

На правах рукописи

Воскобойников Михаил Леонтьевич

**Технология
разработки и применения сервис-ориентированных приложений
в контейнеризированной вычислительной среде**

Специальность 2.3.5 – Математическое и программное
обеспечение вычислительных систем, комплексов и
компьютерных сетей

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Иркутск – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова Сибирского отделения Российской академии наук (ИДСТУ СО РАН)

Научный руководитель: **Феоктистов Александр Геннадьевич** – доктор технических наук, доцент, ИДСТУ СО РАН, главный научный сотрудник

Официальные оппоненты: **Легалов Александр Иванович** – доктор технических наук, профессор, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», профессор

Бабенко Михаил Григорьевич – доктор физико-математических наук, доцент, Северо-Кавказский федеральный университет, заведующий кафедрой вычислительной математики и кибернетики

Ведущая организация: **Вычислительный центр ДВО РАН** – обособленное подразделение ФГБУН Хабаровский Федеральный исследовательский центр ДВО РАН (г. Хабаровск)

Защита состоится «03» марта 2026 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета 24.1.060.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова Сибирского отделения Российской академии наук (ИДСТУ СО РАН) по адресу: 664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 134.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте www.idstu.irk.ru ИДСТУ СО РАН.

Автореферат разослан –

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.

Т.В. Груздева

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В настоящее время решение фундаментальных и прикладных задач зачастую осуществляется с помощью распределенных научных приложений, характеризующихся модульной структурой их прикладного программного обеспечения (ПО), развитым системным ПО (совокупностью программ, обеспечивающих создание приложения, организацию вычислений, обработку данных и взаимодействие различных категорий пользователей приложения) и ориентацией на решение определенного класса задач в гетерогенной распределенной вычислительной среде (ГРВС). В современных приложениях схема решения задачи реализуется научным рабочим процессом (НРП, англ., Scientific Workflow) – информационно-вычислительной структурой, отражающей бизнес-логику предметной области в интеграции предметных данных, ПО и вычислительных ресурсов в процессе проведения экспериментов. В процессе применения НРП при решении ресурсоемких задач, например, для исследования энергетических комплексов (ЭК), возникает необходимость решения *ряда важных проблем*: согласованного использования разнородных вычислительных ресурсов; учета специфики предметных областей решаемых задач; интеграции, тестирования и контейнеризации прикладного и системного ПО (ПСПО); стандартизации спецификаций объектов предметной области и вычислительной модели приложения, форматов представления и протоколов передачи данных; управления вычислениями в ГРВС; взаимодействия с системами управления прохождением заданий (СУПЗ), а также с метапланировщиками; использования технологий ускорения обработки данных в оперативной памяти (ОП), таких как In-Memory Data Grid (IMDG); поддержки стандарта Web Processing Service (WPS). IMDG имеет неоспоримое преимущество в скорости обработки данных по сравнению с традиционными базами данных (БД). Стандарт WPS незаменим при работе с большими массивами пространственно-распределенных данных.

Необходимость учета предметной специфики и обеспечения масштабирования вычислений обуславливает переход от использования ГРВС общего назначения, которая может включать Grid-системы, облачные платформы, ресурсы центров коллективного пользования и другие вычислительные мощности, к применению предметно-ориентированной вычислительной среды (ПОВС). Такой переход обеспечивает рациональное сочетание возможностей ресурсов среды, потребностей и накладных затрат, обуславливаемых особенностями предметных областей для конкретных классов решаемых задач.

В силу актуальности вышеперечисленных проблем степень разработанности исследований относительно каждой из них достаточна высока. Результаты по концептуальному и сборочному программированию, а также построению и применению пакетов прикладных программ отражены в работах И.О. Бабаева, М.М. Горбунова-Посадова, А.Ю. Горнова, А.П. Ершова, Е.А. Жоголева, В.П. Ильина, Д.А. Корягина, Е.М. Лаврищевой, С.С. Лаврова, В.Э. Малышкина, В.М. Матросова, Г.А. Опарина, Э.Х. Тыгу, А.И. Тятюшкина, Г.С. Цейтина, D. Gries, R.T. Hartley, G. Mayers, S.P. Reiss, J.F. Sowa, W.M. Turski и др.

В рамках организации параллельных и распределенных вычислительных систем следует отметить работы А.И. Аветисяна, А.А. Белеванцева, В.Б. Бетелина, Вл.В. Воеводина, В.П. Гергеля, Б.М. Глинского, В.А. Ильина, В.В. Коренькова, В.Д. Корнеева, И.И. Левина, А.И. Легалова, Л.Б. Соколинского, В.В. Топоркова, В.Г. Хорошевского, А.Н. Черных, D. Abramson, H. Casanova, J. Dongarra, S.S. Gill, M. Livny, T. Tannenbaum, A. Zomaya и других российских и зарубежных ученых. Параллельно развиваются системы управления НРП (англ., Workflow Management System – WMS). Существенный вклад в это направление внесли T.L. Casavant, E. Deelman, Y. Gil, G. Juve, S. Pandey, D. Talia, I. Taylor, B. Wassermann и др.

Особое внимание научного сообщества уделяется развитию сервис-ориентированного подхода к организации распределенных вычислений (см., например, работы А.В. Бухановского, И.В. Бычкова, И.А. Каляева, Л.В. Массель, И.А. Пестунова, Г.И. Радченко, Г.М. Ружникова, С.И. Смагина, А.А. Сорокина, О.В. Сухорослова, Р.К. Федорова, А.М. Федотова, А.Е. Хмельнова, Ю.И. Шокина, М.В. Якововского, О.Э. Якубайлика, R. Vuuya, R. Fielding, I. Foster, M.V. Juric, C. Kesselman, S.J. Kim, X. Liu, B. Schuller, M.P. Singh, A. Rajasekar, S. Tuecke, S. Weerawarana и др.). В настоящее время сервис-ориентированные приложения (СОП) становятся все более востребованными на практике.

Анализ современного состояния в области распределенных вычислений^{1,2,3} показывает, что *известные методы и средства не обеспечивают в полной мере комплексного решения проблемы разработки и применения СОП на основе НРП и дальнейшего эффективного построения и применения ПОВС*. Требуется создание новых технологических решений, а также адаптация или модификация известных разработок с целью улучшения критериев подготовки и проведения экспериментов в ПОВС с поддержкой комплексного выполнения интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО. *Диссертационная работа направлена на решение данной актуальной задачи⁴, имеющей важное научно-техническое значение в области распределенных вычислений*. В работе выделяются базовые критерии пользователей (временные затраты на подготовку и проведение эксперимента и точность оценки требуемых ресурсов) и владельцев ресурсов (загрузка процессора, балансировка нагрузки и эффективность использования ресурсов).

Цель работы состоит в разработке моделей, алгоритмов и инструментальных средств создания и применения СОП в ПОВС, обеспечивающих улучшение базовых критериев пользователей и владельцев ресурсов в сравнении с известными разработками за счет использования знаний о специфике решаемых задач, комплексного выполнения интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО, а также применения IMDG.

Основные задачи диссертации, решаемые для достижения поставленной цели применительно к ПОВС:

¹ Hossain M.M. et al. Extensibility Challenges of Scientific Workflow Management Systems // Proc. of the International Conference on Human-Computer Interaction. Cham: Springer Nature Switzerland, 2023. P. 51–70.

² Lindsay D. et al. The evolution of distributed computing systems: from fundamental to new frontiers // Computing. 2021. Vol. 103, № 8. P. 1859–1878.

³ Padovano R. Critical Analysis of Parallel and Distributed Computing and Future Research Direction of Cloud Computing // Journal of Computing and Natural Science. 2021. Vol. 1, № 4. P. 114–120.

⁴ Cheng X. et al. Meta computing // IEEE Network. 2023. Vol. 38, № 2. P. 225–231.

- анализ современных подходов к организации СОП, известных систем управления НРП, методов и средств виртуализации и контейнеризации;
- разработка вычислительной модели СОП, включающей знания о сущностях и процессах интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО;
- разработка алгоритмов построения и выполнения НРП;
- разработка методики, алгоритмов и программных средств автоматизации применения технологии IMDG;
- поддержка интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО;
- реализация инструментального комплекса (ИК) разработки СОП для решения ресурсоемких научных и практических задач на основе НРП;
- апробация результатов диссертации на примерах решения ресурсоемких научных и практических задач.

Объектом исследования являются методы и средства разработки и применения распределенных научных приложений в ГРВС.

Предметом исследования выступают модели, алгоритмы и инструментальные средства разработки и применения СОП в ПОВС.

Методы исследования. При решении поставленных задач использовались методы и средства концептуального, модульного и сервис-ориентированного программирования, контейнеризации ПО, организации параллельных и распределенных вычислений.

Научная новизна диссертации заключается в развитии теории и практики распределенных вычислений относительно улучшения базовых критериев пользователей и владельцев ресурсов при создании СОП (поддерживающих стандарт WPS) в ПОВС в сравнении с известными разработками. При этом на защиту выносятся следующие основные положения:

- 1) предложена вычислительная модель СОП, расширяющая известные модели знаниями о сущностях и процессах интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО и тем самым позволяющая повысить качество управления вычислениями при ее использовании;
- 2) разработаны алгоритмы построения и выполнения НРП в ПОВС, обеспечивающие в сравнении с алгоритмами управления вычислениями в известных WMS согласование базовых критериев пользователей и владельцев ресурсов за счет использования расширенной модели и результатов тестирования рабочих процессов на испытательных стендах;
- 3) реализованы методика, алгоритмы и программные средства автоматизации динамического развертывания кластера IMDG, отличающиеся от известных разработок более высокой точностью оценки требуемых ресурсов посредством анализа влияния специфики данных на их размещение в ОП и сокращающие время развертывания кластера относительно ручного режима;
- 4) создан ИК, интегрирующий перечисленные модель, алгоритмы и программные средства в рамках единой технологии разработки и применения СОП для решения ресурсоемких научных и практических задач на основе НРП в ПОВС и обеспечивающий сокращение времени на подготовку и проведение экспериментов в сравнении с известными WMS.

Практическая значимость. Применение результатов диссертации обеспечивает эффективное управление НРП на основе согласования заданных критериев качества решения задач и предпочтений владельцев ресурсов. Основные результаты диссертации использованы при выполнении государственных заданий и научных исследований в ИДСТУ СО РАН, в том числе в рамках следующих научно-технических работ: регионального проекта РФФИ и Правительства Иркутской области № 20-47-380002 р_а «Математическое и информационное моделирование инфраструктурных объектов Байкальской природной территории» (2020-2022 гг.); проекта Министерства науки и высшего образования РФ № FWEW-2021-0005 «Технологии разработки и анализа предметно-ориентированных интеллектуальных систем группового управления в недетерминированных распределенных средах» (2020-2025 гг.); 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», 2024-2026 гг.).

Получены акты о внедрении результатов диссертации, в частности, ИК Framework for Development and Execution of Scientific WorkFlows (FDE-SWFs), в Институте систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН и Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

Достоверность и обоснованность полученных в диссертации результатов подтверждается положительными результатами анализа адекватности предложенных модели и алгоритмов, корректным применением классических методов исследования и соответствием результатов экспериментов известным теоретическим оценкам.

Соответствие диссертации паспорту специальности. Тема и основные результаты диссертации соответствуют следующим областям исследований паспорта специальности 2.3.5 – Математическое и программное обеспечение вычислительных систем, комплексов и компьютерных сетей:

- п. 1 – модели, методы и алгоритмы проектирования, анализа, трансформации, верификации и тестирования программ и программных систем;
- п. 3 – модели, методы, архитектуры, алгоритмы, языки и программные инструменты организации взаимодействия программ и программных систем;
- п. 8 – модели и методы создания программ и программных систем для параллельной и распределенной обработки данных, языки и инструментальные средства параллельного программирования.

Апробация. Основные результаты диссертации представлены на VIII Международной научно-практической конференции «Информационные технологии и высокопроизводительные вычисления» (Хабаровск, 2025 г.), Выездном совещании участников проекта «Фундаментальные исследования Байкальской природной территории на основе системы взаимосвязанных базовых методов, моделей, нейронных сетей и цифровой платформы экологического мониторинга окружающей среды» (г. Белокуриха, 2025 г.), X Международной

конференции «Суперкомпьютерные дни в России» (Москва, 2024 г.), VI и VII International Workshops on Information, Computation, and Control Systems for Distributed Environments (Иркутск, 2024 и 2025 гг.), Международной конференции «Ляпуновские чтения» (Иркутск, 2023–2025 гг.), XXVII, XXIX и XXX Байкальской Всероссийской конференции с международным участием «Информационные и математические технологии в науке и управлении» (Иркутск, 2022, 2024 и 2025 гг.), International Workshop on Critical Infrastructures in the Digital World (Большое Голоустное, 2024 г.), IV Scientific-practical Workshop on Information Technologies: Algorithms, Models, Systems (Иркутск, 2021 г.), а также семинарах ИДСТУ СО РАН.

Публикации. Результаты научных исследований автора отражены в 30 научных работах. Основные публикации представлены в российских журналах [1-7], рекомендованных ВАК для опубликования научных результатов диссертации, а также в работах, проиндексированных в международных базах цитирования Web of Science и Scopus [1, 2, 7-10]. Получено 3 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [11-13].

Личный вклад автора. Все выносимые на защиту научные положения получены соискателем лично. Из совместных работ в диссертацию включены только те результаты, которые принадлежат непосредственно автору. В работах, выполненных в соавторстве, в частности, в основных публикациях [1-5, 7-10], лично соискателем проведен сравнительный анализ систем управления НРП, рассмотрены направления развития сервис-ориентированных технологий, включая стандарты описания рабочих процессов, разработаны компоненты ИК FDE-SWFs для создания и применения СОП, расширена вычислительная модель, разработаны алгоритмы управления вычислениями в ПОВС, созданы испытательные стенды для тестирования ПСПО, проведены вычислительные эксперименты. Методика контейнеризации ПО [7] разработана в неделимом соавторстве с Р.О. Костроминым. Вклад соискателя в разработанное ПО [11, 12] состоит в разработке и реализации архитектуры, а также алгоритмов работы программ.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографии из 174 наименований, списка принятых сокращений и 7 приложений. Общий объем основного текста работы – 143 страницы, включая 14 таблиц и 46 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы и направления исследования диссертации, формулируются ее цель и основные задачи, подчеркивается научная и практическая значимость работы, приводится структура диссертации.

В первой главе рассматриваются основные понятия и определения, связанные с организацией распределенных вычислений в ПОВС. Проводится обзор и выполняется сравнительный анализ известных систем управления НРП. Обсуждаются текущее состояние и перспективные направления развития технологий разработки и применения СОП, а также существующие стандарты описания сервис-ориентированных НРП. На основе проведенного исследования

обосновывается разработка нового инструментария для создания и применения СОП и формулируются функциональные и системные требования к его работе.

Вторая глава представляет предложенную вычислительную модель СОП, разработанную схему взаимодействия диспетчера FDE-SWFs с программами (модулями СОП) и программными системами – метапланировщиком и СУПЗ, а также алгоритмы построения и выполнения НРП. Модель представлена структурой

$$M = \langle L_{ab}, L_{al}, L_{so}, L_{pa}, L_{cn}, R, Rc \rangle,$$
$$L_{ab} = \langle Z, T, O, Op, Pr, St, W, Tb \rangle, \quad L_{al} = \langle M, Pa \rangle, \quad L_{so} = \langle Sr, Ms \rangle,$$
$$L_{pa} = \langle J, N, Lrm, Sch, Us, Ap, Q, Cm, H \rangle, \quad L_{cn} = \langle Cn, Sc \rangle,$$

где L_{ab} , L_{al} , L_{so} , L_{pa} и L_{cn} представляют элементы абстрактного, алгоритмического, сервис-ориентированного и программно-аппаратного уровней, а также уровня контейнеризации, R – множество связей, в общем случае типа «многие-ко-многим», между объектами структур L_{ab} , L_{al} , L_{so} , L_{pa} и L_{cn} , Rc – множество конфигурационных связей. Z, T, O, Op, Pr, St, W и Tb – множества параметров приложения (скаляров, векторов, матриц, файлов, составных параметров и параллельных списков данных), допустимых типов данных, абстрактных операций, выполняемых над множеством параметров и отражающих семантику алгоритмических знаний в модели, операторов, выполняемых над операциями, продукций (условий выполнения операций), постановок задач, формулируемых в процедурной (*Выполнить* <список операторов>) или непроедурной (*Вычислить* <множество целевых параметров> по <множеству исходных параметров>) форме, НРП, строящихся на основе постановок задач, и системных рабочих процессов для тестирования ПО. M и Pa – множества модулей, представляющих алгоритмические знания и реализующих операции, и программ автономного выполнения НРП. $Sr, Ms, J, N, Lrm, Sch, Us, Ap, Q$ и Cm – множества сервисов, реализующих операции и НРП, сообщений сервисов, заданий по выполнению НРП, ресурсов среды, СУПЗ, метапланировщиков, пользователей, административных политик, квот на ресурсы и каналов связи. Cn и Sc – конфигурации среды и сценарии контейнеризации. H – вычислительная история выполнения ПО. НРП представляют как традиционные схемы решения задач (ярусно-параллельные формы графа алгоритма), вершины-операции которых реализуются модулями, так и композиции сервисов.

Множества Z, O, W, M, Pa и Sr включают подмножества прикладных и системных объектов. Системные объекты предназначены для поддержки взаимодействия модулей, сервисов, НРП и автономных программ с внешними ресурсами и системами. Модель определяет понятия и связи между объектами абстрактного, алгоритмического, сервис-ориентированного и программно-аппаратного уровней и уровнем контейнеризации. Элементы L_{ab} , L_{al} и L_{pa} интерпретируются аналогично соответствующим элементам моделей^{5,6}. В диссертации множество Op расширено новыми операторами агрегирования и

⁵ Феоктистов А.Г. Организация предметно-ориентированных распределенных вычислений в гетерогенной среде на основе мультиагентного управления заданиями // Автореф. дис. докт. техн. наук: 05.13.11. Иркутск: Изд-во ИДСТУ СО РАН, 2021. 39 с.

⁶ Опарин Г.А. Автоматизация разработки и применения пакетов программ для исследования динамики сложных управляемых систем // Автореф. дис. докт. техн. наук: 05.13.11. Иркутск: Изд-во ИДСТУ СО РАН, 1998. 40 с.

дезагрегирования параллельных списков данных, параллельного цикла, явного и неявного многометодного анализа. Множество M расширено системными модулями, реализующими алгоритмы выполнения этих операторов. L_{SO} в целом отражает элементы модели описания композиции сервисов⁷. Предложенная модель расширена новой структурой L_{cn} , включающей элементы уровня контейнеризации ПО и ссылки на конфигурационные файлы объектов ПОВС. Конфигурация среды определяет метаописание сценариев контейнеризации ПСПО, включающих наборы инструкций по выполнению скриптов для развертывания системы Docker, сборки Docker-образа и запуска контейнера на основе Docker-образа.

В диссертации используется подход к управлению вычислениями на уровне приложений⁸. В отличие от подходов к управлению на уровнях ГРВС и СУПЗ, суть данного подхода заключается в рациональном выборе ресурсов, наиболее подходящих для эффективного выполнения конкретного приложения. Выбор ресурсов выполняется на основе оценок времени, стоимости и надежности выполнения модулей НРП. Схема работы диспетчера НРП с метапланировщиком Condor DAGMan и СУПЗ HTCondor представлена на рис. 1.

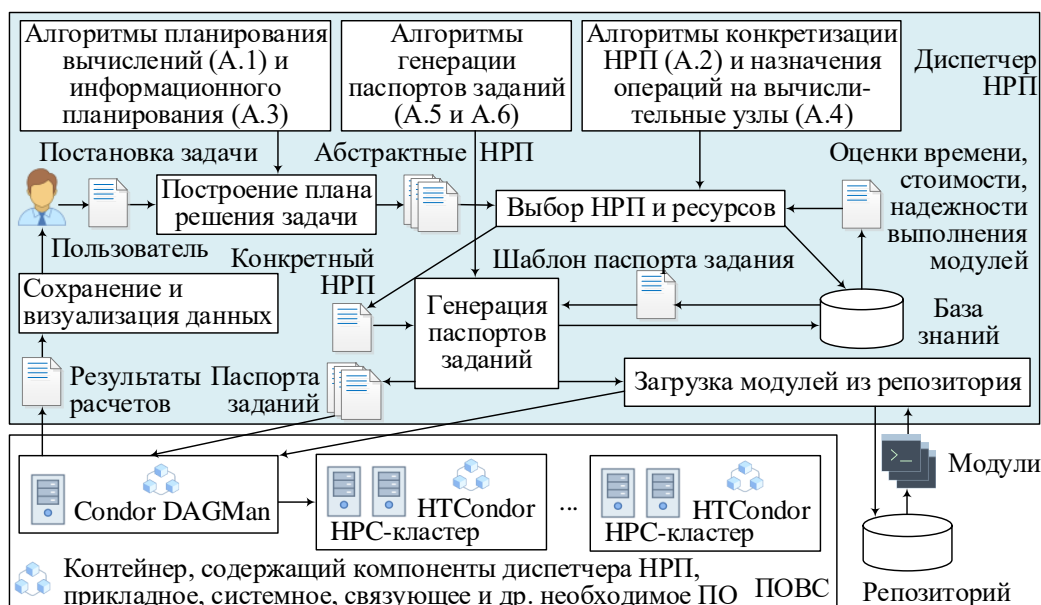


Рисунок 1 – Схема взаимодействия диспетчера НРП с Condor DAGMan и HTCondor

Алгоритм А.1 представляет собой модификацию известного метода прямой волны⁹ с целью построения ярусно-параллельной схемы решения задачи по ее непроцедурной постановке. Алгоритм А.3 предназначен для определения множеств исходных и целевых параметров по процедурной постановке задачи. В общем случае в результате выполнения алгоритма А.1 строится НРП, включающий множество вариантов решения задачи. Разработан алгоритм А.2 конкретизации поливариантного НРП путем удаления операций, выполняющих избыточные вычисления, методом обратной волны⁸. В результате работы алгоритма А.2 в НРП для каждого набора избыточных операций остается одна операция, являющаяся наиболее приоритетной

⁷ Федоров Р.К. Сервис-ориентированная информационно-аналитическая среда композиции сервисов обработки пространственных данных // Автореф. дис. докт. техн. наук: 2.3.5. Иркутск: Изд-во ИДСТУ СО РАН, 2024. 39 с.

⁸ Топорков В.В. Модели распределенных вычислений. М.: Физматлит, 2004. 320 с.

⁹ Горбунов-Посадов М.М. и др. Системное обеспечение пакетов прикладных программ. М.: Наука, 1990. 208 с.

для указанной конфигурации ПОВС. Приоритеты операций определяются путем тестирования выполнения модулей, реализующих эти операции, с помощью испытательных стендов на разных узлах среды.

HTCondor использует механизм передачи данных через центральный узел, что обуславливает существенные накладные расходы. В этом контексте в диспетчере НРП реализован механизм прямой передачи данных между узлами, позволяющий ускорить расчеты за счет сокращения пересылок данных по сети не менее чем в два раза (рис. 2).

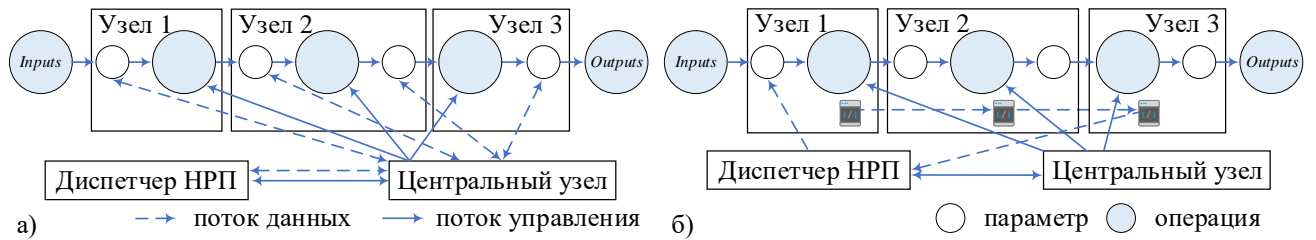


Рисунок 2 – Передача данных: через центральный узел (а) и прямая (б)

Время $T(X)$ выполнения НРП в асинхронном режиме по готовности данных при их передаче через центральный узел определяется формулами (1)-(2)

$$T(X) = \max_{i=1, \dots, n, l=1, \dots, m} \tau_{il}, \quad (1)$$

$$\tau_{il} = q_{il} + c_{il} + t_{il} + \max_{\forall j \in \overline{1, n}: p_{ij}=1, i \neq j, r \in \overline{1, m}} \left(\tau_{jr} + \frac{d_{ij}}{\omega_{rb}(t)w_{rb}} + \frac{d_{ij}}{\omega_{bl}(t)w_{bl}} \right), \quad (2)$$

где X – булева матрица размерности $m \times n$ (элемент $x_{li} = 1$ показывает, что i -я операция выполняется на l -м узле), τ_{ir} (τ_{jl}) – оценка времени, прошедшего с начала выполнения НРП до завершения операции o_i (o_j) на r -м (l -м) узле, q_{il} – оценка времени нахождения модуля, реализующего операцию o_i в очереди l -го узла, c_{il} – оценка временных затрат на контейнеризацию ПСПО на l -м узле для выполнения i -й операции, t_{il} – время выполнения i -й операции на l -м узле с учетом чтения и записи данных, P – булева матрица предшествования операций размерности $n \times n$ (элемент матрицы $p_{ij} = 1$ означает, что j -я операция предшествует i -й операции), D – матрица оценки размеров передаваемых данных размерности $n \times n$ (элемент матрицы $d_{ij} > 0$ показывает размер данных, передаваемых между i -й и j -й операциями), W – матрица пропускной способности интерконнекта размерности $m \times m$ (элемент матрицы $w_{lr} \geq 0$ демонстрирует пропускную способность интерконнекта между l -м и r -м узлами), $\omega_{lr}(t)$ – коэффициент снижения пропускной способности в момент времени t между l -м и r -м узлами, $m \leq \delta$ – число выделенных узлов, n – число операций, b – индекс центрального узла, $\tau_{il} \leq \lambda_l$, δ – квота на число узлов, λ_l – квота на время использования l -го узла.

Время $Y(X)$ выполнения НРП в асинхронном режиме по готовности данных при их прямой передаче определяется формулами (3)-(5)

$$Y(X) = \max_{i=1, \dots, n, l=1, \dots, m} \tau_{il}, \quad (3)$$

$$\tau_{il} = q_{il} + c_{il} + t_{il} + \max_{\forall j \in \overline{1, n}: p_{ij}=1, i \neq j, r \in \overline{1, m}} \left(\tau_{jr} + \frac{s_{lr}}{\omega_{lr}(t)w_{lr}} \right), \quad (4)$$

$$s_{lr} = \begin{cases} d_{ij}, & \text{если } l \neq r, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (5)$$

Суть эвристического алгоритма А.4 заключается в минимизации $Y(X)$ при назначении операций на узлы. Оценка времени выполнения операции на каждом узле выполняется с учетом размера передаваемых данных и скорости их передачи. Если на очередном шаге работы алгоритма одному и тому же узлу назначаются две и более операции, то выбирается та операция, которая предшествует большему числу операций НРП. Учет структуры НРП в алгоритме позволяет уплотнить расписание выполнения заданий в сравнении с алгоритмом HTCondor и, тем самым, сократить время вычислений. При реализации в НРП многовариантных расчетов с помощью экземпляров операции обработки параллельного списка данных выполнение НРП разделяется на фрагменты вычислений в асинхронном и синхронном режимах. К моменту синхронных вычислений все асинхронные расчеты должны быть завершены, и все узлы свободны. Реализация операции включает дезагрегирование данных на k элементов параллельного списка, синхронную обработку элементов списка экземплярами операции и последующее агрегирование результатов расчетов. При назначении узлов в синхронном режиме решается задача (6)-(7) распределения нагрузки в узлах и ее балансировки

$$\max_{l=1,m} \frac{\nu_l}{\pi_l} \downarrow \min, \quad (6)$$

$$\sum_{l=1}^m \nu_l = k, \quad 0 \leq \frac{\nu_l}{\pi_l} \leq \lambda_l, \quad (7)$$

где ν_l – переменная, представляющая искомое число экземпляров операции для l -го узла, k – общее число экземпляров, π_l – производительность l -го узла.

Алгоритмы А.5 и А.6 реализуют генерацию заданий по выполнению НРП и его модулей для Condor DAGMan и HTCondor в соответствии с расписанием.

В третьей главе рассматривается ИК FDE-SWFs, относящийся к классу WMS. Его архитектура (рис. 3) включает интерфейс, инструменты разработчика, диспетчер НРП для управления вычислениями. FDE-SWFs предоставляет набор API для доступа пользователей к внешним ресурсам и системам, с которыми им необходимо взаимодействовать при подготовке и проведении экспериментов. Его база знаний содержит спецификацию модели, НРП и сведения о ресурсах. Отличительной особенностью ИК FDE-SWFs в сравнении с известными WMS является поддержка стандарта WPS, что улучшает его возможности по интеграции с геоинформационными системами. Генератор WPS-сервисов поддерживает автоматическое развертывание модулей и НРП приложений в качестве новых сервисов, а также включение вновь созданных сервисов в модель.

Разработаны методика, алгоритмы и программные средства автоматизации динамического развертывания кластера Apache Ignite и построения программ, реализующих НРП для параллельной и распределенной обработки данных на основе IMDG (рис. 4). Учет детальной структуры исходных данных позволяет существенно сократить погрешность оценки требуемого размера ОП в сравнении с известными методиками и рационально выделить нужное число узлов кластеров.



Рисунок 3 – Архитектура FDE-SWFs

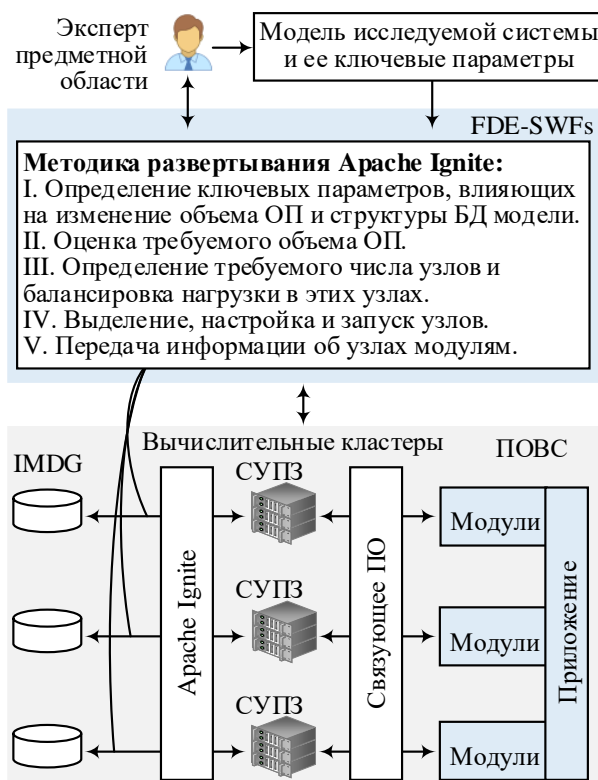


Рисунок 4 – Средства поддержки IMDG

Оценка S требуемого размера ОП для кластера Apache Ignite определяется по формулам (8)-(10)

$$S = D + (o_{data} + o_{index}) \sum_{i=1}^t r_i(x_1, x_2, \dots, x_h), \quad (8)$$

$$D = \sum_{i=1}^t d_i, \quad d_i = r_i(x_1, x_2, \dots, x_h) \sum_{j=1}^{c_i} s_{ij}, \quad (9)$$

$$o_{data} = \frac{M_{data} - D^*}{\sum_{i=1}^t r_i^*(x_1, x_2, \dots, x_h)}, \quad o_{index} = \frac{M_{index} - M_{data}}{\sum_{i=1}^t r_i^*(x_1, x_2, \dots, x_h)}, \quad (10)$$

где D (D^*) – суммарный размер данных в байтах БД модели (тестовой модели) ЭК, t – число таблиц, d_i – размер данных в i -й таблице в байтах, o_{data} и o_{index} – удельные накладные расходы на хранение данных и индексов, c_i – число столбцов в i -й таблицы, $r_i(x_1, x_2, \dots, x_h)$ – число строк в i -й таблице, x_1, x_2, \dots, x_h – ключевые параметры предметной области, влияющие на изменение размера данных, h – число ключевых параметров, s_{ij} – максимальный размер данных в j -ом столбце i -й таблицы в байтах, M_{data} (M_{index}) – размер данных в ОП без учета (с учетом) индексов таблиц при записи $r_i^*(x_1, x_2, \dots, x_h)$ строк i -й таблицы, $r_i^* < r_i$. Значения o_{data} и o_{index} рассчитываются на испытательном стенде при однократном занесении в БД не менее 16000000 записей. При достижении такого числа записей эти значения стабилизируются. Разработаны алгоритмы А.7 и А.8 для расчета o_{data} и o_{index} , которые включают следующие этапы: отключение (включение) индексов в таблицах распределенной БД; занесение в БД 16000000 или более записей; получение размера БД в ОП в байтах и числа записей в БД во всех таблицах через запросы к Apache Ignite с помощью его SQL-консоли; расчет o_{data} (o_{index}). Определение требуемого числа узлов кластера Apache Ignite с учетом требуемого

размера ОП и квот на их использование, а также балансировка нагрузки осуществляются с помощью оптимизационного алгоритма¹⁰.

В FDE-SWFs НРП может быть реализован следующими способами: на основе композиции WPS-сервисов, представленной на языке программирования Python; в виде отдельного WPS-сервиса, который реализуется традиционным НРП на основе исполняемых модулей и заданий для Condor DAGMan и HTCondor; с помощью стандартизированного декларативного языка BPEL. В последнем случае НРП может использоваться любыми внешними WMS, поддерживающими BPEL. На рис. 5 представлены сценарии выполнения НРП под управлением FDE-SWFs.

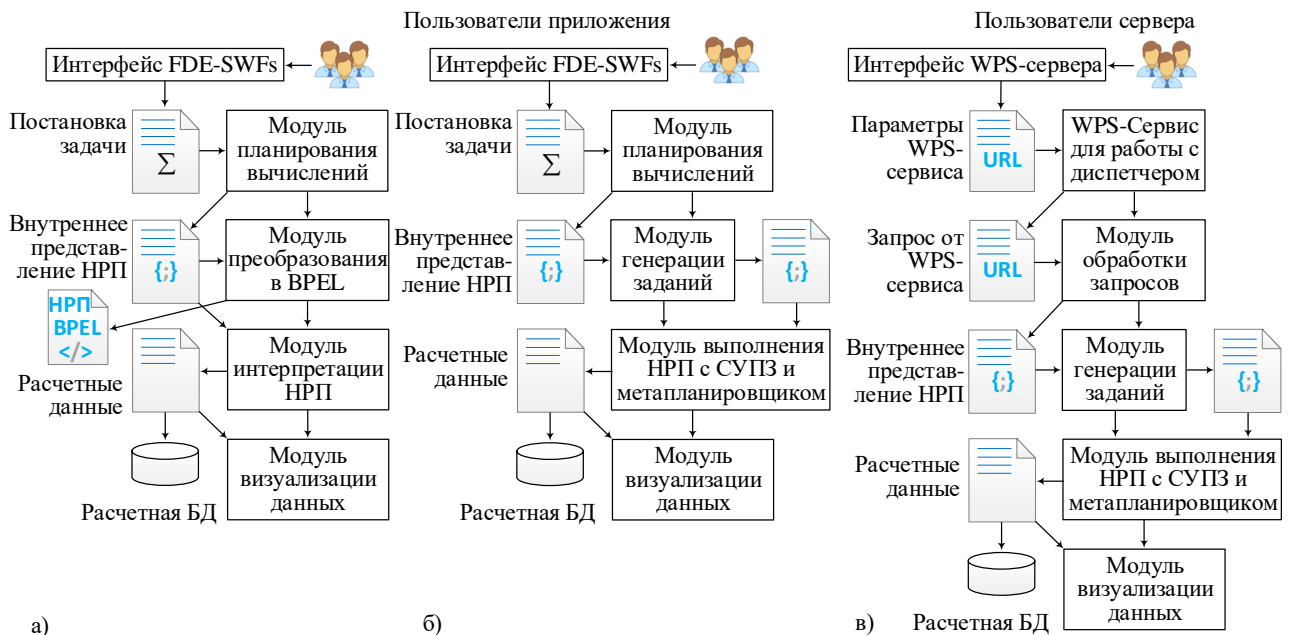


Рисунок 5 – Сценарий 1 (а), Сценарий 2 (б) и Сценарий 3 (в) выполнения НРП

В рамках Сценария 1 пользователь формулирует постановку задачи. Используя вычислительную модель и алгоритмы планирования вычислений, модуль планирования вычислений выполняет построение НРП во внутреннем представлении. Модуль преобразования производит трансформацию НРП из внутреннего представления на BPEL. Модуль интерпретации осуществляет асинхронное параллельное выполнение операций НРП, представленных в виде композиции WPS-сервисов. По завершению выполнения НРП пользователь может осуществить визуализацию данных с целью их дальнейшего анализа. Сценарий 2, в отличие от Сценария 1, предполагает, что операции НРП представлены модулями. Пользователь формулирует постановку задачи. Используя вычислительную модель и алгоритмы планирования вычислений, модуль планирования вычислений выполняет построение НРП во внутреннем представлении. Затем он генерирует паспорта заданий для Condor DAGMan и HTCondor по выполнению НРП и его модулей. Подсистема контейнеризации осуществляет выделение требуемых ресурсов, подготовку образов в соответствии с классами ресурсов и прикладными модулями НРП с последующим запуском контейнеров на данных ресурсах. НРП выполняется по готовности ресурсов.

¹⁰ Kosyanov N. On an Improvement to the Next-step Procedure // Proceedings of the 7th International Workshop on Information, Computation, and Control Systems for Distributed Environments. Irkutsk: ISDCT Publisher, 2025. P. 149–151.

Выполнение НРП с помощью WPS-сервисов реализуется Сценарием 3. FDE-SWFs автоматизирует создание, регистрацию и применение WPS-сервисов, представляющих НРП. FDE-SWFs автоматически регистрирует программные модули и НРП в виде асинхронных WPS-сервисов в каталогах на WPS-сервере.

Отличительной особенностью FDE-SWFs в сравнении с известными WMS является обеспечение возможности создания испытательных стендов. Стенды предназначены для тестирования и испытания новых алгоритмических и программных разработок, различных технологических решений и источников данных, а также систем их извлечения, обработки, передачи, хранения и анализа, перед внедрением создаваемых или модифицируемых систем и технологий. Стенд строится в виде композиции сервисов, которые представляют модули разрабатываемого приложения и внешние приложения. Внешние приложения реализуют дополнительные системные операции обработки и анализа данных, получения информации с контрольно-измерительного оборудования и многокритериального выбора предпочтительных результатов вычислений.

Тестирование отдельных программ (модулей, сервисов и НРП) и программных систем в целом (СОП) производится на тестовых наборах данных, предоставляемых разработчиками приложений. Тестированием оценивается работоспособность программ и программных систем, точность вычислений, а также эффективность использования ресурсов, включая загрузку процессора, использование оперативной и дисковой памяти, балансировку нагрузки ресурсов.

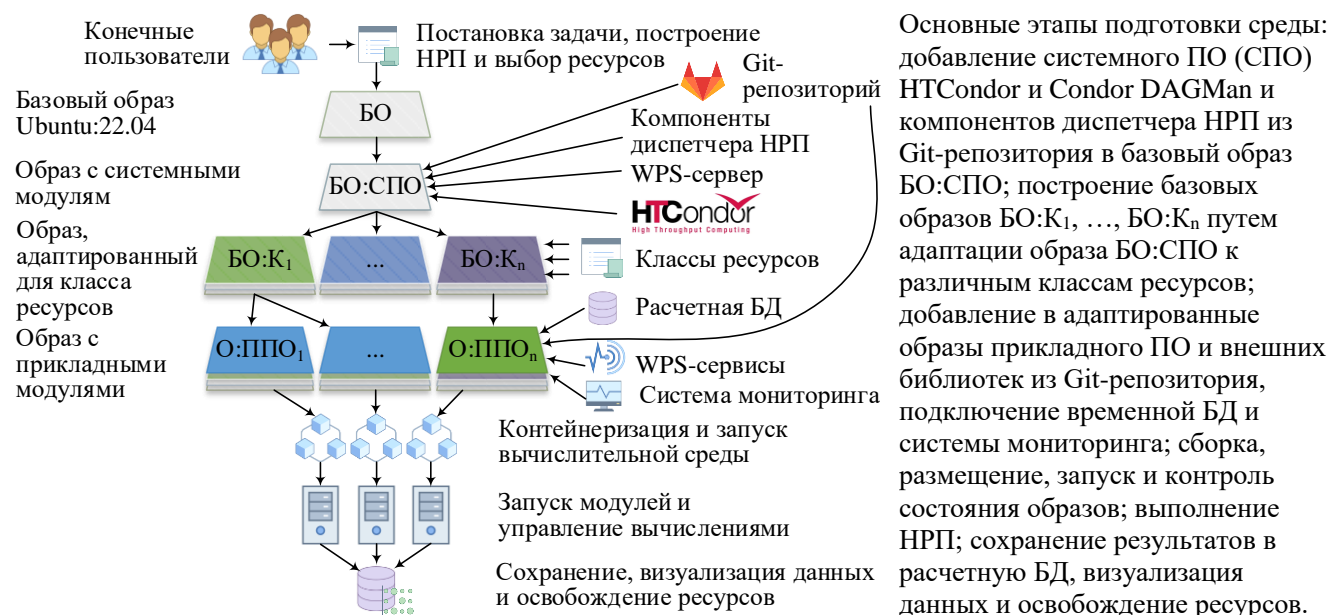


Рисунок 6 – Схема контейнеризации ПО

Разработаны программные средства для автоматизации поддержки контейнеризации ПСПО, основанные на оригинальной методике [7] (рис. 6). Подсистема контейнеризации осуществляет выделение ресурсов, подготовку образов в соответствии с классами ресурсов и модулями НРП с последующим запуском контейнеров. Образ может адаптироваться под класс ресурсов. Например, при организации кластера IMDG в адаптированные образы добавляется ПО Apache Ignite. Доставка образов и развертывание контейнеризированной среды

на ресурсах осуществляется с помощью системы Ansible. Для описания инструкций этой системе используются файлы Playbook в текстовом формате YAML.

В четвертой главе приводятся примеры применения результатов диссертации при разработке и применении СОП с помощью ИК FDE-SWFs.

Разработано приложение для решения задач структурно-параметрической оптимизации ЭК разных уровней их территориально-отраслевой иерархии с помощью методов библиотеки PaGMO. Создан стенд для тестирования и последующего выбора наиболее подходящих методов из шестидесяти трех методов библиотеки относительно модели определенного уровня с использованием оператора неявного многометодного анализа. Стенд успешно применен при выборе методов для моделей топливно-энергетического комплекса (ТЭК) России и локального ЭК населенного пункта, расположенного на Байкальской природной территории. Тестирование и многокритериальный выбор методов из Парето-оптимального множества был выполнен за заданное время (10 ч для ТЭК и 1 ч для локального ЭК) с учетом ограничений по суммарным метрикам живучести конфигураций ЭК и показателям эффективности использования ресурсов. Применение выбранных методов позволило достигнуть масштабирования вычислений. На рис. 7 и 8 показаны ускорение и масштабирование (отношение ускорения к числу узлов) вычислений при решении задачи структурно-параметрической оптимизации локального ЭК. Увеличение числа узлов позволяет существенно сократить время решения задачи. При этом наиболее целесообразно использовать число узлов, кратное степени 2.

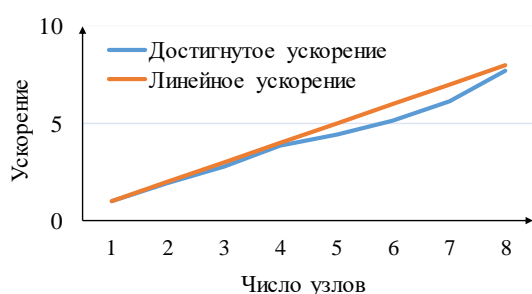


Рисунок 7 – Ускорение вычислений

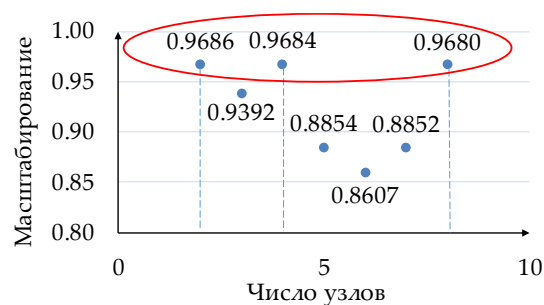


Рисунок 8 – Масштабирование вычислений

Разработано приложение для решения задачи глобального анализа уязвимости ЭК. С его помощью исследованы модели системы газоснабжения (модель 1), включающей 26 дуг и 20 узлов ($k = 8, m = 26, n = 0$), и ТЭК (модель 2) – 2190 дуг и 1220 узлов ($k = 2, m = 2190, n = 1220$). Использован инструмент Apache Ignite, поддерживающий IMDG. Оценен требуемый размер ОП для решения задач на кластере Apache Ignite для двух пулов ресурсов: 8 узлов – AMD Ryzen 9 5900X 12-Core Processor, 128 ГБ ОЗУ (пул 1); 2 узла – AMD EPYC 9654 96-Core Processor, 768 ГБ ОЗУ (пул 2). Для расчета накладных расходов (НР) на хранение данных (ХД) и индексов (ХИ), а также требуемого размера ОП разработаны три стенда. Для модели системы газоснабжения установлено, что НР на ХД и ХИ стабилизируются на значениях 240 байтов и 172 байта – рис. 9а и 9б. Для модели ТЭК НР на ХД и ХИ стабилизируются на значениях 20 и 206 байтов – рис. 9в и 9г.

Методика (М), ключевые параметры (k, m и n), число записей (ЧЗ), пул, прогнозируемый размер (ПР) и фактический размер (ФР) ОП, погрешность

прогноза – абсолютная (АПП) и относительная (ОПП), число узлов – прогнозируемое (ПЧУ) и фактическое (ФЧУ) приведены в табл. для двух моделей разной сложности. Проведено сравнение трех методик оценки требуемого размера ОП: предложенной методики М1, методики М2¹¹ и методики М3 разработчиков Apache Ignite. Результаты показали (см. табл.), что методика М1 обеспечивает наименьшую ОПП, не превышающую 1.54% на всех тестах в сравнении с методиками М2 и М3, где ОПП не менее 31.41% и 20.34% соответственно. М1 дает незначительное отклонение ПР в большую сторону. Методика М2 показывает завышенный прогноз (см. ПЧУ в строках 2, 8 и 11 табл.), что может снижать эффективность использования ресурсов. Методика М3 прогнозирует недостаточный размер ОП, что зачастую приводит к нехватке ОП выделяемых узлов и отказу процесса вычислений без использования памяти на диске или к увеличению времени вычислений более чем в 10 раз с использованием диска. В частности, по методике М3 выделяется недостаточное число узлов для пула 1 (см. ПЧУ в строке 9 табл.). Автоматизация развертывания кластера обеспечивает существенное снижение временных затрат относительно ручного режима (рис. 10).

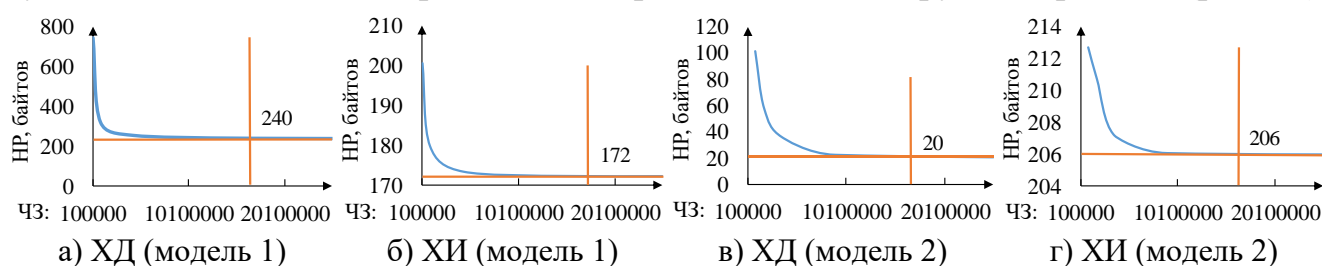
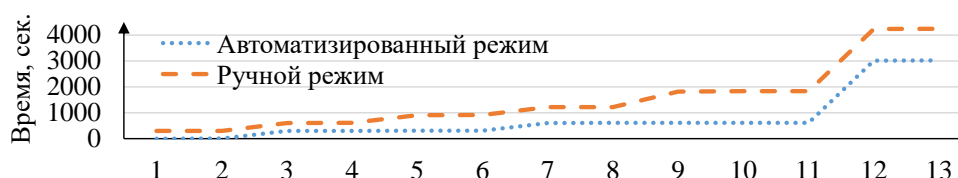


Рисунок 9 – Накладные расходы на хранение данных и индексов

Таблица – Результаты сравнительного анализа методик

№	М	<i>k / m / n</i>	Пул	ЧЗ	ПР, ГБ	ФР, ГБ	АПП, ГБ	ОПП, %	ПЧУ	ФЧУ
1	М1	8 / 26 / 0	1	140512730	62.837	61.887	0.950	1.54	1	1
2	М2				119.036		57.149	92.34	2	
3	М3				11.357		-50.530	81.65	1	
4	М1	8 / 26 / 0	2	140512730	62.837	61.887	0.950	1.54	1	1
5	М2				119.036		57.149	92.34	1	
6	М3				11.357		-50.530	81.65	1	
7	М1	2 / 2190 / 1220	1	902411450	479.012	473.214	5.798	1.23	6	6
8	М2				621.846		148.632	31.41	7	
9	М3				376.964		-96.250	20.34	5	
10	М1	2 / 2190 / 1220	2	902411450	479.012	473.214	5.798	1.23	1	1
11	М2				621.846		148.632	31.41	2	
12	М3				376.964		-96.250	20.34	1	



Этапы: отключение индексов (1); запуск кластера (2, 6 и 11); тестирование (3 и 7); остановка кластера (4, 8 и 13); включение индексов (5); оценка требуемого размера ОП (9); выделение узлов кластера (10); выполнение НРП (12)

Рисунок 10 – Время развертывания кластера Apache Ignite

¹¹ Feoktistov A. et al. An Approach to Implementing High-Performance Computing for Problem Solving in Workflow-based Energy Infrastructure Resilience Studies // Computation. 2023. Vol. 11, № 12. P. 243.

Разработана *ПОВС* для комплексной оценки критичности элементов ЭК (рис. 11). Созданы три приложения для перебора множеств отказов, глобального анализа чувствительности и анализа потоковых показателей важности элементов ЭК, а также композиция wf_4 сервисов wf_1 , wf_2 и wf_3 для комплексной оценки критичности. НПП приложений представлены WPS-сервисами. Вспомогательные расчеты проведены на стендах (сервисы tb_1 и tb_2). Приложения размещены на разных ресурсах в соответствии со сложностью решаемых задач. Узлы ресурсов выделяются по запросу. Среда использована для исследования газотранспортной системы (8 объектов добычи природного газа, 12 объектов потребления и 26 объектов транспорта). Экспертом выделено две группы уязвимых элементов и одна группа узких мест, выработаны рекомендации по развитию этих элементов. Сервис wf_1 выполнил полный перебор 313911 сценариев возмущений. Средняя загрузка процессора была ниже, чем при выполнении tb_1 , что обусловлено большей долей последовательных вычислений, выполняемых wf_1 . Определение среднего времени обработки одного сценария с помощью tb_1 обеспечило балансировку нагрузки в узлах. Глобальный анализ проведен с помощью wf_2 . Расчет необходимого числа вариаций входных факторов посредством tb_2 позволил сократить время выполнения wf_2 . При расчетах с tb_2 и wf_2 достигнута одинаковая средняя загрузка процессора. Сервисом wf_3 обработано 2854879 сценариев при расчете потоковых показателей важности элементов ЭК со средней загрузкой процессора, равной 96%.

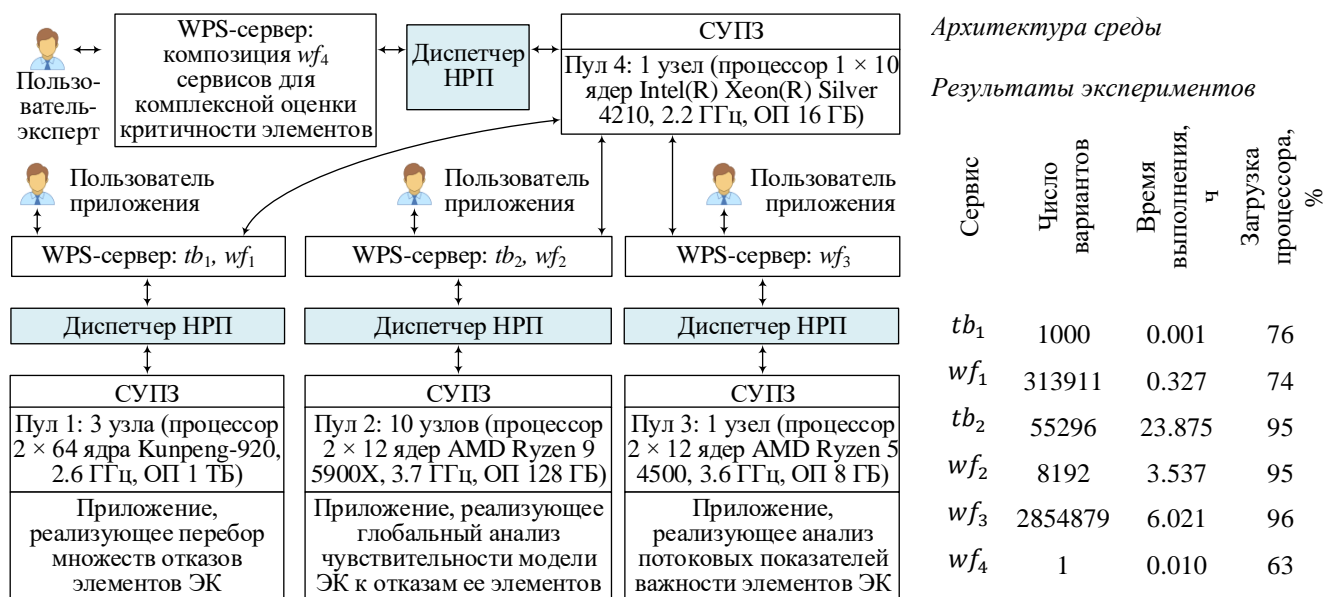


Рисунок 11 – ПОВС для комплексной оценки критичности элементов ЭК

Разработано *приложение* для оценки времени выполнения известных научных рабочих процессов Epigenomics, CyberShake и LIGO¹² и рассмотрены три схемы их выполнения: с централизованной передачей данных (схема 1); на основе предложенного в диссертации механизма прямой передачи данных (схема 2); с использованием прямой передачи данных и алгоритма А.4 (схема 3). Эксперименты показали очевидное преимущество применения схем 2 и 3 в

¹² Juve G. et al. Characterizing and profiling scientific workflows // Future Generation Computer Systems. 2013. Vol. 29, № 3. P. 682–692.

сравнении со схемой 1, т. к. они обеспечивают более плотное расписание выполнения заданий (рис. 12). Применение алгоритма А.4 (схема 3) дает дополнительное сокращение времени выполнения НРП (рис. 13). ПОВС включает четыре узла со следующими характеристиками: 1 CPU, 2 ГБ ОП, жесткий диск размером 30 ГБ, пропускная способность сети – 5 Гбит/с. В случае выполнения Epigenomics схемы 2 и 3 показали преимущество по сокращению времени вычислений в сравнении со схемой 1 более чем на 32% и 40% соответственно. Для CyberShake (LIGO) схемы 2 и 3 позволили сократить время вычислений в сравнении со схемой 1 более чем на 47% и 53% (14% и 21%) соответственно.

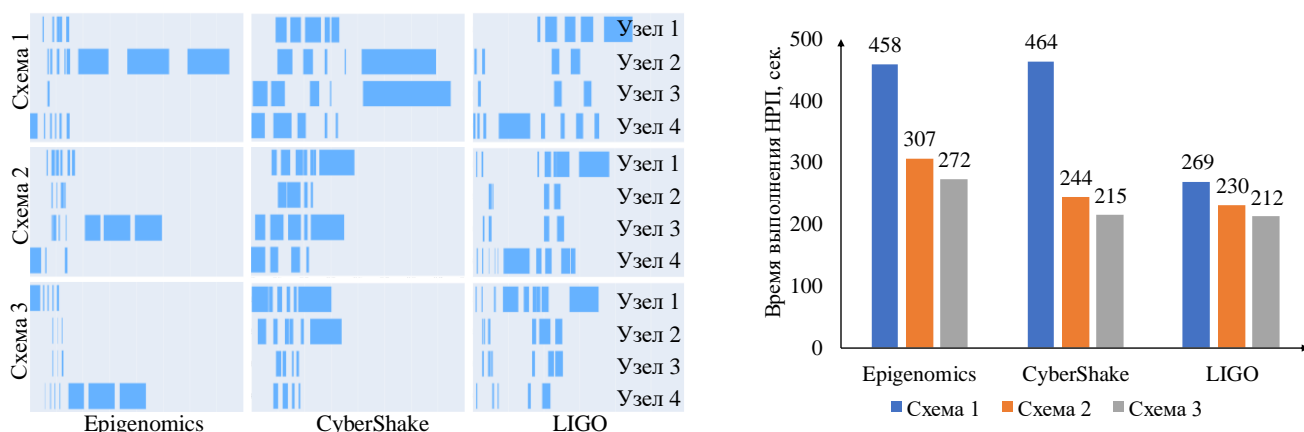
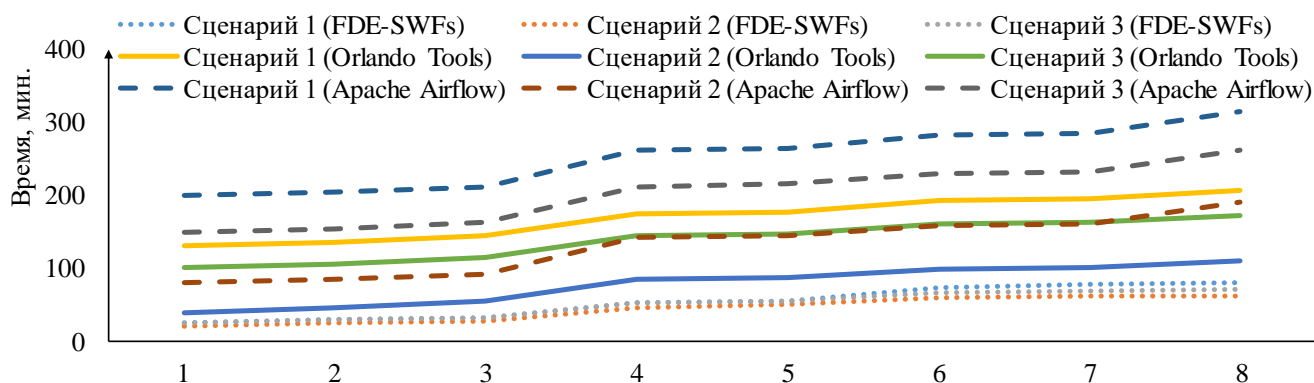


Рисунок 12 – Расписание выполнения заданий Рисунок 13 - Время выполнения НРП



Этапы: описание модели (1); конструирование НРП по процедурной (2) и непроцедурной (3) постановкам задач; конфигурирование ресурсов (4); ввод данных (5); выполнение НРП (6); получение (7) и визуализация (8) результатов

Рисунок 14 – Время подготовки и проведения экспериментов

Проведено сравнение временных затрат на разработку и применение тестового приложения с помощью FDE-SWFs, его предшественника Orlando Tools¹¹ и популярной в настоящее время WMS Apache Airflow. График времени подготовки и проведения экспериментов для трех сценариев выполнения НРП поэтапно с накоплением итога (рис. 14) показывает, что FDE-SWFs превосходит Orlando Tools и Apache Airflow по сокращению временных расходов.

В заключении подытожены основные результаты диссертации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В целом решение поставленных в диссертации задач, включая реализацию предложенной модели, а также разработанных алгоритмов и инструментальных

средств, обеспечивает следующие преимущества при создании и применении СОП в ПОВС по сравнению с известными разработками:

- расширение совокупности знаний вычислительной модели, необходимых для создания и применения СОП в ПОВС, знаниями о сущностях и процессах интеграции, тестирования и контейнеризации ПСПО;
- построение, трансформацию и тестирование программ и программных систем, их взаимодействие между собой и другими программными комплексами, а также параллельную и распределенную обработку данных;
- учет особенностей предметной области решаемых задач (выявление ключевых параметров, влияющих на увеличение необходимых ресурсов при обработке данных, определение предпочтительных методов решения задач путем их тестирования на испытательных стендах, разработка приложений в ориентации на ресурсы, соответствующие сложности решаемых задач);
- улучшение базовых критериев пользователей и владельцев ресурсов при создании и применении приложений для решения ресурсоемких задач;
- автоматизацию развертывания кластера IMDG, сокращающую трудозатраты, и оценку требуемых для него ресурсов с высокой точностью;
- сокращение времени на подготовку и проведение экспериментов в целом.

Предложенные в диссертации комплексные технологические решения по организации ПОВС, основанные на разработанных моделях, алгоритмах и инструментальных средствах, допускают свое естественное развитие применительно к другим ГРВС различного назначения.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В изданиях, рекомендованных ВАК

1. Bychkov I., Feoktistov A., Voskoboynikov M., Edelev A., Beresneva N., Edeleva O. Optimization of Integrated Energy System Resilience // Информатика и автоматизация. 2025. Т. 24, № 3. С. 951–981.
2. Бычков И.В., Феоктистов А.Г., Воскобойников М.Л., Еделев Я.А. Разработка сервис-ориентированного доступа к высокопроизводительной вычислительной среде на основе стандарта WPS // Вычислительные технологии. 2025. Т. 30, № 2. С. 87–99.
3. Воскобойников М.Л., Феоктистов А.Г. Использование технологии In-Memory Data Grid при исследовании живучести энергетических инфраструктур // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2025. № 3(39). С. 154–163.
4. Феоктистов А.Г., Воскобойников М.Л., Черных А.Н. Разработка и применение сервис-ориентированных научных приложений в инструментальном комплексе FDE-SWFs // Труды Института системного программирования РАН. 2024. Т. 36, № 6. С. 195–214.
5. Воскобойников М.Л., Феоктистов А.Г. Сравнительный анализ систем управления научными рабочими процессами // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2024. № 3(35). С. 102–111.

6. Воскобойников М.Л. Диспетчер научных рабочих процессов: методы и средства визуализации данных // Современные наукоемкие технологии. 2024. № 1. С. 16–21.
7. Феоктистов А.Г., Костромин Р.О., Воскобойников М.Л., Ли-Дэ Д.И. Организация вычислительной среды разработки и применения научных рабочих процессов на основе контейнеризации // Вычислительные технологии. 2023. Т. 28, № 6. С. 151–164.
В изданиях, входящих в базы цитирования Web of Science и Scopus
8. Edeleva O., Edelev A., Voskoboinikov M., Feoktistov A. Scientific Workflow-Based Synthesis of Optimal Microgrid Configurations // Energies. 2024. Vol. 17, № 23. P. 6138.
9. Feoktistov A., Voskoboinikov M., Tchernykh A. Framework for Development and Execution of Scientific WorkFlows: Designing Service-oriented Applications // Programming and computer software. 2024. Vol. 50, № 8. P. 900–913.
10. Kostromin R., Feoktistov A., Voskoboinikov M. Service-Oriented Tools for Automating Digital Twin Development // Proc. of the 4th Scientific-practical Workshop on Information Technologies: Algorithms, Models, Systems (ITAMS 2021). CEUR-WS Proceedings. 2021. Vol. 2984. P. 95–100.
Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ
11. Феоктистов А.Г., Воскобойников М.Л. Модуль прогнозирования размера базы данных в оперативной памяти узлов вычислительного кластера. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025660056. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ), 2025.
12. Воскобойников М.Л., Феоктистов А.Г. Библиотека программных агентов организации распределенной базы данных в оперативной памяти. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024668180. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ), 2024.
13. Воскобойников М.Л. Планировщик схем решения задач для распределенных пакетов прикладных программ / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023685789. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ), 2023.

Научно-организационный отдел
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова СО РАН
664033, Иркутск, ул. Лермонтова, д. 134
e-mail: rio@icc.ru

Подписано к печати 26.12.2025 г.
Формат бумаги 60×84 1/16, объем 1 п.л.
Заказ № 5. Тираж 100 экз.

Отпечатано в ИДСТУ СО РАН