

===== ИНФОРМАЦИОННЫЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ =====
===== ТЕХНОЛОГИИ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ =====

УДК: 004.7

Развитие информационно-коммуникационных технологий в Пушинском научном центре РАН

©2012 Лахно В.Д.^{*1,2}, Исаев Е.А.^{3,4}, Пугачев В.Д.³, Зайцев А.Ю.¹,
Фиалко Н.С.¹, Рыкунов С.Д.^{1,2}, Устинин М.Н.^{1,2}

¹Институт математических проблем биологии, Российская академия наук, Пушино, Московская область, 142290, Россия

²Пушинский государственный естественно-научный институт, Пушино, Московская область, 142290, Россия

³Пушинская радиоастрономическая обсерватория астрокосмического центра ФИАН, Российская академия наук, Пушино, Московская область, 142290, Россия

⁴Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, 101000, Россия.

Аннотация. В статье дано описание информационно-вычислительного комплекса Пушинского научного центра. Рассмотрены структура и топология городской вычислительной сети и локальной вычислительной сети Пушинской радиоастрономической обсерватории АКЦ ФИАН, различные аспекты реализации архитектуры опорной сети, ее конфигурация, а также конфигурация и функциональное назначение серверов сети. Представлена подробная информация по интеграции базовой сети в региональную и глобальную вычислительные сети и по доменам ПНЦ и ПРАО. Дано подробное описание вычислительного кластера ИМПБ РАН, приведены примеры решения ресурсоемких задач математического моделирования и обработки экспериментальных данных.

Ключевые слова: информационные технологии, вычислительные сети, каналы связи, вычислительный кластер, параллельные вычисления.

ВВЕДЕНИЕ

К началу 21-го века в основном сформировался современный взгляд на информационно-вычислительное обеспечение научных исследований. Развитие сетей Интернет обеспечило интенсивный обмен информацией и доступ к многочисленным базам данных, а главным направлением развития вычислительной техники, используемой в науке, стало создание суперкомпьютеров с параллельной архитектурой. Проведение исследований на мировом уровне стало невозможно без выполнения этих условий, требующих развития и внедрения информационно-коммуникационных технологий.

В Пушинском научном центре РАН эта задача была возложена на Институт математических проблем биологии РАН, с целью концентрации ресурсов и координации действий институтов ПНЦ по созданию единой информационно-вычислительной структуры. Эта работа проводится ИМПБ РАН с 1999 года, с опорой на собственные кадры и на сотрудников Пушинской радиоастрономической обсерватории Астрокосмического центра ФИАН.

К настоящему времени создана высокоскоростная городская вычислительная сеть, объединяющая локальные сети институтов и предоставляющая доступ к Интернет. В

состав этой сети входит вычислительный кластер ИМПБ РАН – мощный компьютер с параллельной архитектурой. Также поддерживаются базы данных Объединенного центра вычислительной биологии и биоинформатики и другие информационные ресурсы.

Создание этого информационно-вычислительного комплекса позволило на новом уровне развернуть работы в области математической биологии и биоинформатики, изучающей работу живых систем, опираясь на точные сведения об их структуре [1].

ГОРОДСКАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СЕТЬ ПУЩИНСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РАН

В городе Пущино базируются 11 научных учреждений Российской академии наук (табл. 1.), размещенных на территории примерно 3х3 км² (см. рис. 1). Создание городской вычислительной сети (ГВС) потребовало прокладки большого количества коммуникаций, общая протяженность оптоволоконных соединений превышает 20 км. Эта работа велась планомерно в течение 10 лет и в настоящее время, в основном, закончена. Рассмотрим устройство этой сети более подробно.

Таблица 1. Научные учреждения Российской академии наук, расположенные в г. Пущино

Наименование организации	Сокращенное наименование
Президиум Пущинского научного центра	ППНЦ
Институт белка	ИБ
Институт биологического приборостроения	ИБП
Институт биофизики клетки	ИБК
Институт биохимии и физиологии микроорганизмов	ИБФМ
Институт математических проблем биологии	ИМПБ
Институт теоретической и экспериментальной биофизики	ИТЭБ
Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения	ИФХиБПП
Институт фундаментальных проблем биологии	ИФПБ
Пущинская радиоастрономическая обсерватория АКЦ ФИАН	ПРАО
Филиал института биоорганической химии	ФИБХ

Городская вычислительная сеть ПНЦ РАН (рис. 1-3) построена по топологии "расширенная звезда". Центральный узел состоит из коммутатора АТ-Х900-24XS с дополнительным модулем АТ-ХЕМ12Т, и сопряженного с ним сервера *octopus.psn.ru*, выполняющего основную работу по маршрутизации трафика. Сервер управляется операционной системой Debian GNU/Linux 5.0 - одним из наиболее надежных и удобных в конфигурации дистрибутивов.

К центральному коммутатору в ИМПБ многомодовыми оптоволоконными кабелями подключены институты ИТЭБ, ИБК, ИФХиБПП, ИБП, а также городская больница; внутри корпусов этих институтов сеть разведена силами штатного персонала. Подсети ИБ и ИМПБ подключены к центральному узлу кабелями UTP-5е, поскольку тот находится в одном здании с ними, и, как следствие, витая пара вполне подходит в качестве передающей среды для этих соединений.

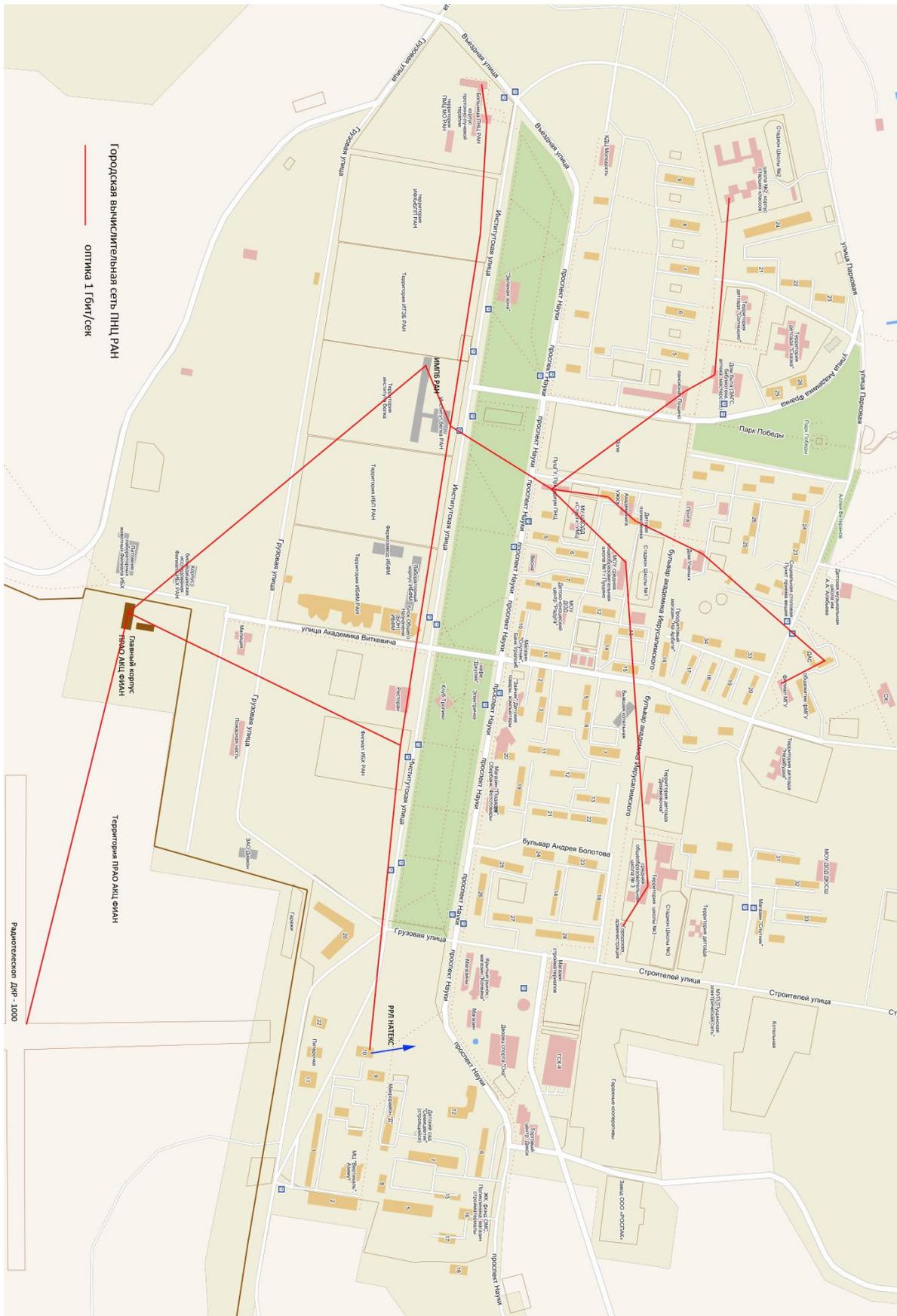


Рис. 1. Структура городской вычислительной сети Пушчинского научного центра РАН.

В центральном вычислительном узле также расположен сервер, на котором в виртуальных машинах OpenVZ [2] работают *mail.psn.ru*, *www.psn.ru* и *ftp.psn.ru*

(соответственно, почтовый, веб и файловый серверы). Такой подход позволяет достичь значительной экономии вычислительных ресурсов по сравнению с использованием нескольких физически отдельных серверов, в то же время, предоставляя лучшую безопасность и надежность работы по сравнению с эксплуатацией всех этих служб под одной операционной системой. ППНЦ, ПРАО и ИБФМ подключены к центральному коммутатору одномодовыми оптоволоконными кабелями, что позволяет достичь большей пропускной способности на этих участках сети; структура подсети ПРАО подробнее описана в следующем разделе.

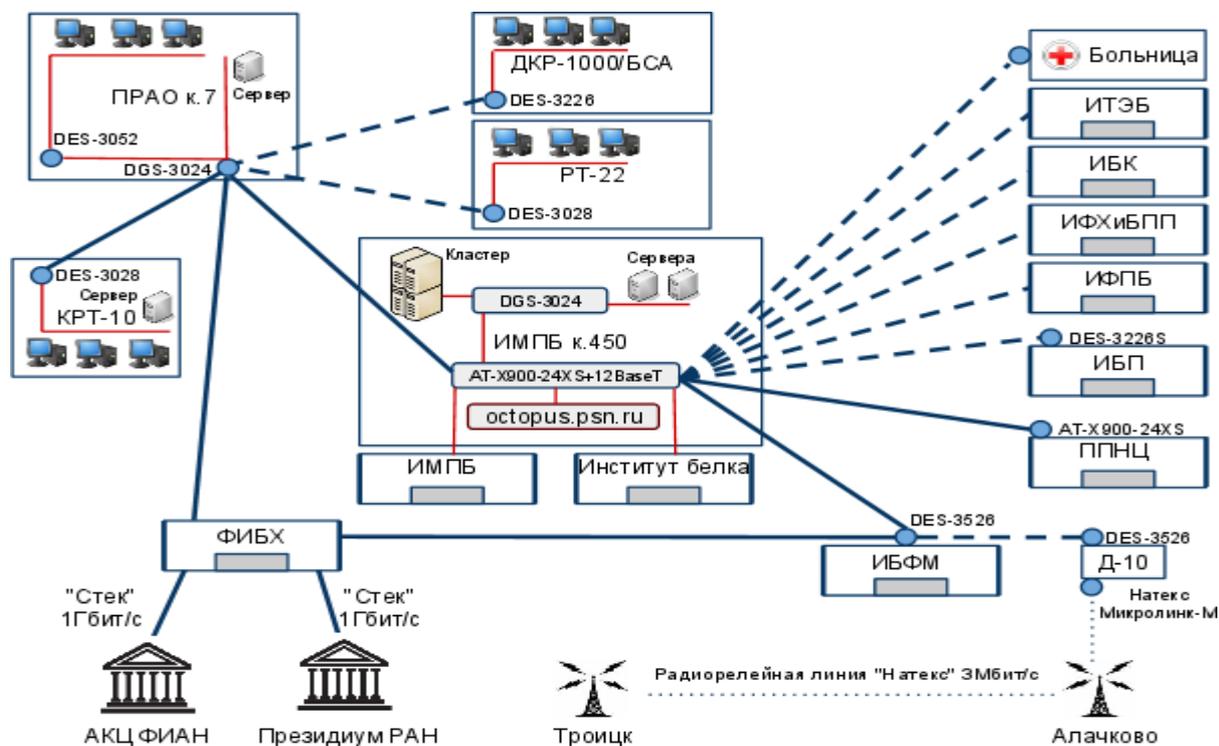


Рис. 2. Физическая топология городской вычислительной сети Пушчинского Научного Центра РАН, включая ЛВС ПРАО АКЦ ФИАН им.Лебедева (блок IP: 194.149.64.0/21, автономная система №9056). Тонкими сплошными линиями обозначены соединения по витой паре 5-й категории (UTP-5/5e), толстыми сплошными линиями - соединения по одномодовому оптоволоконному кабелю, толстыми штриховыми - многомодовому; пунктиром обозначены радиорелейные линии связи. Расшифровка сокращенных названий институтов приведена в табл. 1.

В состав городской вычислительной сети входит вычислительный кластер ИМПБ РАН (рис. 4), а также серверы и системы хранения данных. В сети ПНЦ широко используется технология виртуальных локальных сетей по стандарту IEEE 802.1Q [3].

Для маршрутизации через протокол BGP на сервер *octopus.psn.ru* используется программное обеспечение *bgpd* и *zebra*; системные почтовые сообщения с этого сервера и других машин доставляются администратору почтовым сервером (MTA) *exim4*. Сервер *octopus.psn.ru* служит пунктом сбора и визуализации статистической информации по техническому состоянию сети; каждые 5 мин опрашиваются входящие в состав сети коммутаторы на предмет функционирования.

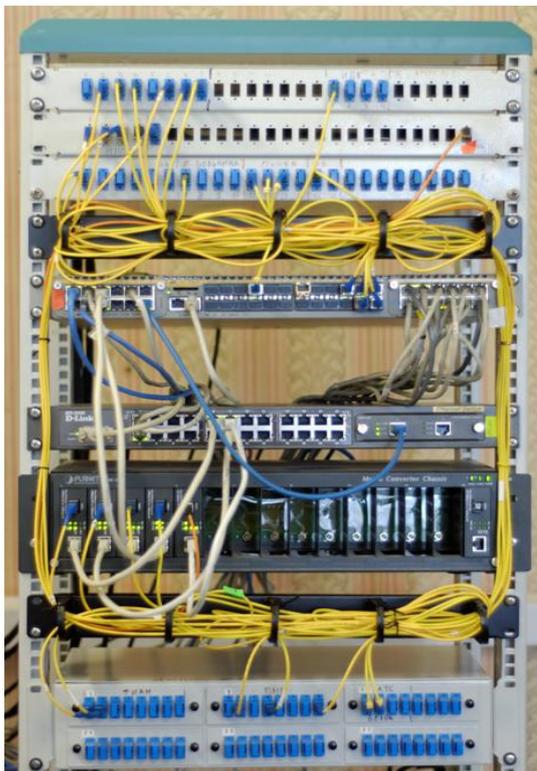


Рис. 3. Узел управления городской вычислительной сетью ПНЦ РАН.



Рис. 4. Вычислительный кластер ИМПБ РАН.

ЛОКАЛЬНАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СЕТЬ ПРАО АКЦ ФИАН

Отдельно остановимся на устройстве локальной вычислительной сети (ЛВС) Пушинской радиоастрономической обсерватории Астрокосмического центра ФИАН им. Лебедева (ПРАО АКЦ ФИАН).

ПРАО АКЦ ФИАН представляет собой территориально распределенную организацию, где на территории общей площадью около 2 км² располагаются четыре радиотелескопа, лабораторный корпус и ряд других объектов, включенные в общую вычислительную сеть. Однако основное количество компьютеров сосредоточено в лабораторном корпусе и лишь небольшое число разбросано по нескольким удаленным друг от друга (на 100-1000 метров) корпусам (корпуса РТ-22, корпус ДКР-1000/БСА, служба времени и другие).

Локальная сеть ПРАО организована по топологии "расширенная звезда", так как эта топология обеспечивает надежность сети в случае отказа какой-либо сетевой станции или участка структурированной кабельной системы (СКС), что существенно удешевляет поиск и ликвидацию неисправностей, а также позволяет достичь высоких значений пропускной способности во многих типовых вариантах использования ЛВС. Отказоустойчивость сети особенно актуальна в свете функционирования в составе ПРАО автоматизированных наблюдательных комплексов [4].

На рис. 2 видно, что ЛВС ПРАО разбита на три крупных узла, два из которых соединены с центральным коммутатором одномодовыми оптоволоконными кабелями. Причины выбора в пользу оптоволокна как среды для передачи сигнала между узлами очевидны: спецификация IEEE 802.3 [5], описывающая широко распространенный (и используемый в ПРАО) стандарт Ethernet на витой паре UTP-5e, гарантирует передачу данных на частоте 350МГц на расстоянии, не превышающем 100м; при превышении этой длины кабеля, соединяющего сетевые устройства, возникает ряд негативных эффектов, которые приводят к резкому падению пропускной способности канала по мере увеличения его длины; в то же время на оптоволоконной передающей среде Ethernet позволяет поддерживать высокую пропускную способность (в зависимости от

версии и установленных устройств связи - от 100Мбит/с до 10Гбит/с) на расстояниях до 100 км.

В качестве центрального коммутатора используется коммутатор 2-го уровня марки D-Link DGS-3024 с 20 портами 10/100/1000BASE-T для подключений Gigabit Ethernet по медному кабелю, и 4 комбинированными портами 1000BASE-T /SFP для подключений к сети ПНЦ РАН и к оптическим каналам опорной сети. Каждый из узлов, в свою очередь, состоит из управляемого коммутатора 2-го уровня и подключенных к нему рабочих станций и абонентских устройств других типов; по корпусам разведена сеть на неэкранированной витой паре 5е категории; пиковая пропускная способность этих коммутаторов составляет 100Мбит/с. Также к центральному коммутатору подключены каналами связи типа Gigabit Ethernet сервера обсерватории.

Из рис. 2 видно, что выход ЛВС ПРАО в Интернет обеспечивается с помощью оптоволоконного соединения между ИМПБ РАН и центральным маршрутизатором ПРАО (1 Гбит/с по SFP).

Администрирование и мониторинг серверов осуществляется в штатном режиме через удаленный вход в систему по протоколу SSH v.2. Использование первой версии этого протокола не допускается в связи с обнаруженными в ней уязвимостями [6]. На случай аварийных ситуаций машинный зал оборудован консолью (монитор и клавиатура), к которой через KVM-переключатель подсоединены все сервера.

В качестве основной операционной системы для серверов используется свободно распространяемая операционная система с открытым исходным кодом Debian GNU/Linux 5.0, известная своей надежностью, стабильностью работы, и сертифицированная по системе CGL (Carrier-Grade Linux).

Для организации удобной рабочей среды ЛВС ПРАО предоставляет ряд важных сетевых сервисов, среди них следует особо выделить следующие:

- DHCP-сервер и DNS-сервер;
- HTTP-сервер;
- сервер баз данных;
- сервер электронной почты;
- сервер точного времени NTP.

Эксплуатация большого количества служб, необходимых для эффективной работы сети ПРАО, может отрицательно сказываться на уровне загрузки центрального сервера, а также неизбежно ведет к снижению уровня безопасности; в связи с этим в ЛВС ПРАО службы, доступные извне ЛВС (к примеру, веб-сервер, DNS и электронная почта) физически и логически отделены от внутренней сети, и выделены в так называемую демилитаризованную зону. Входящий трафик из Интернета может достичь и повлиять только на службы находящиеся в ДМЗ, и не пропускается во внутреннюю сеть.

Службы физически распределены по серверам следующим образом:

- Сервер №1: маршрутизатор, брандмауэр, DHCP-сервер;
- Сервер №2 (расположен в КРТ-10): HTTP-сервер и почтовый сервер; каждый из этих серверов работает под управлением виртуальной машины openvz.
- Сервер №3: сервер баз данных;
- Сервер №4: DNS-сервер, сервер точного времени NTP.

Назначением DHCP-сервера является автоматизация процесса выдачи абонентским устройствам сети IP адресов из доступного пула по заранее заданным администратором ЛВС правилам. Это позволяет существенно сэкономить время, необходимое для подключения к сети новых персональных компьютеров, а также снизить вероятность возникновения конфликтов IP-адресов, когда под одним и тем же IP-адресом пытаются функционировать два и более компьютера одновременно.

Маршрутизатор обеспечивает доступ пользователям локальной сети ПРАО к ресурсам Интернет и сети ПНЦ РАН, а также защиту находящихся в ЛВС ПРАО машин от несанкционированного доступа и сетевых атак с помощью брандмауэра. Маршрутизация и управление трафиком осуществляется с помощью пакета программ *iproute2* (<http://lartc.org/howto>); политики брандмауэра реализованы с помощью модуля ядра Linux *iptables* (<http://www.netfilter.org/projects/iptables>).

В качестве МТА (mail transfer agent: программа, взаимодействующая с другими почтовыми серверами в сети Интернет по протоколу SMTP для обмена электронной почтой и ее маршрутизации) в ЛВС ПРАО используется созданный в Кембриджском университете почтовый сервер *Exim4*; в качестве MDA (mail delivery agent - программа доставки почты) используется программа высокого уровня защищенности *Dovecot*, что позволяет пользователям скачивать свою почту по протоколам POP3 и IMAP. В качестве альтернативного способа работы с почтовой системой предусмотрен веб-интерфейс *SquirrelMail*. Для фильтрации спама и вирусов используются программы *spamassassin*, *greylist* и *clamav*.

Роль HTTP-сервера выполняет *Apache httpd*: быстрый в эксплуатации, гибкий в настройке и обладающий богатым спектром функций веб-сервер, в течение многих лет поддерживаемый *Apache Software Foundation*. Веб-сервер *Apache* поддерживает переконфигурацию "на лету", без полной перезагрузки процесса, а также обладает возможностью расширения своих функций путем подключения библиотек-модулей. На эксплуатирующийся веб-сервер возложена задача обслуживания веб-сайта ПРАО www.prao.ru и сайтов некоторых отделов обсерватории; также, благодаря его наличию, возможно осуществлять доступ к хранящимся в реляционной СУБД (системе управления базами данных) *PostgreSQL* астрономическим базам данных и результатам наблюдений через удобный веб-интерфейс. В целях дальнейшей оптимизации использования вычислительных ресурсов планируется переход на веб-сервер *Lighttpd*.

Для трансляции IP-адресов в доменные имена в обсерватории используется DNS-сервер, построенный на основе программного пакета *djbdns*, включающего в себя набор утилит для обслуживания и разрешения DNS зон.

Сервер времени используется для автоматической синхронизации времени серверов и рабочих станций по протоколу NTP (*Network Time Protocol*, RFC 1305 [7]). Данный протокол синхронизирует время в географически распределенных сетях по порту 123 протокола UDP (*User Datagram Protocol*). Протокол NTP поддерживает множественные избыточные источники данных о времени, что обеспечивает его постоянную синхронизацию, и позволяет установить время на локальной машине с точностью до одной миллисекунды.

В главном корпусе ПРАО установлена и функционирует система цифровой коммутации «ЭЛКОМ», которая представляет собой цифровую автоматическую телефонную станцию. Система построена в виде отдельных модулей, связанных между собой, и обеспечивает как внутреннюю связь в корпусах обсерватории, так и выход на городские телефонные линии. Телефонная связь с корпусом, обслуживающим радиотелескоп РТ-22, осуществляется по существующим оптоволоконным линиям связи с помощью так называемых абонентских выносов. Для передачи голосового трафика внутри сети по протоколу SIP (*Session Initiation Protocol* - протокол установления сеанса) [8] используются голосовые шлюзы *Nateks VC-130-1* и *VC-130-2*. Необходимость такого решения была вызвана частичным выходом из строя старых телефонных линий.

ИНТЕГРАЦИЯ СЕТЕЙ ПНЦ РАН И ПРАО АКЦ ФИАН В ГЛОБАЛЬНУЮ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНУЮ СЕТЬ

Связь с сетями Интернет осуществляется через расположенный в ФИБХ узел связи, который подключен к Президиуму РАН по принадлежащему ЗАО "Стек" оптоволоконному кабелю; для этих целей арендована ширина полосы 1Гбит/с. Канал связи с Президиумом проведен по маршруту ФИБХ-ИБФМ-ИМПБ, и из центрального узла связи в ИМПБ трафик маршрутизируется по всей остальной части ГВС.

Связь ПРАО с АКЦ ФИАН в Москве осуществляется по оптоволоконному каналу пропускной способностью 1Гбит/с, также арендованному у ЗАО "Стек".

Связь с Троицким научным центром осуществляется с помощью установленной на доме Д-10 радиорелейной системы "Натекс Микролинк-М" через ретранслятор в Алачково. К остальной ГВС узел связи Д-10 подключен многомодовым оптоволоконным кабелем, связывающим его с коммутатором в ИБФМ.

Данный раздел посвящен описанию BGP-связей ПНЦ и смежных сетей, а также общей структуре сегмента Интернета, к которому они подключены. Информация представлена в виде таблиц и автоматически построенных графов (таблица 2, рис. 5-7). BGP (англ. Border Gateway Protocol, протокол граничного шлюза) — основной протокол динамической маршрутизации в Интернете. BGP, в отличие от других протоколов динамической маршрутизации, предназначен для обмена информацией о маршрутах не между отдельными маршрутизаторами, а между целыми автономными системами, и поэтому, помимо информации о маршрутах в сети, переносит также информацию о маршрутах на автономные системы. BGP не использует технические метрики, а осуществляет выбор наилучшего маршрута исходя из правил, принятых в сети. BGP поддерживает бесклассовую адресацию и использует суммирование маршрутов для уменьшения таблиц маршрутизации. С 1994 года действует четвертая версия протокола, все предыдущие версии являются устаревшими. BGP является протоколом прикладного уровня и функционирует поверх протокола транспортного уровня TCP (порт 179). BGP, наряду с DNS, является одним из главных механизмов, обеспечивающих функционирование Интернета. Автономная система (AS) в Интернете — это система IP-сетей и маршрутизаторов, управляемых одним или несколькими операторами, имеющими единую политику маршрутизации с Интернетом. См. RFC 1930 для дополнительной информации по данному определению. Уникальный номер AS (или ASN) присваивается каждой AS для использования в BGP-маршрутизации. Именно ASN однозначно идентифицирует каждую сеть в Интернете.

Таблица 2. Пиринговые связи системы AS9056

Пиринг	Импорт	Экспорт
AS2643 IHEP-SU AS	AS2643	AS9056 AS13161
AS2683 RADIO-MSU	ANY	AS9056 AS2643
AS3058 RAS-AS Russian Academy of Sciences	ANY AS-RBNET	AS9056
AS5568 RBNNet Russian Backbone Network	ANY	AS9056
AS21453 FLEX-AS Autonomus System for Wireless Network in Moscow region Russia	ANY	AS9056
AS28700 INFORMTELECOM-AS Informtelecom XXI LTD.		AS-INFORMTELECOM

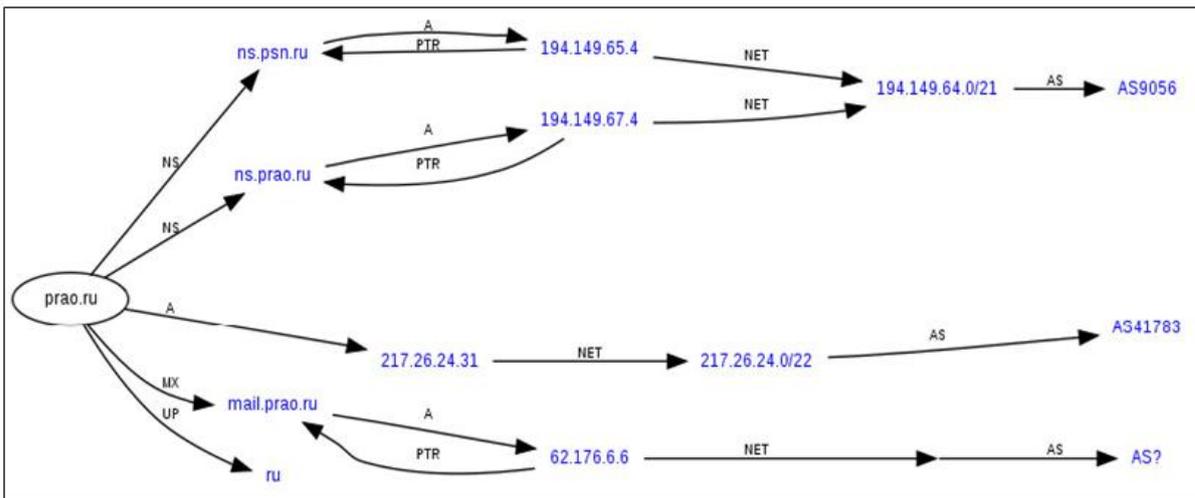


Рис. 5. Схема DNS-поиска доменных имен домена prao.ru.

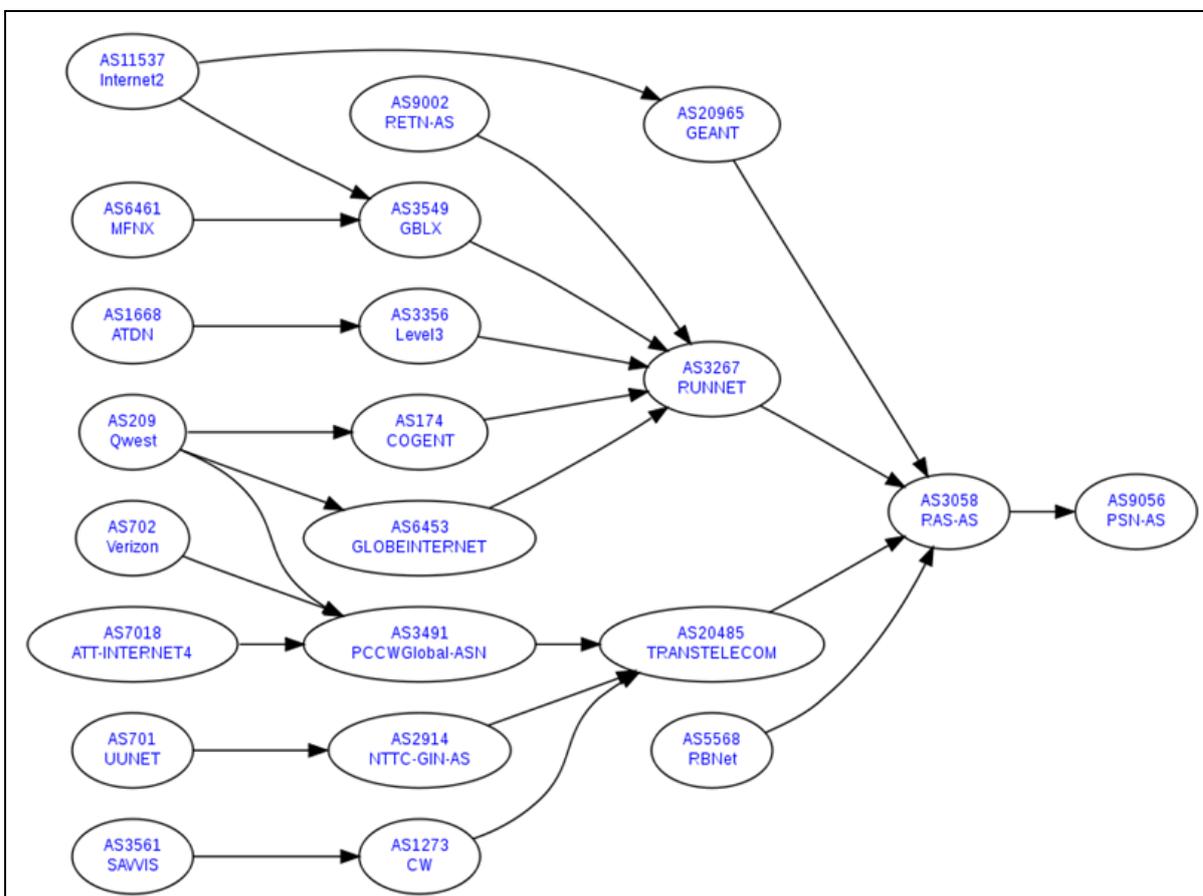


Рис. 6. Визуализация графа маршрутизации внешнего трафика AS9056 - автономной системы ПИЦ РАН (подсеть 194.149.64.0/21).

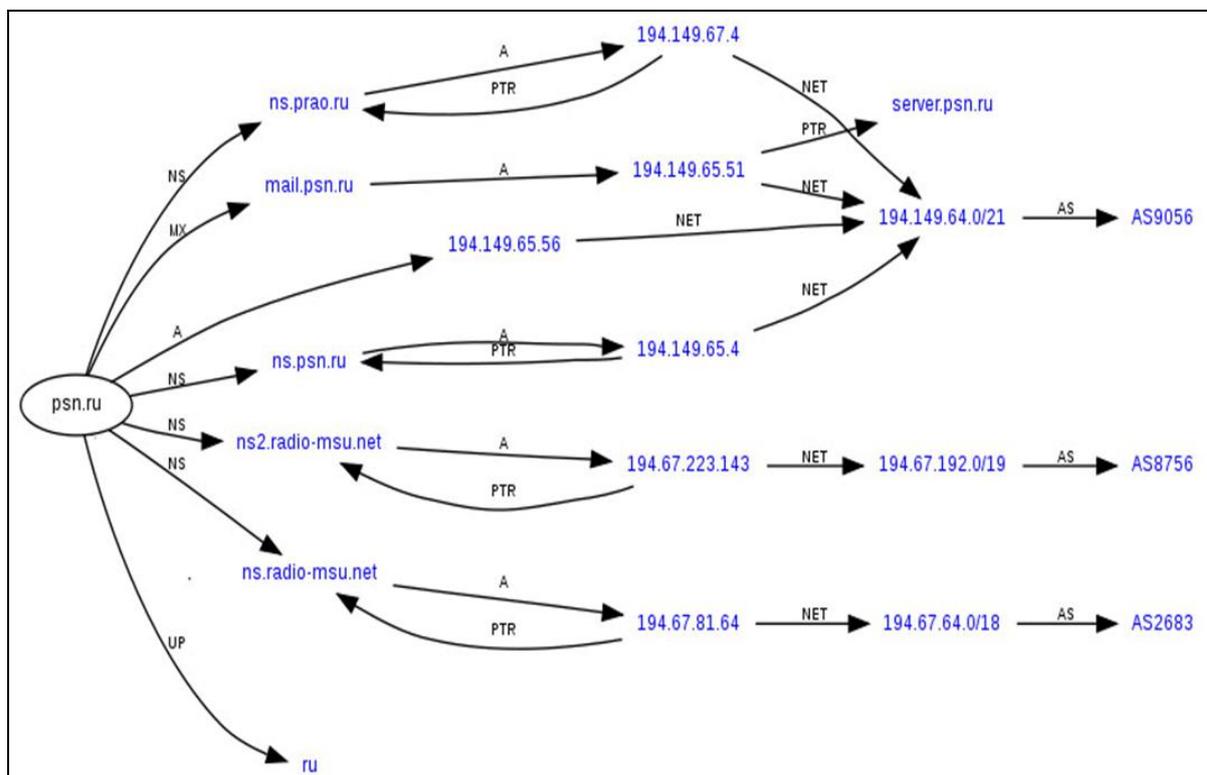


Рис. 7. Схема DNS-поиска доменных имен домена psn.ru.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР ИМПБ РАН

Многопроцессорный вычислительный кластер (рис. 4) является ядром информационно-вычислительного комплекса Пущинского научного центра РАН. Кластер был создан в 2000 году и с тех пор неоднократно модифицировался: изменялся состав вычислительных узлов, коммуникации между узлами, объем памяти.

В конце 2010г. была проведена очередная модернизация кластера, что позволило достичь производительности в 1.2 Тфлопс (по данным теста High Performance Computing Linpack). В настоящее время вычислительный кластер состоит из вычислительных узлов двух типов:

- 9 двухпроцессорных вычислительных узлов на базе процессоров Intel Xeon X5650 (6 ядер, 2.66ГГц) с 24 Гб оперативной памяти на узел;
- 12 двухпроцессорных вычислительных узлов на базе процессоров Intel Xeon E5620 (4 ядра, 2.40ГГц) с 24 Гб оперативной памяти на узел.

Суммарное количество вычислительных ядер - 204, объем оперативной памяти - 504 Гб.

Вычислительные узлы связаны между собой коммуникационной сетью Mellanox Infiniband QDR, пропускная способность сети 40 Гб/сек, время передачи коротких сообщений порядка 1-7 мкс. Сеть передачи данных и сеть управления кластером построены на основе гигабитных управляемых коммутаторов D-Link DGS-3120.

Для хранения данных текущих расчетов используется кластерная распределенная файловая система GlusterFS v3.3. Объем хранилища составляет 800 Гб.

Однопроцессорный сервер на базе Intel Xeon E3-1230 служит точкой доступа к кластеру и сервером управления вычислительными ресурсами. Для хранения пользовательских данных используется быстрое дисковое хранилище сервера объемом 4 Тб (Adaptec 5805, raid10 из четырех дисков SAS).

На кластере установлено следующее программное обеспечение:

- операционная система - Debian GNU/Linux v7.0;

- система управления заданиями - менеджер ресурсов Torque и планировщик Maui;
- среды исполнения параллельных задач - OpenMPI v1.4.5 и MPICH2 v1.4.1;
- языки программирования - C/C++, Fortran 77/90/95.

Также используется некоммерческое программное обеспечение Intel Parallel Studio XE 2011 и специализированные пакеты программ (Gaussian, Gromacs, GNU Octave и другие).

Ниже рассмотрены два примера использования вычислительного кластера для решения задач вычислительной биологии. Первый пример является типичным для современного математического моделирования сложных биологических систем. Во втором примере решается задача обработки данных сложного биологического эксперимента. Постановки задач в этих примерах оптимизированы для полного распараллеливания и дают высшую эффективность использования кластера.

Моделирование переноса заряда в ДНК

Два десятилетия назад на стыке физики, химии и биологии появилось новое быстро развивающееся направление, исследующее перенос зарядов в биомакромолекулах. Особый интерес для исследований представляет перенос электронов и дырок в ДНК, как в биологическом плане (поскольку передвижение радикалов сквозь молекулу ДНК играет решающую роль в процессах мутагенеза и канцерогенеза), так и для нанобиоэлектроники – новой быстро развивающейся дисциплины, интегрирующей достижения наноэлектроники и молекулярной биологии. Основные направления нанобиоэлектроники включают создание биосенсоров, наноэлектронных схем на основе ДНК, конструирование нанобиотранзисторов, диодов, биочипов и т.д. [9, 10]. Поэтому исследование проводящих свойств молекул ДНК, таких как подвижность принесенного заряда, представляет большой интерес.

Мы выполняем расчеты теоретических значений подвижности дырки в различных синтезированных полинуклеотидах на основе квантово-классической модели переноса заряда в одномерной дискретной цепочке при заданной температуре T окружающей среды. Миграция заряда вдоль фрагментов ДНК с известной последовательностью исследуется с помощью вычислительных экспериментов.

Как известно, результатами в большинстве биофизических экспериментов являются осредненные (например, в нашем случае по большому количеству фрагментов ДНК в растворе) значения физических величин. При моделировании переноса заряда в ДНК при конечной температуре мы проводим расчеты для большого числа реализаций, чтобы затем рассчитать средние значения макроскопических физических величин. Такая постановка задачи допускает естественное распараллеливание расчета по реализациям типа "один процессор – одна реализация".

При моделировании динамики переноса заряда вдоль фрагментов ДНК решается связанная система нелинейных динамических квантово-механических и классических уравнений, количество которых определяется длиной нуклеотидной последовательности. Для учета температурных эффектов в классическую подсистему добавлен ланжевеновский член (случайная сила с определенными свойствами), моделирующий температурные флуктуации сайтов цепочки ДНК [11, 12]. Расчет динамики распространения заряда вдоль фрагмента ДНК в отдельной реализации сводится к решению задачи Коши – численному интегрированию системы $4N$ обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка со случайной правой частью.

Для исследования динамики переноса заряда в ДНК при заданной температуре разработан смешанный алгоритм интегрирования квантово-классической модели со случайной силой на больших временных интервалах. Разработана параллельная версия

алгоритма, позволяющая моделировать динамику процесса на больших временных интервалах интегрирования. Для уменьшения машинного времени разработана двухуровневая схема расчета: 1) естественное распараллеливание с выполнением каждой реализации на отдельном узле с использованием MPI, и 2) распараллеливание на узле, содержащем многоядерные процессоры, при расчете каждой реализации с использованием общей памяти и среды openMP. Хотя при численном решении системы дифференциальных уравнений используется последовательный метод, в уравнения, описывающие состояния сайтов цепочки, явно входят только ближайшие соседи. Поэтому цепочка «разбивается» на более короткие части, которые интегрируются на шаге независимо на разных ядрах узла, и обмен данными происходит только для крайних сайтов этих частей.

Динамика переноса заряда моделируется для большого числа реализаций, т. к. точность рассчитываемых средних значений имеет порядок $1/\sqrt{N}$, N – число реализаций.

С помощью вычислительного эксперимента было исследовано влияние дисперсии классической цепочки и сольватационного члена на подвижность заряда в ДНК.

При разных значениях дисперсии рассчитана подвижность носителей заряда в однородных синтетических фрагментах ДНК. Показано, что в случае полинуклеотидных цепочек учет дисперсии может существенно увеличить подвижность дырок.

Численно исследованы состояния с наименьшей энергией – неподвижные поляроны, и их зависимость от величины дисперсии. Показано, что при увеличении дисперсии полная энергия системы возрастает и радиус полярона увеличивается.

Сделана оценка температуры развала полярона в цепочках с дисперсией и сольватацией. Показано, что при «биологических» температурах эффект сольватации приводит к образованию устойчивого полярона.

Аппроксимация экспериментальных данных магнитной энцефалографии

Современные научные исследования проводятся с использованием сложного оборудования и порождают большие объемы экспериментальных данных. В биологии также наблюдается тенденция к усложнению экспериментального оборудования. Магнитные энцефалографы являются весьма сложными приборами, измеряющими магнитное поле в сотнях точек над поверхностью головы с частотой в сотни герц. При анализе магнитных энцефалограмм (МЭГ) производится выделение полезного сигнала на фоне общей спонтанной активности мозга, а затем решается обратная задача. По магнитному полю находится местонахождение электрических источников на магниторезонансной томограмме головы испытуемого и делаются научные или диагностические выводы [13, 14]. Обработка данных магнитной энцефалографии сталкивается со значительными трудностями, обусловленными большими объемами и высокой сложностью данных, а также их зашумленностью. Целью данной работы было получение высокоточных разложений в ряды Фурье экспериментальных данных магнитной энцефалографии для последующего частотного анализа. Данные были представлены в виде массивов чисел двойной точности, размеры массивов определялись временем регистрации МЭГ и числом измерительных каналов и составляли 150000×148 или 300000×148 .

Для интерпретации программы использовалась среда GNU Octave - свободная система для математических вычислений, использующая совместимый с MATLAB язык высокого уровня (<http://www.gnu.org/software/octave/>).

Octave представляет собой интерактивный командный интерфейс для решения линейных и нелинейных математических задач, а также проведения других численных экспериментов. Кроме того, Octave можно использовать для пакетной обработки. Язык

Octave оперирует арифметикой вещественных и комплексных скаляров и матриц, имеет расширения для решения линейных алгебраических задач, нахождения корней систем нелинейных алгебраических уравнений, работы с полиномами, решения различных дифференциальных уравнений, интегрирования систем дифференциальных и дифференциально-алгебраических уравнений первого порядка, интегрирования функций на конечных и бесконечных интервалах.

Octave был написан с учётом совместимости с MATLAB и реализует многие его возможности:

1. Матрицы в качестве основных типов данных;
2. Встроенная поддержка комплексных чисел;
3. Мощные встроенные математические функции и большие библиотеки функций;
4. Расширяемость, благодаря возможности создания пользовательских функций.

Но есть и отличия:

1. Комментарии могут начинаться как с символа #, так и с символа %;
2. Поддерживаются C-подобные операторы ++, --, +=, *=, /=;
3. Элементы могут быть адресованы без создания новой переменной;
4. Строки могут быть заданы как символом ", так и символом '.

На кластере используется версия GNU Octave, скомпилированная с поддержкой Intel MKL – математической библиотеки для выполнения хорошо оптимизированных многопоточных математических операций.

Для ускорения обработки данных были применено распараллеливание по реализациям. Был выбран узел кластера с 8 ядрами и для каждого набора исходных данных запущен свой вычислительный процесс. Среднее время исполнения программы для массива 150000x148 составило 38 часов 40 минут, а для массива 300000x148 – 156 часов 15 минут.

В результате работы были получены разложения экспериментальных данных в многоканальный ряд Фурье высокой точности. Была проведена проверка точности аппроксимации, показавшая, что отклонение между исходными и восстановленными данными составляет менее 0.01%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитие информационно-коммуникационных технологий в Пущинском научном центре РАН проводится свыше 10 лет, с использованием современных технических средств и программного обеспечения. Результатом этой работы является разветвленная городская вычислительная сеть на 2000 IP-адресов, включающая вычислительный кластер с быстродействием 1,2 Тфлопс. Сеть обеспечивает связь всех научных и образовательных организаций, расположенных в г. Пущино, и стабильный высокоскоростной доступ в Интернет. Вычислительный кластер оснащен специализированными программами и позволяет проводить расчеты ресурсоемких задач математического моделирования и обработки экспериментальных данных. Внешние каналы связи, городская вычислительная сеть и кластер составляют мощный технический комплекс для исследований в области биологии и радиоастрономии, проводимых в институтах ПНЦ.

Создание информационно-вычислительного комплекса ПНЦ РАН стало возможным благодаря Российской академии наук, Российскому фонду фундаментальных исследований, Министерству промышленности и науки РФ, компаниям "СТЕК" и "ИТЭК".

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 10-07-00112, 11-07-00635, 11-07-12054, 10-07-00300, 11-07-12033, 11-07-00577, 11-07-00716, 11-01-00765.

ПРИЛОЖЕНИЕ.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И СПЕЦИАЛЬНЫХ ТЕРМИНОВ

Топология "звезда" - все компьютеры и сетевые устройства подключены к одному центральному устройству.

Топология "расширенная звезда" - такая схема практически аналогична топологии "звезда", за одним исключением. Каждое устройство соединено с локальным центральным устройством, а оно, в свою очередь, соединено с центром другой "звезды".

Коммутатор - устройство, предназначенное для соединения нескольких узлов компьютерной сети в пределах одного или нескольких сегментов сети.

Многомодовое оптоволокно - позволяет передавать одновременно несколько сотен разрешенных световых мод, вводимых в оптоволокно под разными углами. Все разрешенные моды имеют разные траектории распространения и, соответственно, различное время распространения по оптическому волокну. Поэтому многомодовое оптоволокно имеет один главный недостаток — большая величина модовой дисперсии, ограничивающая полосу пропускания, — из-за которого оптический передатчик по оптоволокну имеет малую дальность передачи. С помощью многомодового оптоволокну в волоконно-оптических линиях связи (ВОЛС) осуществляется передача данных по оптоволокну на расстояние не более 4–5 км.

Одномодовое оптическое волокно сконструировано таким образом, что в ядре оптоволокну может распространяться только одна, основная мода. Именно поэтому такие оптические волокна имеют наилучшие характеристики, и наиболее активно используются при строительстве ВОЛС. Основные преимущества одномодовых оптических волокон — малое затухание 0,25 db/км, минимальная величина модовой дисперсии и широкая полоса пропускания — благодаря которым обеспечивается бесперебойная передача по оптоволокну электрических сигналов.

Кабель UTP – витая пара — вид кабеля связи, представляет собой одну или несколько пар изолированных проводников, скрученных между собой (с небольшим числом витков на единицу длины), покрытых пластиковой оболочкой.

OpenVZ — реализация технологии виртуализации на уровне операционной системы, которая базируется на ядре Linux. OpenVZ позволяет на одном физическом сервере запускать множество изолированных копий операционной системы, называемых «виртуальные частные серверы» (Virtual Private Servers, VPS) или «виртуальные среды» (Virtual Environments, VE).

Маршрутизация — процесс определения маршрута следования информации в сетях связи.

Протокол BGP — основной протокол динамической маршрутизации в Интернете, предназначен для обмена информацией о достижимости подсетей между группами маршрутизаторов под единым техническим управлением.

Ethernet — пакетная технология передачи данных преимущественно локальных компьютерных сетей, определяет проводные соединения и электрические сигналы на физическом уровне, формат кадров и протоколы управления доступом к среде.

SFP — промышленный стандарт модульных компактных приёмопередатчиков (трансиверов), используемых для передачи данных в телекоммуникациях.

Протокол SSH — сетевой протокол прикладного уровня, позволяющий производить удалённое управление операционной системой.

DHCP (англ. Dynamic Host Configuration Protocol — протокол динамической конфигурации узла) — это сетевой протокол, позволяющий компьютерам автоматически получать IP-адрес и другие параметры, необходимые для работы в сети TCP/IP.

DNS (англ. Domain Name System — система доменных имён) — компьютерная распределённая система для получения информации о доменах. Чаще всего используется для получения IP-адреса по имени хоста (компьютера или устройства), получения информации о маршрутизации почты, обслуживающих узлах для протоколов в домене. Распределённая база данных DNS поддерживается с помощью иерархии DNS-серверов, взаимодействующих по определённому протоколу.

HTTP (англ. HyperText Transfer Protocol — «протокол передачи гипертекста») — протокол прикладного уровня передачи данных (изначально — в виде гипертекстовых документов). Основой HTTP является технология «клиент-сервер», то есть предполагается существование потребителей (клиентов), которые иницируют соединение и посылают запрос, и поставщиков (серверов), которые ожидают соединения для получения запроса, производят необходимые действия и возвращают обратно сообщение с результатом. HTTP в настоящее время повсеместно используется во Всемирной паутине для получения информации с веб-сайтов.

Брандмауэр - межсетевой экран или **сетевой экран** — комплекс аппаратных или программных средств, осуществляющий контроль и фильтрацию проходящих через него сетевых пакетов в соответствии с заданными правилами. Основной задачей сетевого экрана является защита компьютерных сетей или отдельных узлов от несанкционированного доступа. Также сетевые экраны часто называют фильтрами, так как их основная задача — не пропускать (фильтровать) пакеты, не подходящие под критерии, определённые в конфигурации.

SMTP (англ. Simple Mail Transfer Protocol — простой протокол передачи почты) — это широко используемый сетевой протокол, предназначенный для передачи электронной почты в сетях TCP/IP.

POP3 (англ. Post Office Protocol Version 3 — протокол почтового отделения, версия 3) — стандартный Интернет-протокол прикладного уровня, используемый клиентами электронной почты для извлечения электронного сообщения с удаленного сервера по TCP/IP-соединению.

IMAP (англ. Internet Message Access Protocol) — протокол прикладного уровня для доступа к электронной почте. IMAP предоставляет пользователю обширные возможности для работы с почтовыми ящиками, находящимися на центральном сервере. Почтовая программа, использующая этот протокол, получает доступ к хранилищу корреспонденции на сервере так, как будто эта корреспонденция расположена на компьютере получателя. Электронными письмами можно манипулировать с компьютера пользователя (клиента) без постоянной пересылки с сервера и обратно файлов с полным содержанием писем.

Термин "**TCP/IP**" обычно обозначает все, что связано с протоколами TCP и IP. Он охватывает целое семейство протоколов, прикладные программы и даже саму сеть. В состав семейства входят протоколы UDP, ARP, ICMP, TELNET, FTP и многие другие. TCP/IP - это технология межсетевого взаимодействия, технология internet. Сеть, которая использует технологию internet, называется "internet". Если речь идет о глобальной сети, объединяющей множество сетей с технологией internet, то ее называют Internet.

Transmission Control Protocol (TCP) (протокол управления передачей) — один из основных сетевых протоколов Интернета, предназначенный для управления передачей данных в сетях и подсетях TCP/IP.

Internet Protocol (IP) — межсетевой протокол. Относится к маршрутизируемым протоколам сетевого уровня семейства TCP/IP. Именно IP стал тем протоколом, который объединил отдельные подсети во всемирную сеть Интернет. Неотъемлемой частью протокола является адресация сети.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лахно В.Д. Математическая биология и биоинформатика. *Вестник Российской академии наук*. 2011. Т. 81. № 9. С. 812–818.
2. Kolyshkin K. *Virtualization in Linux*. 2006. URL: <http://mirrors.unbornmedia.com/openvz/doc/openvz-intro.pdf> (дата обращения: 11.08.2012).
3. *IEEE Std. 802.1Q-2005. Virtual Bridged Local Area Networks*. ISBN 0-7381-3662-X.
4. Китаев В.В. *Распределенная система обработки и сбора данных ПРАО АКЦ ФИАН. II Базовая локальная вычислительная сеть*: препринт ФИАН № 52. Москва, 1997.
5. *IEEE Standards Association. IEEE 802.3 LAN/MAN CSMA/CD (Ethernet) Access Method*. URL: <http://standards.ieee.org/getieee802/802.3.html> (дата обращения: 11.08.2012).
6. CORE SDI S.A. SSH Insertion attack.1998. US CERT Vulnerability Note VU#13877.
7. David L. Mills, University of Delaware. Network Time Protocol (Version 3). Specification, Implementation and Analysis. IETF RFC1305. March 1992.
8. Rosenberg J., Schulzrinne H., Camarillo G., Johnston A., Peterson J., Sparks R., Handley M., Schooler E. *SIP: Session Initiation Protocol. IETF RFC 3261*. June 2002.
9. Lakhno V.D. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2008. V. 108. № 11. P. 1970.
10. *Nanobioelectronics – for Electronics, Biology, and Medicine*. Eds. Offenhäusser A., Rinaldi R. New York: Springer, 2009. 337 p.
11. Lakhno V.D., Fialko N.S. Hole mobility in a homogeneous nucleotide chain. *JETP Letters*. 2003. V. 78. № 5. P. 336–338.
12. Lakhno V.D., Fialko N.S. Bloch oscillations in a homogeneous nucleotide chain. *Pisma v ZhETF*. 2004. V. 79. № 10. P. 575–578.
13. Ustinin M.N., Kronberg E., Filippov S.V., Sychev V.V., Sobolev E.V., Llinas R. Kinematic visualization of human magnetic encephalography. *Mathematical Biology and Bioinformatics*. 2010. V. 5. № 2. P. 176–187. URL: [http://www.matbio.org/downloads_en/Ustinin2010\(5_176\).pdf](http://www.matbio.org/downloads_en/Ustinin2010(5_176).pdf) (дата обращения: 11.08.2012).
14. Устинин М.Н., Поликарпов М.А., Панкратов А.Н., Рыкунов С.Д., Наурзаков С.П., Гребенкин А.П., Панченко В.Я. Сравнительный анализ экспериментальных данных магнитной энцефалографии. *Математическая биология и биоинформатика*. 2011. Т. 6. № 1. С. 63–70. URL: [http://www.matbio.org/2011/Ustinin2011\(6_63\).pdf](http://www.matbio.org/2011/Ustinin2011(6_63).pdf) (дата обращения: 11.08.2012).

Материал поступил в редакцию 05.09.2012, опубликован 13.09.2012.