

Романюк О.М.¹, Санигора А.С.², Свістунів С.Я.², Марченко О.І.¹

¹ НТУУ “КПІ”; ² Інститут теоретичної фізики ім. Боголюбова НАН України, м. Київ

Створення середовища виконання наукових додатків у ґрід з використанням інструментаріїв Gridsphere та Vine Toolkit як частини комплексного наукового шлюзу

Для проведення досліджень у будь-якій області науки, вчені потребують використання спеціальних програмних додатків для наукових обчислень. Більшість з них пристосована для використання лише в межах локального середовища. Такий спосіб використання суттєво знижує ефективність обчислень через обмеження обчислювальних потужностей ресурсами локальної системи. Також існує проблема необхідності використання додатків вченими, які не мають вільного доступу до обчислювальної системи, на якій встановлено потрібний додаток.

Як вирішення цих проблем, для виконання наукових додатків в [1] пропонується використовувати ґрід. У роботі [1] визначено термін “Комплексний науковий шлюз” для характеристики операційного середовища, серед функцій якого є організація виконання наукових додатків в доступних ґрід-інфраструктурах та надання науковим додаткам зручних користувацьких інтерфейсів, що адаптовані до такого способу їх використання.

Дана робота представляє варіант реалізації цих функцій для програмного пакету Gromacs (пакет для розрахунків молекулярної динаміки) шляхом створення спеціального середовища виконання наукових додатків у ґрід-середовищі gLite. В роботі пропонується модель середовища виконання додатку. Основою Комплексного наукового шлюзу є ґрід портал, для реалізації якого використовуються інструментарії Gridsphere [2] та Vine Toolkit [3]. Ґрід-портал на основі Gridsphere забезпечує реалізацію інтерфейсу програмування (API) портлетів стандарту JSR 168. Він також включає в себе певний набір портлетів і сервісів портлетів для управління обліковими записами користувачів, аутентифікації, авторизації, управління шаблонами графічного інтерфейсу та системою управління контентом [2]. Інструментарій Vine Toolkit забезпечує інтеграцію у середовище ґрід-порталу та реалізує функціональність модулів взаємодії з ґрід-середовищем з інтерфейсами програмування додатків (API). Vine Toolkit містить наступні модулі взаємодії з ґрід-середовищем: модуль управління ресурсами, модуль управління завданнями, модуль опитування та повідомлення, модуль управління файлами та модуль управління обліковими записами [3].

Для реалізації поставленого завдання необхідно створити програмні модулі, що здатні реалізувати веб-інтерфейси додатку в середовищі Gridsphere, та організувати процес виконання додатку у ґрід-середовищі, використовуючи бібліотеку програмних компонент Vine Toolkit. Програмні модулі повинні бути реалізовані у вигляді портлетів стандарту JSR 168. Для створення портлетів була обрана технологія Flex, оскільки ця технологія надає більше можливостей для розробки компонентів, ніж jsр-сторінки або jsf-каркаси і виключає проблеми міжбраузерної сумісності [4]. При побудові web-додатку за допомогою Flex, додаток складається з декількох компонентів: серверної частини (що включає службу та модель), клієнтської частини (що включає GUI-компонент, вихідний компонент класу Action Script, модель класу Action Script та конфігураційний файл) та локалі. Ці елементи складаються у спеціальну структуру типу Model-View-Controller, яка дозволяє створювати кілька представлень екземплярів або повторно використовувати бізнес-логіку в інших додатках [5].

Реалізація процесу виконання програмного пакету Gromacs у ґрід-середовищі була розбита на два етапи: підготовка розрахункових даних та безпосередньо розрахунки. Підготовчий етап передбачає нескладні перетворення вихідних даних, використовуючи підпрограми пакету. Ці обчислення не вимагають великих ресурсних витрат, тому було вирішено виконувати ці обчислення на локальному кластері. Другий етап (безпосере-

дньо розрахунки молекулярної динаміки) потребує великих обчислювальних потужностей, тому цей етап виконується у глід-середовищі.

Для реалізації програмних модулів, використовуючи інструменти Vine Toolkit був створений шаблон проекту. Для цього проекту були розроблені MXML-файли, що безпосередньо реалізують структуру та взаємозв'язок компонентів самого веб-додатку. Після компіляції були отримані портлети, що відповідають специфікації JSR 168 і використовують SWF-файли для відображення графічного середовища додатку у веб-браузері. Розроблені портлети були розміщені на порталі і можуть бути використані користувачами для роботи з програмним пакетом Gromacs, який основну частину своїх обчислень виконує у глід-середовищі.

Література

1. Romaniuk O. Complex Science Gateway: use of different grid infrastructures to perform scientific applications / Romaniuk O., Svistunov S., Karpenko D., Marchenko O. : Proc. of the 4-th International Conference ACSN-2009, Lviv – 2009 – P. 81–84.
2. The GridSphere Project [електронний ресурс] : The GridSphere portal framework home page – 2010 – режим доступу: <http://www.gridisphere.org/gridisphere/gridisphere>.
3. The Vine Toolkit [електронний ресурс] : The Vine Toolkit documentation page – 2008 – режим доступу: <http://vinetoolkit.org/content/docs>.
4. Adobe Flex 3: Developer Guide [електронний ресурс] / Adobe Systems Incorporated – 2008 – режим доступу: http://livedocs.adobe.com/flex/3/devguide_flex3.pdf.
5. Russell M. The Vine Toolkit: A Java Framework for Developing Grid Applications / Russell M., Dziubecki P., Grabowski P. [та ін.] : Parallel Processing and Applied Mathematics – 2008 – vol. 4967, P. 331–340.