

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени

«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ «Робототехники и комплексной автоматизации»

КАФЕДРА «Системы автоматизированного проектирования (РК-6)»

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ЗАМЕТКИ

по направлению «Разработка систем инженерного анализа и ресурсоемкого ПО (rndhpc)»

Авторы (исследователи): Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Три-

шин И.

Научный(е) руководитель(и): Соколов А.П.

Консультанты: Фамилия И.О.@

Работа (документирование) над научным направлением начата 20 сентября 2021 г.

Руководители по направлению:

СОКОЛОВ, – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры САПР,

Александр Павлович МГТУ им. Н.Э. Баумана

ПЕРШИН, – PhD, ассистент кафедры САПР,

Антон Юрьевич МГТУ им. Н.Э. Баумана

Исследователи (студенты кафедры САПР, МГТУ им. Н.Э. Баумана): Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И.

С59 Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И.. Разработка систем инженерного анализа и ресурсоемкого ПО (rndhpc): Научно-исследовательские заметки. / Под редакцией Соколова А.П. [Электронный ресурс] — Москва: 2021. — 47 с. URL: https://arch.rk6.bmstu.ru (облачный сервис кафедры PK6)

Документ содержит краткие материалы, формируемые обучающимися и исследователями в процессе их работ по одному научному направлению.

Документ разработан для оценки результативности проведения научных исследований по направлению «Разработка систем инженерного анализа и ресурсоемкого ПО» в рамках реализации курсовых работ, курсовых проектов, выпускных квалификационных работ бакалавров и магистров, а также диссертационных исследований аспирантов кафедры «Системы автоматизированного проектирования» (РК6) МГТУ им. Н.Э. Баумана.

RNDHPC

© С Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И., Соколов А.П., 2021

Содержание

\mathbf{C}_{1}	Список сокращений и условных обозначений 4				
1	Теоретиче	ские основы графоориентированного программного каркаса	5		
	2022.01.01:	Отличие сетевых моделей от сетевых графиков	5		
2	Разработка	а графоориентированного дебаггера	5		
	2021.11.10:	Автоматизированные и автоматические методы отладки, применяемые при реализации сложных вычислительных методов (СВМ), отладка наукоёмкого кода, science code debugging, graph based programming и пр. (первичный обзор литературы)	5		
	2021.11.22:	Web-инструменты для древовидного представления ассоциативных массивов, визуализация ассоциативных массивов (первич-			
	2021.12.19:	ный обзор литературы)	13 17		
3	Разработка	a web-ориентированного редактора графовых моделей	17		
	2021.10.05:	Обзор языка описания графов DOT	17		
	2021.12.04:	Краткое описание алгоритма визуализации графа	18		
	2021.12.05:	Описание текущего состояния проекта	23		
4	Реализаци	я поддержки различных стратегий распараллеливания в			
	рамках гра	афоориентированного программного каркаса	27		
	2021.11.14:	Известные алгоритмы поиска циклов в ориентированных графах	27		
5		ентированная методология разработки средств взаимодей-			
	ствия пользователя в системах автоматизированного проектирова-				
		енерного анализа	29		
	2021.11.06:	Особенности применения графового описания процессов обра-			
		ботки данных в pSeven (DATADVANCE)	29		
	2022.02.09:	Сравнительная характеристика GBSE, pSeven, Pradis	31		
	2022.02.09:	Требования к представлению графовых моделей в comsdk	38		
	2022.03.09:	Текущее представление графовых моделей в библиотеке comsdk	39		
	2022.03.23:	Требования к возможностям обхода графовых моделей в GBSE.	41		
	2022.04.13:	Дополнительный обзор литературы и наброски для введения	42		
	2022.05.17:	Современные форматы описания иерархических структур данных	43		

Список сокращений и условных обозначений

aDOT Расширенный формат DOT (описание представлено в [1]). 35, 40 **aINI** Расширенный формат INI (описание представлено в [2]). 36

ГПИ графо-ориентированная программная инженерия (англ., graph-based software engineering (GBSE)), ориентированная для создания программных реализаций СВМ (патент на изобретение RU 2681408 [3]). 41, 43

СВМ сложный вычислительный метод. 4

ТО технический объект, в т.ч. сложный процесс, система. 32, 35

1 Теоретические основы графоориентированного программного каркаса

2022.01.01: Отличие сетевых моделей от сетевых графиков

"Сетевые модели отличаются от сетевых графиков тем, что в их вершинах могут реализовываться сложные логические и вероятностные функции, а также тем, что в них допускаются контуры

Малинин $\Pi.И.^{1}$, 1970, [4].

В работе [4] проф. Л.И. Малинин использует термин контуры, что в современной литературе по теории графов часто называют *циклами*.

В работах [5, 6] д.т.н. В.И. Нечипоренко представляет обобщёный подход к графовому описанию сложных процессов и систем.

Подготовлено: *Соколов А.П. (РК-6), 2022.01.01*

2 Разработка графоориентированного дебаггера

2021.11.10: Автоматизированные и автоматические методы отладки, применяемые при реализации сложных вычислительных методов (CBM), отладка наукоёмкого кода, science code debugging, graph based programming и пр. (первичный обзор литературы)

Анализ взвешенных графов вызовов для локализации ошибок программного обеспечения

Далее представлен материал, являющийся результатом анализа работы [7].

Проблема Обнаружение сбоев, которые приводят к ошибочным результатам с некоторыми, но не со всеми входными данными.

Предложенное решение Метод анализа графов вызовов функций с последующим составлением рейтинга методов, которые вероятнее всего содержат ошибку.

Описание решения Граф вызовов

Метод основан на анализе графа вызовов. Такой граф отражает структуру вызовов при выполнении конкретной программы. Без какой-либо дополнительной обработки граф вызовов представляет собой упорядоченное дерево с корнем.

 $^{^{1}}$ Профессор Малинин Л.И. использовал псевдоним и публиковался как Ермилов Л.И.

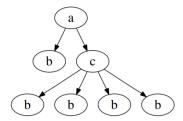


Рис. 1. Граф вызовов

Узлами являются сами методы, а гранями – их вызовы. Метод main() программы обычно является ее корнем, а все методы, вызываемые напрямую, являются ее дочерними элементами.

Редукция графа

Трассировка представляется в виде графов вызовов, затем повторяющиеся вызовы методов, вызванные итерациями, удаляются, вместо этого вводятся веса ребер, представляющие частоту вызовов.

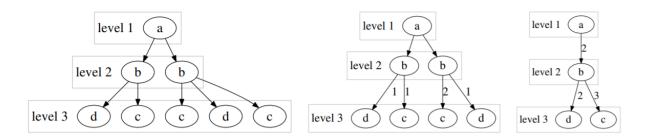


Рис. 2. Редукция графа вызовов

Поиск подграфов

Для поиска подграфов используется фреймворк для ранжирования потенциально ошибочных методов.

После сокращения графов вызовов, полученных от правильного и неудачного выполнения программ, применяется поиск часто встречающихся замкнутых подграфов SG в наборе данных графа G, используя алгоритм CloseGraph. Полученный набор подграфов разделяется на те, которые встречаются при правильном и неудачном выполнении (SGcf), и те, которые возникают только при неудачном выполнении (SGf).

Анализ

Два набора подграфов рассматриваются отдельно.

SGcf используется для построения рейтинга на основе различий в весах ребер при правильном и неудачном выполнении. Графы анализируются: применяется алгоритм выбора характеристик на основе энтропии к весам различных ребер для вычисления вероятности вызова метода и вероятности содержания в нем ошибки.

Алгоритм на основе энтропии не может обнаружить ошибки, которые не влияют на частоту вызовов и не учитывает подграфы, которые появляются только в ошибочной

Поэтому отдельно рассчитывается оценка для методов, содержащихся только в ошибочной версии. Эта оценка - еще одна вероятность наличия ошибки, основанная на частоте вызовов методов при неудачных выполнениях.

Затем вычисляется общая вероятность наличия ошибки для каждого метода. Этот рейтинг дается разработчику программного обеспечения, который выполняет анализ кода подозрительных методов.

Интегрированная отладка моделей Modelica

Далее представлен материал, являющийся результатом анализа работы [8].

Modelica – объектно-ориентированный, декларативный язык моделирования сложных систем (в частности, систем, содержащих механические, электрические, электронные, гидравлические, тепловые, энергетические компоненты).

Проблема Из за высокого уровня абстракции и оптимизации компиляторов, обеспечивающих простоту использования, ошибки программирования и моделирования часто трудно обнаружить.

Предложенное решение В статье представлена интегрированная среда отладки, сочетающая классическую отладку и специальные техники (для языков основанных на уравнениях) частично основанные на визуализации графов зависимостей.

Описание решения На этапе моделирования пользователь обнаруживает ошибку в нанесенных на график результатах, или код моделирования во время выполнения вызывает ошибку.

Отладчик строит интерактивный граф зависимостей (IDG) по отношению к переменной или выражению с неправильным значением.

Узлы в графе состоят из всех уравнений, функций, определений значений параметров и входных данных, которые использовались для вычисления неправильного значения переменной, начиная с известных значений состояний, параметров и времени.

Переменная с ошибочным значением (или которая вообще не может быть вычислена) отображается в корне графа.

Ребра могут быть следующих двух типов.

- Ребра зависимости данных: направленные ребра, помеченные переменными или параметрами, которые являются входными данными (используются для вычислений в этом уравнении) или выходными данными (вычисляются из этого уравнения) уравнения, отображаемого в узле.
- Исходные ребра: неориентированные ребра, которые связывают узел уравнения с реальной моделью, к которой принадлежит это уравнение. ребра, указывающие

из сгенерированного исполняемого кода моделирования на исходные уравнения или части уравнений, участвующие в этом коде

Пользователь может:

- Отобразить результаты симуляции, выбрав имя переменной или параметра (названия ребер). График переменной покажется в дополнительном окне. Пользователь может быстро увидеть, имеет ли переменная ошибочное значение.
- Отобразить код модели следуя по исходным ребрам.
- Вызвать подсистему отладки алгоритмического кода, если пользователь подозревает, что результат переменной, вычисленной в уравнении, содержащем вызов функции, неверен, но уравнение кажется правильным.

Используя эти средства интерактивного графа зависимостей, пользователь может проследить за ошибкой от ее проявления до ее источника.

Систематические методы отладки для масштабных вычислительных фреймворков высокопроизводительных вычислений

Далее представлен материал, являющийся результатом анализа работы [9].

Параллельные вычислительные фреймворки для высокопроизводительных вычислений играют центральную роль в развитии исследований, основанных на моделировании, в науке и технике.

Фреймворк Uintah был создан для решения сложных задач взаимодействия жидких структур с использованием параллельных вычислительных систем.

Проблема Поиск и исправление ошибок в параллельных фреймворках, возникающих из-за параллельного характера кода.

Предложенное решение В статье описывается подход к отладке крупномасштабных параллельных систем, основанный на различиях в исполнении между рабочими и нерабочими версиями. Подход основывается на трассировке стека вызовов.

Исследование проводилось для вычислительной платформы Uintah Computational Framework.

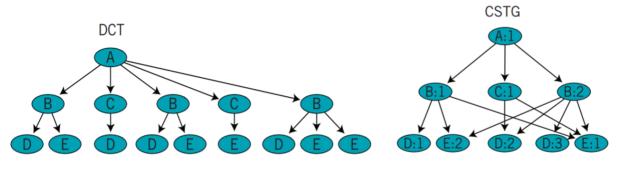
Описание решения Так как количество трассировок стека, которые можно получить при выполнении программы, может быть большим, для лучшего понимания используются графы, которые могут сжать несколько миллионов трассировок стека в одну управляемую фигуру. Метод основан на получении объединенных графов трассировки стека (CSTG).

Хотя сбор и анализ трассировки стека ранее изучались в контексте инструментов и подходов, их внимание не было сосредоточено на кросс-версии (дельта) отладке.

```
void A() {
        cstg.addStackTrace();
}
void B() {
        A();
}
int main() {
        int x = random();
        if (x > 0) B();
        A();
}
```

Рис. 3. Пример построения CSTG

CSTG не записывают каждую активацию функции, а только те, что в трассировках стека ведут к интересующей функции (функциям), выбранной пользователем. Каждый узел CSTG представляет все активации конкретного вызова функции. Помимо имен функций, узлы CSTG также помечаются уникальными идентификаторами вызова. Грани представляют собой вызовы между функциями.



Pиc. 4. CSTG

Пользователю необходимо вставить в интересующие функции вызовы cstg.addStackTrace(). Инструмент CSTG автоматически запускает тестируемый пример с использованием различных сценариев, создает графы и помогает пользователям увидеть существенные различия между сценариями. Сама ошибка обычно обнаруживается и подтверждается с помощью традиционного отладчика, при этом дельта-группы CSTG наводят на место возникновения ошибки.

Ориентированный на данные фреймворк для отладки параллельных приложений

Далее представлен материал, являющийся результатом анализа работы [10].

Проблема Обнаружение ошибок в крупномасштабных научных приложениях, работающих на сотнях тысяч вычислительных ядер.

Неэффективность параллельных отладчиков для отладки пета-масштабных приложений.

Предложенное решение В этом исследовании представлена реализация фреймворка для отладки, ориентированного на данные, в котором в качестве основы используются утверждения. Подход, ориентированный на данные можно использовать для повышения производительности параллельных отладчиков.

Метод, представленный в статье основан на параллельном отладчике Guard, который поддерживает тип утверждения во время отладки, называемые сравнительные утверждения.

Описание решения Утверждение – это утверждение о предполагаемом поведении компонента системы, которое должно быть проверено во время выполнения. В программировании программист определяет утверждение, чтобы гарантировать определенное состояние программы во время выполнения.

Пользователь делает заявления о содержимом структур данных, затем отладчик проверяет достоверность этих утверждений.

В следующем списке показаны примеры утверждений, которые можно использовать для обнаружения ошибок во время выполнения:

- «Содержимое этого массива всегда должно быть положительным».
- «Сумма содержимого этого массива всегда должна быть меньше постоянной границы».
- «Значение в этом скаляре всегда должно быть больше, чем значение в другом скаляре».
- «Содержимое этого массива всегда должно быть таким же, как содержимое другого массива».

В работе используются два новых шаблона утверждений помимо сравнительных: общие специальные утверждения и статистические утверждения.

Общие специальные утверждения позволяют использовать простые арифметические и булевы операции.

```
for (j = 0; j < n; j++) {
  for (i = 0; i < m; i++) {
    pold[j][i] = 50000.;
    pressure[j][i] = 50000.; }}</pre>
```

Например, учитывая следующий фрагмент кода из исходного файла init.c и предполагая, что код вызывается с набором процессов \$a, можно рассмотреть следующее утверждение:

Это утверждение гарантирует, что каждый элемент в структуре данных набора процессов \$a равен 50 000 в строке 180 исходного файла init.c.

Соответственно, сравнительные утверждения позволяют сравнивать две отдельные структуры данных во время выполнения.

Следующее утверждение сравнивает данные из big_var в \$a в строке 4300 исходного файла ref.c c large var в \$b в строке 4300 исходного файла sus.c.

```
assert $a::big var@"ref.c":4300=$b::large var@"sus.c":4300
```

Статистические утверждения - это определяемый пользователем предикаты, состоящие из двух моделей данных в форме либо статистических примитивов (средние значения, значения стандартного отклонения), либо функциональных моделей (гистограммы, функции плотности)

Статистические утверждения позволяют пользователю сравнивать информацию о шаблонах данных между двумя структурами данных, тогда как более ранние утверждения требовали сравнения точных значений.

Например, можно утверждать, что среднее значение большого набора данных находится между определенными границами до или после вызова функции или что количество элементов в массиве должно находиться в определенном диапазоне.

Определение степени и источников недетерминизма в приложениях MPI с помощью ядер графов

Далее представлен материал, являющийся результатом анализа работы [11].

Проблема Выявление причин сбоев воспроизводимости в приложениях на экзафлопсных платформах.

Крупномасштабные приложения MPI обычно принимают гибкие решения во время выполнения том порядке, в котором процессы обмениваются данными, чтобы улучшить свою производительность. Следовательно, недетерминированные коммуникативные модели стали особенностью этих научных приложений в системах высокопроизводительных вычислений.

Недетерминизм мешает разработчикам отслеживать вариации выполнения программы для отладки. Также сложно воспроизвести результаты при повторных запусках, что затрудняет доверие к научным результатам.

Предложенное решение Фреймворк для определения источников недетерминизма с использованием графов событий.

[git] • 2021_rk6_71b_trishiniv @ 92b320b • clockworkRocker, primus2011@gmail.com(2022-05-19 12:36:00 ++

Описание решения Параллельное выполнение программы моделируется в виде ориентированных графов событий, ядра графов используются, чтобы охарактеризовать изменения межпроцессного взаимодействия от запуска к запуску. Ядра могут количественно определять тип и степень недетерминизма, присутствующего в моделях коммуникации MPI.

Фреймворк позволяет найти первопричины недетерминизма в исходном коде без знания коммуникативных паттернов приложения.

Платформа моделирует недетерминизм в следующие три этапа.

Этап первый. Сбор трассировки выполнения. Фреймворк фиксирует трассировку нескольких выполнений недетерминированного приложения с помощью двух модулей трассировки: CSMPI (фиксирует стек вызововов, связанных с вызовами функций MPI) и DUMPI (фиксирует порядок отправляемых и получаемых сообщений для каждого процесса MPI).

Для каждого выполнения приложения фреймворк генерирует один файл трассировки CSMPI и один файл трассировки DUMPI для каждого процесса MPI (или ранга). Файлы трассировки впоследствии загружаются конструктором графа событий для восстановления порядка сообщений выполнения.

Этап второй. Построение модели графа событий. На втором этапе фреймворк моделирует выполнение недетерминированного приложения в виде ориентированного ациклического графа (DAG), используя файлы трассировки, созданные на первом этапе.

Здесь вершины представляют собой связи point-to-point, такие как отправка и получение сообщения, а направленные ребра представляют отношения между этими событиями. Модели межпроцессного взаимодействия этой формы обычно называются графами событий.

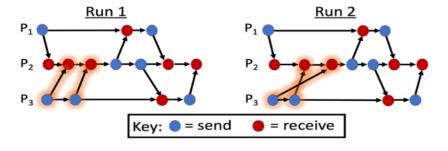


Рис. 5. DGA

Затем используются ядра графов для количественной оценки (несходства) графов событий, тем самым количественно оценивая степень проявления недетерминированности в приложении.

Ядра графов представляют собой семейство методов для измерения структурного сходства графов.

Простыми словами, ядро графа можно рассматривать как функцию, которая подсчитывает совпадающие подструктуры (например, поддеревья) двух входных графов, как показано на рис. 6, сопоставляя пары графов со скалярами, которые количественно определяют, насколько они похожи.

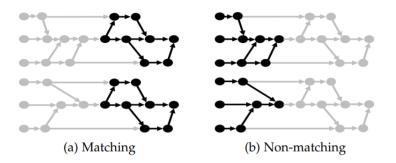


Рис. 6. Сравнение двух графов

Этап третий. Анализ графа событий. На последнем этапе анализ графа событий позволяет ученым количественно оценить недетерминированность многократного выполнения приложения MPI без каких-либо знаний о коммуникативных моделях приложения MPI.

Подготовлено: Крехтунова Д.Д. (PK6-73B), 2021.11.10

2021.11.22: Web-инструменты для древовидного представления ассоциативных массивов, визуализация ассоциативных массивов (первичный обзор литературы)

Ассоциативные массивы

Ассоциативный массив – это массив, в котором обращение к значению осуществляется по ключу (того или иного типа).

Часто в качестве ключа используется не индекс, а строка, задаваемая программистом. Таким образом представить ассоциативный массив можно как набор пар "ключзначение". При этом каждое значение связано с определённым ключом.

Поддержка ассоциативных массивов есть во многих интерпретируемых языках программирования высокого уровня, таких, как Perl, PHP, Python, Ruby, Tcl, JavaScript и других.

Реализации ассоциативного массива Простейший способ хранения ассоциативных массивов – список пар (ключ, значение), где *ключ* определяет "индекс" элемента, а *значение* – значение элемента с этим индексом.



Наиболее популярными являются реализации ассоциативных массивов, основанные на различных деревьях поиска. Так, например, в стандартной библиотеке STL языка C++ контейнер map < K, T> реализован на основе красно-чёрного дерева [?]. В языках Java, Ruby, Tcl, Python используется один из вариантов хеш-таблицы [?]. Известны и другие реализации (ааа, ммм, ...).

функции требуют O(n) операций, где n – количество элементов в рассматриваемой структуре. Операции над деревьями же требуют O(h), где h – максимальная глубина дерева.

Операции с деревом работают быстрее. При реализации на основе списков все

Данные в дереве хранятся в его вершинах. В программах вершины дерева обычно представляют структурой, хранящей данные и две ссылки на левого и правого сына.

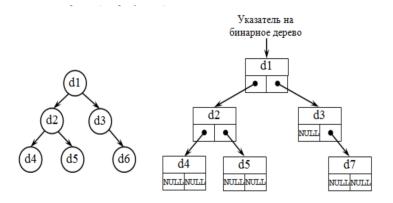


Рис. 7. Пример представления бинарного дерева

Набор библиотек TnT для web-визуализации деревьев и аннотаций на основе трассировок

В статье [12] представлен набор библиотек, предназначенных для web-визуализации деревьев и трассировок.

В статье говорится в первую очередь о визуализации биологических данных в вебприложениях. Но представленные библиотеки не имеют узкой направленности и могут использоваться для разных целей.

Библиотеки TnT (англ. Trees and Tracks) предназначены для создания настраиваемых, динамических и интерактивных визуализаций деревьев и аннотаций на основе треков.

Библиотеки написаны на Javascript с использованием библиотеки D3, которая сама по себе является мощным инструментом визуализации данных. Она использует стандарты масштабируемой векторной графики (SVG), HTML и CSS.

Ниже приведено краткое описание библиотек TnT, непосредственно связанных с визуализацией деревьев.

- TnT Tree

Эта библиотека построена на основе кластерного расположения D3 (D3 cluster layout) и позволяет создавать динамические и интерактивные деревья. Он состоит из нескольких настраиваемых элементов: макета, определяющего общую форму дерева, узлов дерева в которых можно изменять форму, размер и цвет, ярлыков, состоящих из текста или изображений и данных для загрузки объектов Javascript или строк newick / nhx.2.2 TnT Tree Node.

PhyloCanvas - аналогичный проект, предлагающий средства для визуализации деревьев. В качестве основной технологии в нем используется Canvas. Но библиотеки TnT более универсальны и поддерживают интеграцию с другими библиотеками. Документацию и примеры для TnT Tree можно найти по ссылке http://tntvis.github.io/tnt.tree/.

- TnT Tree Node

Эта библиотека предоставляет методы для управления деревом на уровне данных и используется TnT Tree, хотя также может использоваться и независимо. Методы, включенные в TnT Tree Node, варьируются от вычисления наименьшего общего предка набора узлов до извлечения поддеревьев. Документацию для этой библиотеки можно найти как часть документации библиотеки TnT Tree.

Программное обеспечение Empress интерактивного и исследовательского анализа многомерных наборов данных на основе деревьев

В работе [13] представлен интерактивный web-инструмент EMPress для визуализации деревьев в контексте микробиома, метаболома и других областей. EMPress предоставляет широкие функциональные возможности, такие как анимация объектов, наряду со стандартными функциями визуализации дерева.

EMPress реализован в виде подключаемого модуля QIIME 2 (или отдельной программы Python, которую можно использовать вне QIIME 2), способной создавать HTML-документы с автономным пользовательским интерфейсом визуализации. Кодовая база состоит из компонента Python и компонента JavaScript. Кодовая база Python отвечает за проверку данных, предварительную обработку, фильтрацию и форматирование. Взаимодействие с пользователем, рендеринг и генерация рисунков обрабатываются базой кода JavaScript.

Кодовая база Python EMPress использует такие модули, как NumPy, SciPy, Pandas, Click, Jinja2, scikit-bio, формат BIOM и EMPeror.

В кодовой базе JavaScript используются Chroma.js, FileSaver.js, glMatrix, jQuery, Require.js, Spectrum, и Underscore.js.

Программный инструмент Тreemap визуализации иерархических структур

В статье [14] представлена интерактивная версия Тreemap.

В теории графов дерево – это особый тип графа, который связан и ацикличен [?]. Обычно деревья представляются визуально с помощью диаграмм узлов и связей

[git] • 2021_rk6_71b_trishiniv® 92b320b • clockworkRocker, primus2011@gmail.com(2022-05-19 12:36:00 +0300]

(древовидных диаграмм). В деревьях ребра присутствуют только между соседними слоями, и, следовательно, деревья наилучшим образом подходят для представления иерархических данных, для которых характерно расположение элементов на различных уровнях относительно друг друга: "ниже", "выше" или "на одном уровне".

Тreemap - это метод визуализации иерархических структур. Используя этот метод, можно отобразить дерево с миллионами узлов в ограниченном пространстве. Основная идея, лежащая в основе этого метода визуализации, состоит в том, чтобы выделиять прямоугольники для родительских узлов, а для дочерних узлов блоки (прямоугольники) в соответствующем родительском прямоугольнике.

Интерфейс создавался с использованием html / css с jQuery для обработки событий, связанных с кликами.Входными данными для интерфейса является дерево родительских указателей (parent pointer tree - структура данных N-арного дерева, в которой каждый узел имеет указатель на свой родительский узел, но не указывает на дочерние узлы).

Web-инструмент DoubleRecViz для визуализации согласования деревьев транскриптов и генов

В статье [15] представлен веб-инструмент для визуализации согласований между филогенетическими деревьями (деревья, отражающее эволюционные взаимосвязи между различными видами, имеющими общего предка).

В статье описан формат DoubleRecViz, основанный на формате phyloXML (XML, предназначенный для описания филогенетических деревьев и связанных с ними данных).

DoubleRecViz написан на Python и использует библиотеку Dash, которая предоставляет функции динамической визуализации веб-данных. Dash является связкой Flask, React.Js, HTML и CSS.

Приложения на Dash — веб-серверы, которые запускают Flask и связывают пакеты JSON через HTTP-запросы. Интерфейс Dash формирует компоненты, используя React.js.

Komnohehtы Dash — это классы Python, которые кодируют свойства и значения конкретного компонента React и упорядочиваются как JSON.

Полный набор HTML-тегов также обрабатывается с помощью React, а их классы Python доступны через библиотеку. CSS и стили по умолчанию хранятся вне базовой библиотеки, чтобы сохранить принцип модульности и независимого управления версиями.

Подготовлено: *Крехтунова Д.Д.* (*РК6-73Б*), 2021.11.22

2021.12.19: Концептуальная постановка задачи

Требуется реализовать web-ориентированный программный инструмент (далее GBSE-отладчик), обеспечивающий проведение отладки графовых реализации некоторых сложных вычислительных методов. GBSE-отладчик должен обеспечивать отслеживание текущих значений каждого отдельного элемента данных в состояниях, соответствующих узлам связанной графовой модели.

Цель разработки. Создать программный инструментарий (web-ориентированный), который бы позволил визуализировать значения отдельных элементов общих данных[16], остановив обработку на произвольном, выбираемом(ых) заранее, состоянии(ях) данных.

Назначение. Реализация задачи разработки GBSE-отладчика позволит отслеживать текущие значения отдельных элементов данных в произвольном состоянии данных (узле) при проведении текущего расчета, что упростит процесс разработки графоориентированных решателей.

Поставленные задачи (частичный перечень).

- 1. Провести обзор литературы по темам:
- (а) "Автоматические методы отладки наукоемкого кода" (автоматизированные и автоматические методы отладки, приме- няемые при реализации сложных вычислительных методов (СВМ), отладка наукоёмкого кода, science code debugging, graph based programming);
- (b) "Методы визуализации ассоциативных массивов" (web-инструменты для древовидного представления ассоциативных массивов, визуализация ассоциативных массивов).
- 2. Определить перечень поддерживаемых типов элементов данных СВМ, предложить и реализовать методы визуализации для каждого из них.
- 3. Разработать функцию на языке Python, позволяющую определять тип данных, хранящихся в каждом отдельном элементе ассоциативного массива (хранение данных осуществляется в объекте типа dict).
- 4.~ С использованием программного каркаса Django разработать программное обеспечение для визуализации объектов типа dict в древовидном виде.

Подготовлено: *Крехтунова Д.Д. (РК6-73Б), Соколов* А.П. (РК6), 2021.12.19

3 Разработка web-ориентированного редактора графовых моделей

2021.10.05: Обзор языка описания графов DOT

Язык описания графов DOT предоставляется пакетом утилит Graphviz (Graph Visualization Software). Пакет состоит из набора утилит командной строки и программ с графиче-

ским интерфейсом, способных обрабатывать файлы на языке DOT, а также из виджетов и библиотек, облегчающих создание графов и программ для построения графов. Более подробно будет рассмотрена утилита dot.

Замечание 1

dot — программный инструмент для создания многоуровневого графа с возможностью вывода изображения полученного графа в различных форматах (PNG, PDF, PostScript, SVG и др.).

Установка graphviz:

Linux: sudo apt install graphviz

MacOS: brew install graphviz

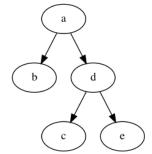
Вызов всех программ Graphviz осуществляется через командную строку, в процессе ознакомления с языком использовалась следующая команда:

```
dot -Tpng <pathToDotFile> -o <imageName>
```

В результате выполнения этой команды будет создано изображение графа в формате png.

Пример описания простого графа на языке DOT представлен далее.

```
digraph G {
    a -> b;
    a -> d -> c;
    d -> e;
}
```



Более подробная информация с примерами представлена в обзоре литературы, который размещён по следующему адресу:

01 - Курсовые проекты/2021-2022 - Разработка web-ориентированного редактора графовых моделей /0 - Обзор литературы/

Подготовлено: Ершов В. (РК6-72Б), 2021.10.05

2021.12.04: Краткое описание алгоритма визуализации графа

В ходе разработки web-ориентированного редактора графов, который позволяет импортировать и экспортировать файлы в формате аDOT [1], был разработан алгоритм визуализации графов. В этой заметке будет рассмотрен этот алгоритм и приведено несколько примеров aDOT файлов, которые корректно визуализируются, используя этот алгоритм.

Теоретические основы и назначение графоориентированной программной инженерии представлены в работе [16]. Принципы применения графоориентированного подхода зафиксированы в патенте [3].

Один из самых важных критериев построенного графа – это его читаемость. Граф должен быть построен корректно и недопускать неоднозначностей при его чтении. Например, вершины не должны налегать друг на друга, ребра не должны пересекаться, создавая сложные для восприятия связи.

Проведя длительную аналитическую работу, было принято решение разбивать граф по уровням. Рассмотрим следующее аDOT-определение графовой модели G (листинг 1).

Листинг 1. Пример aDOT-определение простейшей графовой модели G

```
digraph G {
2 // Parallelism
3  s1 [parallelism=threading]
4 // Graph definition
5   __BEGIN___->s1
6  s4 ->s6 [morphism=edge_1]
7  s5 ->s6 [morphism=edge_1]
8  s1 =>s2 [morphism=edge_1]
9  s1 =>s3 [morphism=edge_1]
10  s2 ->s4 [morphism=edge_1]
11  s3 ->s5 [morphism=edge_1]
12  s6 -> __END___
13 }
```

Если нарисовать такой граф на бумаге, то становится очевидно, что каждый набор вершин имеет одну координату по оси X, а связанные с ними вершины находятся правее по координате X, таким образом напрашивается разбиение графа по уровням. На рисунке (8) представлен этот граф, разбитый на уровни.

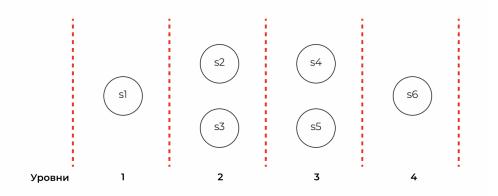


Рис. 8. Узлы графовой модели G, представленные на разных "уровнях"

Разбиение графа по уровням является основой алгоритма визуализации, далее на примере более сложного графа поэтапно разберем алгоритм.

Рассмотрим следующий файл на языке aDOT (листинг 2).

Листинг 2. Пример aDOT-определения графовой модели TEST

```
1 digraph TEST
 2 {
 3 // Parallelism
    s11 [parallelism=threading]
 4
    s4 [parallelism=threading]
    s12 [parallelism=threading]
 6
    s15 parallelism=threading
    s2 [parallelism=threading]
    s8 parallelism=threading
 9
10 // Functions
    f1 [module=DEFAULT VALUE, entry func=DEFAULT VALUE]
12 // Predicates
    p1 [module=DEFAULT VALUE, entry func=DEFAULT VALUE]
14 // Edges
    edge 1 [predicate=p1, function=f1]
16 // Graph model description
        BEGIN ->s1
17
18
    s6 ->s8 [morphism=edge 1]
    s7 ->s8 [morphism=edge 1]
19
    s10 ->s8 [morphism=edge 1]
20
    s11 => s8 [morphism=edge 1]
21
    s11 => s9 [morphism=edge 1]
22
23
    s14 ->s9 [morphism=edge 1]
    s3 ->s9 [morphism=edge 1]
24
    s4 = s6 [morphism=edge 1]
25
    s4 = > s7 [morphism=edge 1]
26
27
    s4 => s10 [morphism=edge 1]
28
    s4 =>s11 [morphism=edge 1]
    s12 =>s4 [morphism=edge 1]
29
    s12 => s14 [morphism=edge 1]
30
    s13 ->s3 [morphism=edge 1]
31
32
    s15 =>s14 [morphism=edge_1]
    s15 => s14 [morphism=edge 1]
33
34
    s2 => s12 [morphism=edge 1]
    s2 => s13 [morphism=edge 1]
35
36
    s2 => s15 [morphism=edge 1]
    s1 ->s2 [morphism=edge 1]
37
38
    s8 = s9 [morphism=edge 1]
    s8 = s6 [morphism=edge 1]
39
40
    s9 -> END
41 }
```

В результате визуализации модели будет получен граф, представленный на рисунке (9).

Основная задача алгоритма – это отрисовать вершины графа в корректных пози-

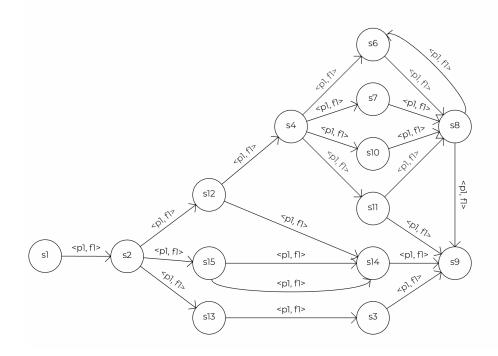


Рис. 9. Визуализация графовой модели TEST

циях, а затем построить между ними ребра. Поскольку редактор графов — это webориентированное приложение, то вся бизнес-логика написана на языке JavaScript. В JavaScript имеется очень удобный инструмент — объекты. Аналогами объектов в других языках программирования являются хэш-карты, но в Javascript возможности использования объектов гораздо шире. Всю информацию об уровнях графа будем хранить в объекте levels. Ниже представлено как выглядит объект levels для рассматриваемого выше графа:

```
{
"1":[{"s1":[]}],
"2":[{"s2":["s1"]}],
"3":[{"s12":["s2"]}, {"s13":["s2"]}, {"s15":["s2"]}],
"4":[{"s4":["s12"]}],
"5":[{"s9":["s14","s3"]}, {"s6":["s4"]}, {"s7":["s4"]}, {"s10":["s4"]},
{"s11":["s4"]},{"s14":["s12","s15"]}, {"s3":["s13"]}],
"6":[{"s8":["s6","s7","s10","s11"]}, {"s9":["s11","s14","s3"]}]
}
```

Ключами объекта levels являются номера уровней, представленные в формате string. Свойсвами являются массивы, на один уровень - один массив. Каждый элемент массива содержит информацию об одной вершине на этом уровне, следовательно количество вершин на уровне - это размер массива. Далее заметим, что элемент массива это не

просто string с названием вершины, а объект. Этот объект содержит один ключ - название вершины на этом уровне, а свойством является массив, который содержит список вершин из которых перешли в эту вершину (переход только по одному ребру).

В качестве примера рассмотрим уровень 5 объекта levels, который был представлен ранее.

```
{
    "5":[{"s9":["s14","s3"]}, {"s6":["s4"]}, {"s7":["s4"]},
    {"s10":["s4"]}, {"s11":["s4"]}, {"s14":["s12","s15"]}, {"s3":["s13"]}],
}

Vectory 5 p. reads upgrerower 7 to person ("s6", "s7", "s10", "s11", "s14", "s2")
```

уровень 5 в графе представлен 7-ю вершин: "s9", "s6", "s7", "s10", "s11", "s14", "s3". Например, в вершину "s6" мы пришли из вершины "s4", таким образом, по ключу "s6" находится массив с один элементом "s4"

```
{"s6": ["s4"]}
```

На рисунке (10) представлен граф с выделенным уровнем №5.

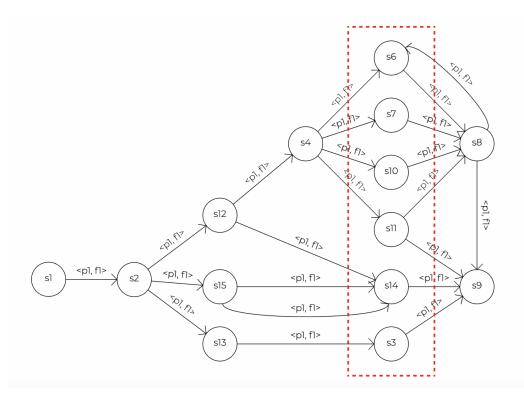


Рис. 10. Уровень №5 на графе

Обратим вниманием на то, что в объекте levels для уровня №5 содержится вершина s_9 которой нет на уровне №5, а она присутствует только на уровне №6. Заполнение объекта levels происходит слево-направо, то есть от меньшего уровня к большему, например, в графе представленном выше есть связь $s_{13} \rightarrow s_3$, таким образом пока в объект levels не будет записана вершина s_{13} , мы не сможем записать связанную с ней вершину s_3 .

Обратным образом происходит дублирование вершин, если обратиться к описанию графовой модели предсталвенной выше, то можно заметить такую связь: $s_1 \to s_2 \to s_{13} \to s_3 \to s_9$. При начальной инициализации объекта levels s_1 будет находиться на уровне 1, s_2 будет находиться на уровне 2 и так далее. Таким образом, вершина s_3 будет находиться на уровне 4, что не совсем корректно. Обработка таких ситуаций является углублением в реализацию алгоритма и в этой заметке не будет подробно описываться.

Для разрешения подобных коллизий после начальной инициализации объекта levels "в лоб" предусмотрено множество дополнительных проверок. Таким образом, на выходе мы получаем корректно сформированный объект levels и дополнительно формируем объект, который будет хранить информацию о вершинах которые находятся не на своем уровне, эти вершины не будут отрисовываться, но при этом они будут учитываться при выравнивании связанных с ними вершин, следовательно просто удалить такие вершины из объекта levels нельзя.

Сама визуализация вершин после формирования объекта levels также является темой отдельной заметки. На данном этапе работы над проектом сначала строится уровень содержащий наибольшее количество вершин, затем строятся оставшиеся уровни: сначала влево до уровня N1, затем вправо до самого последнего уровня.

Подготовлено: Ершов В. (РК6-72Б), 2021.12.04

2021.12.05: Описание текущего состояния проекта

В данной заметке описаны все основные пользовательские сценарии web-ориентированного редактора графов по состоянию на 2021.12.05. Для каждого сценария составлен следующий список:

- 1) реализованные возможности сценария;
- 2) сложности, возникшие при реализации сценария;
- 3) будущий функционал, который расширит user expirience.

Основые сценарии приложения:

- 1) создание графа в приложении путем добавления вершин и ребер между ними;
- 2) экспортирование графа в файл на языке описания графов аDOT;
- 3) импортирование графа из файла на языке описания графов aDOT.

Добавление вершины Для доблавения вершины необходимо выбрать соответствующий пункт в меню, а затем кликнуть на холст. После этого потребуется уточнить название вершины, после ввода названия вершины построение будет полностью завершено. Процесс построения вершины представлен на рисунке 11.

Дополнительный функционал сценария:

- 1) блокировка создания вершины если она находится в близости к другой вершине;
- 2) блокировка создания названия вершины, если такое название присвоено существующей вершине.

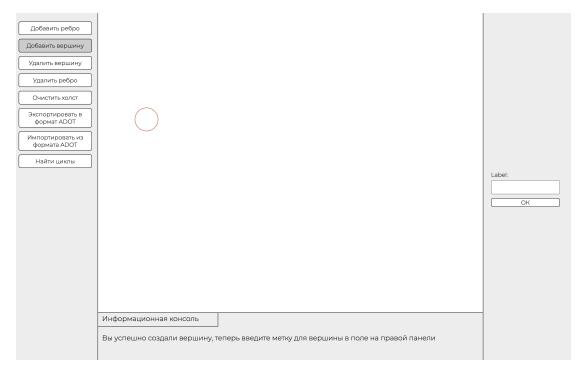


Рис. 11. Создание вершины

Сложности при реализации сценария:

- 1) валидировать все необходимые параметры в процессе создания вершины: положение вершины, название вершины;
- 2) выбор информации о вершине, которую нужно сохранить в оперативной памяти для дальнейшего использования в других сценариях.

Будущее расширение функционала сценария.

- 1) Возможность изменить положение вершины в процессе ее создания. На данный момент вершина создается в месте клика на холст (в том случае если местоположение вершины валидно) и это местоположение уже никак нельзя изменить.
- 2) Использование набора горячих клавиш для ускорения процесса создания вершины.
- 3) При названия подсказать пользователю название вершины, в том случае если прошлые названия имеют инкрементирующийся для каждой вершины постфикс, например, уже созданы вершины s_1, s_2 , при создании новой вершины в поле ввода названия система предложит пользователю название s_3 .

Добавление ребра Для добавления ребра необходимо поочередно выбрать две вершины, которые будут соединены ребром. Затем система потребует ввода предиката и функции, в том случае если введенный предикат или функция являются уникальнальными в рамках графа, то система потребует ввода информации о module и entry func. После этого построение ребра будет завершено. Процесс построения ребра представлен на рисунке 12.

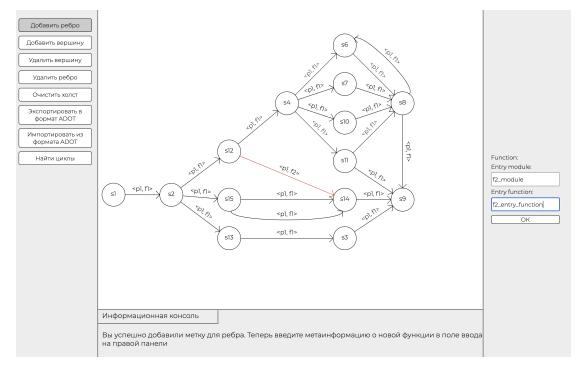


Рис. 12. Создание ребра

Дополнительный функционал сценария.

- Блокировка создания ребра из вершины в нее же саму.
- Если между вершинами уже существуют ребра, то система построит ребро, используя кривые Безье.
- Если на момент построения ребра из вершины выходит только одно ребро, то система потребует учтонения типа параллелизма (формат aDOT).
- Если предикат или функция не являются уникальными в рамках графа, то не требуется уточнение информации о module и entry func.

Сложности при реализации сценария.

- Использование множества вспомогательных функций: подсчет количества ребер между вершинами, для определения типа построения ребра (прямое или кривые Безье), подсчет количества ребер выходящих из вершины для уточнения типа параллелизма, проверка полей ввода предиката и функции (предикат может быть неопределен, а функция должна быть определена), проверка введенных предиката и функции на уникальность в рамках графа.
- Выбор типа построения ребра: прямое, кривые Безье. Обработка ситуации, когда пользователь создает цикл между этими вершинами.

Будущее расширение функционала сценария.

- Возможность перевыбора вершин для построения ребра между ними. На данный момент нельзя допустить ошибку при выборе вершин, необходимо закончить процесс построения ребра, удалить его и создать новое, выбрав другие вершины.
- Алгоритм для построения ребра с использованием кривых Безье. На данный момент ребро строится с помощью одной кривой Безье, что не позволяет строить ребра более сложного вида, тем самым разрешая коллизии, когда ребро проходит через другие вершины.

Удаление вершины Для удаления вершины необходимо выбрать соответствующий пункт в меню, а затем кликнуть на вершину для удаления - вершина удаляется с холста вместе со всеми связанными с ней ребрами.

Сложности при реализации сценария.

– Корректно удалить все связанные с вершиной ребра, а затем удалить информацию об этих ребрах и связанных вершин.

Будущее расширение функционала сценария.

- Возможность одновременного выбора нескольких вершин для удаления.
- Возможность откатить действия в том случае если была удалена лишняя вершина. В целом это касается всего приложения, на данный момент любое действие неотвратимо.

Удаление ребра Для удаления ребра необходимо выбрать соответствующий пункт в меню, а затем клкинуть на ребро для удаления - ребро удаляется с холста.

Сложности при реализации сценария.

– Удалить информацию о ребре из связанных этим ребром вершин.

Будущее расширение функционала сценария.

- Более корректный выбор ребра, на данный момент надо кликать ровно на ребро поскольку для перехвата события клика используется event.target.closest.
- Возможность одновременного выбора нескольких ребер для удаления.

Экспорт в формат aDOT Для экспорта в формат aDOT необходимо выбрать соответствующий пункт в меню, а затем поочередно выбрать две вершины, которые будут являться стартовой и конечной вершиной соответственно. Затем сформируется текстовый файл с описание графа в формате aDOT и автоматически начнется его загрузка.

Импорт из формата aDOT Для импорта из формата aDOT необходимо выбрать соответствующий пункт в меню, а затем выбрать файл для импорта. Далее система сама построит граф, сохранив всю необходимую информацию.

Сложности при реализации сценария.

– Разработка алгоритма визуализации...

Будущее расширение функционала сценария.

 Разработка более гибкого алгоритма визуализации, который сможет работать с более сложными графами.

Подготовлено: Ершов В. (РК6-72Б), 2021.12.05

4 Реализация поддержки различных стратегий распараллеливания в рамках графоориентированного программного каркаса

2021.11.14: Известные алгоритмы поиска циклов в ориентированных графах

Существует несколько групп алгоритмов поиска[17]:

- 1) алгоритмы, основанные на обходе ориентированного графа $(O\Gamma)$;
- 2) алгоритмы, основанные на использовании матриц смежности, описывающих конкретный граф.

Одним из представителей алгоритмов первой группы (обхода ОГ) является алгоритм поиска в глубину (англ., depth-first-search (DFS)), который предполагает, что обход осуществляется из фиксированного и заранее заданного узла. Если число узлов ОГ равно n, то сложность алгоритма DFS $O(n^2)$ и $O(n^3)$ – для случая "многократного обхода" из каждого узла². Поэтому для ускорения алгоритма необходимо применение модификаций, например распараллеливание алгоритма поиска в глубину [18].

Зададим граф G(V, E), где $V = \{a, b, c, ...\}$ – множество вершин, |V| = n, а $E = \{\alpha\beta : \alpha\beta \in V \times V\}$ – множество рёбер (пример, $\{ab, ad, ..., ge\}$).

Для определения $O\Gamma$, часто, применяют понятие матриц смежности[19]:

$$||A|| = ||a_{ij}||_{n \times n};$$
 $a_{ij} = \begin{cases} 1, & -\text{ определено ребро с началом в узле } i \text{ и концом в узле } j; \\ 0, & -\text{ ребро не определено.} \end{cases}$ (1)



 $^{^{2}}$ Для случая ОГ возможность идентификации всех циклов требует осуществления многократных обходов, начиная с каждого из узлов ОГ.

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & \mathbf{d} & \mathbf{e} & \mathbf{f} & \mathbf{g} \\ \mathbf{a} & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \mathbf{c} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{d} & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{e} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{f} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{g} & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 01 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(2)$$

Пример графа, построенного на основе его матрицы смежности A, приведен на рис. 13.

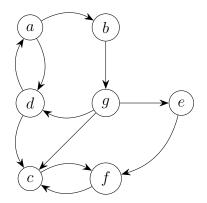


Рис. 13. Граф, построенный по матрице смежности А

Элемент матрицы смежности a_{ij} указывает на факт наличия определённого рёбра с началом в узле i и концом в узле j, тогда как транспонированная матрица A^T задаёт новый ОГ с теми же узлами и рёбрами, противоположно направленными относительно исходного ОГ.

$$A^{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & \mathbf{d} & \mathbf{e} & \mathbf{f} & \mathbf{g} \\ \mathbf{a} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{b} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{c} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ \mathbf{d} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \mathbf{e} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \mathbf{f} & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{a} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(3)$$

Введём обозначение матрицы, возведённой в степень m:

$$A^m = \underbrace{A \times A \times \ldots \times A}_{m}. \tag{4}$$

Матрица A^m обладает следующим свойством: элемент матрицы a^i_j равен числу путей из вершины i в вершину j, состоящих ровно из m рёбер[19]. Длиной цикла

называют количстево рёбер в этом цикле. Для того, чтобы определить циклы длины 2m, нужно найти матрицу циклов C_m , определяемую следующим образом:

$$C_m = A^m \wedge (A^T)^m; (5)$$

где л – оператор конъюнкции, применяемый поэлементно.

Таким образом, матрица C_m будет содержать все циклы длины 2m. Пример для поиска циклов длины 2. 6.

$$C_{2} = A \wedge A^{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & \mathbf{d} & \mathbf{e} & \mathbf{f} & \mathbf{g} \\ \mathbf{a} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{c} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{d} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{e} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{f} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{g} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(6)$$

Подготовлено: Муха В. (РК6-73Б), 2021.11.14

5 Графоориентированная методология разработки средств взаимодействия пользователя в системах автоматизированного проектирования и инженерного анализа

2021.11.06: Особенности применения графового описания процессов обработки данных в pSeven (DATADVANCE)

pSeven — это платформа для анализа данных, оптимизации и создания аппроксимационных моделей, дополняющая средства проектирования и инженерного анализа. pSeven позволяет интегрировать в единой программной среде различные инженерные приложения, алгоритмы многодисциплинарной оптимизации и инструменты анализа данных для упрощения принятия конструкторских решений[20].

Принципы функционирования

На концептуальном уровне в pSeven вводятся следующие понятия:

– Проект – набор файлов, используемых в pSeven для описания решений одной или нескольких задач и хранения результатов их решения.

- Расчётная схема (workflow) формальное описание процесса решения некоторой задачи в виде ориентированного графа, узлами которого являются блоки, а рёбрами - связи. Такое описание хранится в бинарном файле с расширением .p7wf, использующем некоторый специализированный формат хранения подобного рода описаний.
- Блок функциональный элемент расчётной схемы, отвечающий за обработку входных данных и формирование выходных данных.
- Порт переменная определённого типа, описанная в блоке и имеющая в нём уникальное имя, значение которой может быть передано в другие блоки или получено от них через связи.
- Связь (link) одностороннее соединение между двумя портами, обеспечивающее передачу данных от одного к другому.

Проекты в pSeven имеют единую базу данных, куда записываются все результаты запусков расчётных схем и откуда берутся данные для их последующей презентации пользователю и их анализа. Для определения переменных, значения которых должны быть записаны в неё записаны, предусмотрены специализированные порты для самих расчётных схем, с которыми связываются те блоки, результаты выполнения которых интересуют пользователя.

Связи служат для маршрутизации данных. С их помощью осуществляется и взаимодействие между блоками и, кроме того, определяется очерёдность их запуска. В момент добавления связи в пакете pSeven выполняется проверка портов на совместимость. Они считаются совместимыми, если тип данных источника можно преобразовать к типу данных адресата.[21]

Поддержка циклов и ветвлений

Расчетная схема может включать расчетные циклы. Для их создания применяются специализированные блоки, имеющие функциональную возможность управления запуском других блоков в теле цикла и принятия решения о его прекращении. Такие блоки называются управляющими блоками циклов. Одним из характерных примеров является оптимизационный цикл, управление которым осуществляется из блока Optimizer [21], позволяющего, например, настроить максимальное число итераций или требуемую точность, как условия окончания.

Если речь идёт о задачах анализа данных, существует отдельный блок, обозначающий входную точку цикла (Loop). Такой цикл принимает на вход список наборов аргументов, каждый из которых будет обработан на соответствующем шаге цикла, и выдаёт список наборов выходных значений, которые сохраняются в базе данных проекта.

Кроме того, существует возможность включения в расчётную схему условного и безусловного ветвления. Первое достигается засчёт создания связей для подключения одного и того же порта вывода к различным портам ввода. В этом случае по каждой

связи передается копия выходных данных, полученных у источника [21]. Условные ветвления создаются с помощью специального блока Condition, который по определённому условию передаёт входные данные одному из подключенных блоков. Их целесообразно использовать для устранения ошибок в работе блока, отбраковки некорректных входных данных и других аналогичных целей[21].

Особенности выполнения расчётных схем

При выполнении расчётных схем каждый блок запускается в отдельном процессе на уровне операционной системы. Как сказано ранее, начало выполнения блока определяется его связями с другими. Любой блок будет ожидать завершения работы другого блока только в том случае, если ему необходимо получить от него входные данные. Это означает, что два блока, не имеющих связей друг с другом Блоки, входящие в состав различных ветвлений расчетной схемы, могут запускаться параллельно, поскольку они не зависят друг от друга по используемым данным [21].

Кроме того, при обработке больших выборок данных может потребоваться обрабатывать по несколько наборов данных одновременно в независимых потоках исполнения. Помимо прочего этой цели служит блок Composite, который является контейнером для нескольких блоков. В его настройках можно включить опцию параллельного исполнения, указать, с какого порта данные будут обрабатываться параллельно, и указать максимальное число потоков. При запуске расчетной схемы пакет pSeven создает несколько виртуальных экземпляров блока Composite и автоматически распределяет входные наборы данных между ними. Как только в одном из таких виртуальных блоков завершается расчет, он получает из выборки следующий набор для обработки. [22]

Подготовлено: Тришин И.В. (РК6), 2021.11.06

2022.02.09: Сравнительная характеристика GBSE, pSeven, Pradis

В рамках сравнения были рассмотрены известные программные комплексы, в основе которых в том или ином виде лежит идея организации вычислений, описываемая с помощью ориентированных графов (графоориентированный подход).

Для проведения сравнения с программным каркасом GBSE выбирались программные продукты, в которых так или иначе реализован описанный выше подход. В первую очередь был рассмотрен программный комплекс pSeven, разработанный отечественной компанией DATADVANCE. Он направлен в первую очередь на решение конструкторских, оптимизационных задач и, помимо этого, задач анализа данных, что в первом приближении делает его аналогом GBSE по предметному назначению. У автора работы присутствует опыт работы с этим комплексом в рамках прохождения курса лабораторных работ по изученной на кафедре дисциплине "Методы оптимизации". В данном курсе были освещены основы работы с pSeven и основные приниципы организации вычислений в нём. Таким образом, на момент выбора программных комплексов

для сравнения уже имелась некоторая информация о pSeven, которая позволила включить его в рассмотрение.

Кроме того, научным руководителем данной работы была рекомендована разработка отечественной компании "Ладуга" PRADIS - комплекс, так же направленный на решение конструкторских задач. В данной разработке основной упор сделан на задачи анализа проектных решений на микро- и макроуровне.

Выделение признаков для сравнения

Среди прочих должны были быть выделены признаки, относящиеся как к общей структуре программного комплекса, так и к особенностям реализации в нём графоориентированного подхода и, кроме того, к особенностям взаимодействия с пользователем при решении задач, требующих действий с его стороны.

Сравнение осуществлялось с учётом следующих характерных признаков:

- 1) предметное назначение;
- 2) принципы формирования графовых моделей;
- 3) формат описания графовых моделей;
- 4) файловая структура проекта проведения анализа ТО;
- 5) особенности работы с входными и выходными данными графовых моделей;
- 6) особенности передачи данных между узлами графовых моделей;
- 7) поддержка ветвлений и циклов в топологии графовых моделей;
- 8) поддержка параллельной обработки данных;
- 9) возможность выбрать из набора однотипных промежуточных результатов расчётов некоторые экземпляры и продолжить расчёт только для них;
- 10) возможность доопределять входные данные непосредственно во время обхода графовой модели.

Программный комплекс Pradis

Программный комплекс Pradis, разработанный отечественной компанией «Ладуга», предназначен для анализа динамических процессов в системах разной физической природы (механических, гидравлических и т.д.). Как правило, при помощи данного комплекса решаются нестационарные нелинейные задачи, в которых характеристики системы зависят от времени и пространственных координат. Круг задач, которые могут быть решены с помощью Pradis, достаточно широк: возможен анализ любых технических объектов, модели поведения которых представимы системами обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ). Анализ статических задач обеспечивается как частный случай динамического расчета.

Практические возможности по решению конкретных задач определяются текущим составом библиотек комплекса, прежде всего библиотек моделей элементов [23]. Данный копмплекс был рекомедован к обзору и сравнению, однако, после проведённого обзора официальной документации [24] не было получено достаточного представления об использовании элементов графоориентированных подходов в данном копмлексе, поэтому было принято решение исключить его из дальнейшего рассмотрения.

Программный комплекс pSeven

В программном комплексе pSeven, разработанном компанией DATADVANCE, используется методология диаграмм потоков данных (англ. Dataflow diagram, DFD). В комплексе применяются ориентированные графы (орграфы) для описания процесса решения некоторой задачи проектирования технического объекта. В терминах pSeven: графовое описание процесса решения задачи называется расчетной схемой (англ. workflow), что, помимо прочего, соответствует классическому термину из области математического моделирования; узлам орграфа поставлены в соответствие процессы обработки данных (используется термин блоки), а рёбра определяют связи между блоками и направления передачи данных между процессами [25].

Используются следующие базовые понятия pSeven:

- расчётная схема формальное описание процесса решения некоторой задачи в виде орграфа;
- блок программный контейнер для некоторого процесса обработки данных, входные и выходные данные для которого задаются через порты (см. ниже);
- порт переменная конкретного³ типа, определённая в блоке и имеющая уникальное имя в его пределах;
- **связь** направленное соединение типа "один к одному" между выходным и входным портами разных блоков.

С учётом данных понятий можно описать используемую методологию диаграмм потов данных следующим образом. Расчётная схема содержит в себе набор процессов обработки данных (блоков), каждый из которых имеет (возможно, пустой) набор именованных входов и выходов (портов). Данные передаются через связи. Для избежания т.н. гонок данных (англ. data races) множественные связи с одним и тем же входным портом не поддерживаются. Для начала выполнения каждому блоку требуются данные на всех входных портах. Все данные на выходных портах формируются по завершении исполнения блока [25].

На рисунке 14 A, B, C, D - блоки обработки информации, x_i - входные порты, y_i - выходные. Стрелками показаны связи. Согласно изложенному выше принципу, сначала будет запущен блок A, по его завершении - блок B. Затем - блоки C и E (параллельно). По завершении блока C будет запущен блок D. На этом обход расчётной схемы завершится, и значения y_7, y_8 и y_9 будут сохранены в локальной базе данных.

Замечание 2 (принцип обхода в pSeven)

Все порты, которые не привязаны к другим блокам, автоматически становятся внешними входами и выходами для всей расчётной схемы. Для начала обхода расчётной схемы должен быть предоставлен набор входных данных и указаны внешние

³Динамическая типизация не поддерживается.

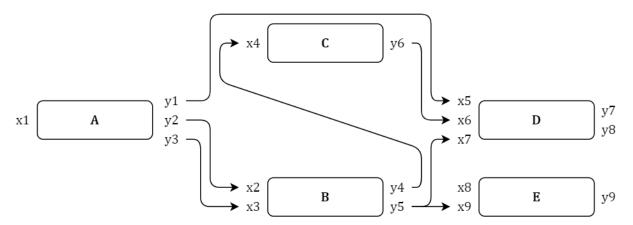


Рис. 14. Пример диаграммы потоков данных

выходные порты, значения которых обязательно должны быть вычислены в результате обхода. Обход производится в несколько этапов: сперва отслеживаются пути от необязательных выходных портов к входным, все встреченные на пути блоки помечаются, как неактуальные и не будут выполнены в дальнейшем; затем отслеживаются пути от обязательных выходных портов к входным и все встреченные на пути блоки помечаются, как обязательные к исполнению. Наконец, обязательные к исполнению блоки запускаются, начиная с тех, которые подключены к внешним входам расчётной схемы, а неактуальные игнорируются. Обход прекращается, когда не остаётся необходимых для выполнения блоков [25].

По завершении обхода расчётной схемы результаты расчётов сохраняются в локальной базе данных проекта. В pSeven встроен инструментарий для визуализации и анализа результатов. Схемы, графики, гистограммы и результаты анализа сохраняются в т.н. отчётах - специальных файлах, сохраняемых в директории проекта. Результаты проведённого сравнения представлены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнительная таблица

№	Признак	pSeven	GBSE
1	Предметное	Задачи оптимизации, анализ данных	Задачи автоматизированного проектирова-
	назначение		ния, алгоритмизация сложных вычисли-
			тельных методов, анализ данных
2	Принцип форми-	Узлы – блоки (процессы), рёбра – связи	Узлы – состояния данных, рёбра – перехо-
	рования графо-	(направление передачи данных) [25].	ды между состояниями, с указанием функ-
	вых моделей		ций перехода [16].
3	Формат описа-	Расчетная схема (в форме орграфа) сохра-	Графовая модель (определяет алгоритм
	ния орграфа	няется в двоичный файле закрытого фор-	проведения комплексных вычислений в
		мата с расширением .p7wf.	форме орграфа) сохраняется в текстовом
			файле открытого формата, подготовленно-
			го на языке а DOT[1], являющегося "суже-
			нием" (частным случаем) известного фор-
			мата DOT (Graphviz).
4	Файловая струк-	Проект состоит из непосредственно файла	Проект состоит из .аООТ файла с опи-
	тура проекта	проекта, в котором хранятся ссылки на со-	санием графа, .alNl-файлов с описанием
	проведения	зданные расчётные схемы и локальную ба-	форматов входных данных, библио-
	анализа ТО	зу данных, сами расчётные схемы, файлы с	тек функций-обработчиков, функций-
		их входными данными, файлы отчётов, где	предикатов и функций-селекторов ,
		сохраняются выходные данные последних	файлов, куда записываются выходные
		расчётов и результаты их анализа.	данные.

5	особенности ра-	Входные данные должны быть указаны	Входные данные хранятся в файле в фор-
	боты с входны-	при настройках внешних входных портов	мате aINI[2], откуда считываются при за-
	МИ И ВЫХОДНЫМИ	расчётной схемы. Данные с выходных пор-	пуске обхода графа [26]. Для записи выход-
		7 1	
	данными графо-	тов схемы сохраняются в локальной базе	ных/промежуточных данных в файлы или
	вых моделей	данных. Для их записи в файлы для обра-	базы данных необходимо добавить соответ-
		ботки/анализа вне pSeven необходимо вос-	ствующие функции-обработчики. Формат
		пользоваться специально предназначенны-	выходных данных не регламентирован.
		ми для этого блоками.	
6	Особенности пе-	Данные между узлами передаются со-	Поскольку узлами графа являются состо-
	редачи парамет-	гласно определйнным связям, которые на	яния данных, существует возможность за-
	ров между узла-	уровне выполнения создают пространство	действовать в расчётах только часть дан-
	ми графовых мо-	в памяти для ввода и вывода данных для	ных, оставляя их другую часть неизмен-
	делей	выполняемых в раздельных процессах бло-	ной.
		ков. Транзитная передача данных, которые	
		не изменяются в данном блоке, на выход	
		невозможна.	
7	Поддержка ветв-	Присутствует. Достигается засчёт специ-	Присутствует по умолчанию
	лений и циклов	альных управляющих блоков, которые от-	
	,	слеживают выполнение условий: для ветв-	
		ления используется блок "Условие" (англ.	
		condition), который перенаправляет дан-	
		ные на один из выходных портов в зави-	
		симости от выполнения описанного усло-	
		вия (подробнее см. [27]); Для реализа-	
		ции циклов в общем случае используют-	
		ся блоки "Цикл"(англ. loop)[21], но для	
		некоторых задач существуют специализи-	
		рованные блоки, организующие логику ра-	
		боты цикла (например, блок "Оптимизатор"(англ. optimizer))	
			l l

36

8	Поддержка	Присутствует. Блоки, входящие в состав	Присутствует. Существует возможность
	параллельной	различных ветвлений схемы могут быть	обойти различные ветвления графа одно-
	обработки дан-	выполнены параллельно, поскольку они не	временно.
	ных	зависят друг от друга по используемым	
		данным.	
9	Возможность	Производится на этапе анализа результа-	Планируется реализовать средство визуа-
	выбрать из набо-	тов с помощью отчётов, где можно задать	лизации данных, которое в совокупности с
	ра однотипных	фильтрацию выходных данных согласно	автоматической генерацией форм ввода[26]
	промежуточных	указанным критерия. В случае, если ре-	позволят отбирать корректные результаты
	результатов рас-	зультаты являются промежуточными, рас-	промежуточных вычислений во время об-
	чётов некоторые	чётную схему приходится разбивать на ча-	хода графовой модели.
	экземпляры и	сти.	
	продолжить рас-		
	чёт только для		
	них;		
10	Возможность	Отсутствует	Частично реализована при помощи
	доопределения		функций-обработчиков специального типа,
	значений вход-		создающих формы ввода
	ных данных в		
	процессе обхода		
	графа		

Подготовлено: Тришин И.В. (РК6), 2022.02.09

2022.02.09: Требования к представлению графовых моделей в comsdk

Введение

На сегодняшний день существуют две реализации графоориентированного программного каркаса GBSE [28]. Обе они представляют собой подключаемые объектно-ориентированные библиотеки, включающие в себя API для создания состояний CBM (узлов графовой модели) и их объединения с помощью функций-предикатов и функций-обработчиков [28]. Хронологически первой из них является реализованная на языке C++ библиотека соmsdk. Более поздней и потому более актуальной в некоторых аспектах является библиотека на языке Python pycomsdk. Поскольку их разработка ведётся не параллельно, между ними существует большое количество алгоритмических и архитектурных отличий. Среди прочих особо выделяется подход к работе с языком описания графовых моделей аDOT и, как следствие, программное представление этих моделей в описанных выше API.

Краткое описание синтаксиса языка аDOT

При описании графовых моделей в GBSE вводятся следующие понятия:

- *состояние данных* некоторый строго определённый набор именованных переменных фиксированного типа, характерных для решаемой задачи;
- морфизм − некоторое отображение одного состояния данных в другое;
- функция-предикат функция, определяющая соответствие подаваемого ей на вход набора данных тому виду, который требуется для выполнения отображения;
- функция-обработичик функция, отвечающая за преобразование данных из одного состояния в другое;
- функция-селектор функция, отвечающая в процессе обхода графовой модели за выбор тех рёбер, которые необходимо выполнить на следующем шаге в соответствии с некоторым условием.

Самая актуальная версия представленного формата содержится в [29].

В текущей версии comsdk поддерживается только уже устаревшая версия формата aDOT, в связи с чем актуальна потребность в обновлении модуля этой библиотеки, содержащего в себе работу с графовыми моделями, для поддержки новейшей версии этого формата.

Список требований

В результате анализа текущего синтаксиса языка aDOT были сформулированы следующие требования к представлению графовых моделей в новой версии библиотеки comsdk:

- 1) Каждое ребро графа должно иметь возможность привязать к нему до трёх морфизмов препроцессор, обработчик и постпроцессор
- 2) Каждый морфизм должен содержать в себе функцию-предикат и функциюобработчик;
- 3) Каждый узел графа должен хранить состояние данных (т.е. сведения о типах и именах переменных);
- 4) Каждый узел графа должен хранить данные о стратегии выполнения рёбер, исходящих из него (поочерёдное выполнение, выполнение в отдельных потоках, выполнение в отдельных процессах, выполнение на удалённом узле через SSH-подключение);

Кроме того, были сформулированы требования к формированию данных обновлённых моделей:

1. При формировании графовой модели все узлы N_i , которые обозначены в аDot файле с её описанием, как подграфы, должны заменяться загружаемыми из соответсвующих аDOT-файлов графовыми моделями G_i , при этом рёбра, входящие в N_i должны быть подключены к начальному узлу G_i , а исходящие из N_i - к конечному узлу G_i ;

Подготовлено: Тришин И.В. (РК6), 2022.02.09

2022.03.09: Текущее представление графовых моделей в библиотеке comsdk

На рисунке 15 представлена UML-диаграмма классов, связанных с представлением в comsdk ориентированного графа, описывающего организацию вычислительных процессов.

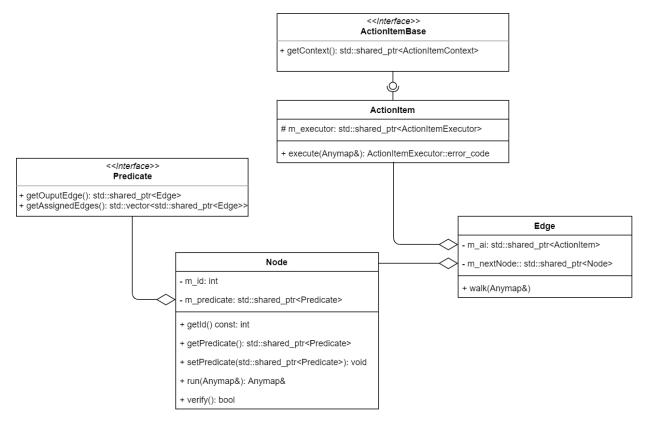
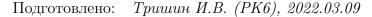


Рис. 15. Текущая структура классов, связанная с графовыми моделями в comsdk

В существующей структуре классов можно выделить следующие недостатки.

- 1. Отсутствует класс графа, который обеспечивал бы удобный интерфейс графовым моделям.
- 2. Отсутствует структура данных, обеспечивающая хранение узлов, относящихся к конкретной графовой модели (включая вложенные графовые модели)
- 3. Индекс узла графа задаётся пользователем при инициализации, что не гарантирует его уникальности.
- 4. Отсутствует структура данных, обеспечивающая хранение рёбер, относящихся к конкретной графовой модели (включая вложенные графовые модели).
- 5. Отсутствует объект, который бы описывал связи между узлами и рёбрами; вместо этого эти связи прописаны в самих узлах и рёбрах, что затрудняет операции с графовой моделью (преобразования и проч.).
- 6. Функции-предикаты привязываются к узлам, а не к рёбрам, что не соответствует требованиям синтаксических конструкций языка aDOT.
- 7. В текущей версии задачей функций-предикатов фактически является отбор рёбер, которые должны быть выполнены, а не проверка соответствия данных в узле определённому формату.



2022.03.23: Требования к возможностям обхода графовых моделей в GBSE

Графоориентированный подход ГПИ подразумевает параллельное выполнение рёбер графа, выходящих из одной вершины. На рисунке 16 после выполнения функций перехода F_{12} и F_{13} , связанных с рёбрами, будет осуществлён переход в два независимых состояния данных S_2 и S_3 соответственно. Далее возникает задача правильным образом преобразовать данные из этих состояний в общее состояние S_4 .

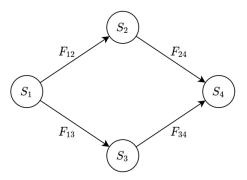


Рис. 16. Пример графовой модели, предполагающей параллельное исполнение

Замечание 3

Далее, допуская определённую нестрогость, говоря о том, что функции перехода, связываемые с рёбрами графовых моделей, выполняются в отдельных потоках выполнения, будем считать, что они выполняются: либо в общем адресном пространстве текущего процесса выполнения, либо в разных процессах на одной или разных вычислительных системах.

Другими словами, в рамках настоящей заметки не будем предполагать, что данные, формируемые в параллельных ветках графовой модели, размещаются в общей памяти.

Рассматриваемый подход может способствовать значительному увеличению эффективности использования ресурсов вычислительной системы и, как следствие, ускорению процесса выполнения⁴, однако, предполагает необходимость реализации дополнительных второстепенных задач. Так для примера на рис. 16 функции перехода F_{12} и F_{13} должны выполняться параллельно (в двух разных потоках выполнения), а значит полученные в результате их выполнения данные, в общем случае⁵, могут быть размещены в разных адресных пространствах разделённой оперативной памяти. Поэтому встаёт задача сбора этих данных в общую оперативную память при переходе в S_4 . В момент разветвления графа должно (в общем случае) происходить «разделение» обрабатываемых данных, чтобы каждая ветвь работала со своим экземпляром

⁴В случае наличия доступных вычислительных ресурсов: нескольких ядер процессора.

⁵Речь идёт о самом общем случае, когда выпонение отдельных функций перехода допускается на разных вычислительных машинах или на кластерных системах с распределённой памятью.

данных. Помимо этого алгоритм обхода графовой модели должен корректно отрабатывать слияние ветвей графа.

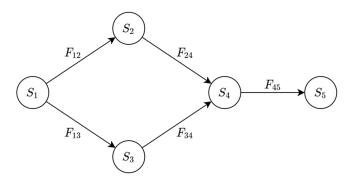


Рис. 17. Пример графовой модели с совмещением ветвей

На рисунке 17 ветви $S_1 \to S_2 \to S_4$ и $S_1 \to S_3 \to S_4$ выполняются в разных потоках выполнения, но ребро F_{45} должно быть выполнено только в одном потоке (если обратного не предполагает функция перехода этого ребра). Таким образом, очевидна необходимость в некоторой управляющей программной структуре, которая бы обеспечивала управление (запуск и завершение) различных потоков выполнения.

Кроме того, указанная управляющая программная структура должна поддерживать несколько вариантов параллельного исполнения. Среди прочих желательна поддержка:

- 1) поочерёдного выполнения (в первую очередь для отладки);
- 2) многопроцессного выполнения;
- 3) многопоточного выполнения;
- 4) выполнения на удалённых узлах (через SSH-соединение).

Т.о. целесообразна поддержка единого интерфейса для различных режимов (стратегий) выполнения (параллельный, последовательный, распределённый и пр.) в рамках обозначенной управляющей программной структуры.

Подготовлено: Tpuuuh U.B., Coколов $A.\Pi.$, 2022.03.23

2022.04.13: Дополнительный обзор литературы и наброски для введения

Методы решения задач, возникающие в процессе современных научно-технических исследований, зачастую предполагают выполнение большого количества операций обработки данных. Каждой такой операции требуются входные данные. По завершении выполнения операции получаются выходные данные. При этом выходные данные одной операции могут являться входными для одной или нескольких других операций. Между ними формируются зависимости по входным и выходным данным. Для учёта

[git] • 2021_rk6_71b_trishiniv® 92b320b • cłockworkRocker, primus2011@gmail.com(2022-05-19 12:36:00 +0300]

этих зависимостей возникает необходимость правильным образом организовать выполнение операций в пределах отдельно взятого метода и, в частности, при разработке программного обеспечения (ПО), которое реализовало бы данный метод.

В наши дни популярность приобретает применение научных систем организации рабочего процесса (англ. scientific workflow systems). Такие системы позвояют автоматизировать процессы решения научно-технических задач, предоставляя средства организации и управления вычислительными процессами [30]. Процесс работы с подобными системами состоит из 4 основных этапов:

- 1. составление описания операций обработки данных и зависимостей между ними;
- 2. распределение процессов обработки данных по вычислительным ресурсам;
- 3. выполнение обработки данных;
- 4. сбор и анализ результатов и статистики.

Одной из ключевых особенностей подобного подхода к реализации методов решения научно-технических задач является выделение операций обработки данных в отдельные программные модули (функции, подпрограммы). При известных входных и выходных данных каждого модуля становится возможной их независимая разработка[31]. Это позволяет распределить их разработку между членами команды исследователей. Вследствие этого уменьшается объём работы по написанию исходных кодов, приходящийся на одного исследователя. Это, в свою очередь, облегчает отладку и написание документации, что положительно сказывается на общем качестве реализуемого ПО.

Подготовлено: Тришин И.В. (РК6-81Б), 2022.04.13

2022.05.17: Современные форматы описания иерархических структур данных

При выполнении курсового проекта по дисциплине «Технологии Интернет» была поставлена задача разработать программный инструмент описания структуры состояния данных вычислительных методов [28]. Данный инструмент планируется в дальнейшем встроить как компонент в средство визуализации состояний данных. Разработка данного средства направлена на повышение прозрачности и наглядности взаимодействия с программным инструментарием ГПИ.

Кроме того, разработка инструмента описания состояний данных направлена на поддержание идеи документирования алгоритмов и вычислительных методов, реализуемых по методологии GBSE.

Описание структуры состояния данных

Т.н. «состояние данных» [28] представляет собой множество именованных переменных фиксированного типа, характерное для конкретного этапа вычислительного метода или алгоритма. Данные в соответствующем состоянии, как правило, удобно хранить в виде ассоциативного массива. Тип отдельной переменной может быть как скалярным

(целое, логическое, вещественное с плавающей запятой и пр.), так и сложным «векторным» (структурой, классом, массивом и пр.). Примером сложного «векторного» типа является, в свою очередь, ассоциативный массив со строковыми ключами, при этом конкретная переменная этого типа будет хранить, как правило, адрес этого массива. В общем случае элементы данного массива могут иметь разные типы.

В рассматриваемом случае возникает возможность организации хранения состояния данных в виде иерархических структур.

Таким образом, для описания состояний данных требуется формат, который бы поддерживал гетерогенные (т.е. разнотипные) иерархические структуры данных.

Анализ известных форматов

Одними из первых рассмотренных были форматы для хранения научных данных HDF4 и HDF5 [32]. Данные бинарные форматы позволяют хранить большие объёмы гетерогенной информации и поддерживают иерархическое представление данных. В нём используется понятие набора данных (англ. dataset), которые объединяются в группы (англ. group). Кроме того, формат HDF5 считается «самодокументирующимся», поскольку каждый его элемент – набор данных или их группа – имеет возможность хранить метаданные, служащие для описания содержимого элемента. Существует официальный API данного формата для языка C++ с открытым исходным кодом. Одним из гланвых недостатков HDF5 является необходимость дополнительного ПО для просмотра и редактирования данных в этом формате, поскольку он является бинарным.

Альтернативой бинарным форматам описания данных являются текстовые. Среди них были рассмотрены форматы XML (Extensible Markup Language) и JSON (Javascript Object Notation). Главным преимуществом формата XML является его ориентированность на древовидные структуры данных и лёгкость лексико-синтаксического разбора файлов этого формата. Среди недостатков стоит выделить потребность в сравнительно большом количестве вспомогательных синтаксических конструкций, необходимых для структурирования (тегов, атрибутов). Они затрудняют восприятие чистых данных и увеличивают итоговый объём файла.

Формат JSON, так же, как и XML рассчитан на иерархические структуры данных, но является не столь синтаксически нагруженным, что облегчает восприятие информации человеком [33]. Кроме того, крайне важным преимуществом JSON является его поддержка по-умолчанию средствами языкы программирования Javascript, который используется при разработке веб-приложений. При этом JSON также обладает рядом недостатков. Среди них сниженная, по сравнению с XML надёжность, отсутствие встроенных средств валидации и отсутствие поддержки пространств имён, что снижает его расширяемость.

Подготовлено: Tришин U.B., Cоколов $A.\Pi.$, 2022.05.17

Список литературы

- [1] Соколов А.П. Описание формата данных aDOT (advanced DOT) [Электронный ресурс]. Облачный сервис SA2 Systems. [Офиц. сайт]. 2020. (дата обращения 05.03.2020)
- [2] Соколов А.П. Описание формата данных aINI (advanced INI) [Электронный ресурс]. Облачный сервис SA2 Systems. [Офиц. сайт]. 2020. (дата обращения 05.03.2020)
- [3] Соколов А.П., Першин А.Ю. Патент на изобретение RU 2681408. Способ и система графо-ориентированного создания масштабируемых и сопровождаемых программных реализаций сложных вычислительных методов. 2019. заявка № RU 2017 122 058 A, приоритет 22.07.2017, опубликовано 22.02.2019
- [4] Ермилов Л.И. Синтез сетевых моделей сложных процессов и систем. Москва: МО СССР, 1970. С. 100.
- [5] Нечипоренко В.И. Структурный анализ и методы построения надёжных систем. Москва: Издательство «Советское радио», 1968. С. 256.
- [6] Нечипоренко В.И. Структурный анализ систем (эффективность и надёжность). Москва: Издательство «Советское радио», 1977. С. 216.
- [7] Frank Eichinger, Klemens Bohm, and Matthias Huber. Mining Edge-Weighted Call Graphs to Localise Software Bugs // Lecture Notes in Computer Science. 2008. P. 333–348.
- [8] A. Pop, M. Sjolund, A. Asghar, P. Fritzson, F. Casella. Integrated Debugging of Modelica Models // Modeling, Identification and Control. 2014. Vol. 35, no. 2. P. 93–107.
- [9] Alan Humphrey, Qingyu Meng, Martin Berzins, Diego Caminha B. de Oliveira, Zvonimir Rakamaric, Ganesh Gopalakrishnan. Systematic debugging methods for largescale HPC computational frameworks // Computing in Science and Engineering. 2014. Vol. 16, no. 3. P. 48–56.
- [10] Minh Ngoc Dinh, David Abramso1, Chao Jin, Andrew Gontarek, Bob Moench, Luiz DeRose. A data-centric framework for debugging highly parallel applications // Software - Practice and Experience. 2013. Vol. 45, no. 4. P. 501–526.
- [11] Dylan Chapp, Nigel Tan, Sanjukta Bhowmick, Michela Taufer. Identifying Degree and Sources of Non-Determinism in MPI Applications via Graph Kernels // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. 2021. Vol. 32, no. 12. P. 2936–2952.
- [12] Miguel Pignatelli. TnT: a set of libraries for visualizing trees and track-based annotations for the web // Bioinformatics. 2016. Vol. 32, no. 16. P. 2524–2525.

- [13] Cantrell K., Fedarko M.W., Rahman G., McDonald D., Y.,Zaw T., Gonzalez A., Janssen S., Estaki M., Haiminen N., Beck K.L., Zhu Q. Empress enables tree-guided, interactive, and exploratory analyses of multi-omic data sets // mSystems. 2021. Vol. 6, no. 2.
- [14] Jadeja M., Kanakia H., Muthu R. Interactive Labelled Object Treemap: Visualization Tool for Multiple Hierarchies // Advances in Intelligent Systems and Computing. 2020. P. 499–508.
- [15] Esaie Kuitche, Yanchun Qi, Nadia Tahiri, Jack Parmer, Aïda Ouangraoua. DoubleRecViz: A Web-Based Tool for Visualizing Transcript-Gene-Species tree reconciliation // Bioinformatics. 2021. Vol. 37, no. 13. P. 1920–1922.
- [16] Соколов А.П., Першин А.Ю. Графоориентированный программный каркас для реализации сложных вычислительных методов // Программирование. 2019. Т. 47, № 5. С. 43–55.
- [17] Davidrajuh R. Detecting Existence of Cycles in Petri Nets // Department of Electrical and Computer Engineering. 2016. Vol. 10, no. 12. P. 2936–2951.
- [18] Fahad Mahdi, Maytham Safar, Khaled Mahdi. Detecting Cycles in Graphs Using Parallel Capabilities of GPU // Computer Engineering Department. 2011. Vol. 13, no. 12. P. 2936–2952.
- [19] Diestel R. Graph Theory: Springer Graduate Text GTM 173. Springer Graduate Texts in Mathematics (GTM). Springer New York, 2012.
- [20] ДАТАДВАНС | Программное обеспечение для анализа данных и оптимизации [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. (дата обращения 06.11.2021).
- [21] Расчётные схемы Руководство пользователя pSeven 6.27 [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. Дата обращения: 15.11.2021.
- [22] Параллельные вычисления Руководство пользователя pSeven 6.27 [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. (дата обращения 15.11.2021).
- [23] PRADIS. Общее описание системы [Оф. документация]. 2007.
- [24] PRADIS. Методы формирования и численного расчёта математических моделей переходных процессов [Оф. документация]. 2007.
- [25] Alexey M. Nazarenko Alexander A. Prokhorov. Hierarchical Dataflow Model with Automated File Management for Engineering and Scientific Applications // Procedia Computer Science. 2015. T. 66. URL: https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S1877050915034055?pes=vor.

- [26] Соколов А.П., Першин А.Ю. Программный инструментарий для создания подсистем ввода данных при разработке систем инженерного анализа // Программная инженерия. 2017. Т. 8, № 12. С. 543–555.
- [27] Condition pSeven 6.31.1 User Manual [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2022. (дата обращения 07.03.2022).
- [28] Соколов А.П. Першин А.Ю. Графоориентированный программный каркас для реализации сложных вычислительных методов // Программирование. 2018. № X.
- [29] Соколов А.П. Першин А.Ю. Описание формата данных aDOT (advanced DOT). 2020.
- [30] Workflows and e-Science: An overview of workflow system features and capabilities / D. E., G. D., S. M. et al. // Future Generation Computer Systems. 2009. Vol. 25, no. 5. P. 528 – 540.
- [31] Данилов А.М., Лапшин Э.В., Беликов Г.Г., Лебедев В.Б. Методологические принципы организации многопотоковой обработки данных с распараллеливанием вычислительных процессов // Известия вузов. Поволжский регион. Технические науки. 2001. № 4. С. 26–34.
- [32] The HDF Group [Электронный ресурс] [Оф. сайт]. 2022. Дата обращения: 17.05.2022.
- [33] JSON vs XML: What's the difference? | Guru99 [Электронный ресурс]. 2022. Дата обращения: 18.05.2022.