



"ОБЛАЧНАЯ" ПЛАТФОРМА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ НИОКР В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

В.Мизгулин, С.Гольдштейн, Р.Кадушников
mvv@siams.com

В настоящее время в ИТ-индустрии наблюдаются серьезные изменения, связанные с ростом популярности "облачных" вычислений. К "облачным" вычислениям относят технологии распределенной обработки данных, в которых компьютерные ресурсы и мощности предоставляются пользователю как интернет-сервис. Предлагаемые решения позволяют сократить затраты на обслуживание аппаратного и программного обеспечения за счет перехода на удаленные рабочие места, терминалы и веб-интерфейсы [1].

В Интернете представлено значительное число публикаций по адаптации "облачных" вычислений к различным прикладным областям [2]. В свете прогнозируемого перехода на использование программно-аппаратных комплексов в качестве некоторого сервиса или услуги целесообразно срочно проработать концепцию взаимодействия заказчиков и поставщиков услуг подобного рода. В статье представлены результаты проектирования и разработки платформы как сервиса (Platform-as-a-Service)

для проведения НИОКР с использованием "облачных" вычислений (R&D Paas).

Предпосылки создания платформы как сервиса для проведения НИОКР

Основные аргументы в пользу создания R&D Paas.

1. Большинство экспериментов, выполняемых студентами и аспирантами в ходе обучения, теряется на жестких дисках в компьютерных классах, попадает под периодическое форматирование и уничтожается, а база результатов экспериментальных

исследований, представленная в бумажных отчетах, перерабатывается крайне редко.

2. При обилии информационных ресурсов, ориентированных на молодых исследователей, существует хаос на уровне интернет-сообщества, научных коллективов вузов и научно-образовательных центров (НОЦ). В результате, несмотря на стабильное государственное финансирование в рамках федеральных целевых программ (ФЦП), наблюдается низкая эффективность НИОКР. Поэтому основную задачу авторы видят

ПЛАТФОРМА КАК СЕРВИС ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ НИОКР



Рис.1. Системно-аспектная схема R&D Paas

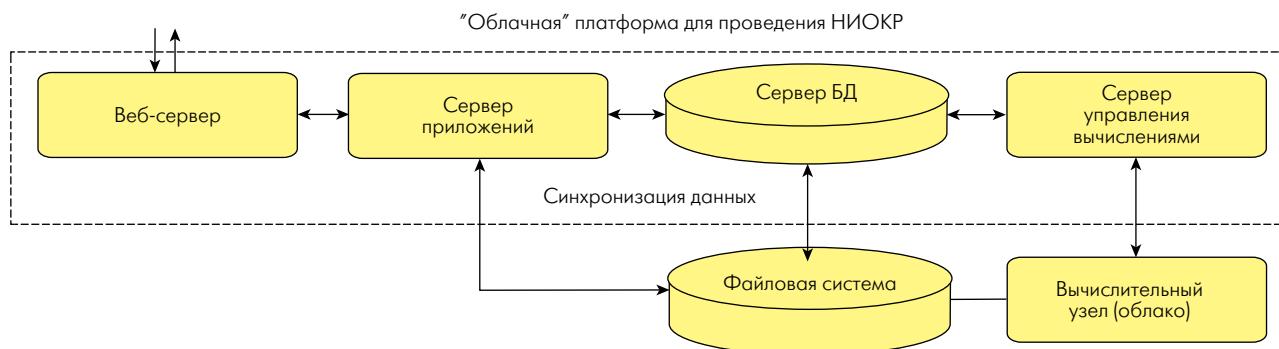


Рис.2. Архитектура верхнего уровня R&D Paas

в создании системной платформы для проведения НИОКР, учитывающей сложившиеся социально-экономические, технологические и информационные аспекты.

Предпосылками создания интерфейсов для проведения НИОКР с помощью разрабатываемой платформы явились результаты работ в рамках ФЦП "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы" по Государственному контракту № 02.523.11.3014 "Многомасштабное моделирование и визуальное проектирование наноструктурированных материалов" по созданию платформы для управления задачами, передачи, хранения и визуализации таких данных [3-5]. Наряду с другими модулями комплекса платформа прошла приемочные испытания в Центре фотохимии РАН и явились инженерным прототипом R&D Paas. При проектировании пользовательских интерфейсов использовался опыт разработки ряда веб-приложений для виртуальных лабораторных исследований, а при создании плат-

формы – подходы, реализованные в веб-ориентированной системе анализа изображений Simagis Live.

Концептуальным прототипом разрабатываемой платформы для проведения НИОКР с использованием "облачных" вычислений можно считать Интернет-портал по нанотехнологиям nanoHUB.org.

Основные аспекты платформы как сервиса для проведения НИОКР

Платформа как сервис для проведения НИОКР с использованием "облачных" вычислений рассматривается в социально-экономическом, технологическом и информационном аспектах и включает 12 систем. На рис.1 представлена системно-аспектная схема R&D Paas. Разработанные и доступные пользователям блоки платформы отмечены символом "*".

В социально-экономическом аспекте платформа, по-видимому, не создаст общественного резонанса, если не предоставит привычных профайлов и социальных сервисов. При разработке потребуется тесная интеграция с бизнесом, возможная

лишь при надежно функционирующей электронной платежной системе. Иными словами, социально-экономическая ценность R&D Paas возникнет только в том случае, если пользователи платформы получат персональные веб-страницы, с помощью которых смогут продавать свои услуги и разработки по определенной специализации. Эти веб-страницы должны существовать в рамках типовой профориентированной социальной сети. При этом необходимы механизм размещения прайсов на веб-страницах и действующие механизмы оплаты по ним.

В технологическом аспекте необходимо учесть постепенный переход на использование программного и аппаратного обеспечения с помощью терминалов и веб-приложений. Для веб-разработки следует выбрать технологию "облачных" вычислений, веб-платформу и комплект библиотек, а также создать или модифицировать существующую платформу для интеграции функциональных модулей, являющихся непосредственным инструментом при проведении НИОКР, и определить базовый набор таких инструментов.

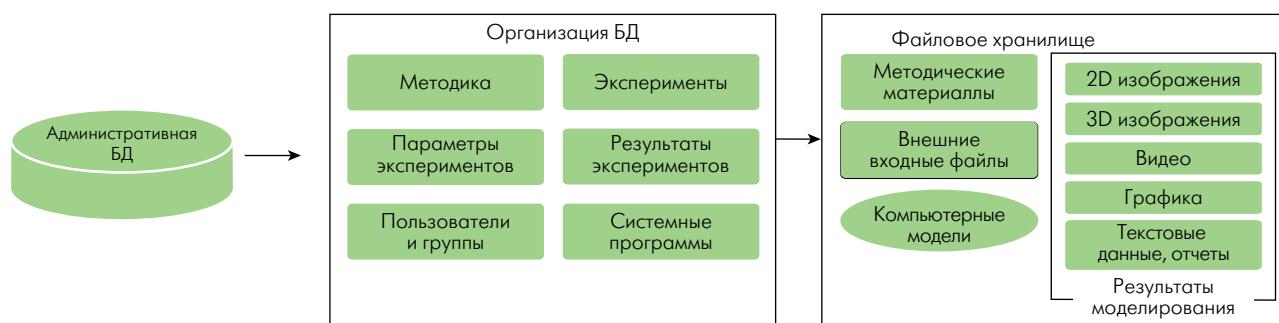


Рис.3. Структура сервера баз данных



КОНТРОЛЬ И ИЗМЕРЕНИЯ

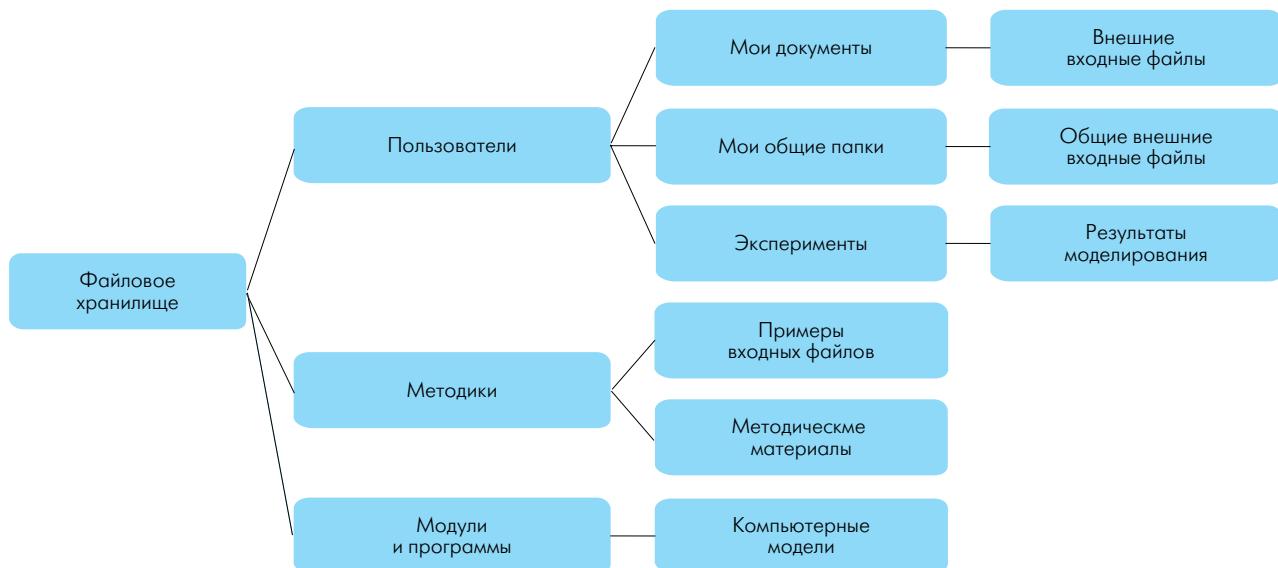


Рис.4. Уровни файлового хранилища

В информационном аспекте следует интегрировать базы данных (БД), использующиеся технологическими платформами, спроектировать новую БД для инструментария и хранения результатов НИОКР. Результаты работы, отчеты и методические материалы важно систематизировать с помощью базы знаний, проработать алгоритмы функционирования интеллектуальных агентов по их извлечению. Для полноценного проведения НИОКР важно также спроектировать систему информационных каналов, с помощью которых можно передавать данные в используемый инструментарий, в том числе их экспорт из внешних приложений и цифровых приборов.

Архитектура платформы
Для разработки веб-среды R&D Paas использовалась типовая архитектура: веб-сервер, серверы приложений и БД, причем последние синхронизированы с файловой системой. Поскольку проведение НИОКР подразумевает ресурсоемкие вычисления, к серверу БД подключался сервер управления вычислениями, а в БД выделялись таблицы для хранения промежуточных результатов и служебной информации об очередности расчетов, правах доступа пользователей и т.д. Сервер управления вычисле-

ниями может быть подключен к вычислительному "облаку", кластеру или локальной сети. Задачи выполняются на подключенных вычислительных узлах, а результаты расчетов сохраняются в общей файловой системе. Схема взаимодействия архитектурных блоков представлена на рис.2.

Хранение данных

Для управления, разграничения прав доступа и обеспечения требуемого уровня безопасности комплекса удобно использовать административную БД ASP.NET Membership. С целью хранения данных спроектирована связка из файлового хранилища и организационной БД. Диспетчеризация вычислительного комплекса также осуществляется при помощи специализированной БД. Структура сервера баз данных представлена на рис.3.

Иерархическая структура организации файлового хранилища представлена на рис.4. Папка "Пользователи" содержит набор вложенных папок, в каждой из которых содержится три подпапки: "Мои документы", "Мои общие папки" и "Эксперименты".

В папку "Мои документы" пользователь может загружать внешние файлы с локального компьютера, а также использовать ее для передачи резуль-

татов одного эксперимента во входные параметры другого.

"Мои общие папки" предназначены для обмена файлами с другими пользователями.

Папка "Эксперименты" содержит набор вложенных папок данных проведенных пользователем экспериментов.

Папка "Методики" содержит набор вложенных папок для хранения методических материалов и примеров входных файлов.

Папка "Модули и программы" предназначена для хранения системных файлов программного обеспечения, использующегося для вычислительных экспериментов.

Заключение

Реализована часть проекта R&D Paas, результатом которой стал веб-ресурс nanoModel.ru для виртуальных лабораторных работ и организации дистанционных учебных курсов по нанотехнологическим специальностям вузов. В нем воплощены следующие структурные блоки:

- веб-платформа ASP.NET MVC;
- сервер веб-приложений nanoModel.ru;
- интеграционная платформа nanoModel.ru;
- интегрированные приложения, включая физико-химические модели и программы для многомасштабного мо-



КОНТРОЛЬ И ИЗМЕРЕНИЯ

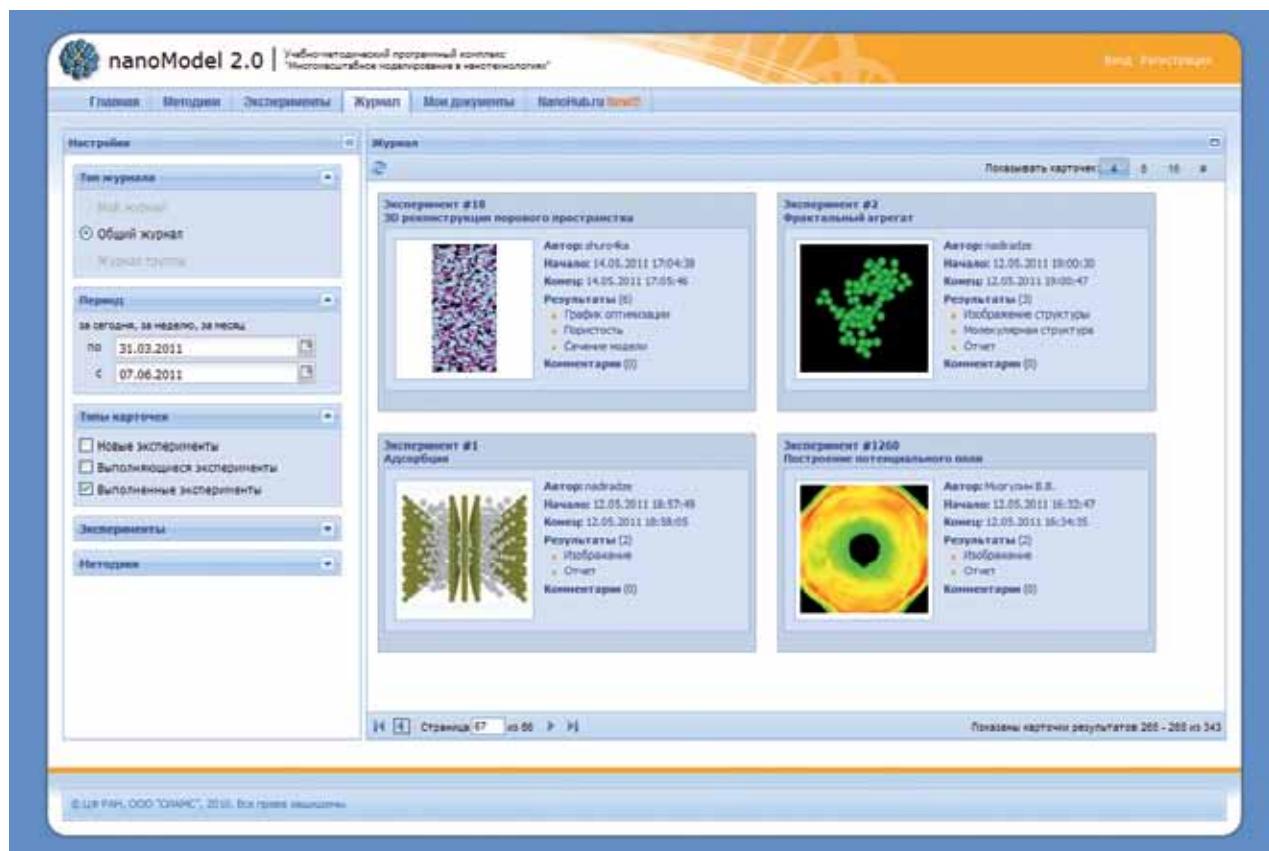


Рис.5. Веб-интерфейс nanoModel.ru

- делирования и виртуального проектирования наноструктурированных материалов;
- СУБД Microsoft SQL Server;
- БД SQL в связке с файловой системой NTFS;
- информационные каналы nanoModel.ru.

На следующем этапе планируется интеграция веб-ресурса nanoModel.ru с социальными сетями и электронными платежными системами, переход на технологию "облачных" вычислений и формирование БД за счет подключения системы управления знаниями.

Пользовательский интерфейс веб-ресурса nanoModel.ru представлен на рис.5.

По достигнутым результатам можно сделать следующие выводы:

- веб-платформа ASP.NET MVC хорошо подходит для разработки веб-приложений для проведения НИОКР;
- веб-интерфейсы – удобное средство для управления высокопроизводительными вычислениями на удаленных серверах;

- использование связки из реляционных и иерархических БД позволяет удачно сочетать быструю навигацию, передачу и хранение больших объемов данных;
- разработанный продукт nanoModel.ru готов к функционированию и дальнейшему развитию.

Литература

1. H.R. Motahari-Nezhad, B. Stephenson, Sh. Singhal. Outsourcing Business to Cloud Computing Services: Opportunities and Challenges. HP Laboratories: February 6, 2009.

2. Constantinos Evangelinos and Chris N. Hill. Cloud Computing for parallel Scientific HPC Applications: Feasibility of running Coupled Atmosphere-Ocean Climate Models on Amazon's EC2. Cloud computing and its applications: October 22-23, 2008.

3. Лебедев-Степанов П.В., Кадушников Р.М., Молчанов С.П., Рубин Н.И.,

Штуркин Н.А., Алфимов М.В. Моделирование самосборки ансамблей микро- и наночастиц в испаряющейся микрокапле раствора. – Российские нанотехнологии, 2011, т.1-2.

4. Григорьев Ф.В., Романов А.Н., Лайков Д.Н., Жабин С.Н., Головачёва А.Ю., Оферкин И.В., Сулимов А.В., Базилевский М.В., Багатуриянц А.А., Сулимов В.Б., Алфимов М.В. Методы молекулярного моделирования супрамолекулярных комплексов: иерархический подход. – Российские нанотехнологии, 2010, т.5, №11–12, 5–6 (май).

5. Алфимов М.В., Багатуриянц А.А., Сафонов А.А., Шербинин А.В., Владимирова К.Г., Белоусов С.А., Богданова М.В., Валуев И.А., Дейнега А.В., Лозовик Ю.Е., Потапкин Б.В. Многомасштабный компьютерный дизайн материалов для оптических хемосенсоров на основе фотонных кристаллов. – Российские нанотехнологии, 2010, т.5, №11–12, 3–4 (март).