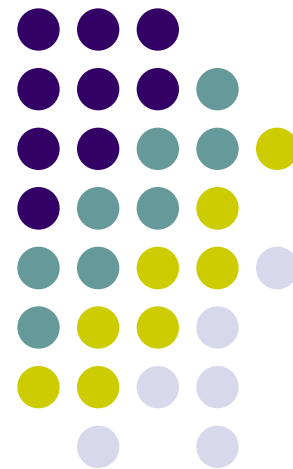


Создание высокоуровневых средств разработки грид-сервисов и интеграции программных ресурсов в грид-систему для решения научных задач

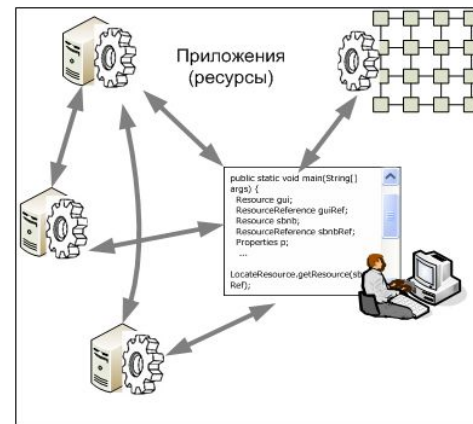
А.П. Афанасьев

*Центр Грид-технологий и распределенных вычислений
Институт системного анализа РАН*

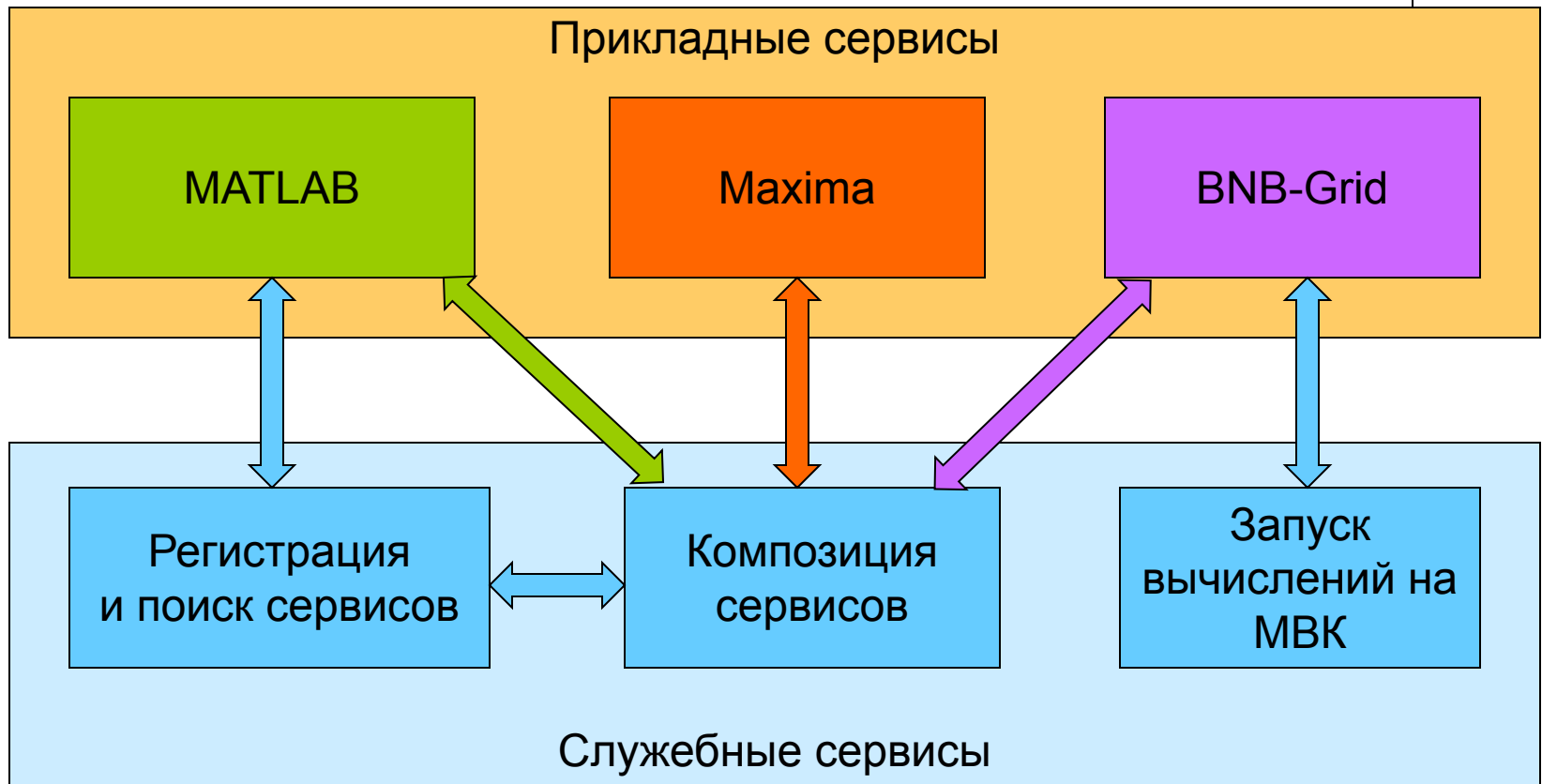


Инструментарий IARnet

- Программный инструментарий для интеграции информационно-алгоритмических ресурсов в глобальной сети при решении прикладных задач
- Ориентирован на решение задач, допускающих многоуровневую декомпозицию на несколько типовых подзадач с хорошей программно-алгоритмической проработкой
- Реализует высокоуровневую модель программирования, доступную широкому кругу прикладных программистов



Grid-сервисы



2007



- Анализ современных технологий построения распределенных вычислительных сред
- Архитектура унифицированного программного инструментария, обеспечивающего интеграцию информационно-алгоритмических ресурсов на принципах сервис-ориентированной архитектуры грид-вычислений
- Реализация базовых компонентов инструментария
 - Средства разработки сервисов
 - Среды развертывания сервисов
 - Средства разработки приложений

Эволюция Grid



Первое поколение

- Доступ к высокопроизводительным вычислительным ресурсам
- Интерфейс batch-системы
- Ресурсы предоставляются крупными Grid-сайтами
- Пользователи не имеют возможности использовать чужие наработки
- Необходимая основа для второго поколения Grid

Эволюция Grid



Первое поколение

- Доступ к высокопроизводительным вычислительным ресурсам
- Интерфейс batch-системы
- Ресурсы предоставляются крупными Grid-сайтами
- Пользователи не имеют возможности использовать чужие наработки
- Необходимая основа для второго поколения Grid

Второе поколение

- Доступ к высокоуровневым сервисам для решения определенных задач
- Web-интерфейсы, порталы
- Сервисы создаются пользователями Grid
- Пользователи могут объединять чужие сервисы в новые сервисы
- Сервисы используют вычислительные ресурсы Grid

Сервис-ориентированный подход



- Виртуализация ресурсов в виде удаленно доступных сервисов, снабженных метаданными и обнаруживаемых через специальные сервисы поиска
- IARnet
 - Средства быстрого создания сервисов
 - API для создания приложений, использующих сервисы
 - Регистрация и поиск сервисов
 - Композиция сервисов на основе workflow-технологий

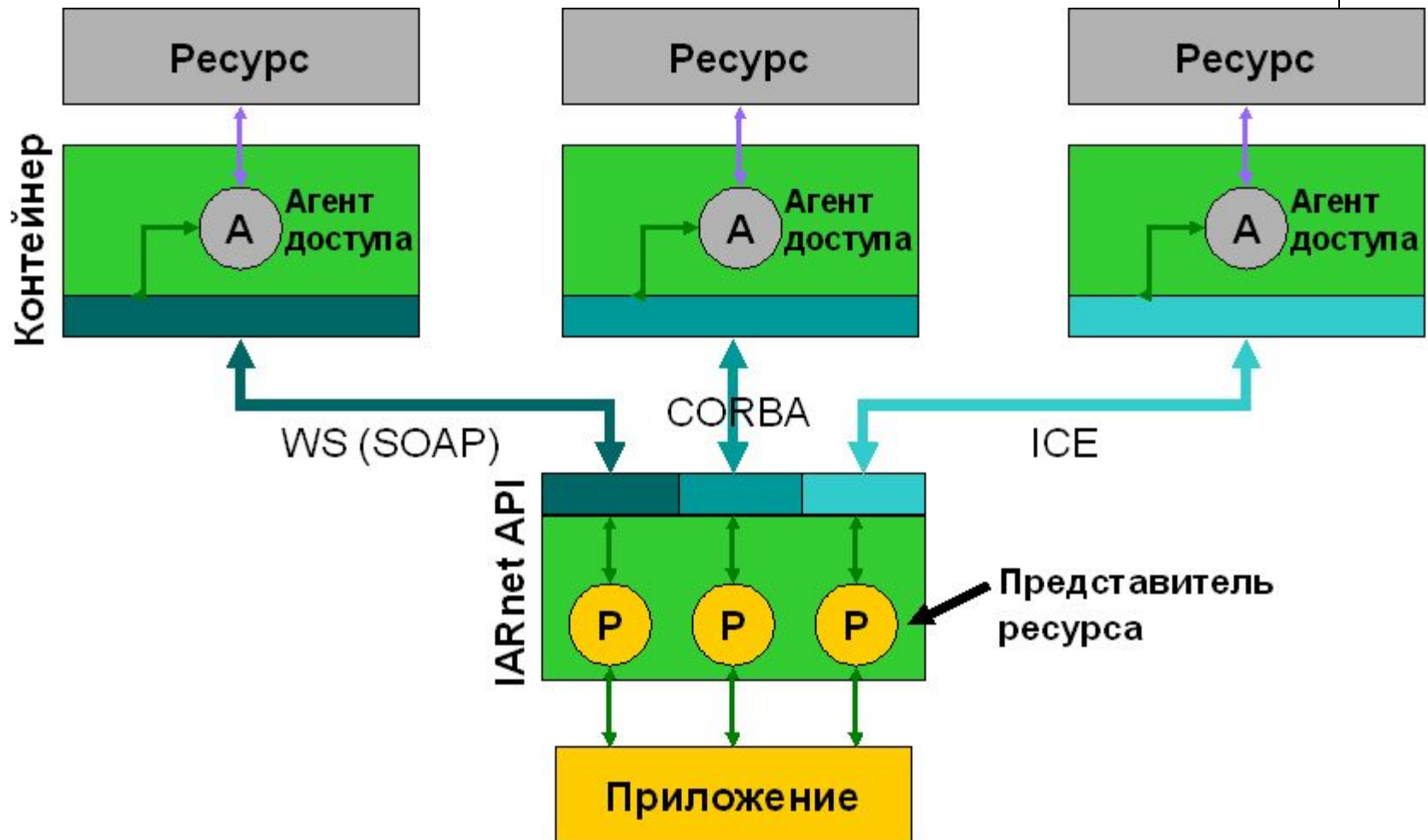
Характеристики инструментария IARnet



- Языки программирования
 - Java и C++ для разработки сервисов
 - Java для разработки клиентских приложений
- Типы данных
 - Прimitives, массивы, коллекции (List, Set, Map)
- Независимость от промежуточного ПО
 - Реализации транспортного уровня для CORBA, SOAP и Ice
- Асинхронные вызовы

- Службы
 - Информационная служба - регистрация и поиск сервисов
 - Служба управления сценариями – описание и выполнение распределенных вычислительных процессов (workflows)

Сетевая архитектура IARnet



2008



- Реализация служебных сервисов
- Механизм обеспечения безопасности
- Развертывание сервисов в действующей Grid-инфраструктуре
- Испытания созданных программных средств и сервисов
- Патентные исследования



Служебные сервисы

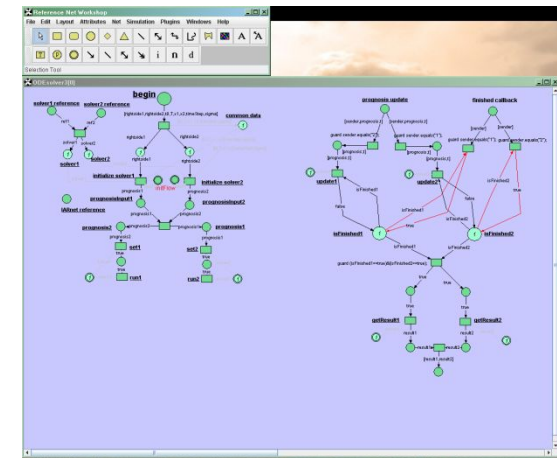
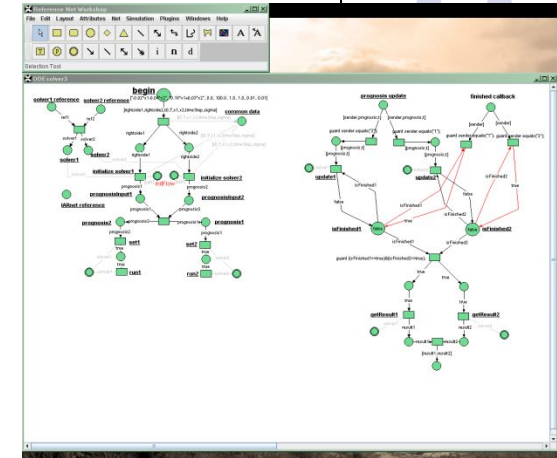
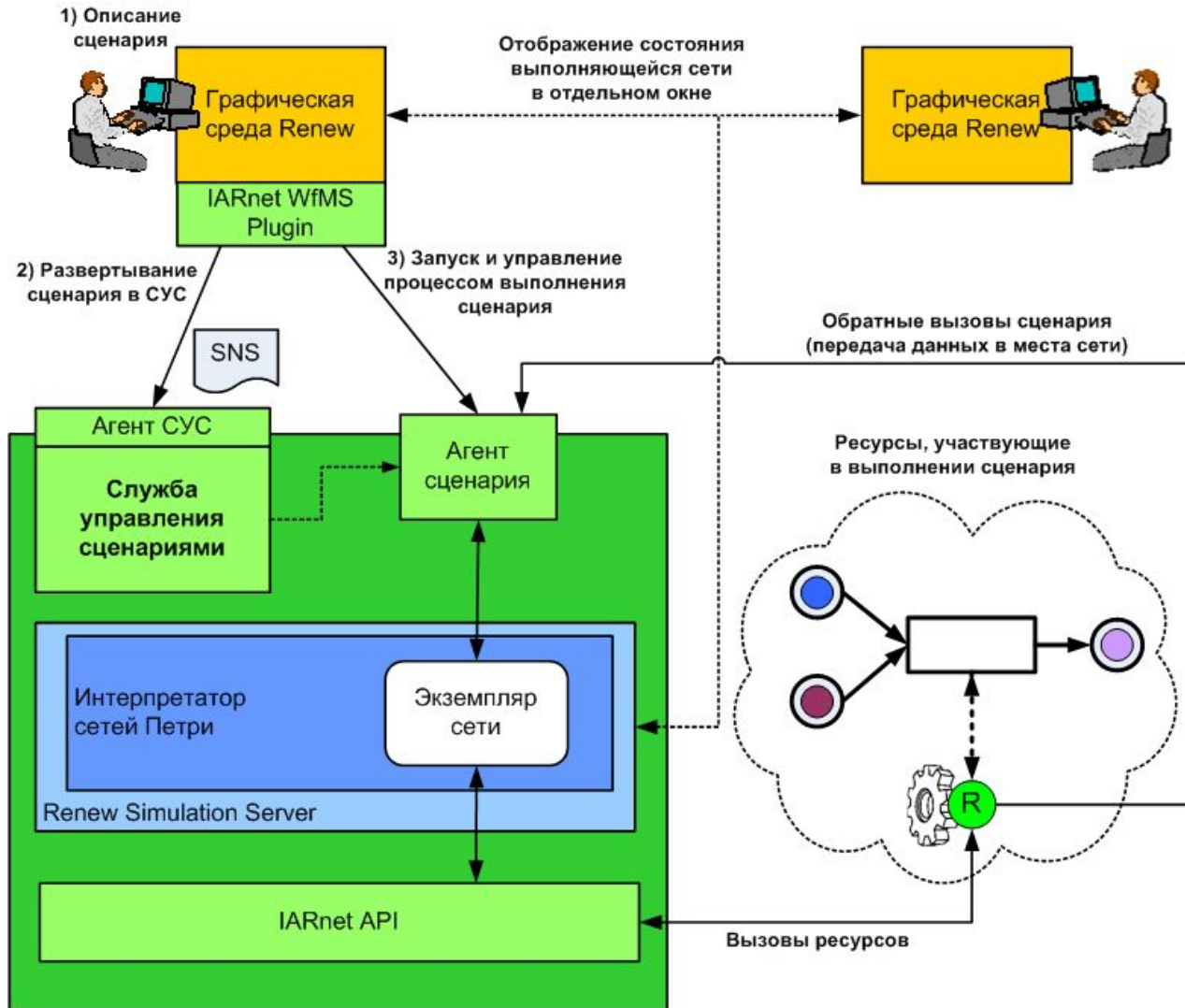
- Информационная служба
- Служба управления сценариями
- Сервис доступа к ресурсам, функционирующим на МВК

Информационная служба



- Публикация описаний ресурсов и типов ресурсов
- Использование технологий Semantic Web
 - Спецификация модели метаданных в виде онтологии на языке OWL
 - Формат представления метаданных - Resource Description Framework (RDF)
 - Поддержка информационных запросов на языке SPARQL

Служба управления сценариями





Механизм безопасности

- Стандартные технологии и спецификации, применяемые в Grid
 - Криптография с открытым ключом
 - Цифровые сертификаты (стандарты PKI, X.509)
 - Протоколы SSL/TLS
- Реализация на основе ППО Ice
 - Клиенты и контейнеры сервисов IARnet могут быть снабжены цифровыми сертификатами
 - Конфиденциальность и целостность передаваемых по сети данных
 - Взаимная аутентификация сторон

Развертывание сервисов в действующей Grid-инфраструктуре



- Совместимость с Grid реализована на уровне механизма безопасности
- Сервис IARnet может авторизовать клиентов, снабженных сертификатами пользователей Grid
- Пример
 - Сервис доступа к пакету символьных вычислений Maxima
 - Принимает запросы от клиентов с сертификатами пользователей RDIG (Russian Data Intensive Grid)

Испытания созданных программных средств и сервисов

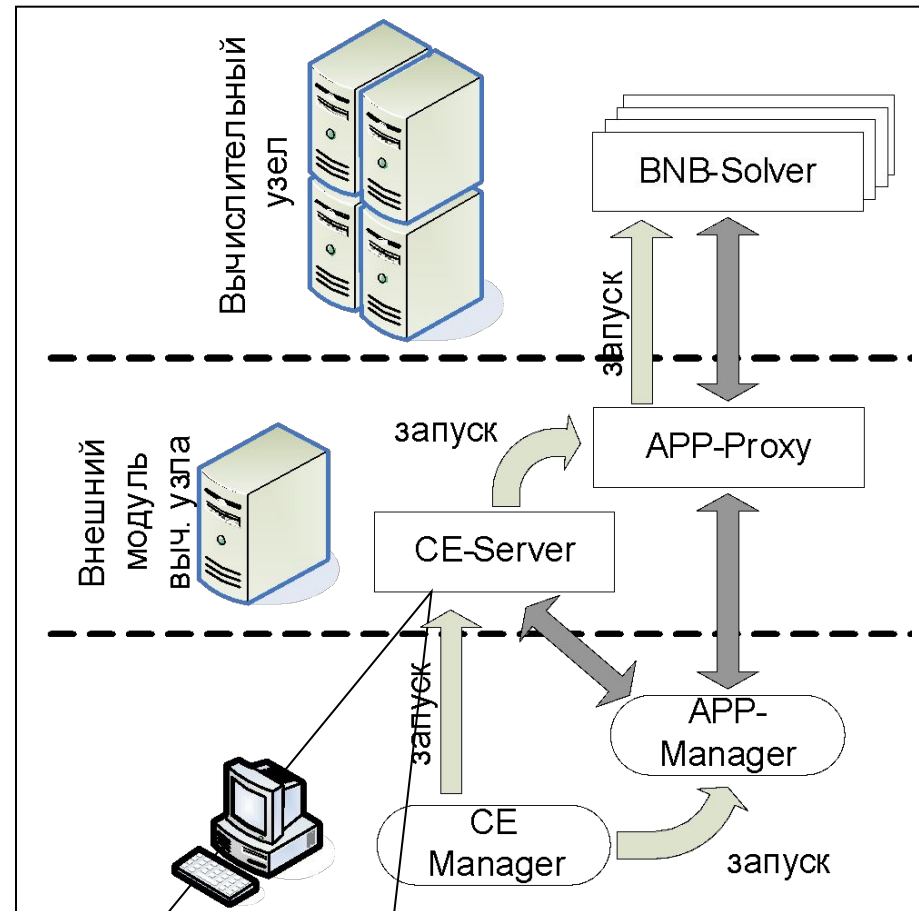
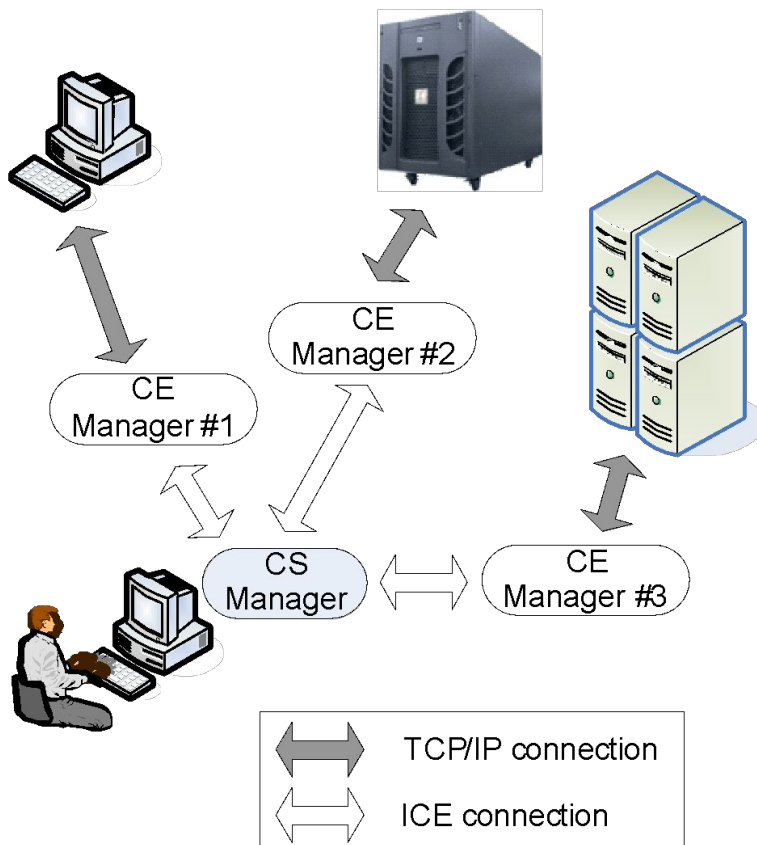


- Испытания реализаций сетевого уровня IARnet на основе ППО CORBA, Ice и Web-сервисов
- Проверка масштабируемости информационной службы и службы управления сценариями IARnet
- Проверка совместимости с ППО действующей грид-системы
- Проверка надежности работы в течение длительного времени
- Проверка непрерывной доступности сервисов

Сервис доступа к ресурсам, функционирующим на МВК



Программный комплекс VNB-Grid

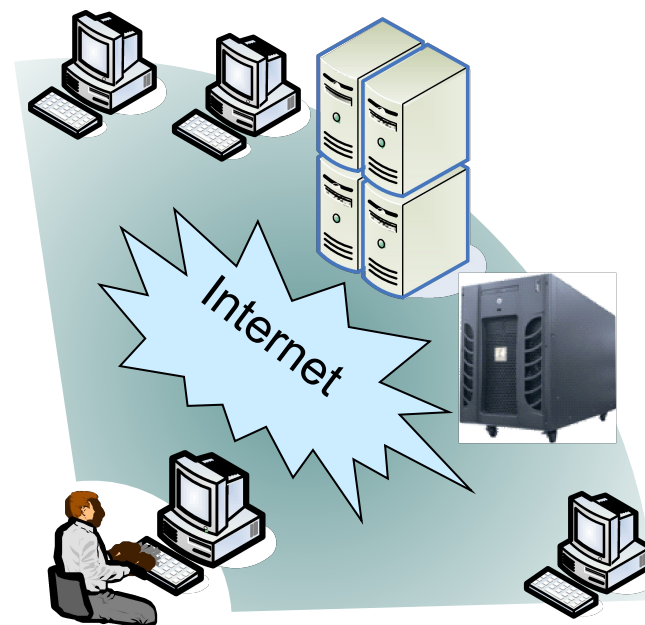


BNB-GRID: РАСПРЕДЕЛЕННАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ДЛЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ В ОБЛАСТИ КОНЕЧНОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ



Позволяет:

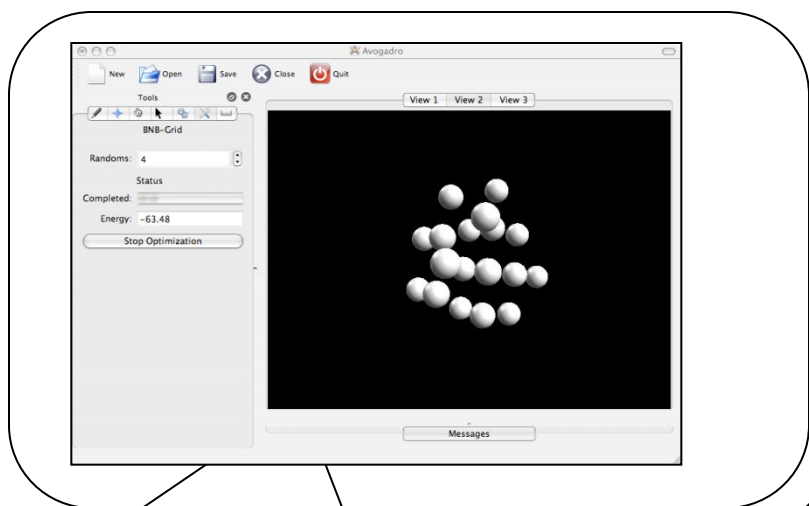
- проводить расчеты на разнородных, географически удаленных суперкомпьютерных ресурсах;
- решать различные задачи оптимизации точными и эвристическими методами;
- проводить расчеты в течение длительного времени с контрольными точками и устойчивостью к сбоям.



ПОИСК КОНФОРМЕРОВ С МИНИМАЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ



ВИЗУАЛИЗАЦИЯ



**BNB
GRID**



МСЦ РАН



ИСА РАН

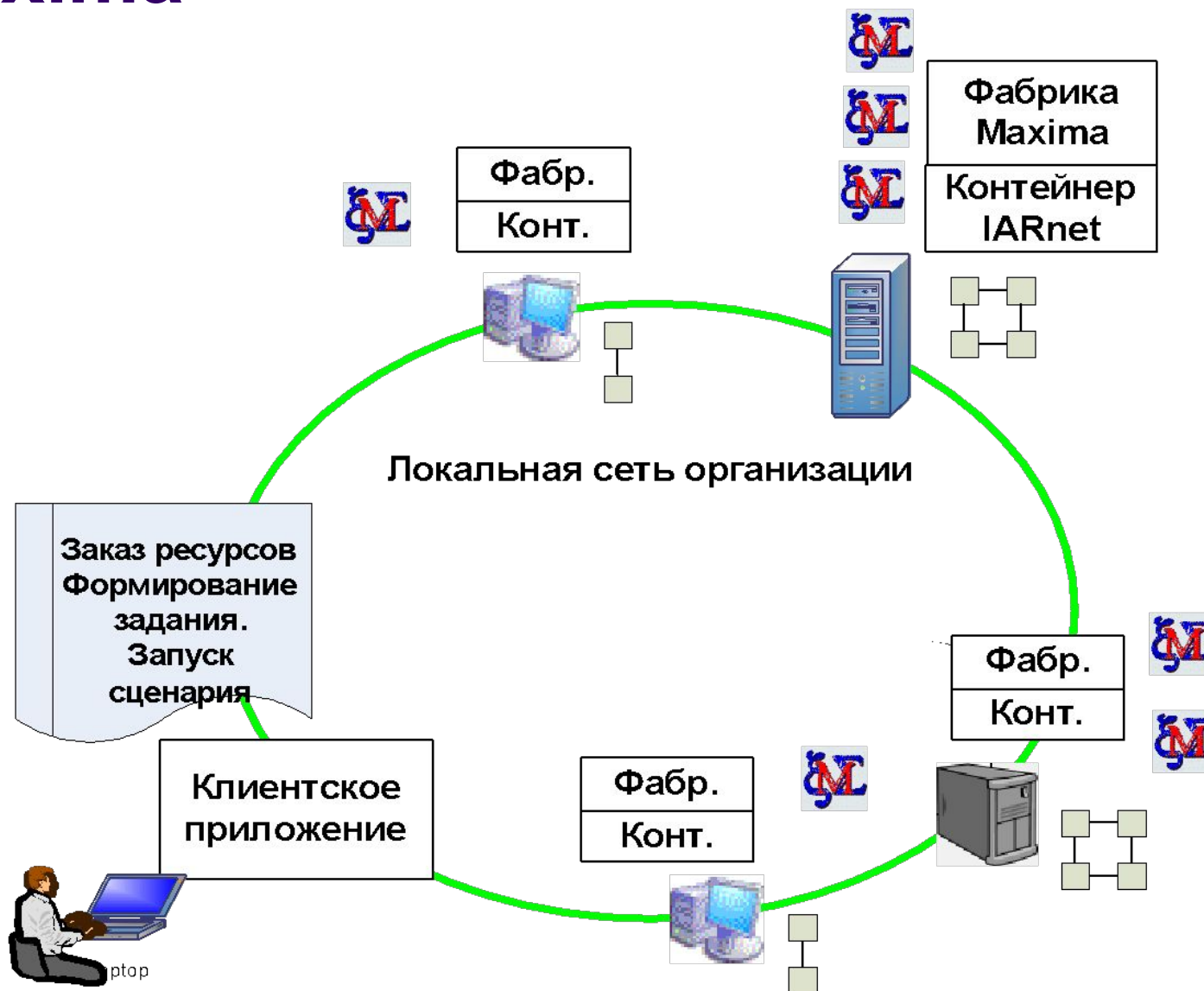
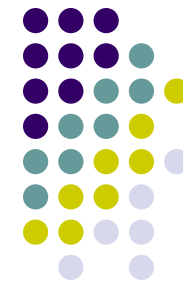


ВЦ РАН



ИСП РАН

Лабораторный грид ресурсов Maxima



Патентные исследования



- Инструментарий IARnet не подпадает под действия недавно поданных патентов, а также не нарушает требований лицензионной и патентной чистоты используемых компонент и библиотек



Индикаторы программы

- Число завершенных НИР – 1
- Число публикаций – 5
- Число патентов – 1 (свидетельство о регистрации программы для ЭВМ)
- Число диссертаций – 1

Участие в выставках и дипломы

- *Перспективные технологии XXI века
(30.09-03.10 2008)*
- *Softool
(30.09-03.10 2008)*



Спасибо за внимание!

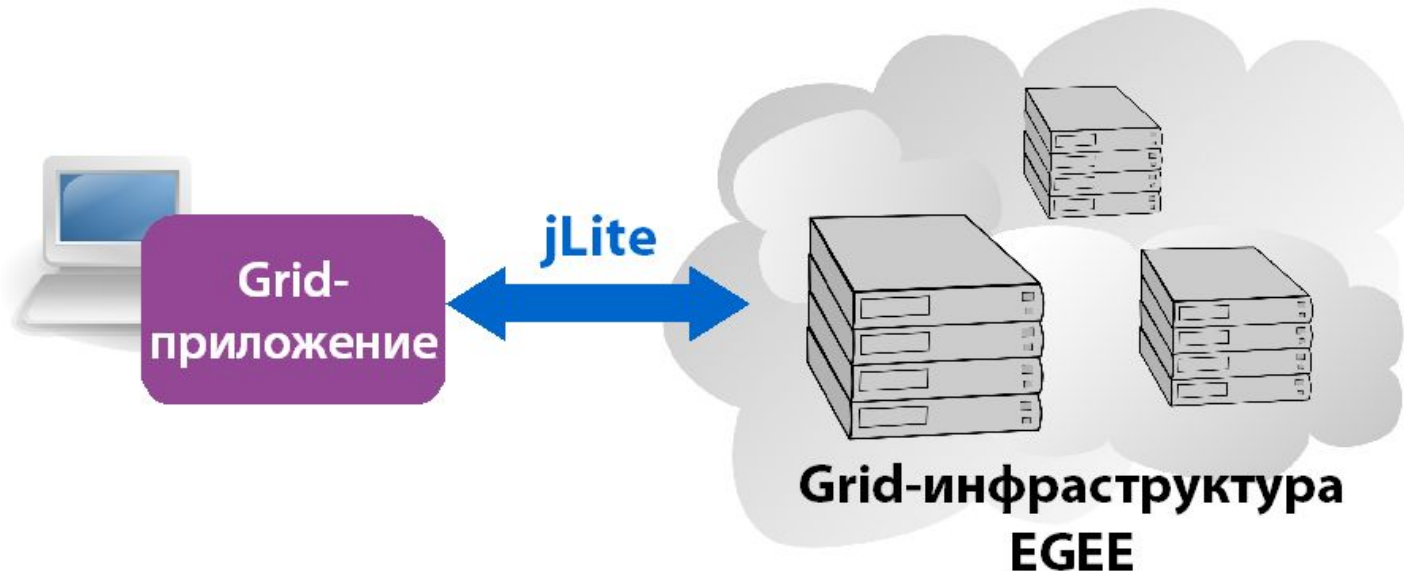
Программная инфраструктура



jLite: интеграция с Grid-инфраструктурой



- Простой программный интерфейс для запуска вычислительных заданий в Grid на основе ПО gLite
- Реализация на Java с поддержкой различных операционных систем
- Не требуется установка ПО gLite



MathCloud



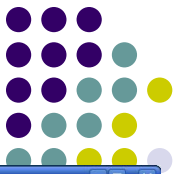
- Сетевая среда для математиков
- Состоит из независимо существующих в Интернете математических сервисов
- Предоставляет удаленный доступ к математическим ресурсам
- Позволяет объединять различные сервисы для решения математических задач
- Использует сервис-ориентированный подход, Web-технологии и модель REST



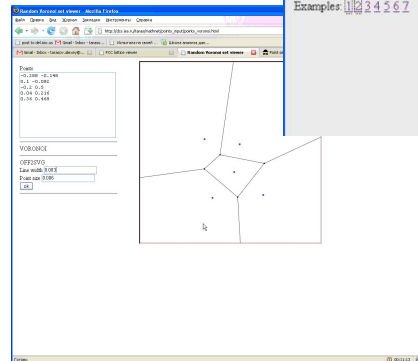
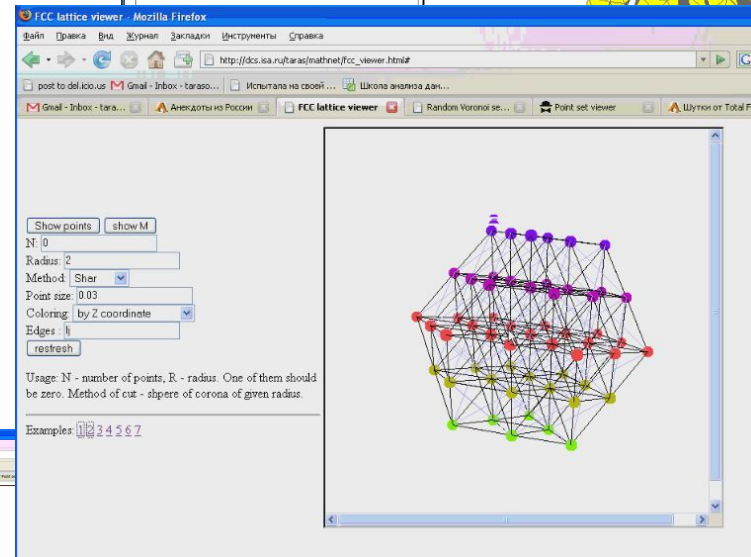
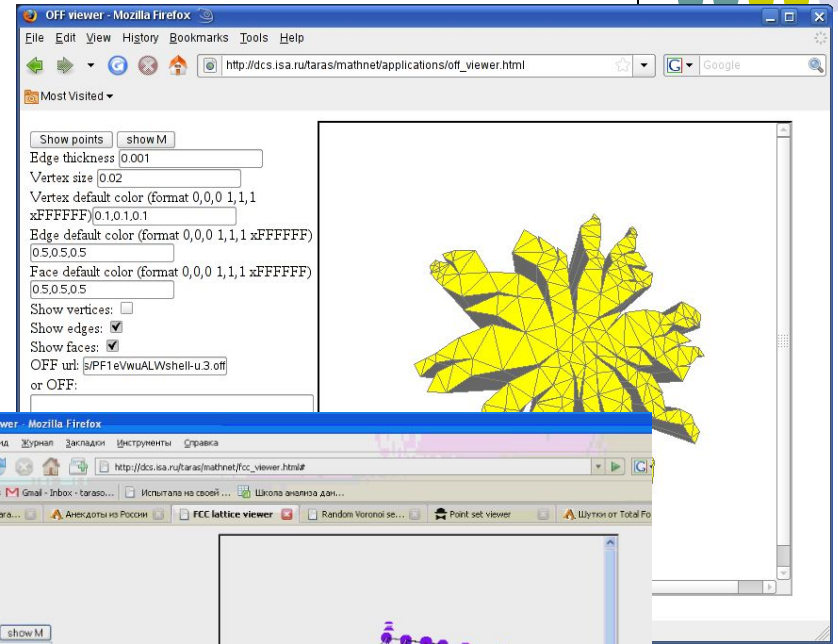
Преимущества MathCloud

- Использование программ без их установки
- Простая возможность объединения различных существующих математических пакетов
- Возможность включения в среду программ, написанных пользователем
- Публикация результатов своей работы: как различных математических конструкций, так и специализированных программ
- Возможность предоставлять гибкий доступ к своим программам, в частности, в формате аренды приложений
- Интеграция с существующими в Интернете математическими ресурсами

Примеры сервисов



- Генерация и визуализация многогранников с заданными свойствами
- Плотнейшая упаковка пространства
- Построение разбиения Вороного

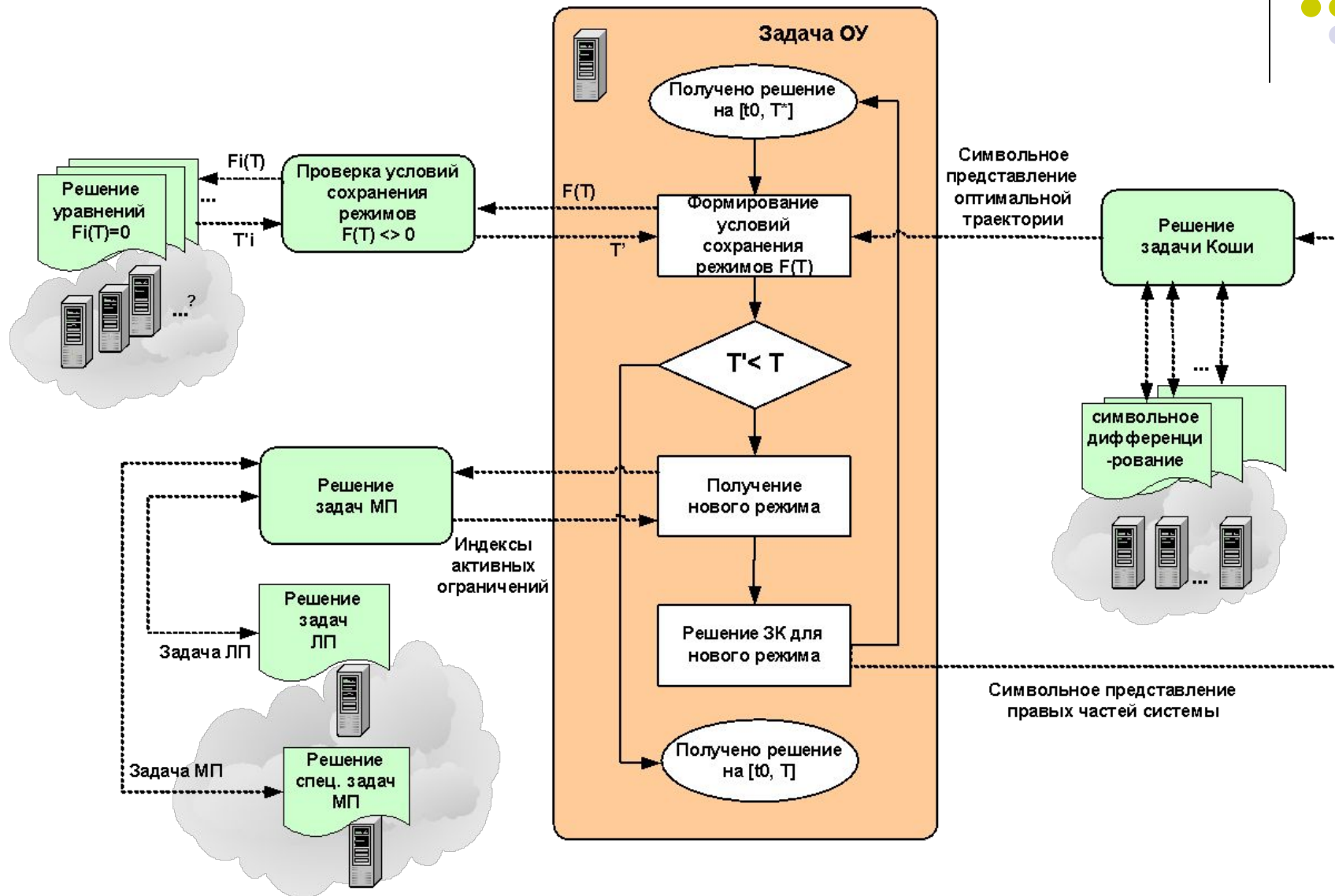


Приложения



- Задачи, декомпозируемые на несколько типовых подзадач с хорошей программно-алгоритмической проработкой (существуют соотв. ресурсы)
- В общем случае, различные виды подзадач
- Требуется
 - Координация ресурсов
 - Интерактивное управление процессом вычислений
- Примеры
 - Интеграция математических ресурсов (*совместно с МИ РАН*)
 - Распределенное имитационное моделирование (*совместно с ВЦ РАН*)
 - Геоинформационные приложения (*программа “Электронная Земля”*)
 - Решение задач конечномерной оптимизации

Задача оптимального управления: Схема распределенного решения



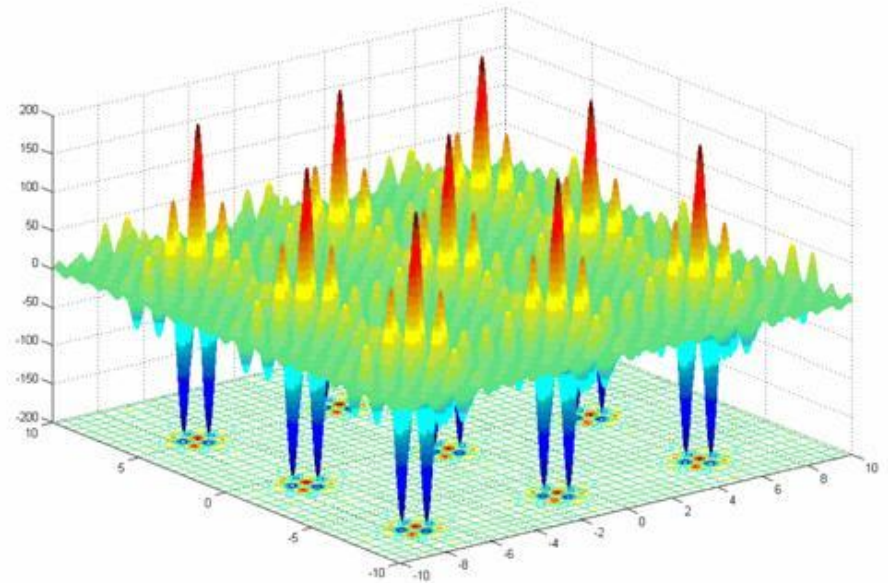
Задачи глобальной оптимизации



$$f(x) \rightarrow \min, x \in G \subseteq \mathbb{R}^n$$

Основные типы:

- непрерывная оптимизация;
- дискретная оптимизация;
- смешанные задачи.



Возможные постановки (для непрерывных задач):

- найти глобальный минимум,
- найти все локальные минимумы,
- найти все стационарные точки.

Особенности методов решения задач ГО

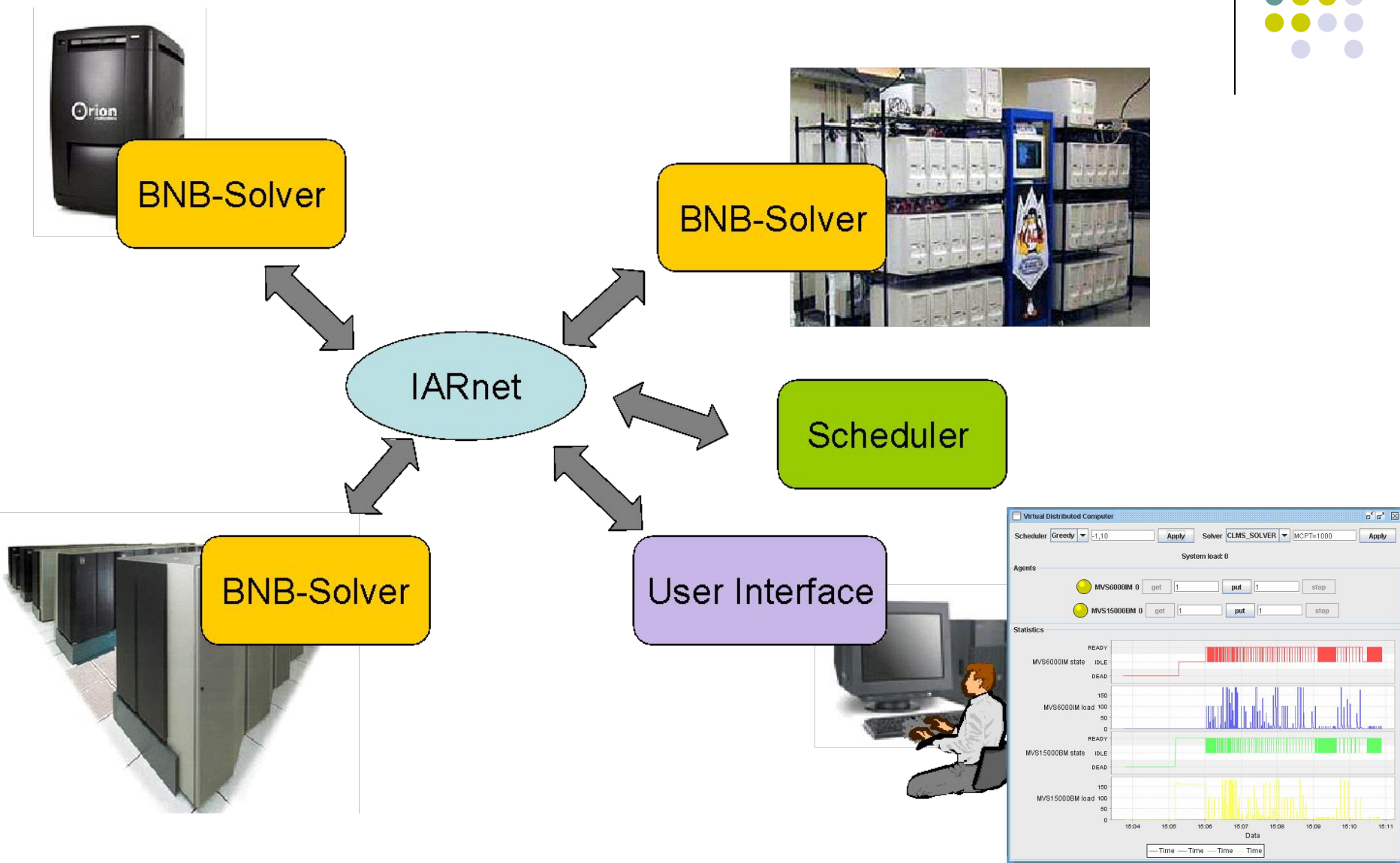


- Много общего в методах решения для различных задач оптимизации
- Высокая трудоемкость
- Декомпозиционная структура методов решения



Необходимость разработки универсальных программных решений, обеспечивающих высокую производительность

Программный комплекс BNB-Grid



Поиск конфигурации молекулярного кластера с минимальной энергией взаимодействия



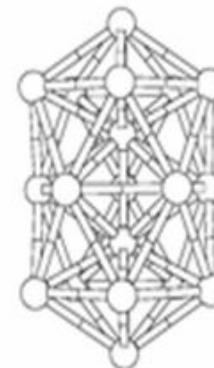
$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n v\left(\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\|\right) \rightarrow \min$$

$\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\|$ - расстояние между атомами i и j

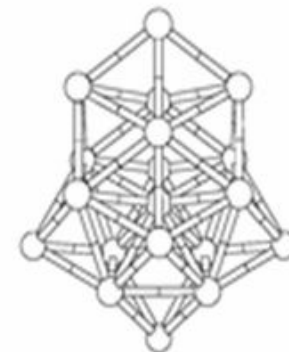
$v(r)$ - потенциал парного взаимодействия атомов

$v_{LJ}(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$ - потенциал Леннарда-Джонса

$v_M(r; \rho) = e^{\rho(1-r)} (e^{\rho(1-r)} - 2)$ - потенциал Морзе



Mor(3)₁₉

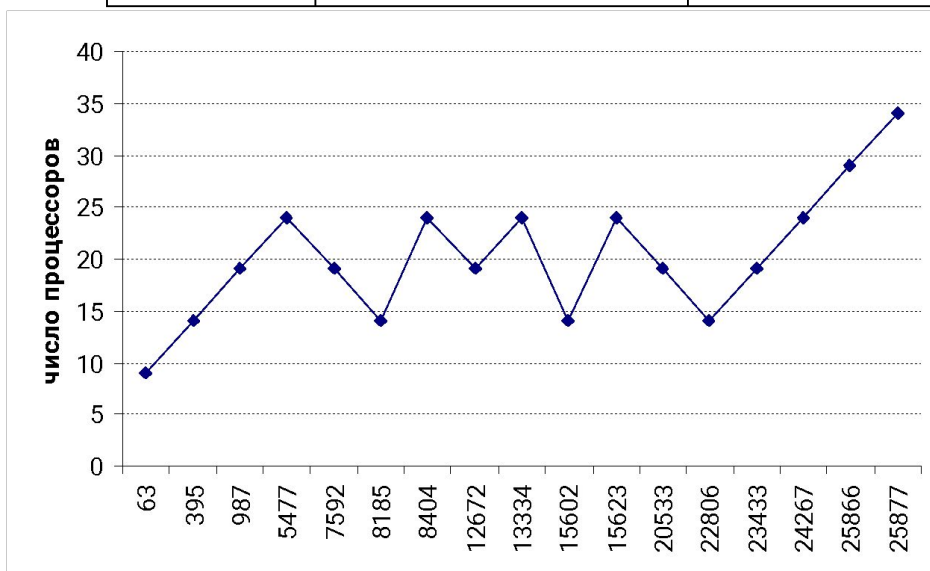


Mor(14)₁₉

Вычислительный эксперимент



| Название | Архитектура процессора | Число процессоров | Местоположение | Наличие системы пакетной обработки |
|----------|----------------------------|-------------------|---|------------------------------------|
| MVS50K | Clovertown (4 core), 3 GHz | 940 | Межведомственный суперкомпьютерный центр (Москва) | + |
| MVS6K | Itanium II, 2.2 GHz | 256 | Вычислительный центр РАН (Москва) | + |
| TSTU | Pentium IV, 3.2 GHz | 8 | Тамбовский Государственный Университет (Тамбов) | - |
| DCS | Pentium IV, 3.2GHz | 1 | Институт системного анализа РАН (Москва) | - |

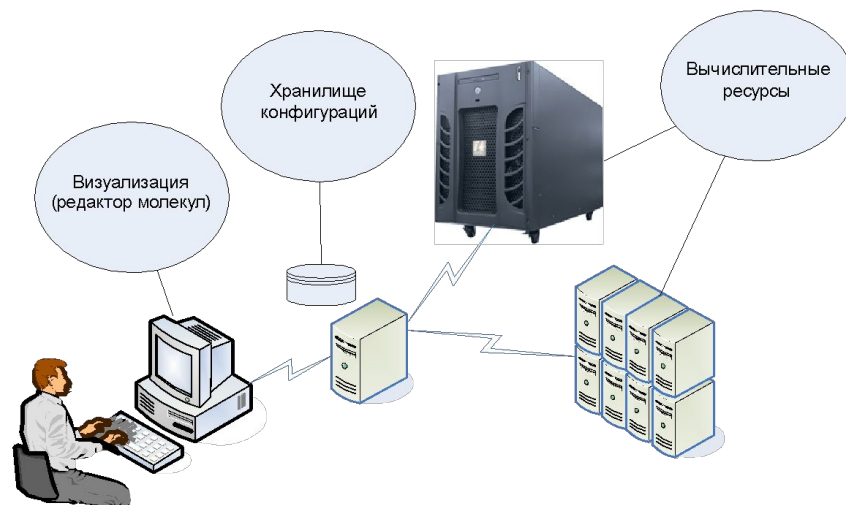
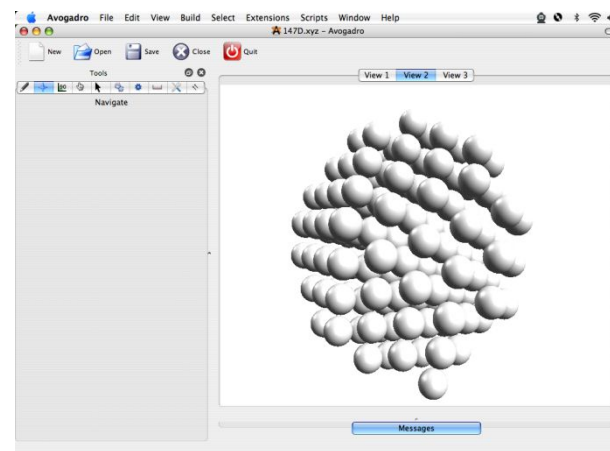


Число процессоров, задействованных в вычислениях, изменялось в процессе расчетов, т.к. компоненты, запущенные на МК с пакетной обработкой работали периодически завершались и запускались вновь.

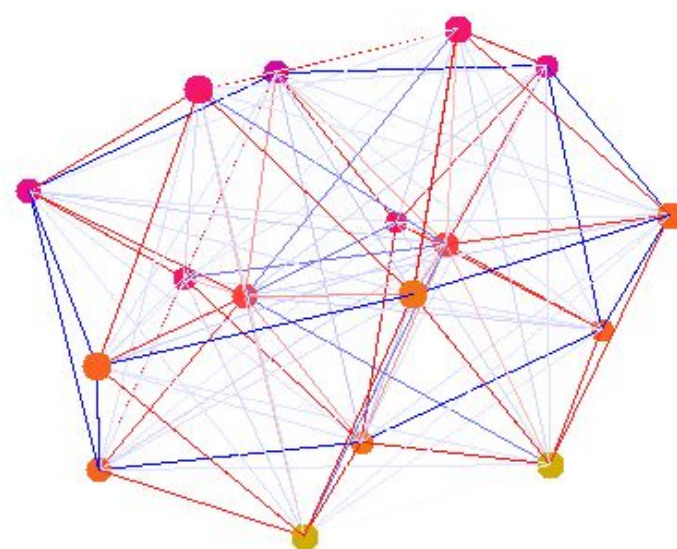
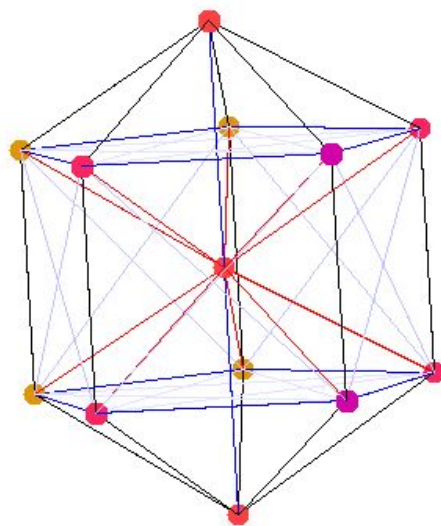
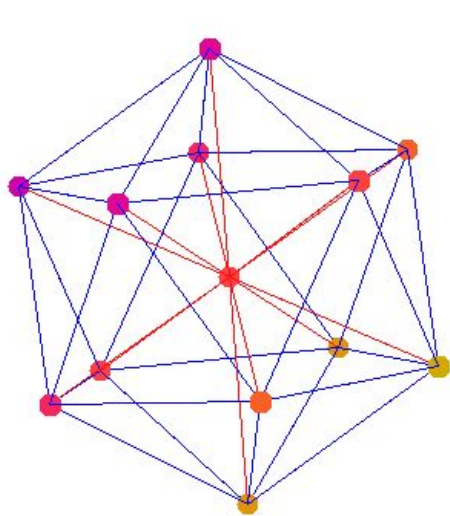
Среда для исследования геометрических свойств оптимальных конфигураций атомов

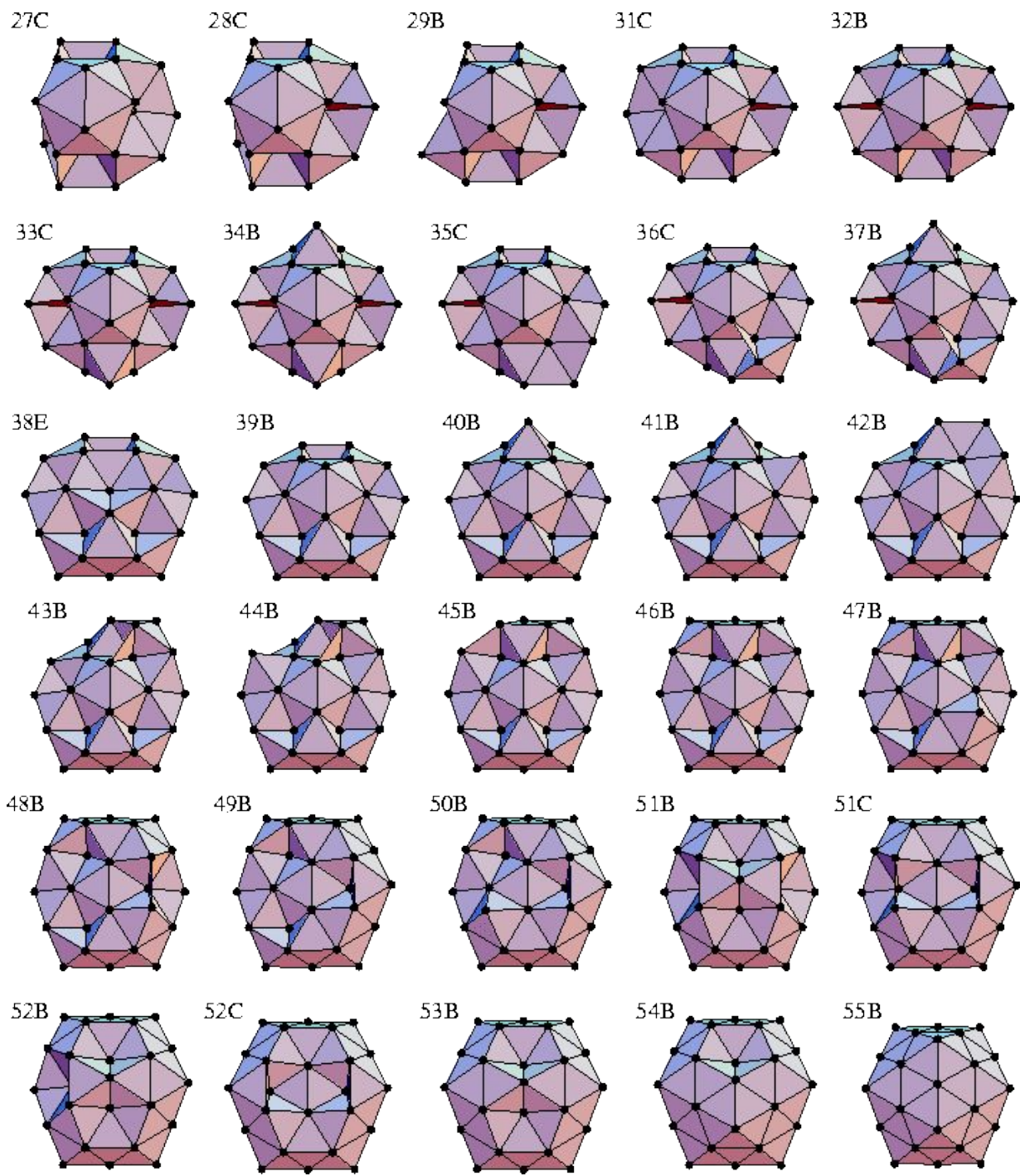


- возможность удобного ввода исходных данных задачи
- поиск конфигурации молекулы с минимальной энергией
- интерактивное исследование полученной конфигурации,
- внесение изменений в ее структуру с последующим применением численных методов для анализа полученной конфигурации, и ее деформации с целью минимизации энергии взаимодействия.



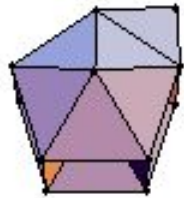
Многогранники и геометрическая структура молекулярного кластера



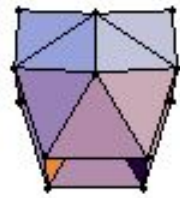




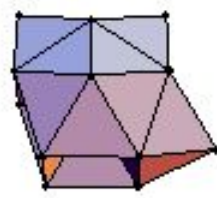
14C



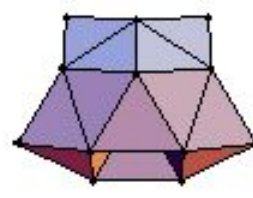
15C



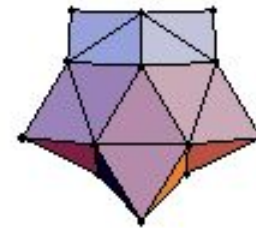
16C



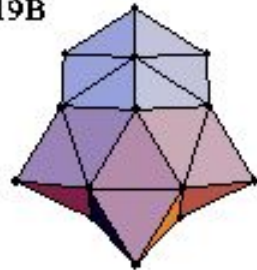
17E



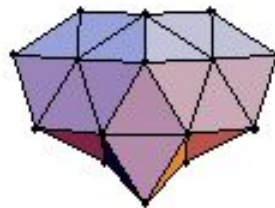
18C



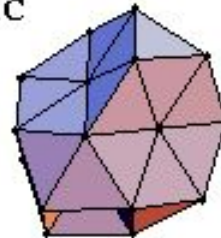
19B



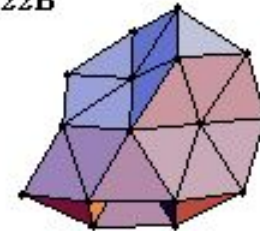
20C



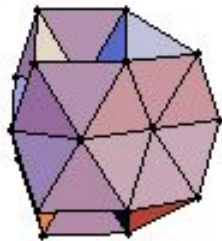
21C



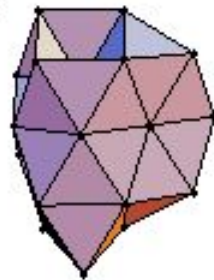
22B



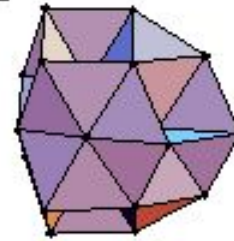
23C



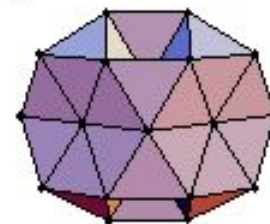
24B



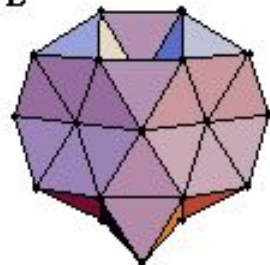
25B



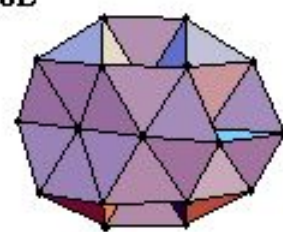
26B



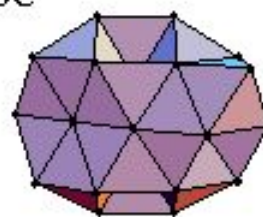
27D



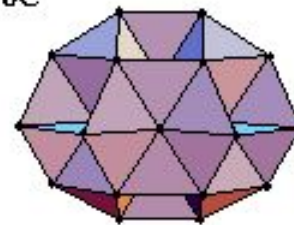
28D

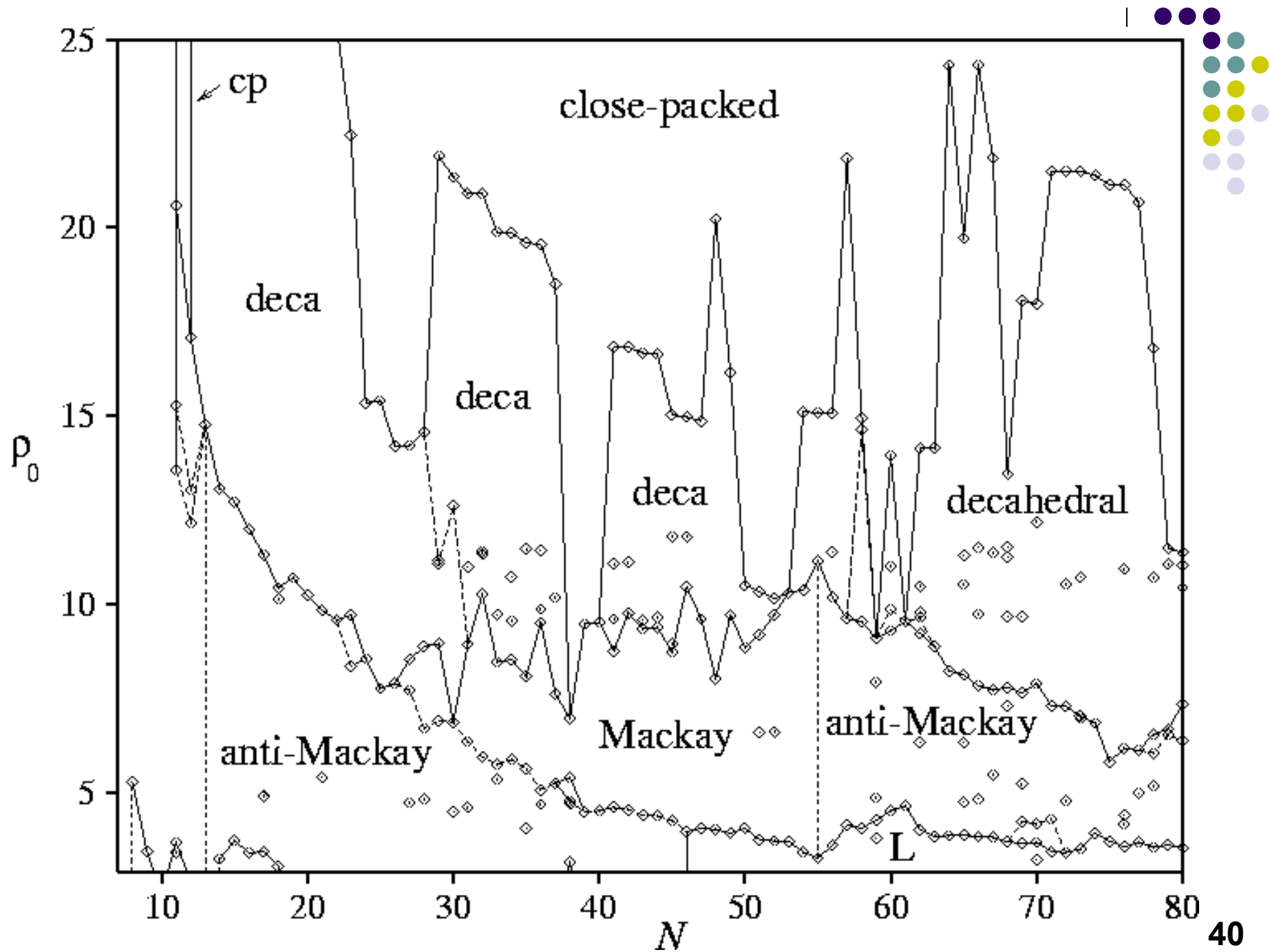


29C



30C







- Большое прикладное значение имеют упаковки, состоящие из неоднородных элементов
- Плотнейшая упаковка из шаров с разными радиусами



Система Лоренца

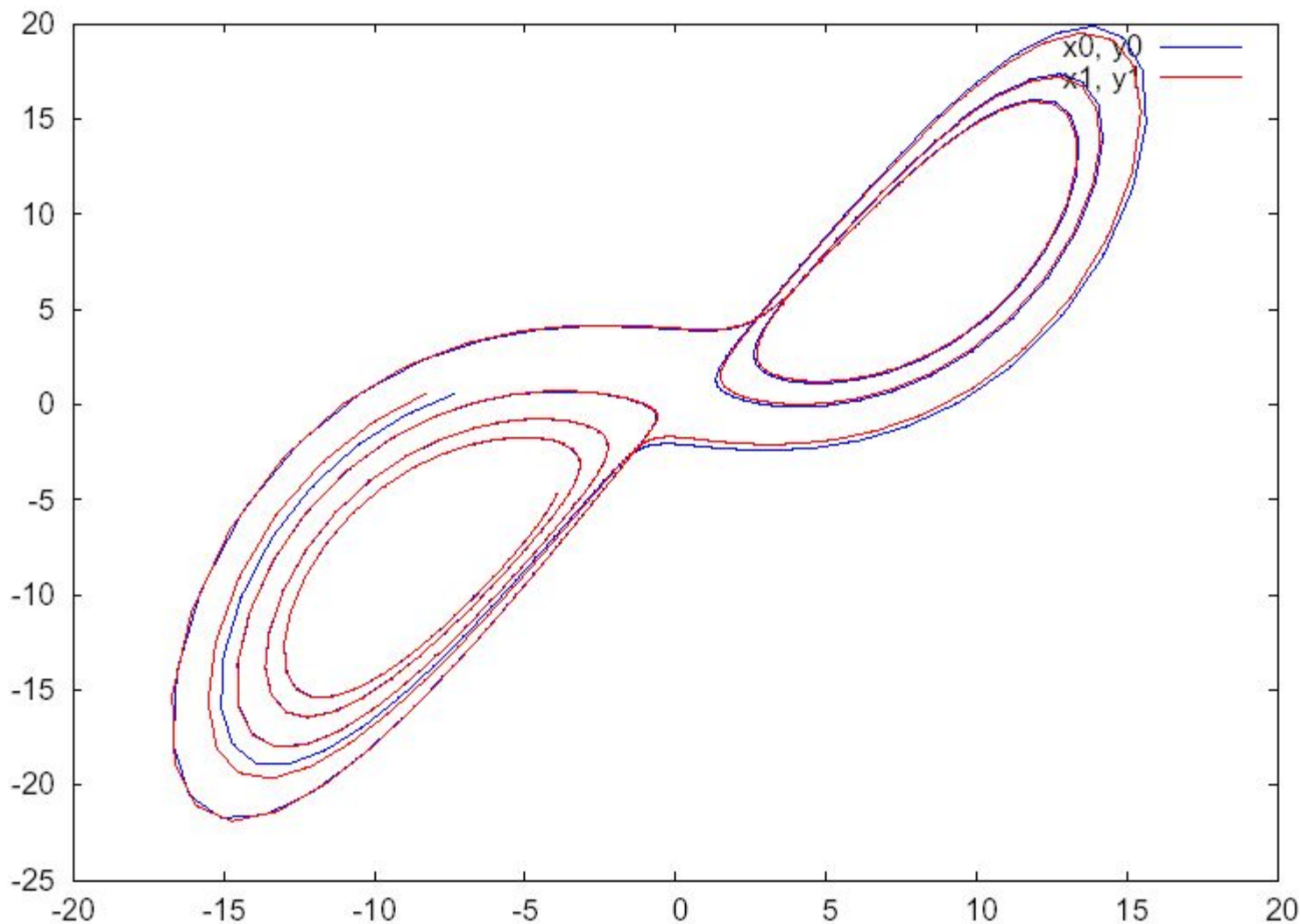
$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= \sigma(x_2 - x_1) \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1(\rho - x_3) - x_2 \\ \frac{dx_3}{dt} &= x_1x_2 - \beta x_3,\end{aligned}$$

$$\sigma = 10 \quad \beta = \frac{8}{3}$$

$$x(t) = x_0 + x^{(1)}(t_0)(t - t_0) + \dots + x^{(i)}(t_0)\frac{(t - t_0)^i}{i!} + \dots + x^{(s)}(t_0)\frac{(t - t_0)^s}{s!} + H(x_0, t_0, T, s),$$

где $x^{(i)}(t_0)$ – i -ая производная функции $x(t)$ взятая в точке t_0 , а $H(x_0, t_0, T, s)$ – остаточный член.

Траектории, исходящие из двух близких начальных точек



Распределенное имитационное моделирование



- Декомпозиция модели на составные блоки
 - Блоки являются алгоритмическими ресурсами
- Размещение блоков в распределенной среде
 - Производительность и масштабируемость
 - Несовместимые требования к ресурсам
 - Различные разработчики и владельцы
- Интеграция блоков модели в рамках имитационного эксперимента

Международные исследовательские проекты по программе ЕС IST



- **EDISON (European Distributed Interactive Simulation Over Network), 1998-2001, <http://cec.to.alespazio.it/EDISON/>**
Система интеграции различных "отраслевых" имитационных моделей
Основное ППО (промежуточное ПО, middleware) - HLA (High Level Architecture).
- **DSE (Distributed System Engineering), 2000-2002, <http://cec.to.alespazio.it/DSE/>**
Система поддержки распределенной работы над проектами, на протяжении всего "жизненного цикла".
Основное ППО - CORBA (Common Object Request Broker Arch.).
- **GeneSyS (Generic System Supervision), 2002-2004, <http://genesys.sztaki.hu/>**
Система и стандарт мониторинга состояния аппаратных и программных компонент распределенных вычислительных систем
Основное ППО - Web-сервисы.

Публикации:

1. **Spacecraft Operator Training Using Infrastructure Developed in EDISON Project, Proc. "Sim. Interop. Workshop", Orlando, 2000**
2. **Cooperative Environments for Distributed Systems Engineering. The Distributed Systems Environment Report. Lecture Notes in Computer Science, 2236 Springer 2001**

Проекты для ESA (Европейское Космическое Агентство)



- **DIS–RVM (Distributed Interactive Simulation for Rendez-Vous Mission), 1998-2000, www.estec.esa.nl/wmwww/EMM/activities/stds/dis/dis.html**

Распределенный симулятор процесса причаливания транспортного корабля к международной космической станции

Стандарты - DIS (Distributed Interactive Simulation), HLA

- **ADL-FS (Advance Distributive Learning: Feasibility Study for ESA Programmes), 2001, <http://www.estec.esa.nl/wmwww/EMM/activities/stds/adl/>**

Распределенная система обучения наземного персонала по использованию элемента оборудования на европейском модуле "Columbus". Включает упражнения с распределенным симулятором.

Стандарты - ADL SCORM (Sharable Content Object Model), CORBA

Публикации:

1. "Distributed Interactive Simulation of Rendezvous and Docking with International Space Station". Proc. of the '97 Fall Sim. Interop. Workshop, Orlando, Fla, US, 8-12 Sept. 1997.
2. "Remote Intervention in Automatic Onboard GNC Systems". Proc. of 3rd International Conference on Spacecraft GNC Systems, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 26-29 November 1996, ESA SP-381 (February 1997).
3. "ATV Proximity Operations Validation and Rehearsal Using Distributed Simulation". Proc. of AIAA ISS Service Vehicles Conference, Houston, Tx, USA, April 1999.
4. "Distributed Learning with Online Simulations for ISS Payload Training". 7th International Workshop on Simulation for European Space Programmes, SESP 2002, 12-14 November 2002, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.

Академические проекты



- Спроектирована и запущена в эксплуатацию автономная система, обеспечивающая доступ в Интернет для группы институтов РАН.

- Создана ЛВС ОИТВС РАН

<http://oivta.isa.ru/>

- ДИАР

В рамках проекта «Информатизация РАН» запущена в эксплуатацию система доступа к удаленным информационно-алгоритмическим ресурсам «ДИАР».

<http://www.isa.ru/diar;>

http://uis.isir.ras.ru/win/htm/scientific_activity.html?p=5p6p4

Публикации:

1. WWW-сервер ОИВТА РАН, Информационные технологии и вычислительные системы, № 2, 1999
2. “Современные технологии построения распределенных программных систем”, Сборник трудов ИСА РАН, М.: Эдиториал УРСС, 2001.

Эколого-социально-экономическая имитационная модель

