна, старший научный сотрудник сектора разработки математического обеспечения на базе больших программных комплексов и средств визуализации данных Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6), кандидат физико-математических наук, **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0002-7375-2161>, tanysha@jinr.ru

Лукьянов Константин Валерьевич, старший научный сотрудник сектора методов моделирования физических процессов и анализа данных наблюдений Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6); доцент Института системного анализа и управления, ФГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна» (141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19), кандидат физико-математических наук, **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0001-8218-7873>, luky@jinr.ru

Земляная Елена Валериевна, начальник сектора расчетов сложных физических систем Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6); профессор Института системного анализа и управления, ФГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна» (141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19), доктор физико-математических наук, **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0001-8149-9533>, elena@jinr.ru

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

References

- [1] Butenko Yu.A., Marov D.M., Nechaevskiy A.V., Streltsova O.I., Rahmonov I.R., Bashashin M.V. Development of a Virtual Research Environment for Modeling Physical Processes on the HybriLIT Platform in Systems Based on Josephson Junctions. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2020;16(3):633-642. (In Russ., abstract in Eng.) <https://doi.org/10.25559/SITITO.16.202003.633-642>
- [2] Balashov N.A., Kutovskiy N.A., Sokolov I.A. Data Visualization in Cloud Service for Scientific Computations. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2021;17(1):109-115. <https://doi.org/10.25559/SITITO.17.202101.733>
- [3] Soloviev A.G., Solovjeva T.M., Ivankov O.I., Soloviov D.V., Rogachev A.V., Kuklin A.I. SAS program for two-detector system: seamless curve from both detectors. *Journal of Physics: Conference Series*. 2017;848:12-20. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/848/1/012020>
- [4] Balashov N., Bashashin M., Kuchumov R., Kutovskiy N., Sokolov I. JINR Cloud Service for Scientific and Engineering Computations. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2018;14(1):61-72. <https://doi.org/10.25559/SITITO.14.201801.061-072>
- [5] Soloviev A.G., Solovjeva T.M., Lukyanov K.V. Deployment of a Web Application for Fitting Experimental Data at the JINR Cloud Infrastructure. *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*. 2024;55(3):627-631. (In Russ., abstract in Eng.) EDN: FMOPBV
- [6] Balashov N., Kutovskiy N., Priakhina D., Sokolov I. Evolution and Perspectives of the Service for Parallel Applications Running at JINR Multifunctional Information and Computing Complex. *EPJ Web of Conferences*. 2020;226:03002. <https://doi.org/10.1051/epj-conf/202022603002>



- [7] Soloviev A.G., Murugova T.N., Islamov A.N., Kuklin A.I. FITTER. The package for fitting a chosen theoretical multiparameter function through a set of data points. Application to experimental data of the YuMO spectrometer. *Journal of Physics: Conference Series*. 2012;351:012027. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/351/1/012027>
- [8] Zemlyanaya E., Kiselev M., Lukyanov K., Popov I., Turapbay K. Online interface for investigation of the structure of phospholipidic vesicular systems by the small angle scattering data analysis within the frame of the separated form factors model. *Sistemnyj analiz v nauke i obrazovanii* = System Analysis in Science and Education. 2017;(4):1-10. (In Russ., abstract in Eng.) EDN: NRYDRZ
- [9] Adam G., Bashashin M., Belyakov D., Kirakosyan M., Matveev M., Podgainy D., Sapozhnikova T., Streltsova O., Torosyan Sh., Vala M., Valova L., Vorontsov A., Zaikina T., Zemlyanaya E., Zuev M. IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high-performance computing and training of IT-specialists. *CEUR Workshop Proceedings*. 2018;2267:638-644. Available at: <https://ceur-ws.org/Vol-2267/638-644-paper-122.pdf> (accessed 15.05.2024).
- [10] Korenkov V.V., Podgainy D.V., Streltsova O.I. Educational program on HPC technologies based on the heterogeneous cluster HybriLIT (LIT JINR). *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2017;13(4):141-146. (In Russ., abstract in Eng.) <https://doi.org/10.25559/SITITO.2017.4.633>
- [11] Baranov A.V., Balashov N.A., Kutovskiy N.A., Semenov R.N. JINR cloud infrastructure evolution. *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2016;13(5):672-675. <https://doi.org/10.1134/S1547477116050071>
- [12] Kiselev M.A. Methods for investigation of lipid nanostructures at neutron and synchrotron sources. *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*. 2011;42(2):578-635. (In Russ., abstract in Eng.) EDN: GEXNTI
- [13] Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V., Zhabitskaya E.I., Bashashin M.V., Ivankov O.I. Investigation of the Possibilities of Analysis of the Vesicular Structure of PTNS-Based Nanodrugs Using the Small-Angle Neutron Scattering Data. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, Sinkhrotronnye i Neitronnye Issledovaniya*. 2023;(1):3-8. (In Russ., abstract in Eng.) <https://doi.org/10.31857/S1028096023010119>
- [14] Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V., Aswal V.K., Neubert R.H.H. What can we learn about the lipid vesicle structure from the small-angle neutron scattering experiment? *European Biophysics Journal*. 2006;35(6):477-493. <https://doi.org/10.1007/s00249-006-0055-9>
- [15] James F., Roos M. Minuit: A System for Function Minimization and Analysis of the Parameter Errors and Correlations. *Computer Physics Communications*. 1975;10(6):343-367. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(75\)90039-9](https://doi.org/10.1016/0010-4655(75)90039-9)
- [16] Valls X., Moneta L., Amadio G., Tsang A. New developments in the ROOT fitting classes. *EPJ Web of Conferences*. 2019;214:05043. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921405043>
- [17] Dean J., Ghemawat S. MapReduce: simplified data processing on large clusters. *Communications of the ACM*. 2008;51(1):107-113. <https://doi.org/10.1145/1327452.1327492>
- [18] Brun R., Rademakers F. ROOT – An Object-Oriented Data Analysis Framework. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 1997;389:81-86. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(97\)00048-X](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(97)00048-X)
- [19] Solovjeva T.M., Soloviev A.G. Comparative study of the effectiveness of PROOF with other parallelization methods implemented in the ROOT software package. *Computer Physics Communications*. 2018;233:41-43. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.06.020>
- [20] Solovjeva T.M. Analysis of the effectiveness of various methods for parallelizing data processing implemented in the ROOT package. *CEUR Workshop Proceedings*. 2021;3041:393-396. Available at: <https://ceur-ws.org/Vol-3041/393-396-paper-72.pdf> (accessed 15.05.2024).
- [21] Amadio G., Bockelman B., Canal P., Piparo D., Tejedor E., Zhang Z. Increasing Parallelism in the ROOT I/O Subsystem. *Journal of Physics: Conference Series*. 2018;1085(3):032014. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1085/3/032014>
- [22] Riley D., Jones C. Multi-threaded Output in CMS using ROOT. *EPJ Web of Conferences*. 2019;214:02016. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921402016>
- [23] Amadio G., Canal P., Guiraud E., Piparo D. Writing ROOT Data in Parallel with TBufferMerger. *EPJ Web of Conferences*. 2019;214:05037. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921405037>
- [24] Londoño O.M., Tancredi P., Rivas P., Muraca D., Socolovsky L.M., Knobel M. Small-Angle X-Ray Scattering to Analyze the Morphological Properties of Nanoparticulated Systems. In: Sharma S. (eds.) *Handbook of Materials Characterization*. Cham: Springer; 2018. p. 37-75. https://doi.org/10.1007/978-3-319-92955-2_2
- [25] Soloviev A., Solovjeva T., Lukyanov K. Deployment of a Web Application for Fitting Experimental Data at the JINR Cloud Infrastructure. *Physics of Particles and Nuclei*. 2024;55:489-491. <https://doi.org/10.1134/S1063779624030808>

Submitted 15.05.2024; approved after reviewing 19.07.2024; accepted for publication 16.09.2024.

About the authors:

Alexey G. Soloviev, Senior Researcher of the Department Simulation Methods of Physical Processes and Observation Data Analysis of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation), Cand. Sci. (Phys.-Math.), ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-9170-362X>, solovjev@jinr.ru

Tatiana M. Solovjeva, Senior Researcher of the Department of Software Development on the Large Program Complexes and Data Visualization Tools of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation), Cand. Sci. (Phys.-Math.), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7375-2161>, tanysha@jinr.ru



Konstantin V. Lukyanov, Senior Researcher of the Department of Simulation Methods of Physical Processes and Observation Data Analysis of the Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation); Associate Professor of the Institute of System Analysis and Management, Dubna State University (19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation), Cand. Sci. (Phys.-Math.), **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0001-8218-7873>, luky@jinr.ru

Elena V. Zemlyanaya, Head of Sector of Computing of Complex Physical Systems of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation); Professor of the Institute of System Analysis and Management, Dubna State University (19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation), Dr. Sci. (Phys.-Math.), **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0001-8149-9533>, elena@jinr.ru

All authors have read and approved the final manuscript.

