

ИНЖЕНЕРНЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ПОРТАЛ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

*А.М. Гудов, д.т.н., доц., С.Ю. Завозкин, к.т.н., доц., И.Ю. Сотников, аспирант
Кемеровский государственный университет,
650000, г. Кемерово, Красная 6, тел. 89045763392
E-mail: good@kemsu.ru, shade@kemsu.ru, mxtfonlife@mail.ru*

Аннотация: В данной работе приводится описание, архитектура и сервисы инженерного вычислительного портала, представляющего собой комплексное решение для организации доступа к высокопроизводительным вычислительным ресурсам, проведения вычислительных экспериментов, решения задач экологической направленности, обучения параллельным технологиям и решения вычислительных задач.

Abstract: This paper describes architecture and services of the Engineering and Computing Portal, which is considered to be a complex solution that provides access to high-performance computing resources, enables to carry out computational experiments, addressing environmental challenges, teach parallel technologies.

Техногенная среда, созданная человеком, несет в себе множество потенциальных и реальных угроз для окружающей среды и для самих людей. Необходимо изучение роли и последствий воздействия техногенных факторов на экологию. К примеру, для Кузбасса одной из наиболее значимых проблем является негативное влияние на экологию региона предприятий угольной промышленности. Их развитие связано с увеличением водопотребления, как для добычи, так и для последующего обогащения угля. Соответственно увеличивается количество сточных вод на предприятиях угольной промышленности, которые являются серьезным источником загрязнения водных ресурсов. В настоящее время более 50% угля добывается открытым способом, что наносит значительный ущерб окружающей природной среде и локальным экосистемам, приводит к безвозвратной утрате высокоплодородных почв, водно-болотных угодий и мест обитания растений и животных.

В связи с этим важными задачами являются: оценка текущего уровня техногенной безопасности объекта, прогнозирование возникновения угроз и оценка эффективности способов их устранения. Одним из решений такого рода задач является использование специализированного программного и аппаратного обеспечения. Зачастую, приходится иметь дело сразу с целым рядом программ, разными способами взаимодействия с ними, форматами входных и выходных данных. Не всегда такое программное обеспечение является открытым и общедоступным. Коммерческие продукты обладают высокой стоимостью лицензии на его использование. Кроме того, проведение вычислительных экспериментов требовательно к аппаратным вычислительным возможностям, вследствие чего появляется необходимость использования высокопроизводительных вычислительных ресурсов и технологий.

Снижение затрат на проведения вычислительных экспериментов может быть достигнуто за счет использования модели облачных вычислений, при которой оплата производится только за аренду программного обеспечения и используемых вычислительных ресурсов. В соответствии с данной моделью в Кемеровском государственной университете разрабатывается Инженерный вычислительный портал, предоставляющий набор сервисов для решения наукоемких задач, в том числе связанных с экологическими проблемами [1]. На данный момент, организован доступ к следующим сервисам:

- Сервис «Onlide» [15] для разработки собственных последовательных и параллельных программ. Основными функциями системы являются: создание многофайловых программных проектов; загрузка имеющегося исходного кода и скачивание созданного с помощью системы; компиляция и запуск на предлагаемых вычислительных ресурсах, в т.ч. высокопроизводительных; сохранение результатов работы программы на рабочую машину пользователя. Включает также сервис отладки параллельных программ, базирующийся на подходе автоматизированного контроля корректности. Для пользователей предусмотрена возможность самостоятельного определения ситуаций в MPI-программе, которые должны быть обнаружены системой.
- Сервис для управления хранилищем файлов пользователя. Результаты вычислений, выполнения пользовательских программ и программные проекты хранятся в выделяемых для каждого пользователя хранилищах.
- Сервис для решения задачи о затоплении шахты, использующий многопараметрическую математическую модель, которая позволяет исследовать процессы течения и распространения, оседа-

ния нерастворенных примесей, с возможностью изменения формы выработки из-за накопления осадка [14]. Сервис предоставляет функции для проведения численных экспериментов с возможными экологическими последствиями использования затопленных подземных горных выработок как очистные сооружения, а также для визуализации получаемых результатов.

- Сервис «Виртуальный лабораторный практикум» [15], обеспечивающий предоставление учебных материалов по теории и технологиям высокопроизводительных вычислений, а также проведение виртуальных лабораторных практикумов по параллельному программированию.

Архитектура.

В основу портала положена сервис-ориентированная архитектура (COA), используемая для построения распределенных систем, предоставляющих свои функциональные возможности в виде сервисов для других систем или других сервисов [5]. COA упрощает интеграцию новых компонентов для расширения возможностей портала. В качестве реализации COA используется технология Web-сервисов [10] базирующаяся на таких стандартах, как: WSDL [12,13] – используется для описания Web-сервиса, SOAP [6,7] – представляет формат сообщения для взаимодействия с Web-сервисом и BPEL [11] – используется для описания бизнес-процессов (оркестровки). Бизнес-процесс представляет собой высокоуровневый Web-сервис, комбинирующий возможности уже существующих.

На рисунке 1 представлена архитектура портала. Такие компоненты, как *Liferay Portlet*, *Apache Axis2*, *Apache ODE* и *LDAP Server*, будут рассмотрены подробнее в следующем разделе. Для остальных компонентов ниже приведено краткое описание:

- *Client System* представляет любую внешнюю систему-клиента, которая взаимодействует с Web-сервисами/бизнес-процессами портала и/или с LDAP-каталогом.
- *User Client Workstation* представляет рабочую машину пользователя. Например, персональный компьютер.
- *Web-browser* представляет web-браузер, установленный на рабочей машине клиента, с помощью которого происходит работа с Web-интерфейсом портала.
- *Portal Server* компьютер-сервер, на котором развернут портал.
- *Nginx* используется как прокси-сервер, передавая запросы другим компонентам (*Apache Tomcat 7*, *Tornado* и *PHP-FPM*). Исключение составляют запросы на получение статических файлов, таких как изображения, JavaScript-файлы и пр., т.к. *Nginx* оптимизирован для такого рода запросов.
- *Tornado* представляет Web-сервер, на котором работает сервис онлайн разработки программ «*Onlide*».
- *PHP-FPM* представляет собой менеджер процессов FastCGI, используемый для генерации динамического PHP-содержимого сервиса «*Виртуальный лабораторный практикум*». Используется, ввиду отсутствия в *Nginx* нативной поддержки генерации такого рода содержимого.
- *Apache Tomcat 7* представляет сервер Web-приложений, реализующий поддержку спецификаций сервлетов. На нем разворачиваются *Liferay*, *Axis2* и *ODE*.
- *AppGenPortlet* представляет портлет для генерации Web-интерфейса сервисов портала. *H*
- *PCAdminPortlet* представляет административный портлет для управления доступом к вычислительным ресурсам и учета использованных ресурсов.
- *AuthHandler* отвечает за проверку доступа пользователей к Web-сервисам и бизнес-процессам.
- Артефакт *HPCWebService* представляет Web-сервис для взаимодействия с высокопроизводительными вычислительными ресурсам.
- *StorageWebService* представляет Web-сервис для взаимодействия с хранилищем файлов пользователей.
- *MineFloodingWebService* представляет Web-сервис для взаимодействия с программой решения задачи о затоплении шахты.
- *VTKUtilsWebService* представляет Web-сервис для работы с файлами в формате VTK.

Используемые решения.

Информация о пользователях портала, Web-сервисах, бизнес-процессах, вычислительных ресурсах хранится в LDAP-каталоге [9]. В качестве реализации выбрано открытое решение OpenLDAP.

Для интеграции Web-сервисного подхода использовались решения Apache Axis2 [2,8] и Apache ODE. Apache Axis2 представляет систему интеграции и управления жизненным циклом Web-сервисов. Основные возможности данной системы:

Сервисы

Далее представлены описания реализованных на данный момент сервисов.

1. Сервис для управления хранилищем файлов пользователей.

Для каждого зарегистрированного пользователя выделяется свой каталог для хранения файлов (результаты, исходный код программ, изображения и пр.). Для взаимодействия пользователей со своим хранилищем через Web-интерфейс портала, реализован сервис, интерфейс которого представлен на рисунке 2.

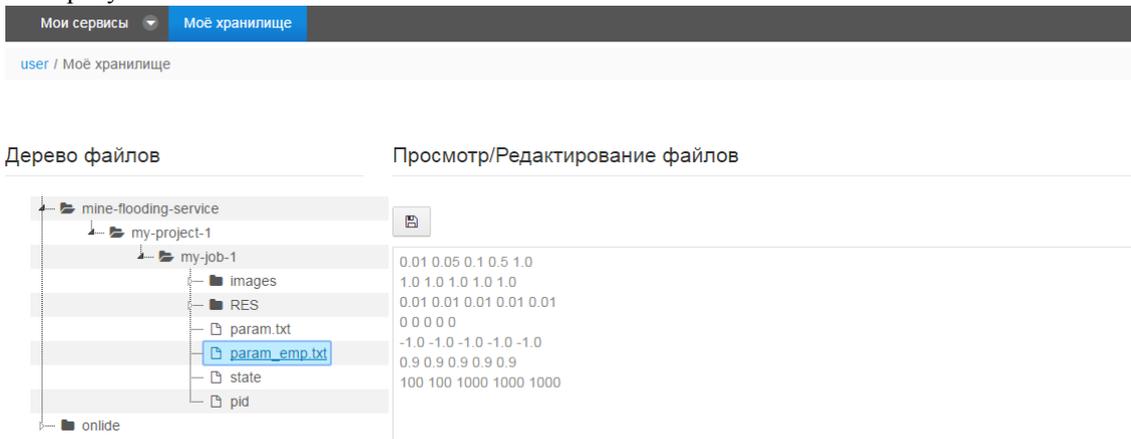


Рис. 2. Сервис для взаимодействия пользователя с хранилищем

2. Сервис для решения задачи о затоплении шахты.

Для разработанной многопараметрической модели [14], используемой для решения задачи о затоплении шахты, реализован соответствующий сервис портала. Работа с ним состоит из следующих этапов:

1. Создание нового проекта или открытие ранее созданного;
2. Создание нового задания или выбор уже имеющегося;
3. Настройка параметров модели (рисунок 3), запуск задания и ожидание его завершения;
4. Запуск генерации изображений по полученным результатам и ожидание завершения;
5. Визуализация результатов (рисунок 4).

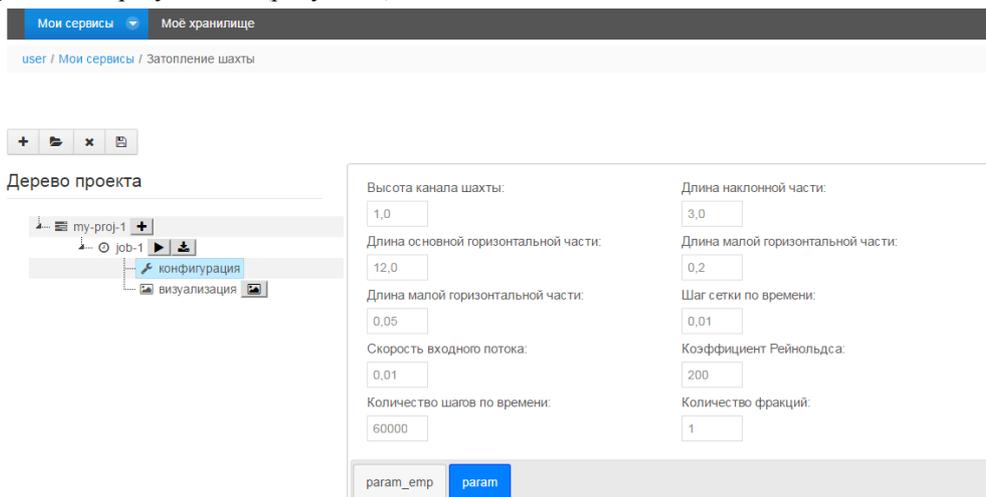


Рис. 3. Сервис для решения задачи о затопления шахты в режиме настройки параметров модели

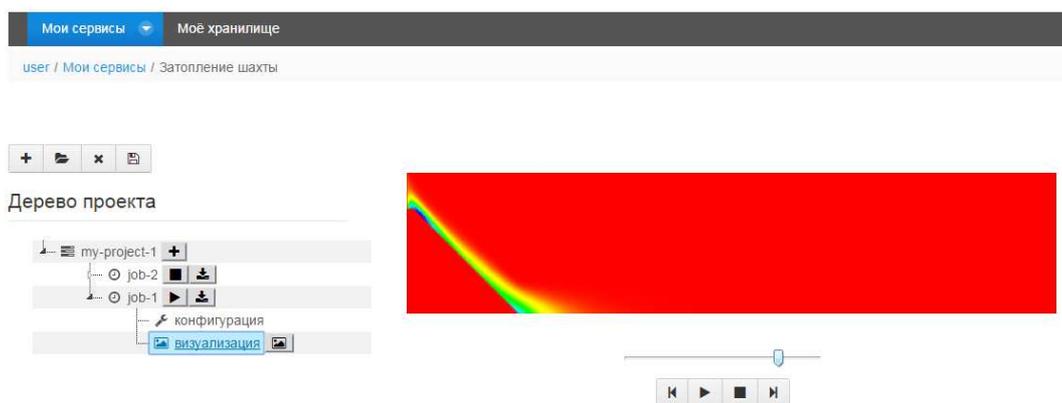


Рис. 4. Сервис для решения задачи о затоплении шахты в режиме визуализации

Во время запуска задания и процесса визуализации результатов пользователь может завершить работу с порталом и вернуться к сервису позже. Результаты решения могут быть закачены с сервера через сам сервис, либо через ранее представленный сервис для взаимодействия с хранилищем.

1. Сервис «Onlide».

Данный сервис реализован для удаленной разработки параллельных и последовательных программ. Далее представлен список предоставляемых функций:

1. Создание программных проектов, состоящих из множества исходных файлов:

- Проекты могут быть разного типа;
- Для разного типа проектов можно установить различные настройки, такие как компилятор, ключи компиляции, подключаемые библиотеки и пр.;
- Проекты могут создаваться из шаблонов, с уже определенным типом, настройками, файлами и пр.;
- Проекты могут быть сохранены на удаленном вычислительном ресурсе или клиентской машине, загружены с них.

2. Редактирование проекта:

- Загрузка файлов с локальной рабочей машины пользователя;
- Скачивание файлов проекта на локальную машину пользователя;
- Создание новых файлов;
- Удаление файлов, имеющих в проекте;
- Просмотр и редактирование файлов проекта. Для файлов разных расширений, доступны разные редакторы и способы просмотра.

3. Компиляция и запуск проекта;

4. Использование и создание плагинов для наращивания функциональных возможностей среды разработки.

Заключение

Разработанный инженерный вычислительный портал внедрен в Кемеровском государственном университете. Он используется для проведения вычислительных экспериментов, обучения теории и технологиям высокопроизводительных вычислений. Данное комплексное решение доступно для широкого круга инженеров, студентов, аспирантов и научных работников. Сервисы портала, а также вычислительные ресурсы предоставляются пользователям на правах аренды.

В дальнейшем планируется расширить список вычислительных сервисов. Начата работа по интеграции в виде сервисов пакета PHOENICS.

Литература.

1. Goudov, A., Perminov, V., Filatov, Y., Un, L.H., Zavozkin, S., Grigorieva, I., Sotnikov, I. High technology software web-Tools to solve environmental problems of coal region (2017) CEUR Workshop Proceedings, 1839, pp. 61-73.
2. Jayasinghe D. Apache Axis2 Web Services / D. Jayasinghe, A. Azeez; Packt Publishing; 2 edition, 2011. – 308 pages
3. JSR 168: Portlet Specification 1.0 [Электронный ресурс] // (<https://www.jsp.org/en/jsr/detail?id=168>)
4. JSR 286: Portlet Specification 2.0 [Электронный ресурс] // (<https://www.jsp.org/en/jsr/detail?id=286>)

5. Patterns - Service-Oriented Architecture and Web Services [Электронный ресурс] // (<http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg246303.pdf>).
6. Simple Object Access Protocol (SOAP) 1.1 [Электронный ресурс] // (<https://www.w3.org/TR/2000/NOTE-SOAP-20000508/>)
7. SOAP Version 1.2 Part 1: Messaging Framework (Second Edition) [Электронный ресурс] // (<https://www.w3.org/TR/soap12/>)
8. Tong K. Developing Web Services with Apache CXF and Axis2 / Tong K. – TipTec Development, 2010. JSR 168: Portlet Specification 1.0 [Электронный ресурс] // (<https://www.jcp.org/en/jsr/detail?id=168>)
9. Understanding LDAP Design and Implementation [Электронный ресурс] // (<http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg244986.pdf>)
10. W3C. Web Service Architecture [Электронный ресурс] // (<http://www.w3.org/TR/ws-arch>)
11. Web Services Business Process Execution Language Version 2.0 [Электронный ресурс] // (<http://docs.oasis-open.org/wsbpel/2.0/OS/wsbpel-v2.0-OS.html>)
12. Web Services Description Language (WSDL) 1.1 [Электронный ресурс] // (<https://www.w3.org/TR/wSDL/>)
13. Web Services Description Language (WSDL) Version 2.0 Part 1: Core Language [Электронный ресурс] // (<https://www.w3.org/TR/wsd20/>)
14. А.М. Гудов, С.Ю. Завозкин, И.В. Григорьева, Л.В. Бондарева, В.А. Перминов Научно-информационный Web-инструментарий для решения задач экологии угольного региона // Материалы XIV Международной конференции имени А. Ф. Терпугова “Информационные технологии и математическое моделирование (ИТММ–2015)”, Томск : Изд-во Том.ун-та, 2015. – Ч. 2. – С. 120-124
15. Сотников И. Ю. Web-система Paralarea для электронного обучения и разработки программ в области высокопроизводительных вычислений // Материалы XVI Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию. – г. Красноярск, Россия. 28-30 октября 2015 г. - Новосибирск: ИВТ СО РАН, 2015. - С. 91-92.