

Сибирское отделение Российской академии наук
Институт вычислительных технологий СО РАН

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

по теме:

**Постгеномная биоинформатика: компьютерный анализ и
моделирование молекулярно-генетических систем**

Интеграционный проект СО РАН № 119

(промежуточный)

Руководитель проекта,

Чл.-корр.РАН

_____ А.М.Федотов

«10» ноября 2010 г.

Новосибирск 2010

Список исполнителей

Федотов А.М.

Д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН,
руководитель Проекта

Шокин Ю.И.

Академик РАН, Шокин Ю.И.

Молородов Ю.И.

К.ф.-м.н., с.н.с.

Жижимов О.Л.

Д.т.н., заведующий лабораторией ИВТ СО
РАН

Фомин А.А.

Зав. сектором

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	4
ВВЕДЕНИЕ	5
1. Общее описание ИВС и технологии обработки данных	6
2. Описание потоков данных	7
3. Описание центра хранения данных	8
4. Описание типового ЛЦХД	8
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	10
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Регламент	11
Основные положения	13
Статус документа	13
Внесение изменений	13
Общее описание ИВКХОД	13
Описание типового ЛЦСХД	14
Описание центра обработки данных (ЦОД)	14
Описание центра хранения данных (ЦХД)	15
Общее описание ЦХД	15
Описание СХД.....	16
Описание интерфейсов ЛСХД	16

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

ИВС – информационно-вычислительная среда

ИВКХОД – информационно-вычислительный комплекс для хранения и обработки данных

ЦХД – центр хранения данных

УСЦХД – управляющий сервер центра хранения данных

СХД – система хранения данных

ЦОД – центр обработки данных

ЛЦХД – локальный центр хранения данных

ИДЛЦХД – источник данных локального центра хранения данных

УСЛЦХД – управляющий сервер локального центра хранения данных

ВВЕДЕНИЕ

Основание для разработки - основанием для проведения научно-исследовательской работы является Интеграционный проект СО РАН № 119 «Постгеномная биоинформатика: компьютерный анализ и моделирование молекулярно-генетических систем».

Настоящий этап работ является вторым этапом исследований по проекту.

Основная цель этого этапа – разработка и доработка программного обеспечения, создание условий для проведения опытной эксплуатации системы контроля доступа к ресурсам.

Основные задачи второго этапа можно сформулировать следующим образом:

- Разработка основных принципов организации виртуальных серверов в схеме облачных вычислений.
- Развитие и создание новых сетевых ресурсов – каналов связи между центрами концентрации информационных и вычислительных ресурсов.
- Организация взаимодействия пользователей ресурсов с обеспечением высокого уровня качества обслуживания.
- Разработка структуры регламента предоставления ресурсов.

Работы настоящего (второго) этапа основаны на результатах предыдущего (первого) этапа работ, на котором были решены задачи предварительных исследований поставленных перед НИР задач, а именно:

Первоочередной задачей поставленной перед Институтом была разработка архитектуры информационно- вычислительной среды (ИВС) на основе единой технологической системы хранения, поиска и обработки информации для молекулярно-генетических систем и процессов.

При подготовке настоящего Отчета использовались материалы отчета по первому этапу работ и результаты исследований, проведенных на втором этапе.

1. Общее описание ИВС и технологии обработки данных

Целью работ является создание ИВС для поддержки работ для компьютерного анализа и моделированию молекулярно-генетических систем. В частности для:

- обеспечения единой прикладной инфраструктуры сбора, хранения и обработки данных на базе существующей транспортной сетевой инфраструктуры СО РАН;
- обеспечения единой глобальной политики управления данными и доступа потенциальных пользователей к этим данным на основе фиксированных интерфейсов и внутренних регламентов;
- обеспечения необходимого уровня защиты информации от различных факторов, разрушающих целостность транспортной инфраструктуры и топологии распределенных хранилищ данных.

Главное требование, предъявляемое к архитектуре ИВС - обеспечение надежности хранения экспериментальных данных, полученных с помощью высокопроизводительных экспериментальных методов в ЦКП «ГЕНОМИКА» и «ПРОТЕОМИКА», и организация доступа к высокопроизводительным вычислительным ресурсам ССКЦ и ЦКП «БИОИНФОРМАТИКА». Исходя из этого требования, ИВС реализуется в виде специализированного информационно-вычислительного комплекса для хранения и обработки данных (ИВКХОД).

ИВКХОД создается на базе существующей сетевой инфраструктуры СО РАН, что позволит обеспечить эффективный и надежный транспортный уровень ИВС, функционирующий в режиме промышленной эксплуатации вне задач и финансирования настоящего Проекта.

ИВКХОД состоит из отдельных слабосвязанных компонент, каждая из которых является автономной и может функционировать без связи с другими компонентами. Состав каждой отдельной компоненты ИВКХОД определяется локальными задачами, вытекающими из ее функционального назначения.

В качестве отдельных компонент ИВКХОД выступают

- локальные центры хранения данных (ЛЦХД)
- центр хранения данных (ЦХД)
- центр обработки данных (ЦОД)

Центральным элементом ИВКХОД является ЦХД. Общая схема компонент ИВКХОД приведена на рис.1

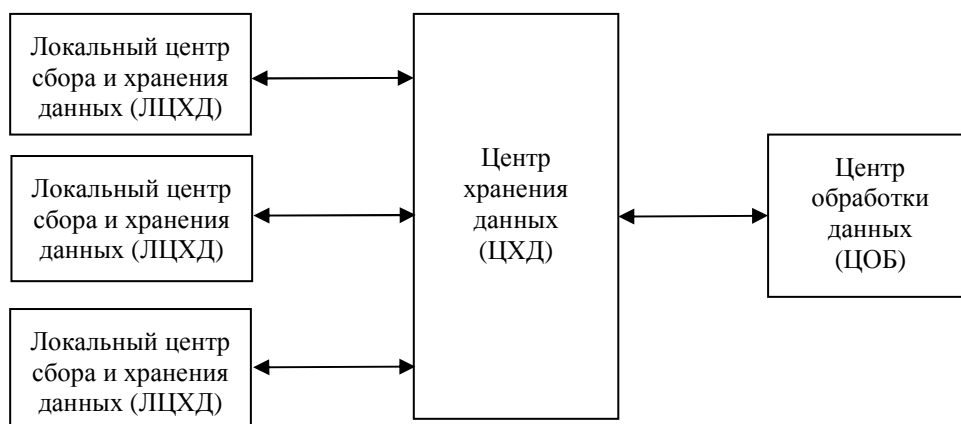


Рис.1 Общая схема ИВКХОД

2. Описание потоков данных

Общее описание потоков данных между компонентами ИВКХОД выглядит следующим образом.

- Данные из ЛЦХД поступают в ЦХД по мере готовности и необходимости.
- Поступающие в ЦХД от ЛЦХД данные претерпевают минимальную обработку. Эта обработка сводится к явному выделению метаданных и помещению их в соответствующую базу данных для организации учета и минимального атрибутивного поиска.
- Для данных, принятых от ЛЦХД в ЦХД предусматривается специальная высоконадежная система хранения данных (СХД), на которой резервируется фиксированное дисковое пространство для централизованного хранения данных и обеспечения оперативного доступа к ним.
- Для выделенных метаданных в ЦХД предусматриваются СУБД и сервер WEB с обеспечением доступа к метаданным через WEB интерфейсы.
- Данные, хранящиеся в ЦХД могут быть запрошены центром обработки данных (ЦОД) для обработки. Данные, полученные в результате обработки ЦОД могут быть помещены в ЦХД для хранения.

Интерфейсы взаимодействия отдельных компонент ИВКХОД специфицируются специальным документом – Регламентом, приведенном в Приложении 1 настоящего Отчета.

3. Описание центра хранения данных

ЦХД предназначен для надежного хранения данных и предоставления оперативного доступа к хранимой информации для обработки и визуализации результатов обработки.

ЦХД состоит из управляющего сервера (УСЦХД) и системы хранения данных (СХД).

Доступ к управляющему серверу возможен по протоколам SSH, SFTP, HTTP, доступ с СХД осуществляется по протоколу iSCSI и, как правило, возможен только со стороны УСЦХД.

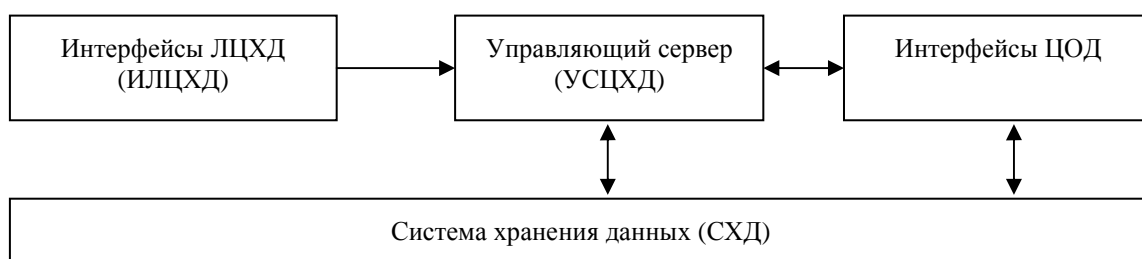


Рис.2 Общая схема ЦХД

УСЦХД содержит все необходимое программное обеспечение для управления данными ЦХД, в том числе WEB-сервер для просмотра метаинформации о хранимых в ЦХД данных.

Общая схема ЦХД представлена на рис.2.

Структура хранения данных, форматы и интерфейсы доступа описаны в Приложении 1 к настоящему Отчету.

4. Описание типового ЛЦХД

Все ЛЦХД имеют одинаковую логическую структуру, которая может реализовываться в различных конфигурациях аппаратного и программного обеспечения, но обеспечивает единые внешние интерфейсы.

Типовой ЛЦХД состоит из источника данных (ИДЛЦХД), управляющего сервера (УСЛЦХД) и локальной системы хранения данных (ЛСХД).

ЛЦХД хранит все локальные данные ЛЦХД, в том числе те, которые после

предварительной подготовки будут отправлены в ЦХД. После перемещения в ЦХД локальные данные в ЛЦХД могут уничтожаться.

Управление локальными данными и внешними интерфейсами осуществляет УСЛЦХД.

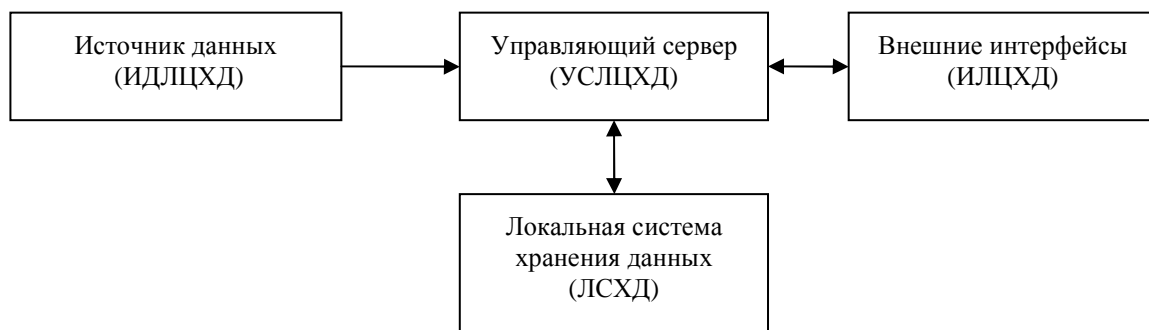


Рис.3 Общая схема типового ЛЦХД

Форматы хранения данных в ЛЦХД могут иметь локальную специфику, которая сохраняется в процессе их перемещения в ЦХД.

Общая схема ЛЦХД приведена на рис.3.

Интерфейсы взаимодействия ЛЦХД и ЦХД описаны в Приложении 1 к настоящему Отчету.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении следует отметить, что задачи, поставленные в проекте на 2010 год, успешно выполнены. А именно:

- Разработана модель обработки и хранения данных для задач настоящего Проекта.
- Определены основные параметры и характеристики основных блоков Комплекса.
- Разработан предварительная версия Регламента работы комплекса для хранения и обработки данных.

Таким образом, созданы условия для перехода к выполнению следующего этапа работ по Проекту, основной задачей которого будет создание и опытная эксплуатация Комплекса.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Регламент

Ниже приведен проект документа – Регламента «Комплекс для хранения и обработки данных для работ по Проекту 119».

Российская академия наук Сибирское отделение
Институт вычислительных технологий

Комплекс для хранения и обработки данных для работ по Проекту 119

(регламент)

Версия 1.0

Новосибирск 2010

Основные положения

- 1.1 Информационно-вычислительный комплекс для хранения и обработки данных (ИВКХОД) предназначен для выполнения работ по Интеграционному проекту СО РАН № 119 «Постгеномная биоинформатика: компьютерный анализ и моделирование молекулярно-генетических систем».
- 1.2 ИВКХОД создается для поддержки работ по секвенированию ДНК. В частности для:
 - обеспечения единой прикладной инфраструктуры сбора, хранения и обработки данных на базе существующей транспортной сетевой инфраструктуры СО РАН;
 - обеспечения единой глобальной политики управления данными и доступа потенциальных пользователей к этим данным на основе фиксированных интерфейсов и внутренних регламентов;
 - обеспечения необходимого уровня защиты информации от различных факторов, разрушающих целостность транспортной инфраструктуры и топологии распределенных хранилищ данных.
- 1.3 ИВКХОД создается на базе существующей сетевой инфраструктуры СО РАН.
- 1.4 ИВКХОД состоит из отдельных слабосвязанных компонент, каждая из которых является автономной.
- 1.5 Функционирование каждой отдельной компоненты ИВКХОД регламентируются отдельными внутренними документами, которые не противоречат настоящему Регламенту.

Статус документа

- 2.1 Настоящий Регламент является открытым документом, допускающим внесение изменений как по мере возникновения новых потребностей, так и в случае изменения общей транспортной инфраструктуры.
- 2.2 Частные регламенты функционирования отдельных компонент ИВКХОД являются составной частью настоящего Регламента.

Внесение изменений

- 3.1 Любые изменения настоящего Регламента должны согласовываться со всеми участниками Проекта.
- 3.2 Изменения настоящего Регламента вступают в силу после их утверждения ответственными исполнителями Проекта и фиксации даты утверждения руководителем Проекта.
- 3.3 Любое изменение Регламента повышает текущую версию настоящего документа.

Общее описание ИВКХОД

- 4.1 Общая схема, определяющая основные потоки данных, представлена на рис. 1.

- 4.2 Локальные центры сбора и хранения данных (ЛЦСХД) взаимодействуют с центром хранения данных (ЦХД) на основе единых правил и интерфейсов.

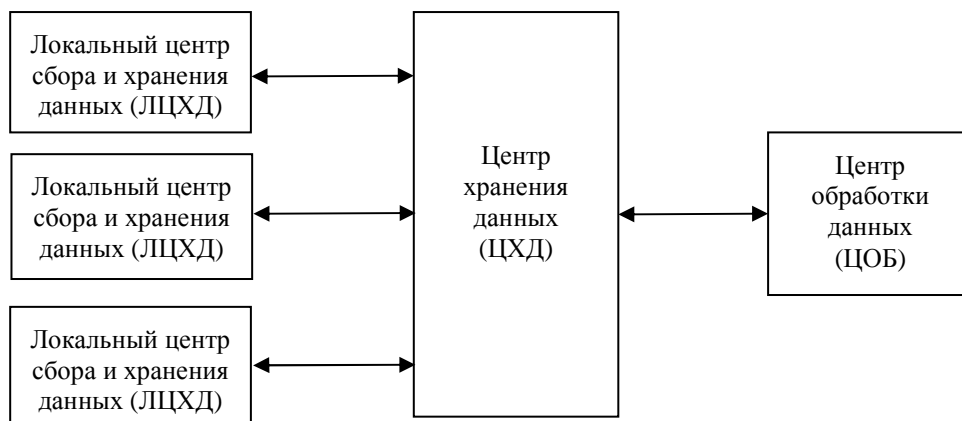


Рис.1 Общая схема ИВКХОД

Описание типового ЛЦСХД

- 5.1 Общая схема типового ЛЦХД представлена на рис.2.
- 5.2 Регламентация работы каждого ЛЦХД определяется соответствующим внутренним регламентом.
- 5.3 Взаимодействие каждого ЛЦХД с ЦХД определяется настоящим Регламентом.

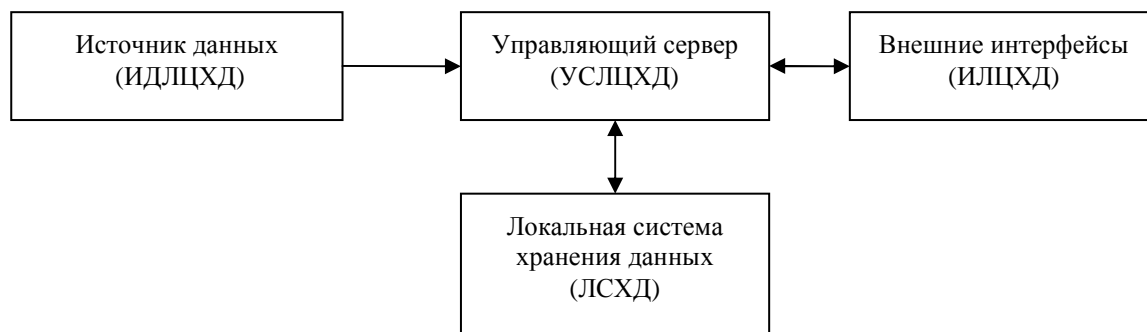


Рис.2 Общая схема типового ЛЦХД

Описание центра обработки данных (ЦОД)

- 6.1 Функционирование ЦОД обеспечивает Суперкомпьютерный центр СО РАН
- 6.2 Регламентация работы ЦОД определяется соответствующим регламентом.
- 6.3 Взаимодействие ЦОД с ЦХД регламентируется настоящим Регламентом.

Описание центра хранения данных (ЦХД)

Общее описание ЦХД

7.1.1 Функционирование ЦХД обеспечивает ИВТ СО РАН.

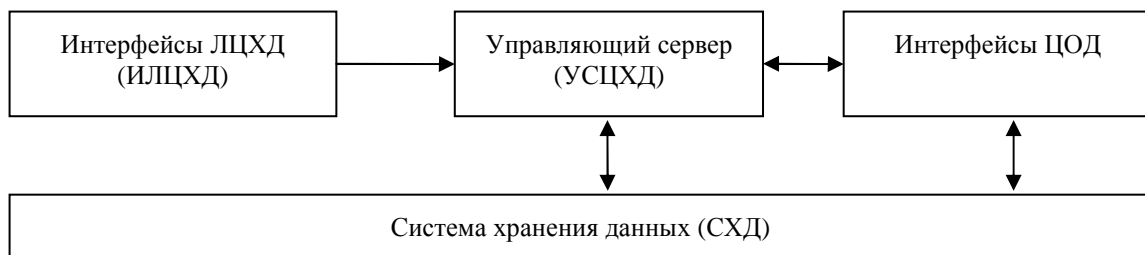


Рис.3 Общая схема ЦХД

7.1.2 Структурная схема ЦХД представлена на рис. 3

7.1.3 Управляющий компьютер ЦХД содержит все необходимое программное обеспечение для управления данными СХД, в том числе WEB-сервер для просмотра метаинформации о сериях измерений.

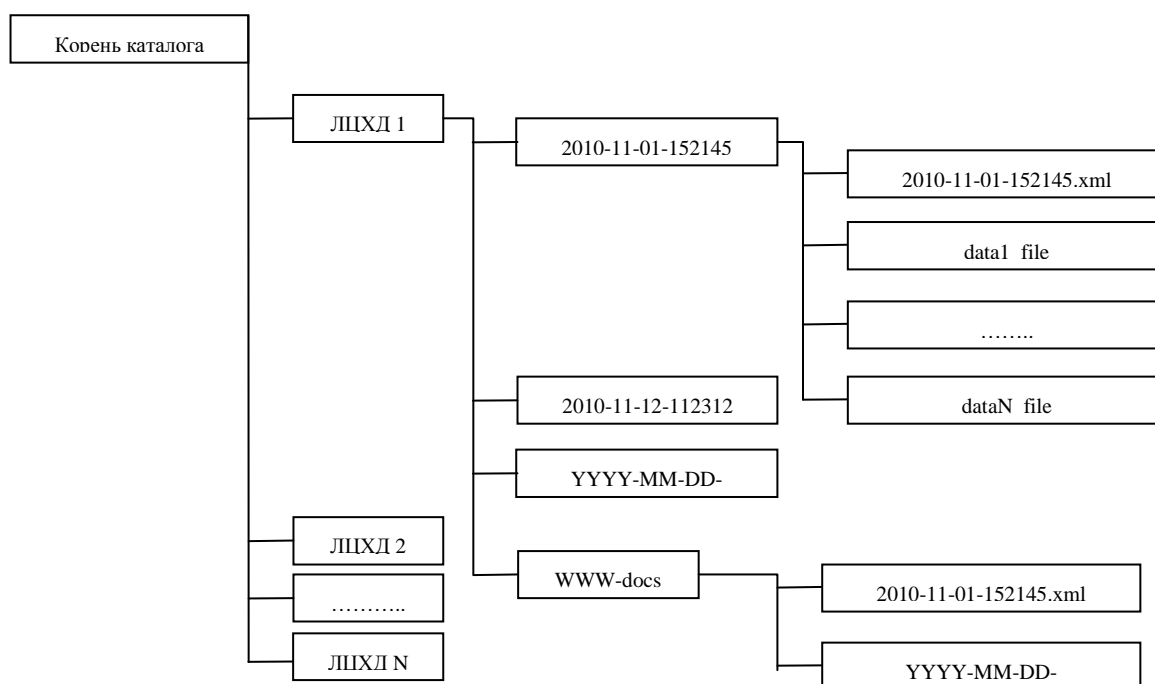


Рис.4 Структура файловой системы ЦХД

Описание СХД

- 7.2.1 СХД представляет собой сетевую систему хранения данных с выделенным фиксированным объемом дискового пространства.
- 7.2.2 Доступный объем фиксированного дискового пространства – 40 Тб.
- 7.2.3 Хранение данных основано на сжатой файловой системе.
- 7.2.4 Доступ к файлам СХД осуществляется через управляющий компьютер ЦХД (УПЦХД) и непосредственно из ЦОД.
- 7.2.5 Контроль доступа к СХД осуществляет УСЦХД на основе локальных политик и политик глобального каталога СО РАН на основе LDAP.
- 7.2.6 Управление политиками доступа к СХД осуществляет Администратор ЦХД.
- 7.2.7 Контактная информация об Администраторе ЦХД сообщается всем исполнителям Проекта методом публикации на сайте Проекта.
- 7.2.8 Предоставление доступа к СХД осуществляется на основании письменного обращения Администратора ЛЦХД к Администратору ЦХД.
- 7.2.9 Файловая система СХД имеет структуру, изображенную на рис.4.

Описание интерфейсов ЛСХД

- 7.3.1 Интерфейсы ЛЦХД определяют взаимодействие ЦХД и ЛСХД.
- 7.3.2 Доступ к ресурсам ЦХД со стороны ЛЦХД осуществляется
 - доступ к файлам – по протоколам NFS, SFTP и HTTP
 - доступ к метаданным – по протоколу HTTP

Данные ЛЦХД, организованные в виде файлов, переносятся в СХД вручную.

Инициатором копирования файлов ЛСХД в СХД является управляющий сервер ЛЦХД (УСЛЦХД).

Процесс переноса данных одной серии измерений из ЛЦХД в ЦХД состоит из следующих шагов, выполняемых в рамках одной транзакции

- Создание в файловой системе ЦХД в каталоге текущей ЛЦХД пустого каталога с именем, включающим дату измерения, например, «2010-11-15-162530» (измерения закончились 15 ноября 2010 года в 16 часов 25 минут 30 секунд).
- Создание в этом каталоге файла описания данных в формате xml, содержащего метаданные проведенной серии измерений.
- Копирование данных измерений в этот каталог.
- Исполнение на УПЦХД утилиты регистрации новых данных.

Процесс удаления данных в файловой системе ЦХД состоит в исполнении соответствующей утилиты на УКЦХД с указанием имени соответствующего каталога серии измерений.