

Система управления сервис-ориентированными научными приложениями

Михаил Воскобойников¹, Александр Феокистов¹

¹Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН, ул. Лермонтова, д. 134, 664033, Иркутск, Россия

Аннотация

Рассматривается инструментальный комплекс FDE-SWFs, предназначенный для автоматизации разработки и применения сервис-ориентированных приложений в гетерогенной распределенной вычислительной среде. Особое внимание уделяется системе управления научными рабочими процессами. В сравнении с известными системами управления рабочими процессами данная система обеспечивает управление как традиционными рабочими процессами на основе потоков задач, так и сервис-ориентированными рабочими процессами. Рабочие процессы могут строиться с использованием дополнительных функциональных возможностей. FDE-SWFs использован для создания ряда пакетов программ, ориентированных на исследование свойств и процессов функционирования энергетических комплексов.

Ключевые слова

Научные приложения, рабочие процессы, гетерогенная распределенная вычислительная среда, сервисы, инструментальный комплекс

1. Введение

Сегодня решение крупномасштабных фундаментальных и прикладных задач в гетерогенной распределенной вычислительной среде (ГРВС) зачастую базируется на разработке и применении распределенных приложений, основанных на использовании научных рабочих процессов (НРП) [1]. При этом НРП описывают логическую последовательность этапов решения задач с помощью прикладного программного обеспечения (ПО).

Разработка и выполнение НРП осуществляется с помощью специализированных систем управления рабочими процессами [2]. Такие системы, как правило, предоставляют разработчику приложения программную инфраструктуру для построения, конфигурирования, выполнения и контроля рабочих процессов со сложными зависимостями между выполняемыми в их рамках операциями обработки данных.

В процессе разработки НРП, возникает необходимость разрешения сложных вопросов согласованного использования разнородных информационно-вычислительных ресурсов и разнообразных источников данных, учета специфики решаемых задач, комплексирования системного и прикладного ПО, унификации описаний предметных областей исследования и их вычислительных моделей, доступа пользователей к распределенным компонентам приложения, получения информации от контрольно-измерительных систем, взаимодействия с локальными системами управления прохождением заданиями и метапланировщиками вычислительной среды, поддержкой технологий организации распределенных баз данных в памяти узлов среды с целью оперативной обработки данных, визуализации расчетных данных и др. К сожалению, известные системы управления рабочими процессами не решают вышеперечисленные вопросы в полной мере [3].

2. Инструментальный комплекс FDE-SWFs

Инструментальный комплекс Framework for Development and Execution of Scientific WorkFlows (FDE-SWFs) развивает и дополняет функциональные возможности фреймворка Orlando Tools [4], предназначенного для создания распределенных научных приложений на основе НРП в ГРВС. Комплекс включает следующие основные подсистемы: пользовательский интерфейс, конструкторы вычислительных моделей, модулей, постановок задачи и сервисов, менеджеры вычислительных процессов и вычислительной среды, API для доступа к информационно-вычислительным ресурсам и системам. База знаний FDE-SWF содержит спецификацию вычислительных моделей разрабатываемых приложений, научных рабочих процессов и сведения о вычислительных ресурсах. Исходная информация и результаты выполнения НРП хранятся в расчетных базах данных FDE-SWFs.

Вычислительная модель сервис-ориентированного приложения описывается в виде структуры $M = \langle Z, T, M, S, N \rangle$, где Z – множество параметров, T – множество допустимых типов параметров, M – множество программных модулей, S – множество сервисов, N – множество узлов ГРВС, на которых размещен тот или иной сервис.

На рисунке 1 представлена схема работы ГРВС.

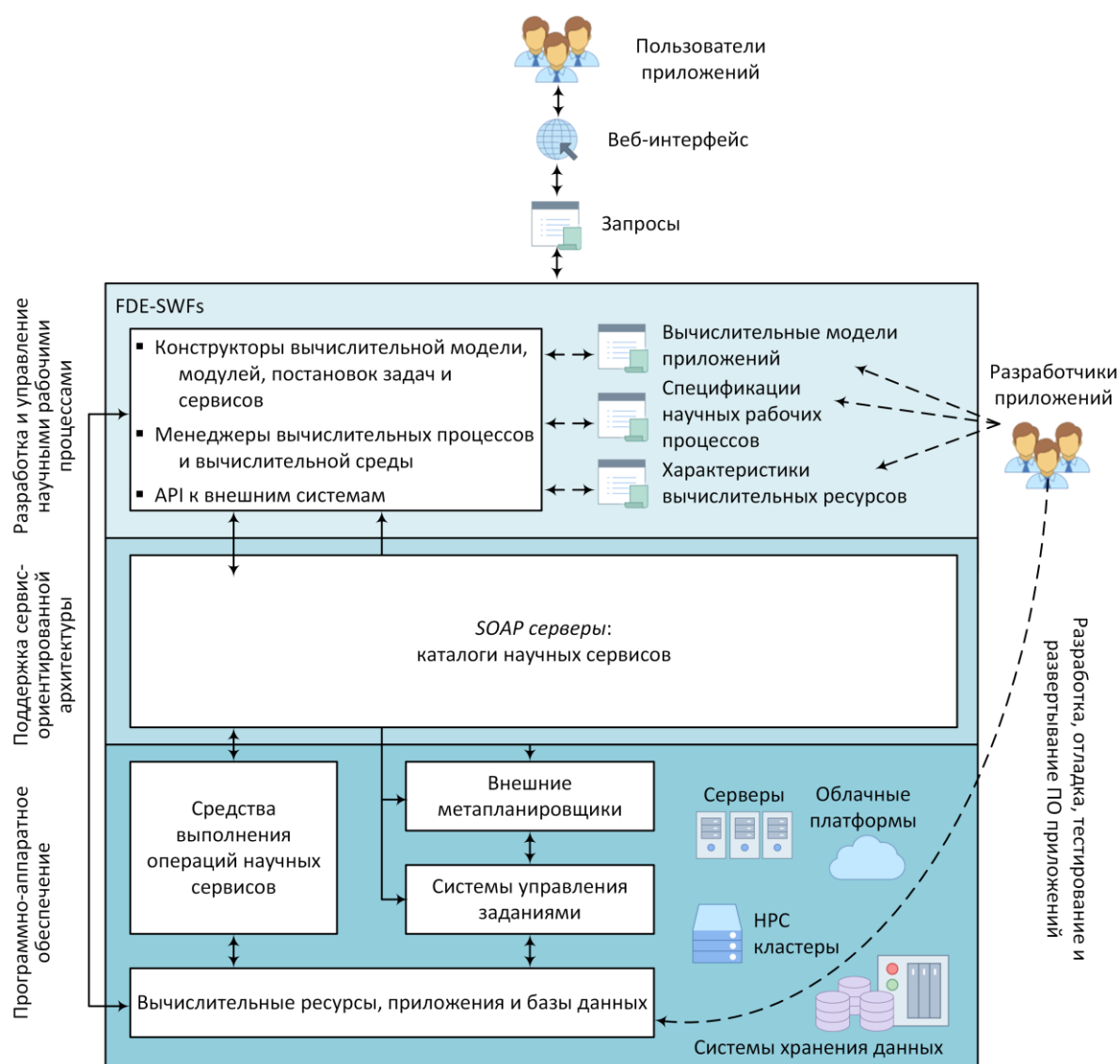


Рисунок 1: Схема работы ГРВС

FDE-SWFs реализован на программной платформе Node.js. Разработчики приложений с помощью веб-интерфейса комплекса описывают вычислительную модель сервис-ориентированного приложения. На вычислительной модели разработчик строит НРП по процедурной или не процедурной постановкам задач. НРП, может быть реализован следующими способами:

- на основе композиции WSDL-сервисов, представленной на языке программирования Python;
- в виде отдельного WPS-сервиса, который реализуется традиционный НРП на основе исполняемых модулей и заданий для внешних метапланировщиков и систем управления заданиями, таких как Condor DAGMan и HTCondor;
- с помощью стандартизированного декларативного языка Business Process Execution Language (BPEL) [5].

В последнем случае, НРП может использоваться любыми внешними системами управления рабочими процессами, поддерживающими BPEL. На рисунке 2 представлена схема выполнения НРП, представленного на языке BPEL, под управлением FDE-SWFs.

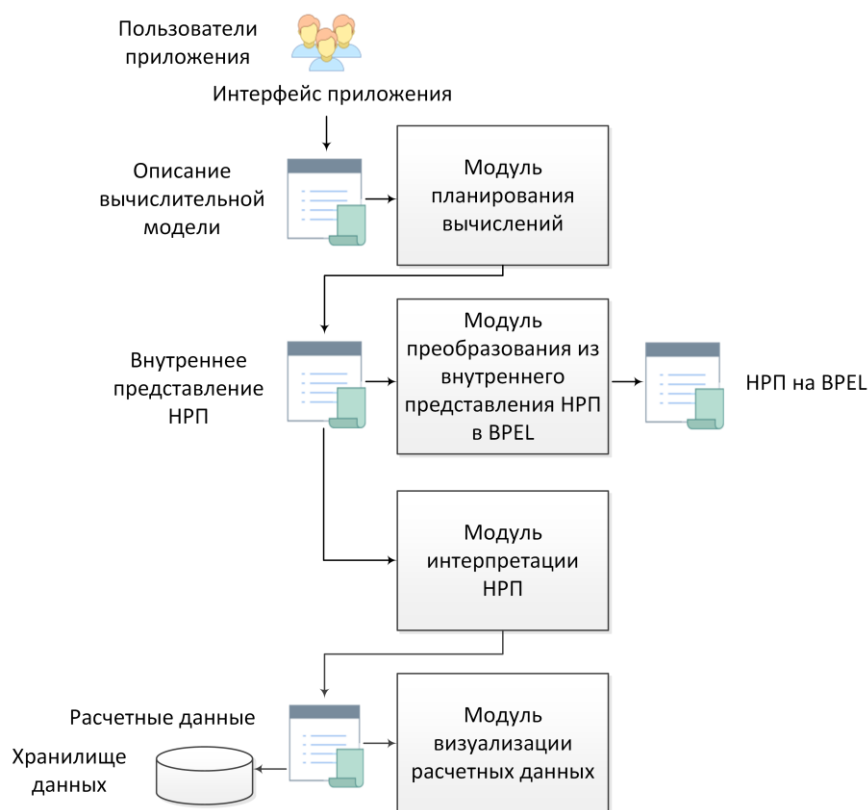


Рисунок 2: Схема выполнения НРП

Пользователь с помощью интерфейса FDE-SWFs выбирает вычислительную модель предметной области исследования и указывает исходные данные для расчета. Модуль планирования вычислений выполняет построение плана решения задачи в виде НРП во внутреннем представлении системы. Модуль преобразования производит конвертацию НРП на BPEL для использования во внешних системах управления рабочими процессами. Далее модуль интерпретации выполняет построение НРП в виде композиции WSDL-сервисов на языке Python и выполняет ее. Полученные в результате выполнения композиции WSDL-сервисов расчетные данные сохраняются в хранилище данных. По завершению выполнения НРП пользователь с помощью модуля визуализации расчетных данных может проанализировать результаты вычислений.

3. Практическое применение

FDE-SWFs использован при разработке и применении пакетов программ для решения следующих задач:

- глобальный анализа уязвимости энергетического комплекса [6];
- оценка падения производительности отдельных систем энергетики при возникновении крупных возмущений [6];
- оценка эффективности алгоритмов определения надежности сети энергетической системы [7];
- многокритериальный выбор методов структурно-параметрической оптимизации моделей энергетических комплексов на разных уровнях их территориально-отраслевой иерархии [8].

В сравнении с известными системами управления рабочими процессами в рамках перечисленных пакетов FDE-SWFs обеспечивает следующие дополнительные возможности:

- использование технологии In-Memory Data Grid [6];
- создание испытательных стендов сервис-ориентированных приложений [7, 8];
- включение в НПП специализированных системных операторов агрегирования и дезагрегирования параллельных списков данных, а также операторов организации многометодных расчетов [7, 8].

4. Заключение

В работе рассмотрен инструментальный комплекс FDE-SWFs, используемый для разработки и применения сервис-ориентированных приложений в гетерогенной распределенной вычислительной среде. Система управления сервис-ориентированными приложениями данного комплекса базируется на использовании методов и средств концептуального, модульного и сервис-ориентированного программирования, контейнеризации ПО, организации параллельных и распределенных вычислений. В сравнении с известными системами управления рабочими процессами она существенно расширяет существующий базис теории и практики параллельных и распределенных вычислений. Эффективность ее работы продемонстрирована при проведении расчетов на основе ряда пакетов, разработанных с помощью FDE-SWFs.

5. Благодарности

Работа выполнена в рамках гранта № 075-15-2024-533 Министерства науки и высшего образования РФ на выполнение крупного научного проекта по приоритетным направлениям научно-технологического развития (проект «Фундаментальные исследования Байкальской природной территории на основе системы взаимосвязанных базовых методов, моделей, нейронных сетей и цифровой платформы экологического мониторинга окружающей среды», рег. № 124052100088-3).

6. Список литературы

- [1] A. Feoktistov, S. Gorsky, R. Kostromin, R. Fedorov, I. Bychkov, Integration of Web Processing Services with Workflow-Based Scientific Applications for Solving Environmental Monitoring Problems, ISPRS International Journal of Geo-Information, 2022, vol. 11, no. 1, pp. 8. doi: 10.3390/ijgi11010008.
- [2] T. Schäl, Workflow management systems for process organisations, Lecture Notes in Computer Science, 1996, vol. 1096, pp. 208. doi:10.1007/978-3-662-21574-6.
- [3] A. Feoktistov, A. Edelev, A. Tchernykh, S. Gorsky, O. Basharina, and E. Fereferov, An Approach to Implementing High-Performance Computing for Problem Solving in Workflow-based Energy

- Infrastructure Resilience Studies, Computation, 2023, vol. 11, no. 12, pp. 243. doi: 10.3390/computation11120243.
- [4] A. Feoktistov, S. Gorsky, I. Sidorov, I. Bychkov, A. Tchernykh, and A. Edelev Collaborative Development and Use of Scientific Applications in Orlando Tools: Integration, Delivery, and Deployment, Communications in Computer and Information Science, 2020, vol. 1087, pp. 18–32. doi:10.1007/978-3-030-41005-6_2.
- [5] M. B. Juric, B. Mathew, and P.G. Sarang, Business process execution language for web services: an architect and developer's guide to orchestrating web services using BPEL4WS, Packt Publishing Ltd, 2006.
- [6] А. Г. Феоктистов, Р. О. Костромин, М. Л. Воскобойников, Д. И. Ли-Дэ, Организация вычислительной среды разработки и применения научных рабочих процессов на основе контейнеризации, Вычислительные технологии, 2023, Т. 28, № 6, с. 151–164. doi:10.25743/ICT.2023.28.6.013.
- [7] G. Danilov and M. Voskoboinikov, Testbed-based approach to testing a library for evaluating network reliability algorithms, Proceedings of the International Workshop on Critical Infrastructures in the Digital Worl (IWCi-2024), March 14-20, 2024, Bolshoe Goloustno, Russia, Irkutsk, ESI SB RAS, 2024, pp. 3–4.
- [8] А. Г. Феоктистов, М. Л. Воскобойников, А. В. Еделев, Методы и средства разработки и применения испытательного стенда сервис-ориентированных приложений, Материалы VI Международного семинара по информационным, вычислительным и управляющим системам для распределенных сред (ICCS-DE 2024, 1-5 июля 2024 г., г. Иркутск, Россия), Иркутск, Изд-во ИДСТУ СО РАН, 2024, с. 164–168.