

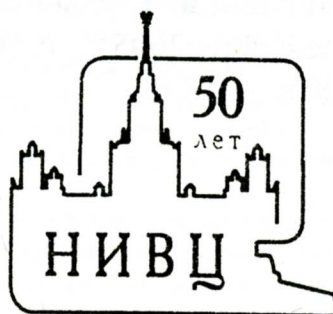
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ростовский государственный университет
Институт вычислительной математики РАН

Труды Всероссийской научной конференции

**Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ:
технологии распределённых вычислений**



Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова
Ростовский государственный университет
Институт вычислительной математики РАН



*Абрам
Марен
19.09.05
Смирнов И.С.*

Труды Всероссийской научной конференции

Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ: технологии распределённых вычислений

г. Новороссийск, 19-24 сентября 2005 г.



Издательство Московского университета
2005

УДК 519.7
ББК 22.18
Н 34

**Научный сервис в сети Интернет: технологии
Н 34 распределённых вычислений:** Труды Всероссийской научной
конференции (19-24 сентября 2005 г., г. Новороссийск).
– М.: Изд-во МГУ, 2005. – 318 с.

ISBN 5-211-05141-6

Данный сборник содержит доклады, включенные в программу Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети Интернет: технологии распределённых вычислений". Конференция проводится с 19 по 24 сентября 2005 года. Подробную информацию о конференции можно найти в сети Интернет по адресу <http://agora.guru.ru/abrau2005>

Конференция проводится при поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований

ISBN 5-211-05141-6

© Московский государственный
университет, 2005

В 2003 года был выигран государственный тендер и построен кластер для Кубанского Университета. Система построена на базе процессоров AMD Athlon 2400+ и вычислительной сети Myninet 2000. В начале 2004 года был выигран международный конкурс и получен гранд МНТЦ на построение кластера для Национальной академии наук Армении.

В мае 2004 года кластер построен и введен в эксплуатацию. Система построена на базе 128 процессоров Intel Xeon 3.06 и вычислительной сети Myninet 2000. Пиковая производительность кластера составляет 783.36 Gflops, максимальная производительность по HPL составляет 483.6 Gflops и эффективность 61,7%.

В настоящее время Институт как член ассоциации Gelato[5] ведет работу по включению собственных программных продуктов в состав стандартных средств системы управления OSCAR.

ЛИТЕРАТУРА:

1. ИСП РАН <http://ww.ispras.ru/news/armcluster.html>
2. OSCAR. http://www.gelato.org/software/view.php?id=1_18
3. Arutyun Avetisyan, Oleg Samovarov, Dmitry Grushin, Andrey Ryzhov. "Clusterweb - a WEB-based cluster management interface". M. Estrada, A. Gelbukh (Eds.) // *Avances en la Ciencia de la Computacion, ENC'04, Colima, Mexico*, pp. 489-495.
4. Параллельные Вычислительные системы в локальной сети ВЦ РАН. Г.М. Михайлов, М.А. Копытов, Ю.П. Рогов, О.И. Самоваров, А.М. Чернецов. – Москва: Вычислительный Центр им. А.А. Дородницына РАН, 2003. – 73 с.
5. Gelato. <http://www.gelato.org/>

О СОЗДАНИИ УЧЕБНОГО ЦЕНТРА ТЕХНОЛОГИЙ GRID НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

И.М. Григорьев, С.А. Немнюгин, М.М. Степанова, А.С. Чирцов

Технологии распределенных вычислений и хранения данных представляют особый интерес для тех исследователей, которые занимаются решением задач, требующих значительных затрат вычислительных ресурсов. В настоящее время активно развиваются различные реализации GRID-систем, увеличивается количество пользователей, имеющих доступ к системам распределенных вычислений и хранения данных. В связи с этим существует необходимость в подготовке квалифицированных пользователей и администраторов GRID-систем.

Для решения этой проблемы на физическом факультете СПбГУ создается учебный центр технологий GRID. Базой учебного центра является ресурсный центр GRID. В настоящее время ресурсный центр имеет следующую конфигурацию: серверы служб CE (Computing Element) и SE (StorageElement), узел с пользовательским интерфейсом (UI, User Interface) и два рабочих узла (WN, WorkNode). Узлы объединены через коммутируемый FastEthernet 100Mbps и расположены в выделенном сегменте локальной сети. Комплекс имеет подключение к внешнему каналу. В будущем планируется увеличение числа рабочих узлов за счет двух вычислительных кластеров физического факультета СПбГУ. Каждый из этих кластеров содержит 10 узлов на основе Pentium с тактовой частотой 1.7 ГГц.

Установлено программное обеспечение промежуточного уровня (middleware) для GRID-систем LCG-2 v.2.4.0. Базовая операционная система Linux RedHat 7.3, тестируется вариант на ScientificLinux3. Интеграция ресурсного центра в GRID EGEE осуществляется подключением к брокеру ресурсов в Институте Ядерной физики (ПИЯФ РАН, Гатчина).

ИНТЕРНЕТ И ИНТЕРАКТИВНЫЕ ОПРЕДЕЛИТЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

А.Л. Лобанов, А.Г. Кирейчук, И.С. Смирнов, М.Б. Дианов, О.Н. Граничин

Создание интерактивных определителей (компьютерных диалоговых ключей) видов, наносящих ущерб народному хозяйству или являющихся полезными ресурсами, или видов, которые могут быть встроены в системы экологического мониторинга, всегда имело важное значение. Но в современных условиях быстрых изменений биоты и вторжений чужеродных вредоносных видов животных и растений компьютерные определители приобретают особую роль. С появлением Интернета стало возможным дистанционное

использование компьютерных ключей пользователями, находящимися в любой точке планеты. Это обстоятельство вызвало новую волну интереса к интерактивным ключам [11, 17].

Экономический эффект создания электронных определителей заключается в снижении затрат на процесс определения или идентификации, а также в повышении точности определения, а значит и в уменьшении издержек от последствий неверной идентификации. Упрощение процесса определения вредных организмов при одних только карантинных мероприятиях может дать огромный экономический эффект - большие потери в сельском и лесном хозяйстве часто связаны с запоздалым определением инородных вредителей [10]. Сейчас опасность подобных вторжений возросла многократно в связи с развитием транспорта и увеличением объема межконтинентальных перевозок. Роль экологического мониторинга и систем его оперативного информационного обеспечения, функционирующих на современном уровне, трудно переоценить в связи с неблагоприятными последствиями влияния человека на окружающую среду.

Разработка определительных ключей и систем экологического мониторинга получает за последние годы более интенсивное развитие, связанное с совершенствованием компьютерных технологий и возрастающей ролью проблем оценки и сохранения биоразнообразия. В связи с распространением Интернета становится актуальным создание диалоговых диагностических программ, использующих современные сетевые возможности.

Биологическая диагностика выделилась в прикладную область систематики в конце 60-х - начале 70-х годов прошлого века [5, 12, 13]. Немало этому способствовала серия публикаций по теории и практике построения диагностических ключей [2, 3, 4, 15], совпавшая с историческим симпозиумом "Биологическая идентификация с помощью компьютеров" в Кембридже (сентябрь 1973). Труды этого симпозиума [20] - классическое пособие по компьютерной диагностике.

В эволюции компьютерных диагностических систем можно выделить 2 стадии: 1) дивергенцию (70-80-е годы), которая наблюдалась вследствие различия в технических возможностях разных учреждений (различная периферия и разные способы доступа к ресурсам ЭВМ) и обусловила широкий спектр диагностических программ; 2) конвергенцию (90-е годы), которая вследствие массового внедрения ПК привела к тому, что центр разнообразия программ сместился в область интерфейса и использования изображений, тогда как внутренняя логическая структура компьютерных ключей достигла определенного оптимума [7, 9]. 30-летний опыт разработки интерактивных определителей [1, 6, 8, 14, 19] позволил нам реализовать в наших разработках (проекты PICKEY и WebKey) практически все известные на сегодня достижения компьютерной диагностики [16, 21].

Для сравнения существующих компьютерных определителей нами были проанализированы около 20 программ из разных стран и сделаны оценки их структурных и пользовательских особенностей [11]. Здесь мы коснемся только тех программ, которые предназначены для работы в Интернете [17, 18].

Можно выделить 5 типов использования возможностей Интернета.

1. Автономные программы, работающие на компьютере клиента и использующие сеть только для загрузки данных ключа и иллюстраций с сервера разработчиков (примеры: Intkey, Lucid и PICKEY).

2. Программы на основе Java или JavaScript, выполняющие на компьютере клиента полученные с сервера наборы инструкций и данных под управлением веб-браузера клиента (пример: NaviKey).

3. Программы, выполняемые целиком на сервере разработчика и посылающие клиенту лишь простые HTML-страницы (примеры: DAP, DAWI, PollyClave, 3I).

4. Программы, содержащие в себе две части - клиентскую, которая выполняется на стороне клиента под управлением веб-браузера, и серверную, работающую на сервере разработчика. Серверная часть программы выполняет основную работу с данными и посылает клиенту промежуточные результаты определения. Примеры: Flora Search и WebKey.

5. Программы, также содержащие в себе две части - клиентскую и серверную. Клиентская часть (как правило, EXE-файл) работает под управлением ОС и обращается к своей серверной части за необходимыми данными. Такое разделение позволяет возложить на клиентскую часть программы гораздо большую вычислительную нагрузку, чем в программах остальных типов. (Примеры на данный момент нам неизвестны).

В докладе будут рассмотрены положительные и отрицательные возможности этих типов программ и продемонстрированы собственные разработки авторов (программы PICKEY и WebKey).

Работа поддержана грантами РФФИ NN 05-07-90179, 05-07-90354; проектом N 11 "Исследование Антарктики" и программой "Биоразнообразие".

ЛИТЕРАТУРА:

1. Дианов М.Б., Лобанов А.Л. PICKEY - Программа для определения организмов с интерактивным использованием изображений // Базы данных и компьютерная графика в зоологических исследованиях (Труды Зоологического института, т. 269). 1997. С. 35-39.
2. Лобанов А.Л. Логические основы классификации диагностических ключей // Тезисы докладов V Коми республиканской молодежной научной конференции. 1972а. С. 104-105.
3. Лобанов А.Л. Логический анализ и классификация существующих форм диагностических ключей // Энтомол. обозр., 1972б. Т. 51, N 3. С. 668-681.
4. Лобанов А.Л. Оценка диагностической ценности рядов признаков в многоходовых определителях, рассчитанных на использование ЭВМ // Тезисы докладов VI Коми республиканской молодежной научной конференции. 1974. С. 125-126.

5. Лобанов А.Л. Математический аппарат для расчета, оценки и сравнения конструктивных параметров диагностических ключей // Зоол. журн., 1975а. Т. 54, вып. 4. С. 485-497.
6. Лобанов А.Л. Результаты экспериментов с биологическими диагностическими системами на базе ЭВМ "Наири-С" // Ежегодник Института биологии Коми филиала АН СССР. Сыктывкар, 1975б. С. 162- 168.
7. Лобанов А.Л. Принципы построения определителей насекомых с использованием электронных вычислительных машин. - Автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. биол. наук. Л.: ЗИН АН СССР, 1983. С. 1-19.
8. Лобанов А.Л. Диалоговые компьютерные биологические диагностические системы BIKEY5 и BIKEY6 // Базы данных и компьютерная графика в зоологических исследованиях (Труды Зоологического института, т. 269). 1997а. С. 61-65.
9. Лобанов А.Л. Компьютерные определители в биологии: результаты 30-летней эволюции // Компьютерные базы данных в ботанических исследованиях. Сборник научных трудов. СПб, БИН РАН, 1997б. С. 51-55.
10. Лобанов А.Л., Дианов М.Б. Диалоговая компьютерная диагностическая система BIKEY и возможности ее использования в энтомологии // Энтотомол. обозр. 1994. Т. 73, Вып. 2. С. 465-478.
11. Лобанов А.Л., Смирнов И.С. Место и роль информационных технологий в исследованиях Зоологического института РАН // Фундаментальные зоологические исследования: Теория и методы. (По материалам Международной конференции "Юбилейные чтения, посвященные 170-летию Зоологического института РАН", проходившей 23-25 октября 2002 г.), М.-СПб., Товарищество научных изданий КМК. 2004. С. 283-318.
12. Свиридов А.В. Материалы по истории методов диагностики биологических объектов // Научн. докл. высш. школы. Биол. науки. 1976. N 8. С. 7-22.
13. Свиридов А.В. Ключи в биологической систематике: теория и практика. - М.: Изд-во МГУ. 1994. Т. 21. 224 с.
14. Смирнов И.С., Лобанов А.Л. Компьютерный определитель по офиурам как база данных для хранения таксономической информации. Коллоквиум по иглокожим "Морфогенетические и конструктивные основы становления планов строения высших таксонов иглокожих". 24 марта 1997 г. ПИН, Москва. Бюллетень МОИП, отд. геол., 1999. Т. 74, вып.1. С. 79.
15. Dallwitz M.J. A flexible computer program for generating identification keys // Syst. Zool., 1974, 23. P. 50-57.
16. Dallwitz M.J. A comparison of matrix-based taxonomic identification systems with rule-based systems // In "Proceedings of IFAC workshop on expert systems in agriculture", International Academic Publishers, Beijing, 1992. P. 215-218.
17. Dallwitz M.J., Paine T.A. and Zurcher E.J. Interactive identification using the Internet // In: "Towards a global biological information infrastructure - challenges, opportunities, synergies, and the role of entomology", European Environment Agency Technical Report, 70. EEA, Copenhagen, 2002. P. 23-33.
18. Dmitriev D.A. The Internet accesible iterative key for identification of leafhoppers (Homoptera, Cicadellidae) // International Symposium on Biodiversity of Species & Ecosystems, 1-4 December 2003, St. Petersburg. Abstracts. 2003. P. 49-50.
19. Lobanov A.L., Stepanjants S.D., Dianov M.B. Dialogue computer system BIKEY as applied to diagnostics of Cnidaria (illustrated an example of hydroids of the genus Symplectoscyphus) // Scientia Marina (Special volume: Advances in Hydrozoan Biology; S.Piraino, J.Bouillon et al. (eds.)). 1996. Vol. 60, N 1. P. 211-220.
20. Pankhurst R.J. (ed.). Biological Identification with Computers. Academic Press, London. 1975. 333 pp.
21. Pankhurst R.J. Practical taxonomic computing. Cambridge University Press, Cambridge, 1991. 202 pp.

ПАКЕТ ПРОГРАММ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ С ИНТЕРФЕЙСОМ ДЛЯ КОЛЛЕКТИВНОГО ДОСТУПА

И.В. Морозов, И.А. Валуев

Настоящая работа нацелена на решение двух задач. Первая – это адаптация разрабатываемых программ молекулярно-динамического (МД) моделирования [1] для выполнения на кластерных параллельных вычислительных системах и получение с его помощью результатов для сильно коррелированных систем в областях: физики плазмы, физики конденсированного состояния, квантовой химии больших молекул и кластеров, включая биомолекулы. Вторая – это создание пользовательского интерфейса для удаленного коллективного доступа к программам моделирования. Особое внимание уделяется легкости работы пользователя, который является, как правило, специалистом-физиком и может не иметь подробной информации об архитектуре параллельной системы.

Отдельное внимание при разработке программ моделирования уделялось унификации протокола взаимодействия этих программ с интерфейсной частью с целью достижения хорошей переносимости (возможности установки на разных типах кластеров) и масштабируемости (возможности применения на кластерных системах различных размеров, включая состоящие из небольшого числа узлов узлов).

ИНТЕРАКТИВНАЯ ОТЛАДКА МРІ-ПРОГРАММ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ОТЛАДЧИКА TDV	115
<i>М.Р. Коваленко</i>	
МАСШТАБИРУЕМОСТЬ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ПОШАГОВОГО ВЫПОЛНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ	119
<i>А.Я. Калинов, К.А. Карганов</i>	
ОПЫТ СОЗДАНИЯ И РАЗВИТИЯ ЦЕНТРА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ РГУ	121
<i>А.А. Букатов, В.Н. Дацюк</i>	
ОПТИМИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ФИЛЬТРАЦИИ С ПОМОЩЬЮ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ	123
<i>С.В. Бакулин</i>	
КОНЦЕПЦИЯ ПРОГРАММЫ ИНФОРМАТИЗАЦИИ УРО РАН НА 2006-2008 ГОДЫ	125
<i>В.И. Бердышев, М.Л. Гольдштейн, И.А. Хохлов</i>	
МЕТОДЫ АНАЛИЗА СТАТИСТИКИ О РАБОТЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ. ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЗАДАЧ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ	127
<i>Н.М. Булочникова, В.Ю. Горицкая, А.Н. Сальников</i>	
СИСТЕМНОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ	130
<i>А.И. Аветисян, О.И. Самоваров, Д.А. Грушин, Г.М. Михайлов, Ю.П. Rogov, А.М. Чернецов.</i>	
О СОЗДАНИИ УЧЕБНОГО ЦЕНТРА ТЕХНОЛОГИЙ GRID НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА	132
<i>И.М. Григорьев, С.А. Немнюгин, М.М. Степанова, А.С. Чирцов</i>	
ИНТЕРНЕТ И ИНТЕРАКТИВНЫЕ ОПРЕДЕЛИТЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ	132
<i>А.Л. Лобанов, А.Г. Кирейчук, И.С. Смирнов, М.Б. Дианов, О.Н. Граничин</i>	
ПАКЕТ ПРОГРАММ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ С ИНТЕРФЕЙСОМ ДЛЯ КОЛЛЕКТИВНОГО ДОСТУПА	134
<i>И.В. Морозов, И.А. Валуев</i>	
НАПРАВЛЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ СОТРУДНИЧЕСТВА ЭЛЕКТРОННЫХ БИБЛИОТЕК РОССИИ	135
<i>А.Б. Антопольский, Б.С. Перли</i>	
ИНТЕРНЕТ-ПРОЕКТ В ОБЛАСТИ РЕЛАКСАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ	137
<i>Е.А. Боброва, А.А. Гуткин, Ф.И. Маняхин, Ф.П. Коршунов, В.П. Крылов</i>	
РАСПРЕДЕЛЕННОЕ ИСПОЛНЕНИЕ ЗАДАЧ В АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА	138
<i>А.Г. Сурков, И.К. Ханов</i>	
СПЕЦИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССОВ В GRID-СИСТЕМАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ VPEL4WS	140
<i>А.С. Лукичев</i>	
АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ СБОРА, ПЕРЕДАЧИ И ОБРАБОТКИ ТЕЛЕМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ	141
<i>Ю.Ю. Громов, А.Н. Борисов</i>	
ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ЧИСЛЕННОГО ПРОГНОЗА ПОГОДЫ НА ПРИМЕРЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ ГИДРОМЕТЦЕНТРА РОССИИ	144
<i>Е.Д. Астахова, Ю.В. Алферов</i>	
СОЗДАНИЕ ИСПЫТАТЕЛЬНОГО ПОЛИГОНА ДЛЯ GRID-ПРИЛОЖЕНИЙ В ГОРОДЕ ПЕРЕСЛАВЛЕ-ЗАЛЕССКОМ	145
<i>С.М. Абрамов, А.А. Московский, А.Ю. Первин, Ф.А. Коряка</i>	
АНАЛИЗ КОРРЕКТНОСТИ МРІ-ПРОГРАММ	146
<i>С.Н. Желтов, В.В. Самофалов, С.В. Братанов, К.В. Невидин, Е.В. Гаврина, В.С. Стариков, В. Kuhn, J. DeSouza</i>	
ОБУЧЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ КОМПЬЮТЕРНЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ В ТГУ	148
<i>А.В. Старченко, В.Н. Берцун</i>	

Научное издание

**НАУЧНЫЙ СЕРВИС В СЕТИ ИНТЕРНЕТ:
технологии распределённых вычислений**

Труды
Всероссийской научной конференции
(19-24 сентября 2005 г., г. Новороссийск)

Оригинал-макет: Т.С.Гамаюнова, С.И.Соболев

Подписано в печать 29.06.2005. Формат 60x84/8. Бумага офс. №1.
Печать рез. Усл печ. л. 39,0. Уч.-изд. л. 42.3.
Тираж 270 экз. Заказ № 13.

Ордена "Знак Почета" Издательство Московского университета.
125009, Москва, ул. Б. Никитская, 5/7.
Участок оперативной печати НИВЦ МГУ. 119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы.