



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«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., Тришин И., Василян А. Р.
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,
Александр Павлович | – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры САПР,
МГТУ им. Н.Э. Баумана |
| ПЕРШИН,
Антон Юрьевич | – PhD, ассистент кафедры САПР,
МГТУ им. Н.Э. Баумана |

Исследователи (студенты кафедры САПР, МГТУ им. Н.Э. Баумана):

Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И., Василян А. Р.

- C59 Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И., Василян А. Р..
Разработка систем инженерного анализа и ресурсоемкого ПО (rndhpc):
Научно-исследовательские заметки. / Под редакцией Соколова А.П. [Электронный ресурс] — Москва: 2021. — 86 с. URL: <https://arch.rk6.bmstu.ru> (облачный сервис кафедры РК6)
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



Крехтунова Д., Ершов В., Муха В., Тришин И.,
Василян А. Р., Соколов А.П., 2021

Содержание

Список сокращений и условных обозначений	5
1 Теоретические основы графоориентированного программного каркаса	6
2022.01.01: Отличие сетевых моделей от сетевых графиков	6
2 Разработка графоориентированного дебаггера	6
2021.11.10: Автоматизированные и автоматические методы отладки, применяемые при реализации сложных вычислительных методов (CBM), отладка научёмкого кода, science code debugging, graph based programming и пр. (первичный обзор литературы)	6
2021.11.22: Web-инструменты для древовидного представления ассоциативных массивов, визуализация ассоциативных массивов (первичный обзор литературы)	14
2021.12.19: Концептуальная постановка задачи	18
3 Разработка web-ориентированного редактора графовых моделей	18
2021.10.05: Обзор языка описания графов DOT	18
2021.12.04: Краткое описание алгоритма визуализации графа	19
2021.12.05: Описание текущего состояния проекта	24
2022.04.25: Использование алгоритма DFS для решения задачи поиска циклов в ориентированном графе	28
2022.11.21: Выбор алгоритмов для решения задачи укладки ориентированного графа	33
2022.11.29: Выбор алгоритмов для поиска циклов в ориентированном графе	35
2022.12.23: Постановка задач	35
2023.01.10: Рассмотрение алгоритмов для поиска циклов в графе из книги Евстигнеева и Касьянова Графы в программировании	36
2023.01.25: Разработка архитектуры программной реализации	39
4 Реализация поддержки различных стратегий распараллеливания в рамках графоориентированного программного каркаса	41
2021.11.14: Известные алгоритмы поиска циклов в ориентированных графах	41
5 Графоориентированная методология разработки средств взаимодействия пользователя в системах автоматизированного проектирования и инженерного анализа	43
2021.11.06: Особенности применения графового описания процессов обработки данных в pSeven (DATADVANCE)	43
2022.02.09: Сравнительная характеристика GBSE, pSeven, Pradis	45
2022.02.09: Требования к представлению графовых моделей в comsdk	52
2022.03.09: Текущее представление графовых моделей в библиотеке comsdk	53
2022.03.23: Требования к возможностям обхода графовых моделей в GBSE	55

: СОДЕРЖАНИЕ ()

2022.04.13:	Дополнительный обзор литературы и наброски для введения	56
2022.05.17:	Современные форматы описания иерархических структур данных	57
6	Методы удалённого запуска приложений	59
2022.06.17:	Удаленный запуск кода Waleffe_flow.Fortran	59
7	Применение предметно-ориентированных языков для автоматизации разработки подсистем ввода и вывода данных	63
2022.10.10:	Метод построения оконного интерфейса пользователя на основе моделирования пользовательских целей	63
2022.10.13:	Построение пользовательского интерфейса с использованием интерактивного машинного обучения	66
2022.10.15:	Методический подход к созданию универсального пользовательского интерфейса	67
2022.10.24:	Теоретическое ознакомление с Django и Docker.	70
2022.10.29:	Практическое ознакомление с Django и Docker	72
2022.11.04:	Разработка web-приложения	76

Список сокращений и условных обозначений

aDOT Расширенный формат DOT (описание представлено в [1]). 49, 54
aINI Расширенный формат INI (описание представлено в [2]). 50

ГПИ графо-ориентированная программная инженерия (англ., graph-based software engineering (GBSE)), ориентированная для создания программных реализаций **CBM** (патент на изобретение RU 2681408 [3]). 55, 57

CBM сложный вычислительный метод. 5

ТО технический объект, в т.ч. сложный процесс, система. 46, 49

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 Л.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 обобщённый подход к граfovому 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 (СВМ), отладка научёмкого 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.

¹Профессор Малинин Л.И. использовал псевдоним и публиковался как Ермилов Л.И.

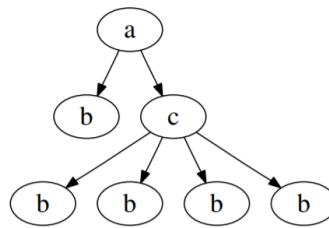


Рис. 1. Граф вызовов

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.

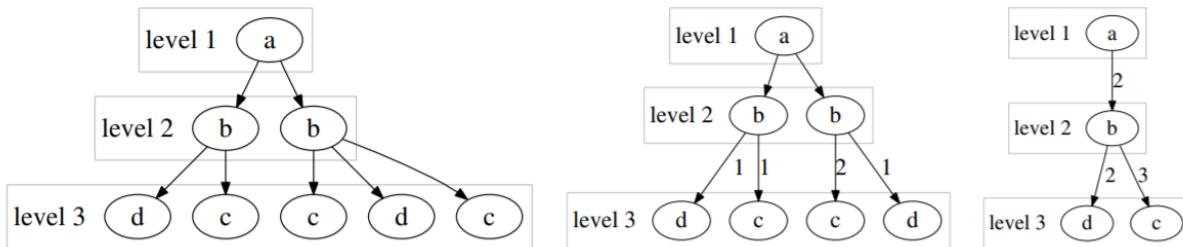


Рис. 2. Редукция графа вызовов

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

версии (SGf).

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 рейтингдается 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.

Фреймворт 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();
}

```

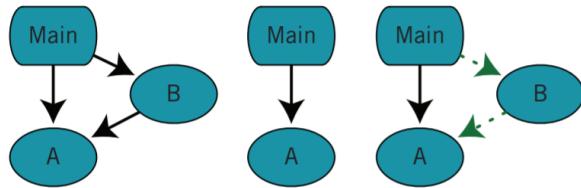


Рис. 3. Пример построения CSTG

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. Границы представляют собой вызовы между функциями.

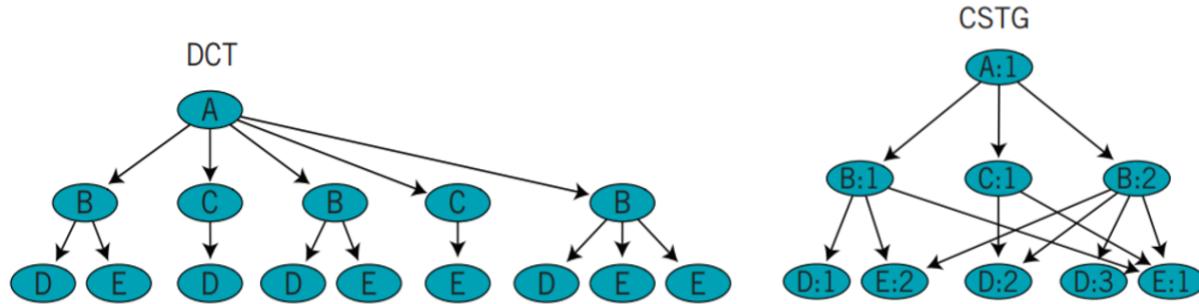


Рис. 4. CSTG

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 булевые операции.

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

```
assert $a::pressure@"init.c":180 = 50000
```

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 `$a` в строке 4300 исходного файла `ref.c` с `large_var` в `$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 экзаслоптальных 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.

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, присущую 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 вызовов, 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 графиками событий.

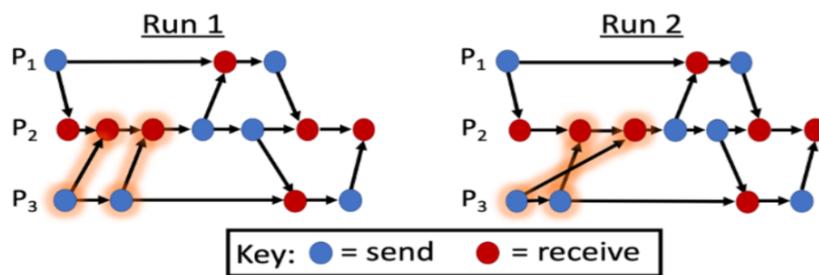


Рис. 5. DGA

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.

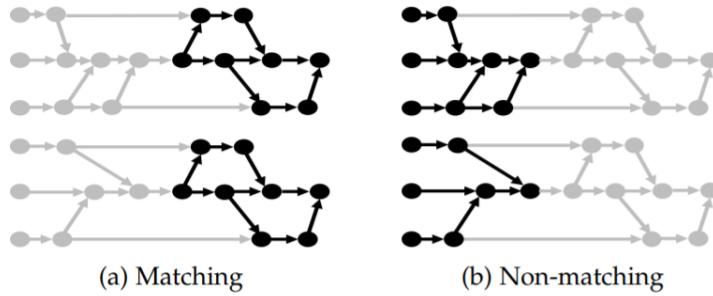


Рис. 6. Сравнение двух графов

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. (PK6-73Б),
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 “ключ-значение”. 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 (aaa, мmm, ...).

Операции с деревом работают быстрее. При реализации на основе списков все функции требуют $O(n)$ операций, где n – количество элементов в рассматриваемой структуре. Операции над деревьями же требуют $O(h)$, где h – максимальная глубина дерева.

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

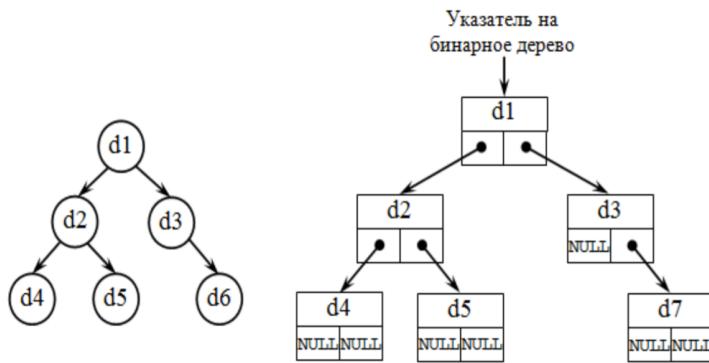


Рис. 7. Пример представления бинарного дерева

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 веб-приложениях. 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 Treemap визуализации иерархических структур

В статье [14] представлена интерактивная версия Treemap.

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

(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”.

Treemap - 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 выделять 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.

Компоненты 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.

2021.12.19: Концептуальная постановка задачи

Требуется реализовать web-ориентированный программный инструмент (далее *GBSE-отладчик*), обеспечивающий проведение отладки графовых реализаций 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:
 - (a) “Автоматические методы отладки научного кода” (автоматизированные и автоматические методы отладки, применяемые при реализации сложных вычислительных методов (СВМ), отладка научного 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

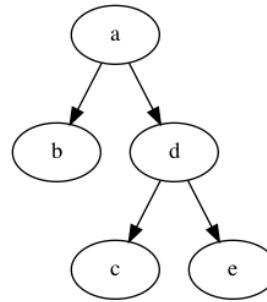
Вызов всех программ Graphviz осуществляется через командную строку, в процессе ознакомления с языком использовалась следующая команда:

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. (PK6-72Б), 2021.10.05

2021.12.04: Краткое описание алгоритма визуализации графа

В ходе разработки web-ориентированного редактора графов, который позволяет импортировать и экспортить файлы в формате aDOT [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 граоориентированной программной инженерии представлены в работе [16]. Принципы применения граоориентированного 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 aDOT-определение графовой модели G (листинг 1).

Листинг 1. Пример aDOT-определение простейшей графовой модели G

```

1 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 график 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 график, разбитый на уровни.

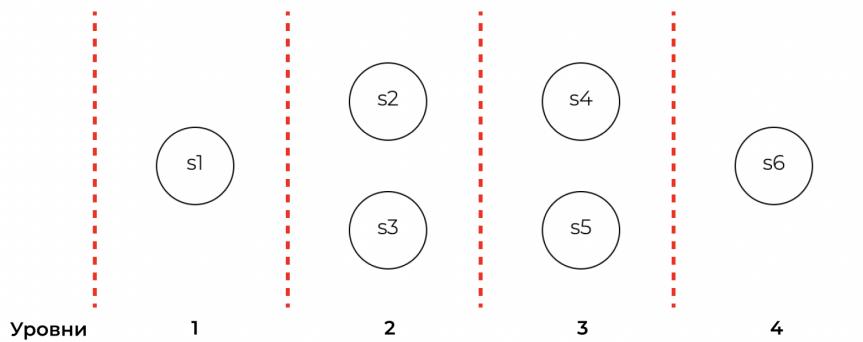


Рис. 8. Узлы графовой модели G, представленные на разных “уровнях”

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
4 s11 [parallelism=threading]
5 s4 [parallelism=threading]
6 s12 [parallelism=threading]
7 s15 [parallelism=threading]
8 s2 [parallelism=threading]
9 s8 [parallelism=threading]
10 // Functions
11 f1 [module=DEFAULT_VALUE, entry_func=DEFAULT_VALUE]
12 // Predicates
13 p1 [module=DEFAULT_VALUE, entry_func=DEFAULT_VALUE]
14 // Edges
15 edge_1 [predicate=p1, function=f1]
16 // Graph model description
17 __BEGIN__ ->s1
18 s6 ->s8 [morphism=edge_1]
19 s7 ->s8 [morphism=edge_1]
20 s10 ->s8 [morphism=edge_1]
21 s11 =>s8 [morphism=edge_1]
22 s11 =>s9 [morphism=edge_1]
23 s14 ->s9 [morphism=edge_1]
24 s3 ->s9 [morphism=edge_1]
25 s4 =>s6 [morphism=edge_1]
26 s4 =>s7 [morphism=edge_1]
27 s4 =>s10 [morphism=edge_1]
28 s4 =>s11 [morphism=edge_1]
29 s12 =>s4 [morphism=edge_1]
30 s12 =>s14 [morphism=edge_1]
31 s13 ->s3 [morphism=edge_1]
32 s15 =>s14 [morphism=edge_1]
33 s15 =>s14 [morphism=edge_1]
34 s2 =>s12 [morphism=edge_1]
35 s2 =>s13 [morphism=edge_1]
36 s2 =>s15 [morphism=edge_1]
37 s1 ->s2 [morphism=edge_1]
38 s8 =>s9 [morphism=edge_1]
39 s8 =>s6 [morphism=edge_1]
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-

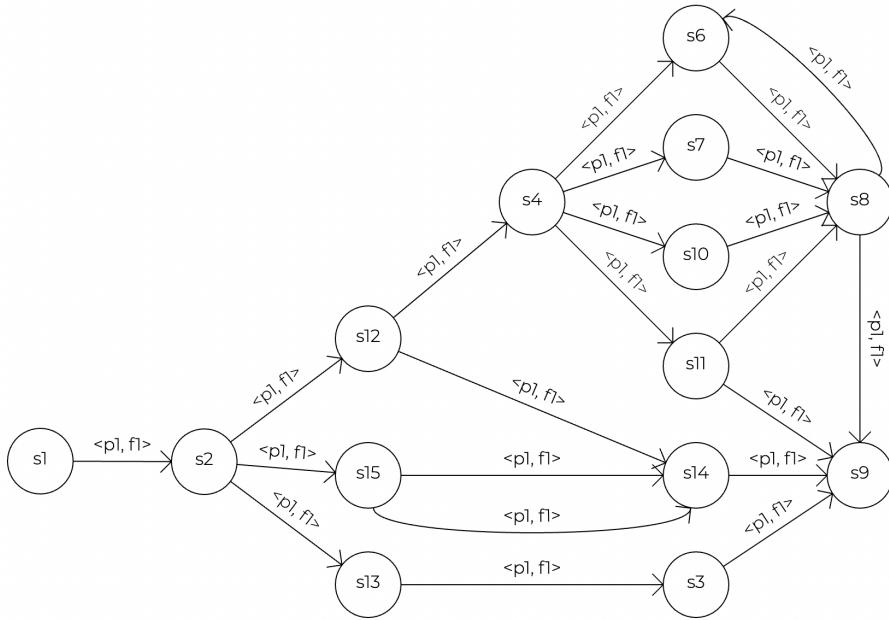


Рис. 9. Визуализация графовой модели TEST

циях, а затем построить между ними ребра. Поскольку редактор графов – это web-ориентированное 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. Свойствами 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 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"]}],
}
```

Уровень 5 в графе представлен 7-ю вершинами: "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 график с выделенным уровнем №5.

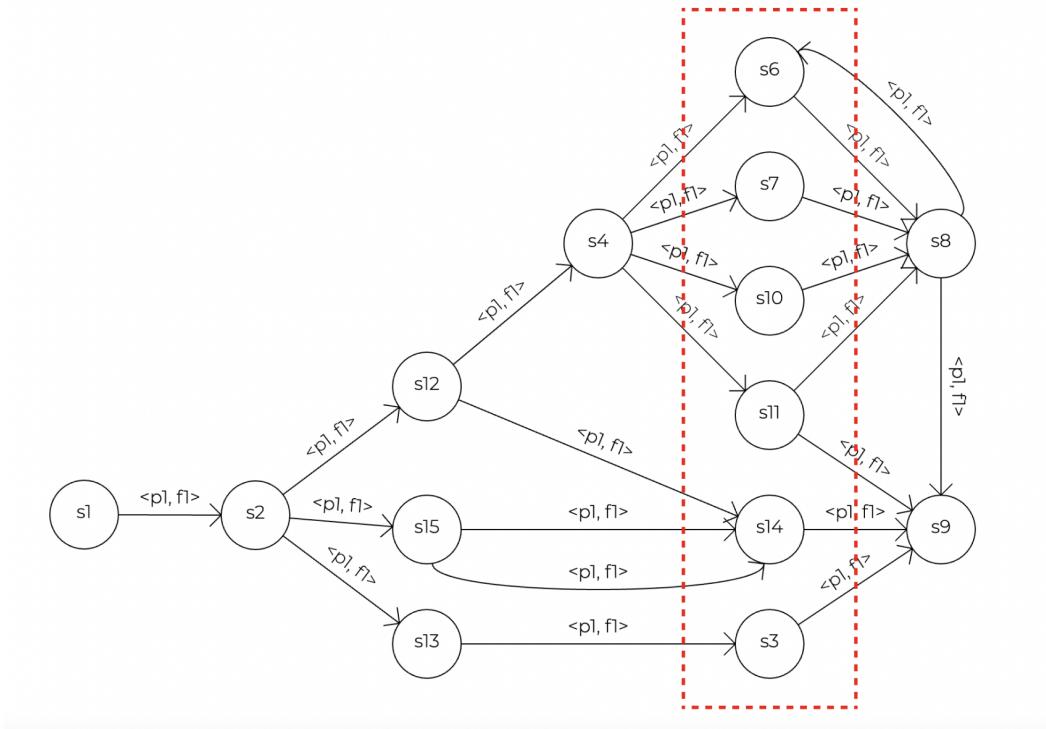


Рис. 10. Уровень №5 на графике

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 слева-направо, то есть от меньшего уровня к большему, например, в графике 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 предсталаенной выше, то можно заметить такую связь: $s_1 \rightarrow s_2 \rightarrow s_{13} \rightarrow s_3 \rightarrow s_9$. 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 №1, затем вправо до самого последнего уровня.

Подготовлено: Ершов В. (PK6-72Б), 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 расширят user expirience.

Основные сценарии приложения:

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

Добавление вершины Для добавления 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 уникальными 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.

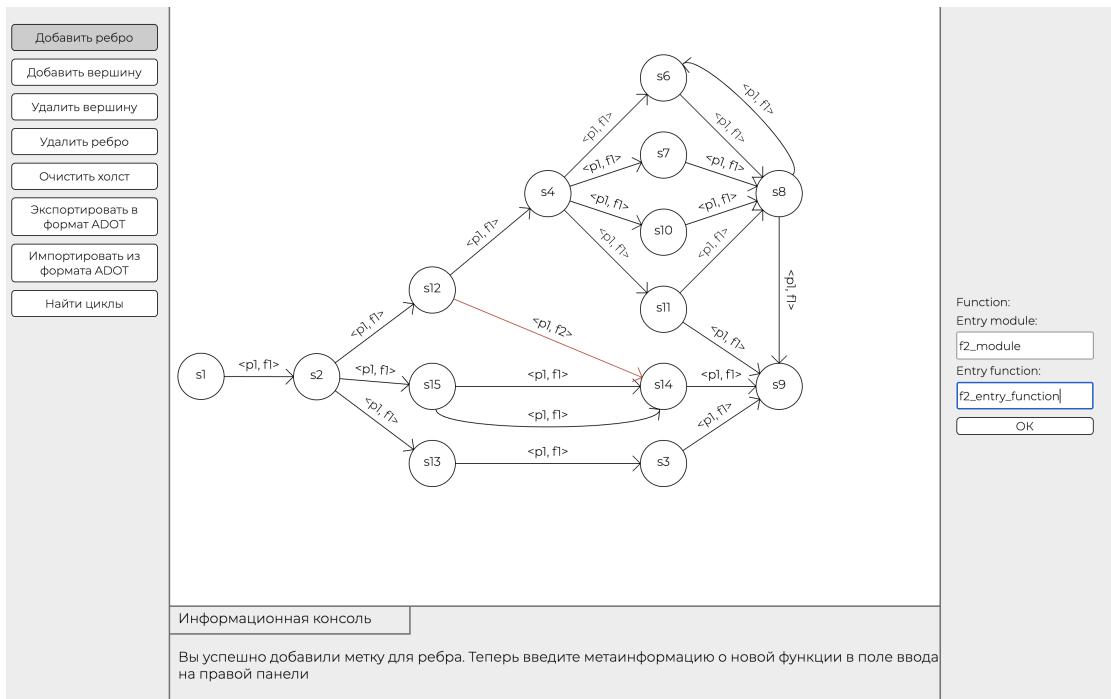


Рис. 12. Создание ребра

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 уточнения 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 кликнуть 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 графиками.



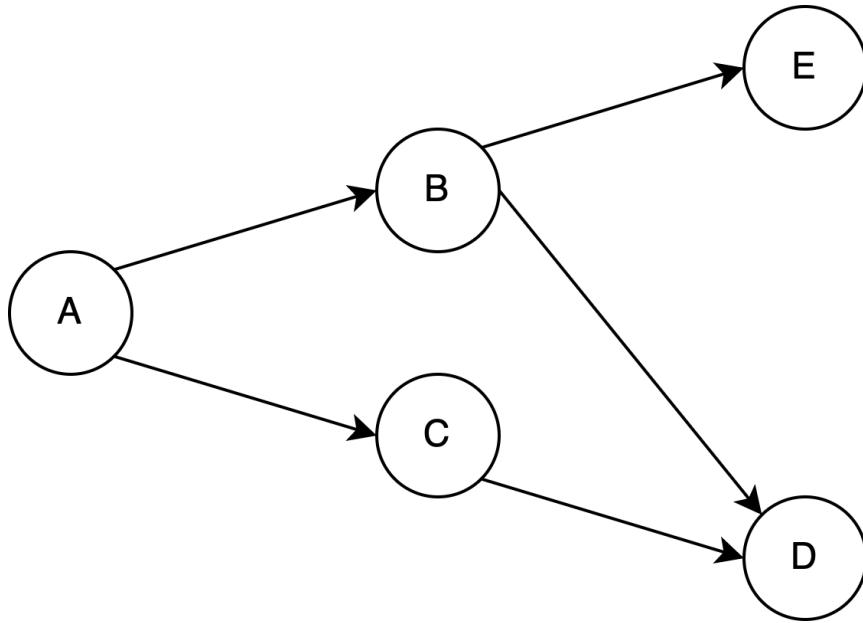
Подготовлено: Ершов В. (PK6-72Б), 2021.12.05

2022.04.25: Использование алгоритма DFS для решения задачи поиска циклов в ориентированном графе

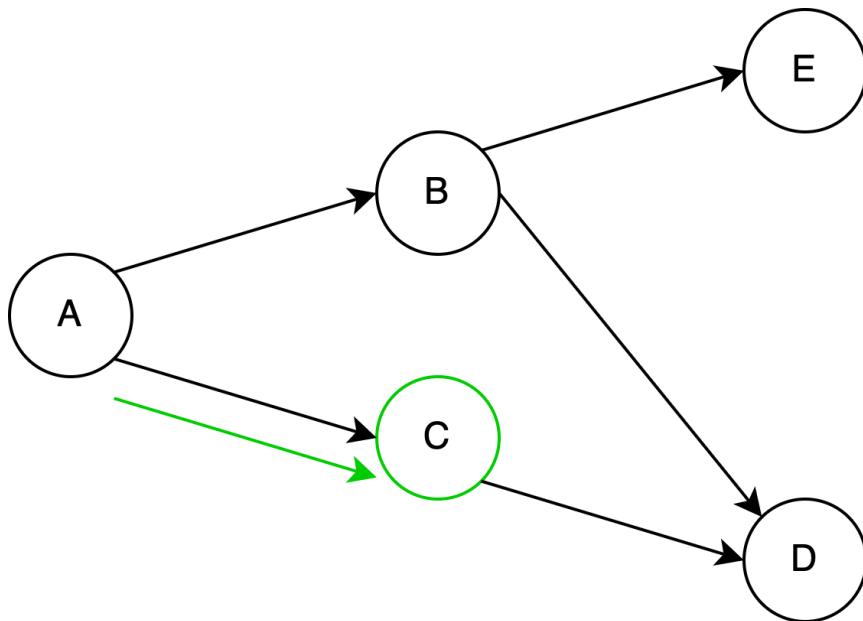
Для поиска циклов в ориентированном графе необходим алгоритм обхода графа. Обход графа - это переход от одной вершины графа к другой с целью поиска ребер или вершин, которые удовлетворяют некоторому условию.

Основными алгоритмами обхода графа являются поиск в ширину (Breadth-First Search, BFS) и поиск в глубину (Depth-First Search). Основное различие между DFS и BFS состоит в том, что DFS проходит путь от начальной вершины до конечной, а BFS двигается вперед уровень за уровнем. Из этого следует, что алгоритмы применяются для решения разных задач. BFS используется для более эффективного нахождения кратчайшего пути в графе, определения связанных компонент в графе, а также обнаружения двудольного графа. DFS применяется для проверки графа на ацикличность или для решения задачи поиска циклов в графе.

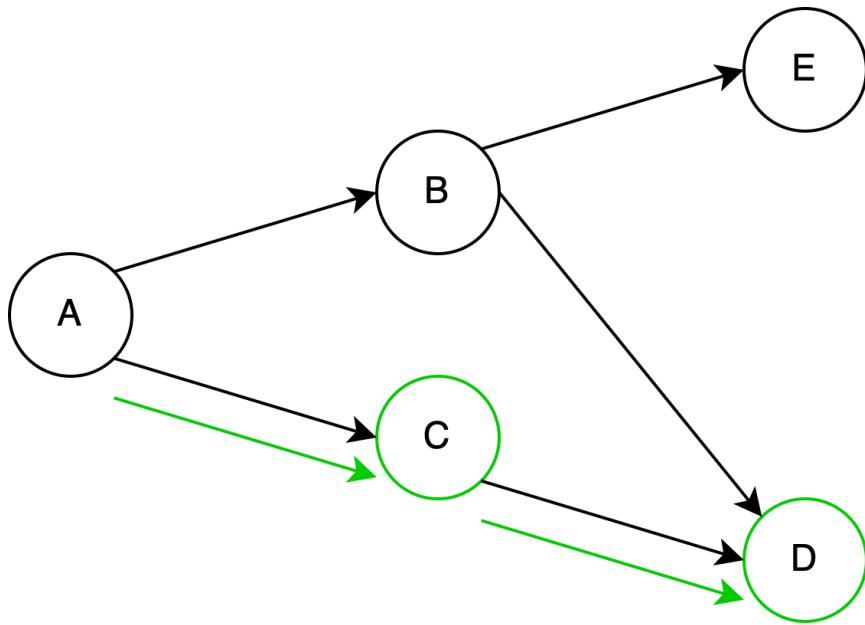
Как ранее было сказано, алгоритм DFS двигается от начальной вершины до тех пор пока не будет достигнута конечная вершина. Если был достигнут конец пути, но искомая вершина так и не была найдена, то необходимо вернуться назад (к точке разветвления) и пойти по другому маршруту. Рассмотрим работу алгоритма на примере:



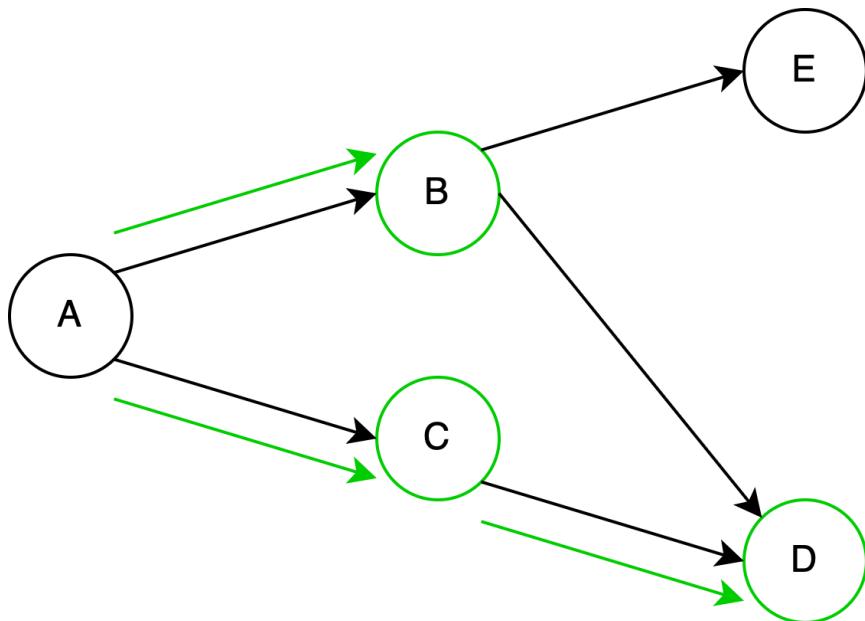
Мы находимся в точке “A” и хотим найти вершину “E”. Согласно принципу DFS, необходимо исследовать один из возможных маршрутов до конца, если не будет обнаружена вершина “E”, то возвращаемся и исследуем другой маршрут.



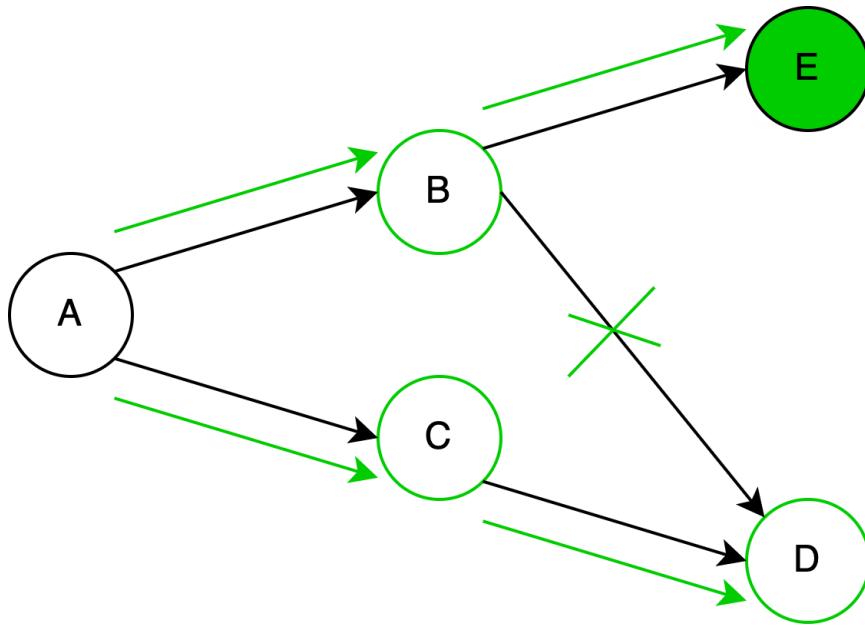
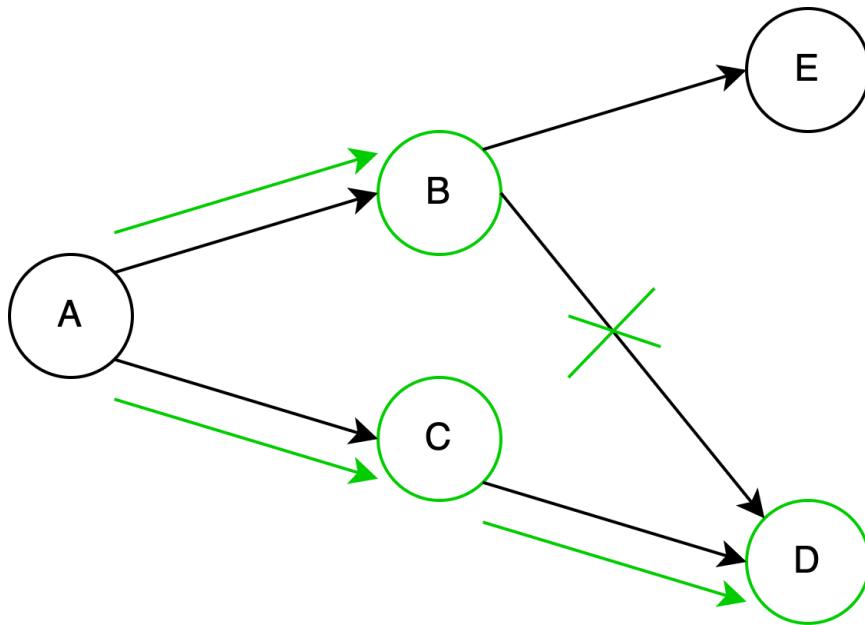
В данном случае мы двигаемся к ближайшей вершине “C”, поскольку это не конец пути, то переходим к следующей вершине.



Мы достигли конца пути, но не нашли “E”, поэтому возвращаемся в начальную вершину “A” и двигаемся по другому пути.



Из вершины “B” существует два возможных дальнейших пути. Поскольку вершина “D” была ранее рассмотрена двигаемся по другому пути.



light • (None) @ (None) • (None) ((None))

Мы нашли искомую вершину “E”, следовательно можно завершать выполнение алгоритма.

В рассмотреном примере решалась достаточно тривиальная задача - поиск вершины в графе. Более интересной является задача поиска циклов в графе. Каждая вершина графа может находиться в трех различных состояниях: вершина не посещена, вершина посещена и вершина посещена, но мы не дошли до конца пути, который включает эту вершину. Для ясности введем следующие обозначения состояний:

- NOT_VISITED - вершина еще не посещена;

- IN_STACK - вершина посещена, но мы не дошли до конца пути;
- VISITED - вершина посещена.

Если в процессе обхода мы встречаем вершину, которая помечена как “IN_STACK”, то мы нашли цикл.

В программной реализации рационально разбить задачу на три функции:

- Функция, которая в цикле проходит по всем вершинам графа и если вершина не была ранее просмотрена, то запускает обход DFS из этой вершины
- Функция непосредственно реализующая обход DFS
- Функция для печати найденного цикла

Ниже приведен (листинг 3) кода данных функций на языке C++

Листинг 3. Решение задачи поиска циклов в ориентированном графе G

```
1 void FindCycles(const std::vector<int> &adjacency_list)
2 {
3     std::vector<std::string> visited(adjacency_list.size(), "NOT_VISITED");
4
5     for (int vertex = 0; vertex < adjacency_list.size(); ++vertex)
6     {
7         if (visited[vertex] == "NOT_VISITED")
8         {
9             std::stack<int> stack;
10            stack.push(vertex);
11            visited[vertex] = "IN_STACK";
12            processDFS(adjacency_list, visited, stack);
13        }
14    }
15 }
16
17 void processDFS(const std::vector<int> &adjacency_list,
18                  std::vector<std::string> &visited,
19                  std::stack<int> &stack)
20 {
21     for (const int &vertex : adjacency_list[stack.top()])
22     {
23         if (visited[vertex] == "IN_STACK")
24         {
25             printCycle(stack, vertex);
26         }
27         else if (visited[vertex] == "NOT_VISITED")
28         {
29             stack.push(vertex);
```

```
30         visited[vertex] = "IN_STACK";
31         processDFS(adjacency_list, visited, stack);
32     }
33 }
34
35 visited[stack.top()] = "DONE";
36 stack.pop();
37 }
38
39 void printCycle(std::stack<int>& stack, int vertex)
40 {
41     std::stack<int> stack_temp;
42     stack_temp.push(stack.top());
43     stack.pop();
44
45     while (stack_temp.top() != vertex)
46     {
47         stack_temp.push(stack.top());
48         stack.pop();
49     }
50
51     while (!stack_temp.empty())
52     {
53         std::cout << stack_temp.top() << ' ';
54         stack.push(stack_temp.top());
55         stack_temp.pop();
56     }
57
58     std::cout << '\n';
59 }
```

light • (None) @ (None) • (None), (None)(None)

Подготовлено: Ершов В. (PK6-82Б), 2022.04.25

2022.11.21: Выбор алгоритмов для решения задачи укладки ориентированного графа

Задача: выбрать алгоритм для укладки ориентированного графа

Для размещения графов известны алгоритмы следующих типов [17]:

- Force-Directed - вершины представляются как заряженные частицы, которые отталкивают друг друга с помощью физической силы, а рёбра — как упругие струны, которые стягивают смежные вершины
- Multidimensional scaling - вершины являются силой, а рёбра уже являются пружинами

- Energy-Based - в этом подходе пытаются описать потенциальную энергию системы и найти положение вершин, которое будет соответствовать минимуму

Для решения поставленной задачи не имеет значения к какой категории принадлежит исследуемый алгоритм, поэтому необходимо рассмотреть самые часто упоминаемые, а именно: Fruchterman-Reingold, Алгоритм Идеса, Kamada Kawai, Force Atlas 2, OpenOrd, Гамма – алгоритм.

Чтобы выбрать нужный для данного случая алгоритм необходимо выделить свойства результирующего графа, по которым будет произведен отбор:

- Граф является ориентированным
- Конец графа должен находиться в противоположной стороне от начала
- Максимально допустимый граф является среднего размера
- В графе могут не иметься циклы

В алгоритме Fruchterman-Reingold используется пружинная физическая модель, где вершины определяются как тела системы, а ребра как пружины. Силы могут действовать только на вершины, вес пружин при этом не учитывается. Данный алгоритм не подходит, так как он не предусмотрен для ориентированных графов [18].

Алгоритм Kamada Kawai похож на алгоритм Fruchterman-Reingold, но выбирается вершина, на которую действует максимальная сила, затем остальные вершины фиксируются, энергия системы минимизируется. Данный метод не подходит, так как имеет самую высокую временную сложность из рассматриваемых - $O(V^3)$ [19].

Force Atlas 2 представляет граф в виде металлических колец, связанных между собой пружинами. Деформированные пружины приводят систему в движение, она колеблется и в конце концов принимает устойчивое положение. Основная его задача - визуализация графов, в которых имеются подмножества с высокой степенью взаимодействия, таким свойством целевой граф не обладает [20].

OpenOrd - это алгоритм, специально предназначенный для очень больших сетей, который работает на очень высокой скорости при средней степени точности. Это хороший компромисс для больших сетей, но часто он нежелателен для небольших графов, где потеря точности может быть значительной по сравнению с другими подходами к компоновке. Все вершины изначально помещаются в начало координат, а затем проводятся итерации оптимизации. Итерации контролируются через алгоритм имитации отжига. Предназначен для визуализации больших графов [21], следовательно не подходит для целевого графа, так как он является графом маленького или среднего размера.

Гамма - алгоритм основная идея которого заключается в том, что выделяются сегменты, затем в минимальном выделяется цепь, которая укладывается в любую грань, вмещающую данный сегмент [22]. Не подходит, так как в целевом графе может не оказаться циклов.

Алгоритм Идеса (Magnetic-Spring Algorithm) рёбра назначаются магнитной пружиной, и затем при воздействии магнитных полей вершины перемещаются [23]. Лучше всего для целевого графа.

Исходя из сравнений выбранных алгоритмов следует, что лучше всего подходит Алгоритм Идеса.

Подготовлено: Журавлев Н.В. (РК6-72Б), 2022.11.21

2022.11.29: Выбор алгоритмов для поиска циклов в ориентированном графе

Задача: найти циклы в ориентированном графе

Для нахождения циклов в ориентированных графах существует множество алгоритмов, выделим основные: поиск в глубину (Depth-First Search, DFS), поиск в ширину (Breadth-First Search, BFS), алгоритмы "Черепахи и зайца".

Единственным требованием к алгоритму для решения задачи является быстродействие, следовательно выбор алгоритма происходит исходя из этой характеристики.

Алгоритмы Черепахи и зайца - группа алгоритмов, которые основаны на перемещении двух указателе. Работа алгоритмов заканчивается, когда два указателя встретятся [24]. Однако они работают за $O(n^3)$ времени [25], что намного больше, чем DFS и BFS, которые работают за $O(n)$.

Основными алгоритмами обхода графа являются поиск в ширину и поиск в глубину. Основное различие между DFS и BFS состоит в том, что DFS проходит путь от начальной вершины до конечной, а BFS двигается вперед уровень за уровнем. Из этого следует, что алгоритмы применяются для решения разных задач. BFS используется для более эффективного нахождения кратчайшего пути в графе, определения связанных компонент в графе, а также обнаружения двудольного графа. DFS применяется для проверки графа на ацикличность или для решения задачи поиска циклов в графе.

Исходя из написанного выше можно сделать вывод, что лучше всего для решаемой задачи подходит алгоритм DFS.

Подготовлено: Журавлев Н.В. (РК6-72Б), 2022.11.29

2022.12.23: Постановка задач

В разработанном А.П.Соколовым и А.Ю.Першиным графоориентированном программном каркасе, для описания графовых моделей был разработан формат aDOT, который является расширением формата описания графов DOT. Для визуализации графов, описанных с использованием формата DOT, используются специальные программы визуализации. Формат aDOT расширяет формат DOT с помощью дополнитель-

ных атрибутов и определений, которые описывают функции-предикаты, функции-обработчики и функции-перехода в целом. Из этого вытекает, что для построения графовых моделей с использованием формата aDOT необходим графический редактор. Разрабатываемый графический редактор должен:

- Предоставлять возможность создавать ориентированный граф с нуля (добавление/удаление ребра/узла)
- Предоставлять возможность нахождение циклов в графе
- Предоставлять возможность экспортить созданный граф в формат aDOT
- Предоставлять возможность загрузить граф из формата aDOT

Так же должен удовлетворять следующим требованиям:

- Иметь возможность экспорта программного кода на языке программирования Python
- Являться плагином для comwrc

Из описания функция редактора можно выделить следующие задачи:

1. Определить алгоритм укладки графа
 2. Определить алгоритм поиска циклов
 3. Определить с помощью какого инструмента будет происходить визуализация графа
 4. Выбрать наиболее безопасный способ экспорта и выполнения кода на Python
- На более прикладном уровне нужно будет решить следующие задачи:
1. Изучить и программно реализовать выбранный алгоритм укладки графа
 2. Изучить и программно реализовать выбранный поиск циклов
 3. Изучить выбранный инструмент визуализации
 4. Разработать механизм реализующий связь информации из aDOT файла с выбранным инструментом визуализации
 5. Изучить и программно реализовать выбранный способ экспорта и выполнения кода на Python
 6. Преобразовать разработанный редактор в плагин для comwrc

Подготовлено: Журавлев Н.В. (РК6-72Б), 2022.12.23

2023.01.10: Рассмотрение алгоритмов для поиска циклов в графе из книги Евстигнеева и Касьянова Графы в программировании

Из книги Евстигнеева и Касьянова "Графы в программировании" были рассмотрены и проанализированы следующие алгоритмы[26]:

```

проц РЕКУРСИВНЫЙ-ОБХОД(p : вершина) =
1.   Посетить вершину p;
2.   для всех q из множества вершин, смежных с p цикл
3.       если q еще не посещалась то
4.           РЕКУРСИВНЫЙ-ОБХОД(q)
    все
    все;
начало
1.   для всех p из множества вершин G цикл
2.       если p еще не посещалась то
3.           РЕКУРСИВНЫЙ-ОБХОД(p)
    все
    все;
конец

```

Рис. 13. Рекурсивный алгоритм обхода графа в глубину

Рекурсивный алгоритм обхода графа в глубину (Рисунок 13) не желательно для использования, т.к. имеется рекурсия, что может плохо сказаться при выполнении поиска.

Общий алгоритм обхода графа с запоминанием дуг (Рисунок 14) и общий алгоритм обхода графа с запоминанием вершин (Рисунок 15) имеют одинаковые характеристики, которые подходят под заданный граф.

```

проц ЛЕС(p0 : вершина) =
1.   S . семейство дуг = ∅;
2.   q : вершина = p0;
3.   L : начало ПОМЕТИТЬ(q);
4.       S ⊂ ИСХОД(q);
5.       пока S ≠ ∅ цикл
6.           q := КОНЕЦ( ∃ S);
7.           если НЕПОМЕЧЕНА(q) то начать L все
    все
    конец
    все

```

Рис. 14. Общий алгоритм обхода графа с запоминанием дуг

```

проц ЛЕС1(p0 : вершина) =
1.   S . семейство вершин = ∅;
2.   S ← p0; ПОМЕТИТЬ(p0);
3.   пока S ≠ ∅ цикл
4.       q := ∃ S;
        для всех p из ПРЕЕМ(q) цикл
6.           если НЕПОМЕЧЕНА(p) то
7.               ПОМЕТИТЬ(p); S ← p
        все
    все
    все

```

Рис. 15. Общий алгоритм обхода графа с запоминанием вершин

Алгоритм обхода графа в ширину с использованием внешней очереди (Рисунок 16) и алгоритм обхода графа в ширину с использованием внутренней очереди (Рисунок

17). Оба алгоритма не подходят, так как имеют большую временную сложность, а именно $O(k + t)$, где k и t - количество дуг и вершин графа, по сравнению с общим алгоритмом обхода графа с запоминанием вершин, который имеет сложность $O(t)$, где t - количество дуг.

```

проц ОБХОД-В-ШИРИНУ( $p_0$  вершина) =
1.  $Q$ : очередь вершин =  $\emptyset$ ;
2.  $Q \leftarrow p_0$ , ПОМЕТИТЬ( $p_0$ );

3. пока  $Q \neq \emptyset$  цикл
4.    $q := \text{Э} Q$ ;  $w := \text{ДУГА}(q)$ ;
5.   пока  $w \neq \text{ничто}$  цикл
6.     ПРОЙТИ-ДУГУ( $w$ );
7.      $r := \text{КОНЕЦ}(w)$ ;
8.     если НЕПОМЕЧЕНА( $r$ )то
9.       ПОМЕТИТЬ( $r$ );  $Q \leftarrow r$ 
10.      все;
11.       $w := \text{СЛЕД}(w)$ 
12.    все;
13.    ПРОЙТИ-ВЕРШИНУ( $q$ )
14.  все
15. все

```

Рис. 16. Алгоритм обхода графа в ширину с использованием внешней очереди

```

проц ОБХОД-В-ШИРИНУ-1 =
1.  $p := q.СЛЕД$ ; ПРОЙТИ-ВЕРШИНУ( $p$ );
2. пока  $p \neq q$  цикл
3.    $q := q.СЛЕД$ ;
4.   для всех  $r$  из ПРЕЕМ( $q$ ) цикл
5.     если НЕПОМЕЧЕНА( $r$ )то
6.       ПРОЙТИ-ВЕРШИНУ( $r$ );
7.        $p.СЛЕД := r$ ;  $p := r$ 
8.     все
9.   все
10.   $p.СЛЕД := \text{ничто}$ 
11. все

```

Рис. 17. Алгоритм обхода графа в ширину с использованием внутренней очереди

Алгоритм обхода графа в глубину без использование дополнительной памяти, представленный в (Рисунок 18) не подходит, так как его работы необходим один приёмник из начальной вершины.

```
проц ОБХОД-В-ГЛУБИНУ (q0 : вершина) =
1. t : вершина = ничто;
2. q : вершина = q0;
3. q0.НД := 1; p := q0.МД[1];
4. L . начало q.МД[q.НД] := t; t := q; q := p;
5. L1 начало
6. пока q.НД < q.КД цикл
7. q.НД := q.НД + 1;
8. p := q.МД[q.НД];
9. если p ≠ ничто то
10. если p.НД = 0 то начать L все
    все
    все;
11. если p ≠ ничто то
12. p := q; Q := t;
13. t := q.МД[q.НД];
14. q.МД[q.НД] := p;
15. начать L1
    все
конец
конец
все
```

Рис. 18. Алгоритм обхода графа в глубину без использование дополнительной памяти

2023.01.25: Разработка архитектуры программной реализации

В реализации программы должны быть реализованы четыре главных сценария действия: Открыть из файла, создание графа, сохранение в файлы, найти цикл. Так же необходимо создать простую базу данных для хранения графов для каждого пользователя. Общий вид схемы модулей представлен на рисунке 19. В программе должно быть реализована 2 класса - Graph (класс графа) и Node (класс вершины).

В классе узла должны иметься следующий поля: словарь с ключом в виде следующих узлов и код при переходе к следующему узлу, являющимся значением являющейся строкой; название для узла.

Краткое описание модулей и их взаимодействия:

- Открыть из файла - модуль , для этого необходимо реализовать алгоритм укладки графа и парсер для преобразования из файла типа aDot в массив объектов класса узла.
- Создать новый граф - модуль ответственный за добавление/удаление частей графа с помощью ручного ввода.
- Сохранение в файл - модуль ответственный за сохранения графа в файл типа aDot, для этого необходимо реализовать парсер для преобразования в нужный формат из массива объектов класса узла.
- Найти цикл - модуль ответственный за нахождение цикла в графе, для этого необходимо реализовать алгоритм поиска цикла в графе.

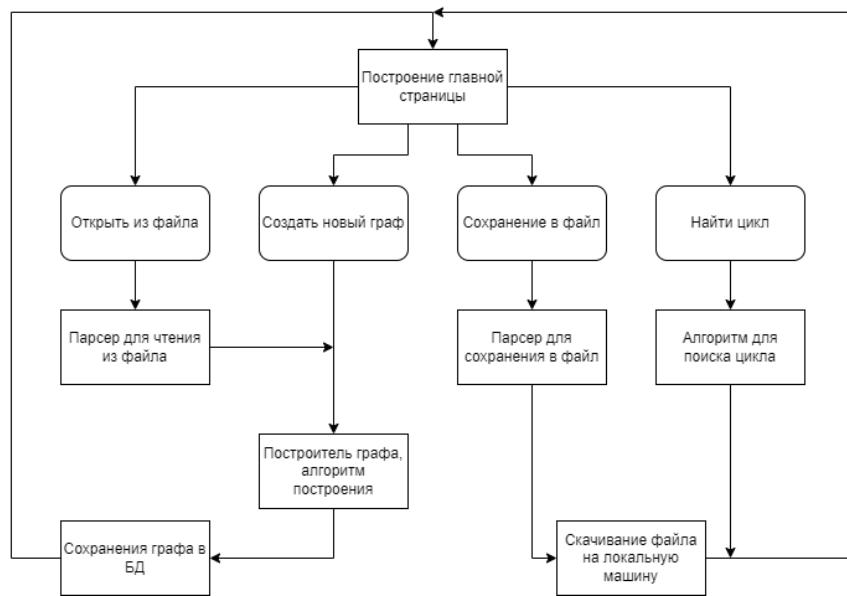


Рис. 19. Схема модулей программы

В классе графа в полях должно иметься массив класса узлов, в методах должны быть реализованы:

- `make_graph(name)` - метод, которые преобразует массив в объекте класса в переменную, которую можно сохранить в виде изображения с выбранным расширением.
- `read_from_aDot(name)` - метод, читающей из файла с названием `name` (тип `string`) данные, затем сохраняет их в поле для узлов.
- `search_cicles()` - метод, который находит циклы в графе, возвращает все циклы в виде строки формата "a-b-c[перенос строки]b-d-e[перенос строки]".
- `add_eage(e1, e2)` - метод, добавляющий ребро между двумя узлами из `e1` (тип класса узла) в `e2` (тип класса узла)
- `delete_eage(e1, e2)` - метод, удаляющий ребро между двумя узлами из `e1` (тип класса узла) в `e2` (тип класса узла)
- `add_node(node)` - метод, добавляет узел `node`.
- `delete_node(node)` - метод, удаляющий узел `node`.
- `save_into_aDot(name)` - метод, сохраняет граф в файл с названием `name` (тип `string`)

В базе данных необходимо иметь одну таблицу с двумя полями: пользователь и его граф в текстовом виде.

Подготовлено: Журавлев Н.В. (РК6-72Б), 2023.01.25

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[27]:

- 1) алгоритмы, основанные на обходе ориентированного графа (ОГ);
- 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 [28].

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

Для определения ОГ, часто, применяют понятие матриц смежности[29]:

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

$$A = \begin{bmatrix} & a & b & c & d & e & f & g \\ a & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ f & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 01 & 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Пример графа, построенного на основе его матрицы смежности A , приведен на рис. 20.

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

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

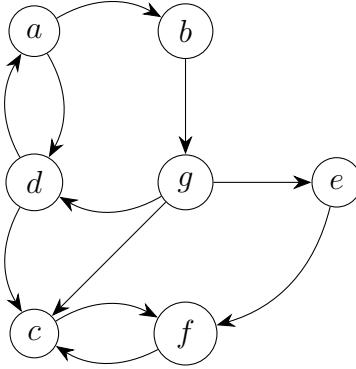


Рис. 20. Граф, построенный по матрице смежности А

новый ОГ с теми же узлами и рёбрами, противоположно направленными относительно исходного ОГ.

$$A^T = \begin{bmatrix} & \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & \mathbf{d} & \mathbf{e} & \mathbf{f} & \mathbf{g} \\ \mathbf{a} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{b} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{c} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ \mathbf{d} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \mathbf{e} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \mathbf{f} & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{g} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Введём обозначение матрицы, возведённой в степень m :

$$A^m = \underbrace{A \times A \times \dots \times A}_m. \quad (4)$$

Матрица A^m обладает следующим свойством: элемент матрицы a_j^i равен числу путей из вершины i в вершину j , состоящих ровно из m рёбер[29]. Длиной цикла называют количество рёбер в этом цикле. Для того, чтобы определить циклы длины $2m$, нужно найти матрицу циклов C_m , определяемую следующим образом:

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

где \wedge – оператор конъюнкции, применяемый поэлементно.

Таким образом, матрица C_m будет содержать все циклы длины $2m$. Пример для

поиска циклов длины 2. **6.**

$$C_2 = A \wedge A^T = \begin{bmatrix} & \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & \mathbf{d} & \mathbf{e} & \mathbf{f} & \mathbf{g} \\ \mathbf{a} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{c} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{d} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{e} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{f} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{g} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Подготовлено: *Муха В. (PK6-73Б), 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[30].

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.[31]

- 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 расчётов 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 расчётов схем, с которыми связываются те блоки, результаты выполнения которых интересуют пользователя.

Связи служат для маршрутизации данных. С их помощью осуществляется 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.[31]

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 [31], 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 portам ввода. В этом случае по каждой связи передается копия выходных данных, полученных у источника [31]. Условные ветвлениа 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[31].

Особенности выполнения расчётовых схем

При выполнении расчётовых 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[31].

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.[32]

Подготовлено: Тришин И.В. (PK6), 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 принципы 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 [33]. Данный комплекс был рекомендован к обзору и сравнению, однако, после проведённого обзора официальной документации [34] не было получено достаточного представления об использовании элементов графоориентированных подходов в данном комплексе, 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**: гра-

фовое 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 [35].

Используются следующие базовые понятия pSeven:

- **расчёчная 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 потоков данных следующим образом. Расчёчная 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 [35].

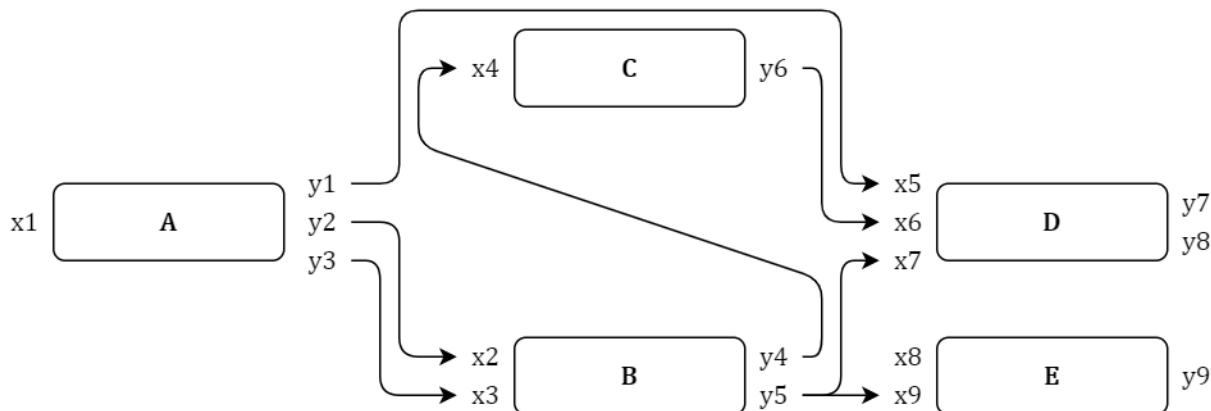


Рис. 21. Пример диаграммы потоков данных

На рисунке 21 *A, B, C, D* - блоки обработки информации, x_i - входные порты, y_i - выходные. Стрелками показаны связи. Согласно изложенному выше принципу, сначала

³Динамическая типизация не поддерживается.

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 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 [35].

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 назначение	Задачи оптимизации, анализ данных	Задачи автоматизированного проектирования, алгоритмизация сложных вычислительных методов, анализ данных
2	Принцип формирования графовых моделей	Узлы – блоки (процессы), рёбра – связи (направление передачи данных) [35].	Узлы – состояния данных, рёбра – переходы между состояниями, с указанием функций перехода [16].
3	Формат описания орграфа	Расчетная схема (в форме орграфа) сохраняется в двоичный файле закрытого формата с расширением .p7wf.	Графовая модель (определяет алгоритм проведения комплексных вычислений в форме орграфа) сохраняется в текстовом файле открытого формата, подготовленного на языке aDOT[1], являющегося “сужением” (частным случаем) известного формата DOT (Graphviz).
4	Файловая структура проекта проведения анализа ТО	Проект состоит из непосредственно файла проекта, в котором хранятся ссылки на созданные расчётные схемы и локальную базу данных, сами расчётные схемы, файлы с их входными данными, файлы отчётов, где сохраняются выходные данные последних расчётов и результаты их анализа.	Проект состоит из .aDOT файла с описанием графа, .aINI-файлов с описанием форматов входных данных, библиотек функций-обработчиков, функций-предикаторов и функций-селекторов , файлов, куда записываются выходные данные.

5	особенности работы с входными и выходными данными графовых моделей	Входные данные должны быть указаны при настройках внешних входных портов расчётной схемы. Данные с выходных портов схемы сохраняются в локальной базе данных. Для их записи в файлы для обработки/анализа вне pSeven необходимо воспользоваться специально предназначеными для этого блоками.	Входные данные хранятся в файле в формате aINI[2], откудачитываются при запуске обхода графа [36]. Для записи выходных/промежуточных данных в файлы или базы данных необходимо добавить соответствующие функции-обработчики. Формат выходных данных не регламентирован.
6	Особенности передачи параметров между узлами графовых моделей	Данные между узлами передаются согласно определенным связям, которые на уровне выполнения создают пространство в памяти для ввода и вывода данных для выполняемых в раздельных процессах блоков. Транзитная передача данных, которые не изменяются в данном блоке, на выход невозможна.	Поскольку узлами графа являются состояния данных, существует возможность задействовать в расчётах только часть данных, оставляя их другую часть неизменной.
7	Поддержка ветвлений и циклов	Присутствует. Достигается засчёт специальных управляющих блоков, которые отслеживают выполнение условий: для ветвления используется блок "Условие"(англ. condition), который перенаправляет данные на один из выходных портов в зависимости от выполнения описанного условия (подробнее см. [37]); Для реализации циклов в общем случае используются блоки "Цикл"(англ. loop)[31], но для некоторых задач существуют специализированные блоки, организующие логику работы цикла (например, блок "Оптимизатор"(англ. optimizer))	Присутствует по умолчанию

8	Поддержка параллельной обработки данных	Присутствует. Блоки, входящие в состав различных ветвлений схемы могут быть выполнены параллельно, поскольку они не зависят друг от друга по используемым данным.	Присутствует. Существует возможность обойти различные ветвления графа одновременно.
9	Возможность выбрать из набора однотипных промежуточных результатов расчётов некоторые экземпляры и продолжить расчёт только для них;	Производится на этапе анализа результатов с помощью отчётов, где можно задать фильтрацию выходных данных согласно указанным критериям. В случае, если результаты являются промежуточными, расчётную схему приходится разбивать на части.	Планируется реализовать средство визуализации данных, которое в совокупности с автоматической генерацией форм ввода[36] позволят отбирать корректные результаты промежуточных вычислений во время обхода графовой модели.
10	Возможность доопределения значений входных данных в процессе обхода графа	Отсутствует	Частично реализована при помощи функций-обработчиков специального типа, создающих формы ввода

Подготовлено: Тришин И.В. (PK6), 2022.02.09

2022.02.09: Требования к представлению графовых моделей в comsdk

Введение

На сегодняшний день существуют две реализации графоориентированного программного каркаса GBSE [38]. Обе они представляют собой подключаемые объектно-ориентированные библиотеки, включающие в себя API для создания состояний СВМ (узлов графовой модели) и их объединения с помощью функций-предикатов и функций-обработчиков [38]. Хронологически первой из них является реализованная на языке C++ библиотека comsdk. 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 aDOT и, как следствие, программное представление этих моделей в описанных выше API.

Краткое описание синтаксиса языка aDOT

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-обработчик* – 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 [39].

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 функцию-обработчик;
- 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 aDot файле с её описанием, как подграфы, должны заменяться загружаемыми из соответствующих aDOT-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. (PK6), 2022.02.09

2022.03.09: Текущее представление графовых моделей в библиотеке comsdk

На рисунке 22 представлена UML-диаграмма классов, связанных с представлением в comsdk ориентированного графа, описывающего организацию вычислительных процессов.

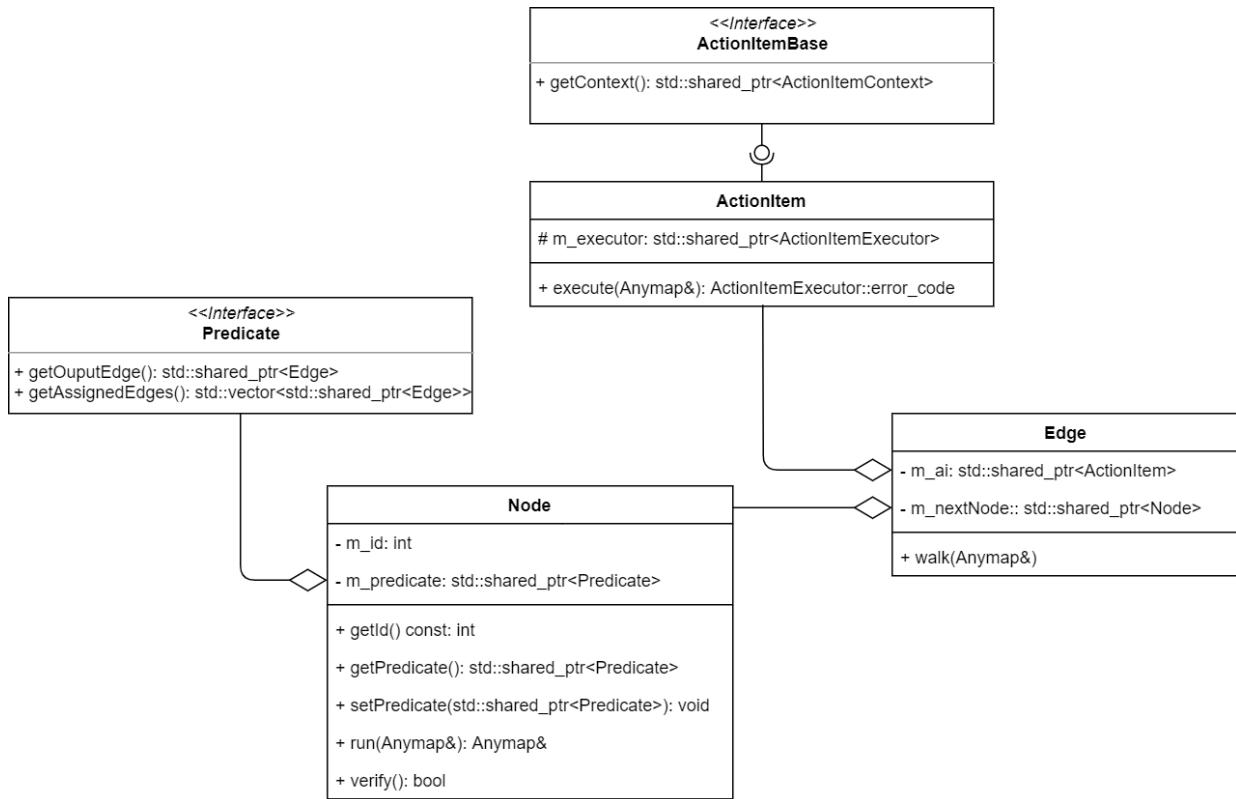


Рис. 22. Текущая структура классов, связанная с графовыми моделями в comsdk

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 23 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 .

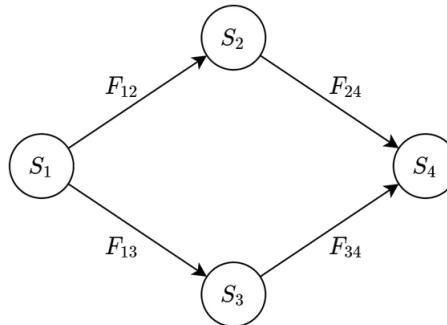


Рис. 23. Пример графовой модели, предполагающей параллельное исполнение

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 ветвях 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. 23 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 выполнение 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.

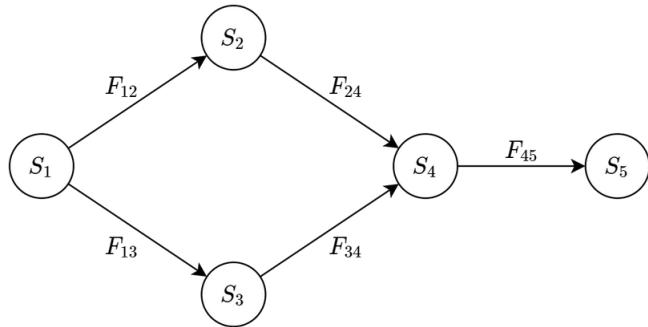


Рис. 24. Пример графовой модели с совмещением ветвей

На рисунке 24 ветви $S_1 \rightarrow S_2 \rightarrow S_4$ и $S_1 \rightarrow S_3 \rightarrow S_4$ 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: Тришин И.В., Соколов А.П.,
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

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 позволяют автоматизировать процессы решения научно-технических задач, предоставляя средства организации и управления вычислительными процессами [40]. 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[41]. 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 оказывается на общем качестве реализуемого ПО.

Подготовлено: Тришин И.В. (РКб-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 [38]. 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»[38] 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 [42]. 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 «самодокументирующемся», 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 главных 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 [43]. Кроме того, крайне важным преимуществом JSON является его поддержка по-умолчанию средствами языка 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.

6 Методы удалённого запуска приложений

2022.06.17: Удаленный запуск кода Waleffe_flow.Fortran

Описание структуры программы Waleffe_flow.Fortran

Структура директорий исходных кодов и запусков программы Waleffe_flow.Fortran изображена на рисунке 25.

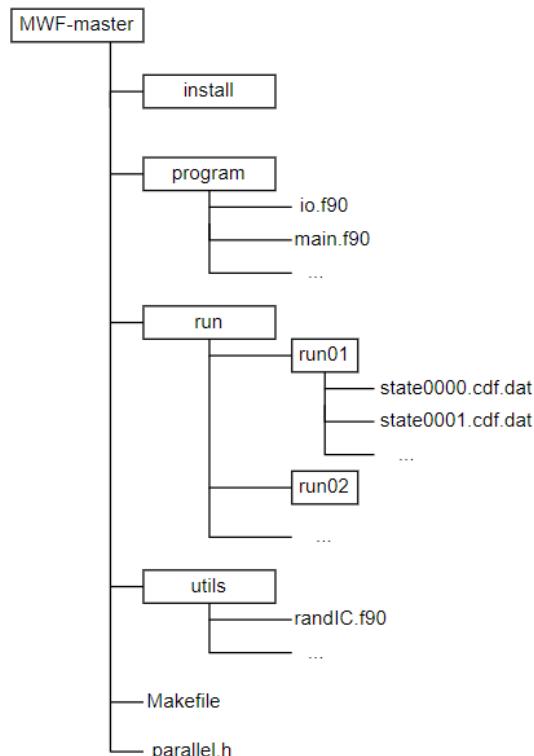


Рис. 25. Структура программы Waleffe_flow.Fortran

[fig1] * (None)@ (None) * (None) , (None) (None))

Удаленный запуск кода

Для подключения к удаленной машине используется SSH – сетевой протокол прикладного уровня, позволяющий производить удалённое управление операционной системой и туннелирование TCP-соединений [44].

Для запуска программы Waleffe_flow.Fortran на удаленной машине необходимо выполнить следующие команды:

1. Подключение к удаленной машине [45]:

```
ssh user@server
```

В данной работе использовалась виртуальная машина с именем hpc.rk6.bmstu.ru и пользователь amamelkina, поэтому команда выглядела следующим образом:

```
ssh amamelkina@hpc.rk6.bmstu.ru
```

2. Переход в директорию с программой [46]:

```
cd /home/amamelkina/MWF-master
```

3. Чтобы настроить среду для использования библиотек MPI, нужно загрузить соответствующий модуль окружающей среды:

```
module load mpi
```

4. Сборка:

```
make  
make install
```

5. Создание начальных условий:

```
make util  
./randIC.out
```

6. Далее необходимо создать папку, в которую будут записываться результаты. Такие наборы результатов хранятся в папке run. В папке run создается папка с номером (например run10), в нее копируются файлы /install/main.info, /install/main.out. Файл state0000.cdf.dat, полученный в результате выполнения пункта 5, должен быть переименован в state.cdf.in и тоже скопирован в новую папку результатов.

7. Затем нужно перейти в созданную папку и запустить программу:

```
./main.out
```

8. После остановки программы, когда будет получено необходимое количество данных, можно отключаться от удаленной машины с помощью команды:

```
exit
```

9. Последний шаг – скопировать результат с удаленной машины на локальную [47]:

```
scp -r user@server:<адрес/откуда/копируем>  
<адрес/куда/копируем>
```

Видно, что запуск данной программы на удаленной машине требует выполнения множества команд. Упростим запуск до одной команды – запуска python-скрипта, в котором будет реализован процесс удаленного запуска.

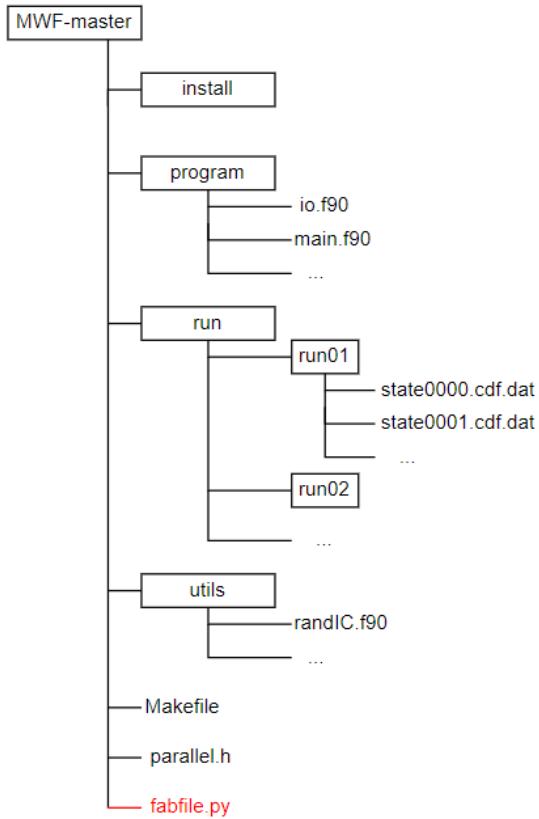


Рис. 26. Размещение fabfile

light] • (None) @ (None) • (None) (None)(None)

Программная реализация

Для реализации необходимого python-скрипта была использована библиотека fabric. Fabric – это библиотека Python и инструмент командной строки для оптимизации использования SSH для развертывания приложений или задач системного администрирования [48].

Для работы с fabric первым делом нужно создать fabfile и разместить в структуре файлов так, как показано на рисунке 26.

Fabfile – это то, что контролирует то, что выполняет fabric. Он называется fabfile.py и запускается командой fab. Все функции, определенные в этом файле, будут отображаться как подкоманды fab. Они выполняются на одном или нескольких серверах. Эти серверы могут быть определены либо в fabfile, либо в командной строке [49].

Добавим сервер в fabfile, определив его в переменной окружения env (листинг 4) [50].

Листинг 4. Добавление сервера в переменную окружения env

```
1 env.hosts = ['hpc.rk6.bmstu.ru']
```

Fabric по умолчанию использует локальное имя пользователя при подключении SSH, но при необходимости его можно переопределить, используя env.user. Предоста-

вим пользователю программы возможность ввести имя (листинг 5). Это реализовано с помощью функции `prompt(text, default=”, …)` [51]. Данная функция выдаёт пользователю запрос с текстом `text` и возвращает полученное значение. Для удобства к `text` будет добавлен одиночный пробел. Если передан параметр `default`, то он будет выведен в квадратных скобках и будет использоваться в случае, если пользователь ничего не введёт (т.е. нажмёт Enter без ввода текста). По умолчанию значением `default` является пустая строка.

Листинг 5. Добавление имени пользователя в переменную окружения `env`

```
1 user = prompt("Enter username", default='amamelkina')
2 env.user = user
```

Также пользователю нужно ввести время в секундах, в течение которого будет выполняться программа.

Затем с помощью функции `run(command, …)`, которая запускает команду оболочки на удалённом узле, выполняется запуск программы `Waleffe_flow.Fortran`.

Также используются функции `put(local_path=None, remote_path=None, …)` и `get(remote_path, local_path = None)` для загрузки файлов на удаленный сервер и скачивания файлов с удалённого сервера соответственно.

Листинг кода python-скрипта представлен в Приложении.

Для запуска `fabric` предоставляет команду `fab`, которая считывает свою конфигурацию из файла `fabfile.py`.

В листинге 6 представлена простая функция, с помощью которой будет продемонстрировано, как использовать `fabric` [52]. Эта функция сохранена как `fabfile.py` в текущем рабочем каталоге.

Листинг 6. Пример функции

```
1 def hello():
2     print("Hello!")
```

Функция приветствия может быть выполнена с помощью `fab` инструмента следующим образом:

```
fab hello
```

В результате выполнения этой команды будет выведено "Hello!".

Таким образом, для запуска программы `Waleffe_flow.Fortran` на удаленной машине теперь необходимо выполнить только одну команду:

```
fab run_fortran
```

В результате работы данного python-скрипта на персональном компьютере в папке `run` появится новая папка с результатами запуска.

7 Применение предметно-ориентированных языков для автоматизации разработки подсистем ввода и вывода данных

2022.10.10: Метод построения оконного интерфейса пользователя на основе моделирования пользовательских целей

Ограничительный метод

Для средств взаимодействия пользователя и ЭВМ с оконным интерфейсом типичным является ограничительный метод. Метод заключается в том, что пользователю представляется некий набор операций, благодаря которым он может выполнять определенные действия с описанными в ЭВМ объектами своей деятельности. Операция имеет название, исходные данные и результаты, представляющие собой объекты воздействия операции. Пользователь решает, какую из операций необходимо выбрать в данный момент для выполнения своего задания, выбирает нужную операцию и задает для нее исходные данные. После чего ЭВМ выполняет указанную операцию, активируя соответствующие функции приложения, и выдаёт результаты операции пользователю.

По итогам выполнения очередной операции пользователь решает, какую следующую операцию ему нужно выбрать, передаёт ее ЭВМ на выполнение и т.д. Этот процесс он должен продолжать до тех пор, пока в итоге выполнения операций не будет достигнут желаемый результат, соответствующий выполненному заданию. Следовательно, пользователь должен сам планировать ход выполнения своего задания из предоставляемых ему операций. Обобщенная схема ограничительного метода взаимодействия приведена на рис. 30. Для ограничительного метода считается, что у пользователя присутствуют процедурные знания, необходимые для планирования процесса выполнения своих заданий.

Направляющий метод

ДТ-модель (ДТ – диалоговая транзакция) диалога является основой направляющего метода взаимодействия пользователя с ЭВМ для оконного интерфейса. Цели партнеров в диалоге делятся на практические цели (ПЦ) и коммуникативные цели (КЦ). ПЦ – это описание определенной ситуации в общей предметной области партнеров, которую (ситуацию) один из партнеров (инициатор ПЦ) стремится достичь с помощью другого партнера. КЦ – это намерение партнера-инициатора ПЦ довести свою ПЦ до сведения второго партнера. При построении ДТ-модели в качестве целей партнеров в диалоге рассматриваются только ПЦ. Пользователя является представлением его задания в ЭВМ. ДТ описывает часть процесса диалога, ограниченную выдвижением и обработкой некоторой ПЦ. Выделяются элементарные ДТ (ЭДТ) и неэлементарные ДТ. ЭДТ является минимальным структурным элементом описания процесса диалога в ДТ-модели. ЭДТ представляет собой последовательность действий (речевых актов), совершаемых поочередно партнерами по диалогу и направленных на выдвижение и

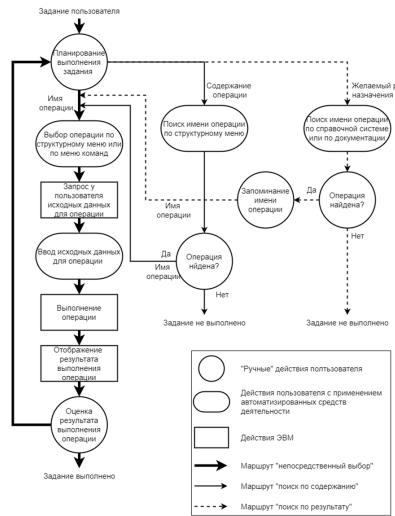


Рис. 27. Обобщённая схема ограничительного метода взаимодействия "пользователь-ЭВМ" для оконного интерфейса

обработку элементарной ПЦ. ЭДТ состоит из трех фаз:

1. Выдвижение элементарной ПЦ партнером-инициатором и передача ее партнеру-исполнителю.
 2. Реагирование на ПЦ, т. е. формирование партнером-исполнителем положительной или отрицательной реакции на выдвинутую цель и передача реакции инициатору ПЦ.
 3. Оценивание реакции партнером-инициатором (принять ее или отклонить с точки зрения соответствия реакции выдвинутой ПЦ) и передача оценки исполнителю.
- Пример ЭДТ представлен на рис. 28.

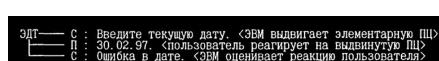


Рис. 28. Пример ЭДТ

В отличие от ограничительного метода взаимодействия, направляющий метод основан на описании в ЭВМ модели пользовательского задания как цели. Каждая из целей соответствует определенному пользовательскому заданию, которое может выполнить ЭВМ во взаимодействии с пользователем. Выбор и целенаправленное упорядочивание подзаданиями, приводящих к выполнению пользовательского задания, совершают не пользователь, а ЭВМ. От пользователя требуется в ответ на запросы ЭВМ ввести исходные данные, необходимые для этих операций.

Направляющий метод взаимодействия "пользователь-ЭВМ" состоит из следующих основных этапов:

- информирование пользователя о множестве допустимых заданий, которые может выполнять ЭВМ в рамках данного приложения;

- выбор пользователем задания по меню заданий и передача его ЭВМ на выполнение;
- планирование процесса взаимодействия при выполнении задания;
- ввод пользователем данных, необходимых ЭВМ для выполнения задания;
- передача пользователю результатов выполнения задания и их оценка пользователем.

Обобщенная схема направляющего метода взаимодействия приведена на рис. 29. В соответствии с этой схемой пользователь должен выбрать в меню заданий свое задание и передать его ЭВМ на выполнение. Выбранное задание рассматривается в ЭВМ как цель пользователя. Достижение этой цели обеспечивается в ходе последующего диалога с пользователем, в котором инициатива взаимодействия принадлежит ЭВМ.

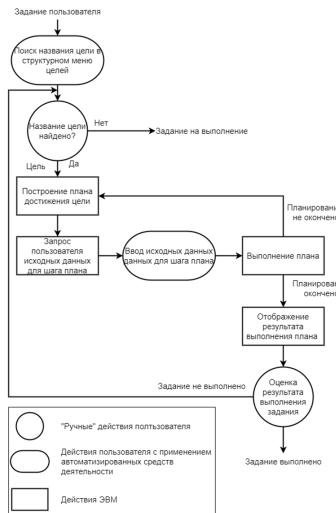


Рис. 29. Обобщённая схема направляющего метода взаимодействия "пользователь-ЭВМ" для оконного интерфейса

В отличие от схемы ограничительного метода, в рассматриваемой схеме существует только один маршрут движения, т. е. здесь нет зависимости результата от степени пользовательской подготовки. После передачи пользовательской цели в ЭВМ дальнейшее взаимодействие не требует инициативы пользователя вплоть до этапа оценки результата достижения цели. Планирование процесса взаимодействия на множестве ДТ осуществляет ЭВМ в соответствии с DT-моделью диалога. Данные, необходимые ЭВМ для достижения принятой от пользователя цели, вводятся пользователем только по запросу, т.е. на этой стадии он выступает в роли реагирующего партнера.

Итак, главное отличие направляющего метода взаимодействия "пользователь-ЭВМ" по сравнению с ограничительным методом состоит в том, что инициатива взаимодействия

по достижению цели пользователя принадлежит не пользователю, а ЭВМ. Это означает, что ЭВМ играет активную роль в целенаправленном взаимодействии по выполнению задания пользователя. Сопоставление схемы направляющего метода взаимодействия (рис. 29) со схемой ограничительного метода (рис. 30) позволяет наглядно судить об упрощении работы пользователя за счет того, что пользователю уже не требуется знать, как выполнить то или иное задание, поскольку планирование процесса взаимодействия выполняет не он сам, а ЭВМ.

Подготовлено: Василян А.Р. (PK6-73Б), 2022.10.10

2022.10.13: Построение пользовательского интерфейса с использованием интерактивного машинного обучения

Построение пользовательского интерфейса

Функционал приложения доступный пользователю следует разделить на отдельные функции, которые пользователь может использовать посредством взаимодействия с интерфейсом или последовательностью таких действий. Применение каждой такой функции необходимо для достижения конкретного результата, который может быть достигнут различными путями. В процессе использования приложения пользователь определяет такие пути по совокупности критерии. К таким критериям относятся:

- личный опыт;
- размер и расположение элементов управления;
- планирование процесса взаимодействия при выполнении задания;
- рекомендации, заложенные в ПО;
- интерактивные подсказки.

Построение пользовательского интерфейса с использованием интерактивного машинного обучения

На первом этапе производится сбор входных данных. В качестве таких данных будут выступать частота, последовательность, достигаемый результат и время между применениями рассматриваемых функций. Исследованием в данной области занимается человеко-компьютерное взаимодействие, где в настоящее время основную роль играет машинное обучение. На основании собранных данных проводится обучение целью которого является сократить путь для достижения конкретного результата, сокращение количества шагов и затрачиваемого времени для выполнения идентичных задач. Для обучения используется алгоритм дерева градиентного повышения (ДГП). Одной

из его возможностей является визуализация процесса обучения. Строится аддитивная модель $F(x)$ состоящую из M деревьев решений $h_m(x)$, с входной функцией x , формула 7.

$$F(x) = \sum_{m=1}^M y_m h_m(x) \quad (7)$$

Каждое дерево решений $h_m(x)$ является слабым учеником и может оперировать со смешанными типами данных. Строится модель с прямой поэтапной модой по формуле 8.

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + y_m h_m(x) \quad (8)$$

Для уменьшения потерь функции L на каждом шагу выбирается дерево решений $h_m(x)$, фиксируя предыдущий ансамбль деревьев, формула 9.

$$F_m(x) = \operatorname{argmin}_h \sum_{i=1}^n L(u_i, F_{m-1}(x_i) - h(x_i)) \quad (9)$$

Для минимизации потерь используется алгоритм по формуле 10.

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + y_m \sum_{i=1}^n \nabla L(u_i, F_{m-1}(x_i)) \quad (10)$$

Алгоритм обучения выбирает лучший порог для каждого. Использование матрицы Гессиана и весов позволяет вычислять прирост информации, вызванный применением каждой функции и правила принятия решения для узла. Обучение может производиться на любом приложении с графическим пользовательским интерфейсом, имеющем длинные цепочки выполнения действий, например, пакет офисных приложений. По результатам обучения строится последовательность действий для достижения необходимого результата. При её построении учитывается время поиска элемента интерфейса, его доступность (подмножество действий необходимых к выполнению для получения доступа к данному элементу), соответствие описания и ожидаемого результата (использование других элементов, требующих большего числа шагов для достижения результата). На основании полученных результатов вносятся корректировки в существующий интерфейс, после чего обучение продолжается.

Подготовлено: Васильян А.Р. (PK6-73Б), 2022.10.13

2022.10.15: Методический подход к созданию универсального пользовательского интерфейса

На рисунке 30 представлены составные элементы подхода к созданию универсального средства построения пользовательского интерфейса программных средств.

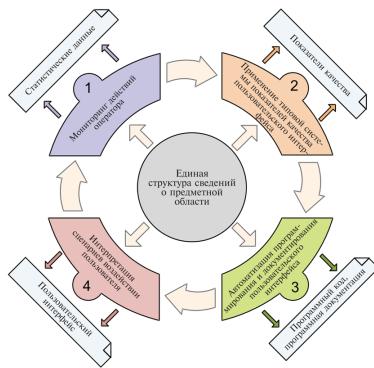


Рис. 30. Составные элементы подхода к созданию универсального средства построения пользовательского интерфейса программных средств

Мониторинг действий оператора (блок 1 на рис. 4) позволяет осуществлять сбор и накопление статистики деятельности оператора во время эксплуатации программных средств. Оператор вводит входные параметры с помощью технических средств ввода данных: клавиатуры, манипулятора «мышь», фотокамеры, микрофона, сканера, специализированных панелей кнопок и переключателей, внешних носителей информации и т. п. Каждая атомарная операция основывается на низкоуровневых сигналах от средства ввода, преобразуемых программной средой в воздействия ввода оператора за счет событийной обработки. Оценка качества пользовательского интерфейса обеспечивается за счет:

- применения типовой системы показателей качества (блок 2 на рис. 4);
- разработки методики оценки качества;
- выполнения мероприятий по оценке показателей качества.

Система показателей качества пользовательского интерфейса основывается на сведениях представленных типов:

- аппаратные события – события, которые возникают от действия всех технических средств при работе с периферийным оборудованием, а также вследствие использования каналов связи и удаленных подключений;
- события приложения – события, связанные с операциями получения, обработки и преобразования данных, обеспечения политики безопасности и уровней доступа, т. е. все эти события появляются в процессе функционирования программы в программной среде;
- пользовательские события – события, предусмотренные программой, происходят в результате воздействий пользователя на элементы управления интерфейса.

Величины, с помощью которых можно определить качество выполнения операции:

- среднее время выполнения операции;
- число ошибок (количество итераций), возникающих за период работы;
- среднее время возникновения ошибки.

Показатели качества пользовательского интерфейса выражаются в формате:

- время выполнения операций (действий);
- число действий, необходимых для выполнения операции;
- число атомарных операций, необходимых для выполнения действия;
- число пустых действий, выполненных оператором;
- число ошибочных атомарных операций.

"Автоматизация программирования и документирования пользовательского интерфейса"(блок 3 на рис. 4) подразумевает возможность автоматизированного документирования интерфейса программы. Основные мероприятия жизненного цикла пользовательского интерфейса:

- задание требований;
- проектирование;
- разработка, программирование
- оценка качества и испытания;
- документирование (описание).

Каждое мероприятие жизненного цикла интерфейса взаимосвязано с UML моделями, описывающими интерфейс, которые в ходе итерационного процесса разработки корректируются и используются для получения документов. В соответствии с подходом предусматривается автоматизация программирования макетов пользовательского интерфейса, основанная на таком выборе паттерна проектирования программного кода, который позволит инкапсулировать механизмы обработки данных и управления от элементов управления интерфейса, но при этом обеспечит связь с моделью данных и мониторинг действий оператора. Можно использовать UML модель сценариев применения пользовательского интерфейса (модель сценариев действий пользователя (СВП)), описывающая различные стороны функционирования программы, которая выражает на определенном уровне абстракции порядок взаимодействия пользователя с программным средством. Модель используется для декомпозиции и формирования однозначного понимания сведений по совокупности функций и режимов работы разрабатываемого программного средства, а также для обеспечения возможности автоматизированного документирования и построения кода интерфейса программы.

С помощью UML модели СВП решаются следующие задачи:

- прототипирование и/или макетирование пользовательского интерфейса при разработке программного средства;
- формализация существующего пользовательского интерфейса;
- описание деятельности пользователя при эксплуатации программных средств, выраженное в виде набора осуществленных сценариев воздействий на элементы управления программы.

Отображение некоторого абстрактного сценария осуществляется механизм его интерпретации (блок 4 на рис. 4) в стандартные программные процедуры, характерные для выбранной програмноаппаратной платформы. Наличие интерпретатора предписывает применение некоторой формальной логики (языка), с помощью лексем которой выражаются любые сценарии. Одна лексема описывает типовую атомарную операцию над элементом управления пользовательского интерфейса, идентифицирующие сведения о которой содержатся в параметрах лексемы. Каждая атомарная операция, которая вызвана действиями пользователя, на диаграмме СВП представляет собой дугу графа, вершины графа — элементы управления пользовательского интерфейса, веса графа — комплексные показатели, характеризующие:

- количество выполнений атомарной операции;
- время выполнения атомарной операции;
- количество ошибок, связанных с выполнением атомарной операции.

Подготовлено: *Василян А.Р. (PK6-73Б)*, 2022.10.15

2022.10.24: Теоретическое ознакомление с Django и Docker.

Django

Django – это высокоуровневый Python веб-фреймворк для бэкенда, который позволяет быстро создавать безопасные и поддерживаемые веб-сайты. Фреймворк — это программное обеспечение, облегчающее разработку и объединение разных компонентов большого программного проекта. Главная цель фреймворка Django – позволить разработчикам вместо того, чтобы снова и снова писать одни и те же части кода, сосредоточиться на тех частях своего приложения, которые являются новыми и уникальными для их проекта. Достоинства Django:

1. Масштабируемый. Django использует компонентную архитектуру, то есть каждая её часть независима от других и, следовательно, может быть заменена или изменена, если это необходимо. Чёткое разделение частей означает, что Django может масштабироваться при увеличении трафика, путём добавления оборудования на любом уровне;

2. Разносторонний. Django может быть использован для создания практически любого типа веб-сайтов;
3. Безопасный. Django помогает разработчикам избежать многих распространённых ошибок безопасности, предоставляя фреймворк, разработанный чтобы «делать правильные вещи» для автоматической защиты сайта. Например, Django предоставляет безопасный способ управления учётными записями пользователей и паролями, избегая распространённых ошибок, таких как размещение информации о сеансе в файлы cookie, где она уязвима или непосредственное хранение паролей вместо хэша пароля;
4. Переносным. Django написан на Python, который работает на многих платформах;
5. Удобным в сопровождении. Код Django написан с использованием принципов и шаблонов проектирования, которые поощряют создание поддерживаемого и повторно используемого кода.

Docker

Docker — программное обеспечение с открытым исходным кодом, применяемое для разработки, тестирования, доставки и запуска веб-приложений в средах с поддержкой контейнеризации. Он нужен для более эффективного использование системы и ресурсов, быстрого развертывания готовых программных продуктов, а также для их масштабирования и переноса в другие среды с гарантированным сохранением стабильной работы. Основной принцип работы Docker — контейнеризация приложений. Этот тип виртуализации позволяет упаковывать программное обеспечение по изолированным средам — контейнерам. Каждый из этих виртуальных блоков содержит все нужные элементы для работы приложения. Это дает возможность одновременного запуска большого количества контейнеров на одном хосте. Преимущества использования Docker:

1. Минимальное потребление ресурсов — контейнеры не виртуализируют всю операционную систему (ОС), а используют ядро хоста и изолируют программу на уровне процесса;
2. Скоростное развертывание — вспомогательные компоненты можно не устанавливать, а использовать уже готовые docker-образы (шаблоны);
3. Удобное скрытие процессов — для каждого контейнера можно использовать различные методы обработки данных, скрывая фоновые процессы;
4. Работа с небезопасным кодом — технология изоляции контейнеров позволяет запускать любой код без вреда для ОС;
5. Простое масштабирование — любой проект можно расширить, внедрив новые контейнеры;
6. Удобный запуск — приложение, находящееся внутри контейнера, можно запустить на любом docker-хосте;
7. Оптимизация файловой системы — образ состоит из слоев, которые позволяют очень эффективно использовать файловую систему.

Определения Docker:

1. Docker-образ (Docker-image) — файл, включающий зависимости, сведения, конфигурацию для дальнейшего развертывания и инициализации контейнера;
2. Docker-контейнер (Docker-container) — это легкий, автономный исполняемый пакет программного обеспечения, который включает в себя все необходимое для запуска приложения: код, среду выполнения, системные инструменты, системные библиотеки и настройки;
3. Docker-файл (Docker-file) — описание правил по сборке образа, в котором первая строка указывает на базовый образ. Последующие команды выполняют копирование файлов и установку программ для создания определенной среды для разработки;
4. Docker-клиент (Docker-client / CLI) — интерфейс взаимодействия пользователя с Docker-демоном. Клиент и Демон — важнейшие компоненты "движка" Докера (Docker Engine). Клиент Docker может взаимодействовать с несколькими демонами;
5. Docker-демон (Docker-daemon) — сервер контейнеров, входящий в состав программных средств Docker. Демон управляет Docker-объектами (сети, хранилища, образы и контейнеры). Демон также может связываться с другими демонами для управления сервисами Docker;
6. Том (Volume) — эмуляция файловой системы для осуществления операций чтения и записи. Она создается автоматически с контейнером, поскольку некоторые приложения осуществляют сохранение данных;
7. Реестр (Docker-registry) — зарезервированный сервер, используемый для хранения docker-образов;
8. Docker-хаб (Docker-hub) или хранилище данных — репозиторий, предназначенный для хранения образов с различным программным обеспечением. Наличие готовых элементов влияет на скорость разработки;
9. Docker-хост (Docker-host) — машинная среда для запуска контейнеров с программным обеспечением;
10. Docker-сети (Docker-networks) — применяются для организации сетевого интерфейса между приложениями, развернутыми в контейнерах.

Подготовлено: Василян А.Р. (PK6-73Б), 2022.10.24

2022.10.29: Практическое ознакомление с Django и Docker

На рисунке 36 представлено дерево проекта.

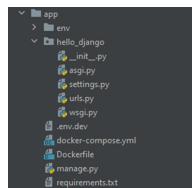


Рис. 31. Содержание проекта

settings.py Файл содержит в себе все настройки проекта. Здесь регистрируются приложения, задаётся размещение статичных файлов, настройки базы данных и т.д.

urls.py Файл задаёт ассоциации url адресов с представлениями.

wsgi.py Используется для определения связи между Django приложением и веб-сервером.

manage.py Используется для создания приложений, работы с базами данных и для запуска отладочного сервера.

Был создан Dockerfile в каталоге проекта. Содержимое Dockerfile представлено в листинге 7.

Листинг 7. Dockerfile

```
1 # pull official base image
2 FROM python:3.9.6-alpine
3
4 # set work directory
5 WORKDIR /usr/src/app
6
7 # set environment variables
8 ENV PYTHONDONTWRITEBYTECODE 1
9 ENV PYTHONUNBUFFERED 1
10
11 # install psycopg2 dependencies
12 RUN apk update \
13     && apk add postgresql-dev gcc python3-dev musl-dev
14
15 # install dependencies
16 RUN pip install --upgrade pip
17 COPY ./requirements.txt .
18 RUN pip install -r requirements.txt
19
20 # copy project
21 COPY ..
```

В Dockerfile описана последовательность команд, которые надо выполнить. На основе этого файла будет создан образ (docker image). Вначале указан образ на котором будем основываться. В нашем случае python 3.9. Устанавливается рабочая директория в контейнере с помощью WORKDIR. Далее устанавливаются переменные окружения:

1. PYTHONDONTWRITEBYTECODE означает, что Python не будет пытаться создавать файлы .pyc;

2. YTHONUNBUFFERED гарантирует, что вывод консоли выглядит знакомым и не буферизуется Docker.

Затем команды для установки соответствующих пакетов, необходимых для Psycopg2. Из директории, где находится Dockerfile, копируется файл зависимостей requirements.txt

в рабочую директорию контейнера. Далее с помощью команды `RUN` исполняются перечисленные в ней команды, что приводит к установкам зависимостей. Затем копируется вся директория проекта в контейнер. Был создан файл `docker-compose.yml` (листинг 8). `docker-compose` позволяет управлять многоконтейнерностью. То есть можно запустить сразу несколько контейнеров, которые будут работать между собой. В нашем случае мы создаем контейнер с базой данных `db` и наш основной контейнер `web`.

Листинг 8. `docker-compose.yml`

```
1 version: '3.8'
2
3 services:
4   web:
5     build: .
6     command: python manage.py runserver 0.0.0.0:8000
7     volumes:
8       - ./usr/src/app/
9     ports:
10      - 8000:8000
11     env_file:
12       - .env.dev
13     depends_on:
14       - db
15
16 db:
17   image: postgres:13.0-alpine
18   volumes:
19     - postgres_data:/var/lib/postgresql/data/
20   environment:
21     - POSTGRES_USER=hello_django
22     - POSTGRES_PASSWORD=hello_django
23     - POSTGRES_DB=hello_django_dev
24
25 # чтобы при работе контейнера сохранялись данные
26 postgres_data:
```

В самом начале указывается версия `docker-compose`. Далее указываются `services` (контейнеры).

1. `web`. Сбор проекта (`build`) делается на основе `Dockerfile` ("." Значит, что он в той же директории, что и `docker-compose`). Далее указывается команда для запуска сервера. Указываем `volumes`, что значит, что всё из директории, где находится `docker-compose`, используется в контейнере. Далее указываются порты (сервер Django запускается в контейнере на порте 8000 и этот порт перебрасывается на нашу хост машину). И в конце сервиса `web` указывается зависимость от сервиса `db`, то есть `web` не сможет работать без `db`.

2. `db`. Выбирается образ `postgres`. Далее указываются `volumes`, чтобы сохранять

наши данные. Так же настраиваются переменные среды.

Команды, представленные на листинге 9, позволяют нам получить переменные окружения записанные в файл .env.dev (листинг 11) и записать их в переменные в файле проекта settings.py.

Листинг 9. Обновлённые переменные в settings.py

```
1 SECRET_KEY = os.environ.get("SECRET_KEY")
2
3 DEBUG = int(os.environ.get("DEBUG", default=0))
4
5 ALLOWED_HOSTS = os.environ.get("DJANGO_ALLOWED_HOSTS").split(" ")
```

SECRET_KEY — это секретный ключ, который используется Django для поддержки безопасности сайта. DEBUG. Включает подробные сообщения об ошибках, вместо стандартных HTTP статусов ответов. Должно быть изменено на False на сервере, так как эта информация очень много расскажет взломщикам. ALLOWED_HOSTS — это список хостов/доменов, для которых может работать текущий сайт. Так же в settings.py были обновлены настройки базы данных (листинг 10) на основе переменных окружения, определённых в .env.dev.

Листинг 10. Обновлённые переменные в settings.py

```
1 DATABASES = {
2     "default": {
3         "ENGINE": os.environ.get("SQL_ENGINE",
4             "django.db.backends.sqlite3"),
5         "NAME": os.environ.get("SQL_DATABASE", BASE_DIR /
6             "db.sqlite3"),
7         "USER": os.environ.get("SQL_USER", "user"),
8         "PASSWORD": os.environ.get("SQL_PASSWORD", "password"),
9         "HOST": os.environ.get("SQL_HOST", "localhost"),
10        "PORT": os.environ.get("SQL_PORT", "5432"),
11    }
12 }
```

Листинг 11. Содержимое файла .env.dev

```
1 DEBUG=1
2 SECRET_KEY=foo
3 DJANGO_ALLOWED_HOSTS=localhost 127.0.0.1 [:1]
4 SQL_ENGINE=django.db.backends.postgresql
5 SQL_DATABASE=hello_django_dev
6 SQL_USER=hello_django
7 SQL_PASSWORD=hello_django
8 SQL_HOST=db
9 SQL_PORT=5432
```

На рисунке 37 изображено приветственное окно Django, что свидетельствует о том, что проект Django был успешно настроен.

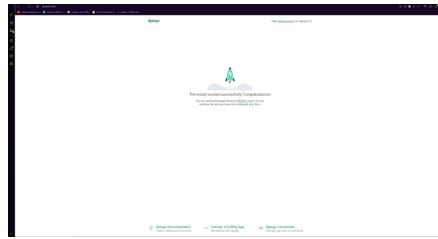


Рис. 32. Окно приветствия

Входим в контейнер и создаём суперпользователя (рисунок 38).

```
PS D:\VChern\django-on-docker\app> docker-compose exec web sh
/uvar/ar/app # ls
dockerfile
dockerfile_prod
dockerfile_staging
entrypoint.prod.sh
entrypoint.staging.sh
manage.py
requirements.txt
static/
uvar/ar/app # python manage.py createsuperuser
Username (leave blank to use 'root'): Arthur
Email address: arthur@ar.com
Password: 
Password (again):
Superuser created successfully.
/uvar/ar/app #
```

Рис. 33. Создание суперпользователя

Переходим по адресу `127.0.0.1:8000/admin/` и вводим имя и пароль суперпользователя. Вход выполнен (рисунок 39).



Рис. 34. Вход успешно выполнен

Проверка на создание таблиц по умолчанию на рисунке 35.

```
PS D:\PyCharm\django-on-docker\app> docker-compose exec db psql
psql (13.0)
Type "help" for help.

hello_django_deve=# \l
                                         List of databases
   Name    | Owner     | Encoding | Collate | Ctype | Access privileges
-----+-----+-----+-----+-----+-----+
 hello_django_dev | hello_django | UTF8   | en_US.UTF8 | en_US.UTF8 |
 postgres          | postgres    | UTF8   | en_US.UTF8 | en_US.UTF8 |
 template          | postgres    | UTF8   | en_US.UTF8 | en_US.UTF8 | =c/hello_django
 template0         | postgres    | UTF8   | en_US.UTF8 | en_US.UTF8 | =c/hello_django
 template1         | postgres    | UTF8   | en_US.UTF8 | en_US.UTF8 | =c/hello_django
(4 rows)
```

Рис. 35. Проверка таблиц

Подготовлено: Васильян А.Р. (PK6-73Б), 2022.10.29

2022.11.04: Разработка web-приложения

На рисунке 36 представлено дерево проекта.

Была добавлена работа со статическими файлами и возможность загружать фотографию в контейнер и вывести на страницу (рисунок 13).

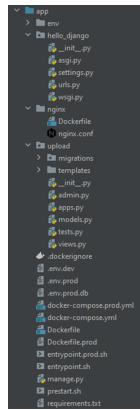


Рис. 36. Дерево проекта

В новом Dockerfile.prod (листинг 12) используется многоступенчатая сборка (**multi-stage build**) , чтобы уменьшить конечный размер образа. **builder** — это временный образ, которое используется для сборки Python. Затем он копируются в конечный производственный образ, а образ **builder** отбрасывается. Так же мы создали пользователя app без полномочий **root**. По умолчанию Docker запускает контейнерные процессы как **root** внутри контейнера, и если кто-то получит доступ на сервер и к контейнеру, то проникший на сервер пользователь тоже станет **root**, что, очевидно, не желательно. Таким образом увеличивается безопасность. Были созданы папки staticfiles и mediafiles, так как docker-compose монтирует именованные тома как **root**. И так как используется пользователь **app** не обладает полномочиями **root**, таким образом можно получить ошибку отказа в разрешении при запуске команды **collectstatic**, если каталог еще не существует. Так же был использован Gunicorn (сервер промышленного уровня) и также добавлен в файл requirements.txt (версия 20.0.4).

Листинг 12. Dockerfile.prod

```
1 # BUILDER
2
3 FROM python:3.9.6-alpine as builder
4
5 # установка рабочей директории
6 WORKDIR /usr/src/app
7
8 # установка переменных окружения
9 ENV PYTHONDONTWRITEBYTECODE 1
10 ENV PYTHONUNBUFFERED 1
11
12 # установите зависимости psycopg2
13 RUN apk update \
14     && apk add postgresql-dev gcc python3-dev musl-dev
15
16 RUN pip install --upgrade pip
```

```
17 RUN pip install flake8
18 COPY ..
19 #RUN flake8 --ignore=E501,F401 .
20
21 # установка зависимостей
22 COPY ./requirements.txt .
23 RUN pip wheel --no-cache-dir --no-deps --wheel-dir /usr/src/app/wheels --r
    requirements.txt
24
25 # FINAL
26
27 FROM python:3.9.6-alpine
28
29 # создание каталога для пользователя app
30 RUN mkdir -p /home/app
31
32 # создание пользователя app
33 RUN addgroup -S app && adduser -S app -G app
34
35 # создание необходимых директорий
36 ENV HOME=/home/app
37 ENV APP_HOME=/home/app/web
38 RUN mkdir $APP_HOME
39 RUN mkdir $APP_HOME/staticfiles
40 RUN mkdir $APP_HOME/mediafiles
41 WORKDIR $APP_HOME
42
43 # установка зависимостей
44 RUN apk update && apk add libpq
45 COPY --from=builder /usr/src/app/wheels /wheels
46 COPY --from=builder /usr/src/app/requirements.txt .
47 RUN pip install --no-cache /wheels/*
48
49 # копирование entrypoint.prod.sh
50 COPY ./entrypoint.prod.sh .
51 RUN sed -i 's/\r$//g' $APP_HOME/entrypoint.prod.sh
52 RUN chmod +x $APP_HOME/entrypoint.prod.sh
53
54 # копирование проекта в контейнер
55 COPY . $APP_HOME
56
57 # chown файлам пользователя
58 RUN chown -R app:app $APP_HOME
59
60 # переход к пользователю app
61 USER app
```

```
62
63 # запуск entrypoint.prod.sh
64 ENTRYPOINT ["/home/app/web/entrypoint.prod.sh"]
```

В docker-compose.prod (листинг ??) был добавлен новый сервис Nginx, чтобы он действовал как обратный прокси-сервер для Gunicorn для обработки клиентских запросов, а также для обслуживания статических файлов. Для работы Nginx была создана новая директория с соответствующим названием. В данной директории были созданы файлы Dockerfile (листинг 14) и nginx.conf (листинг 15).

Листинг 13. docker-compose.prod.yml

```
1 version: '3.8'
2
3 services:
4   web:
5     build:
6       context: ./  
7       dockerfile: Dockerfile.prod
8     command: gunicorn hello_django.wsgi:application --bind 0.0.0.0:8000
9     volumes:
10      - static_volume:/home/app/web/staticfiles
11      - media_volume:/home/app/web/mediafiles
12     expose:
13       - 8000
14     env_file:
15       - ./env.prod
16     depends_on:
17       - db
18
19   db:
20     image: postgres:13.0-alpine
21     volumes:
22       - postgres_data:/var/lib/postgresql/data/
23     env_file:
24       - ./env.prod.db
25
26   nginx:
27     build: ./nginx
28     volumes:
29       - static_volume:/home/app/web/staticfiles
30       - media_volume:/home/app/web/mediafiles
31     ports:
32       - 1337:80
33     depends_on:
34       - web
35
36   volumes:
37     postgres_data:
```

```
36 static_volume:  
37 media_volume:
```

Листинг 14. Dockerfile в директории nginx

```
1 FROM nginx:1.21-alpine  
2 RUN rm /etc/nginx/conf.d/default.conf  
3 COPY nginx.conf /etc/nginx/conf.d
```

Листинг 15. nginx.conf

```
1 upstream hello_django {  
2     server web:8000;  
3 }  
4  
5 server {  
6     listen 80;  
7  
8     location /{  
9         proxy_pass http://hello_django;  
10        proxy_set_header X-Forwarded-For $proxy_add_x_forwarded_for;  
11        proxy_set_header Host $host;  
12        proxy_redirect off;  
13    }  
14  
15    location /static/ {  
16        alias /home/app/web/staticfiles/;  
17    }  
18  
19    location /media/ {  
20        alias /home/app/web/mediafiles/;  
21    }  
22 }
```

Для работы с медиафайлами был создан новый модуль Django под названием `upload`, то есть была создана новая директория `upload` (новый модуль создаётся командой в терминале: "docker-compose exec web python manage.py startapp upload") и добавлен новый модуль в `INSTALLED_APPS` в `settings.py`. В созданной директории был изменен файл `views.py` (листинг 16), была создана папка для шаблонов "templates" и в ней был создан новый шаблон `upload.html` (листинг 17). Так же был изменен файл `app/hello_django/urls.py` (литсинг 18).

Листинг 16. views.py

```
1 from django.shortcuts import render  
2 from django.core.files.storage import FileSystemStorage  
3  
4
```

```
5 def image_upload(request):
6     if request.method == "POST" and request.FILES["image_file"]:
7         image_file = request.FILES["image_file"]
8         fs = FileSystemStorage()
9         filename = fs.save(image_file.name, image_file)
10        image_url = fs.url(filename)
11        print(image_url)
12        return render(request, "upload.html", {
13            "image_url": image_url
14        })
15    return render(request, "upload.html")
```

Листинг 17. upload.html

```
1 {%\ block content %} 
2     <form action="{% url "upload" %}" method="post"
3         enctype="multipart/form-data">
4             {% csrf_token %}
5             <input type="file" name="image_file">
6             <input type="submit" value="submit" />
7         </form>
8 
9     {% if image_url %}
10        <p>File uploaded at: <a href="{{ image_url }}>{{ image_url }}</a></p>
11        
12    {% endif %}
13 {%\ endblock %}
```

light • (None) @ (None) • (None), (None)(None))

Листинг 18. urls.py

```
1 from django.contrib import admin
2 from django.urls import path
3 from django.conf import settings
4 from django.conf.urls.static import static
5 from upload.views import image_upload
6 
7 urlpatterns = [
8     path("", image_upload, name="upload"),
9     path("admin/", admin.site.urls),
10]
11 
12 if bool(settings.DEBUG):
13     urlpatterns += static(settings.MEDIA_URL, document_root=settings.MEDIA_ROOT)
```

Итак, командами представленными ниже запускаются контейнеры: docker-compose -f docker-compose.prod.yml up -d –build docker-compose -f docker-compose.prod.yml exec web

python manage.py migrate –noinput docker-compose -f docker-compose.prod.yml exec web
python manage.py collectstatic –no-input –clear После запуска, при переходе по адресу <http://localhost:1337/>, открывается страница (рис. 37). Можно выбрать файл (рис. 38). И после нажатия на submit страница обновляется, и теперь на ней присутствует ссылка на выбранное изображение, которое теперь сохранено в контейнере, и само изображение (рис. 39). Авторизация так же присутствует по адресу <http://localhost:1337/admin> аналогично тому, что было показано выше.

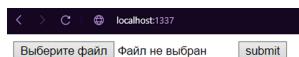


Рис. 37. Страница для загрузки фотографии



Рис. 38. Фотография выбрана

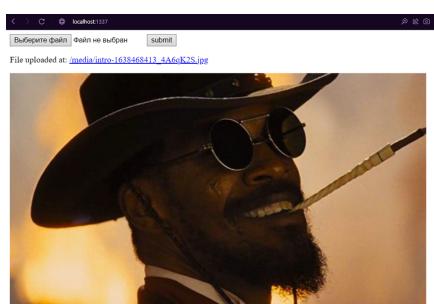


Рис. 39. Страница после нажатия на submit

Подготовлено: Василян А.Р. (PK6-73Б), 2022.11.04

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 large-scale 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] Пупырев С.Н. Тихонов А.В. Визуализация динамических графов для анализа сложных сетей // Моделирование и анализ информационных систем. 2010. Т. 17, № 1. С. 117 – 135.
- [18] Алгоритм Фрюхтермана-Рейнгольда. // pco.iis.nsk.su – URL: <http://pco.iis.nsk.su/wega/index.php/PӨРӮРӹРӻСГРӻСБРӻ>
- [19] Алгоритм Камада-Кавай. // pco.iis.nsk.su – URL: http://pco.iis.nsk.su/wega/index.php/PӨРӮРӹРӻСГРӻСБРӻ_РӨРӹРӹРӻРӻРӻРӻ
- [20] Построение графов: пошаговый гайд. // habr.com – URL: <https://habr.com/ru/company/leader-id/blog/488058/>.
- [21] Метод укладки Gephi. Метод Фрухтермана-Рейнгольда и Openord. // newtechaudit.ru – URL: <https://newtechaudit.ru/metod-ukladki-gephi-fruhtermana-rejngolda-i-openord/>.
- [22] Гамма-алгоритм. // neerc.ifmo.ru – URL: <https://neerc.ifmo.ru/wiki/index.php?title=PYРӹРӹРӻРӻРӻРӻРӻ>
- [23] A Simple and Unified Method for Drawing Graphs: Magnetic-Spring Algorithm. // link.springer.com – URL: https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/3-540-58950-3_391.pdf.
- [24] Нахождение цикла. // ru.wikipedia.org – URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/РҟРӹСЖРӻРӻРӻРӻРӻ>
- [25] Алгоритм Флойда. // neerc.ifmo.ru – URL: https://neerc.ifmo.ru/wiki/index.php?title=PӨРӮРӹРӻСГРӻСБРӻ_РһРӹРӻРӻРӻ
- [26] Евстигнеев В.А. Касьянов В.Н. Графы в программировании. 2003. С. 100 – 125.
- [27] Davidrajuh R. Detecting Existence of Cycles in Petri Nets // Department of Electrical and Computer Engineering. 2016. Vol. 10, no. 12. P. 2936–2951.
- [28] 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.

- [29] Diestel R. Graph Theory: Springer Graduate Text GTM 173. Springer Graduate Texts in Mathematics (GTM). Springer New York, 2012.
- [30] ДАТАДВАНС | Программное обеспечение для анализа данных и оптимизации [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. (дата обращения 06.11.2021).
- [31] Расчётные схемы - Руководство пользователя pSeven 6.27 [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. Дата обращения: 15.11.2021.
- [32] Параллельные вычисления - Руководство пользователя pSeven 6.27 [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2021. (дата обращения 15.11.2021).
- [33] PRADIS. Общее описание системы [Оф. документация]. 2007.
- [34] PRADIS. Методы формирования и численного расчёта математических моделей переходных процессов [Оф. документация]. 2007.
- [35] Alexey M. Nazarenko Alexander A. Prokhorov. Hierarchical Dataflow Model with Automated File Management for Engineering and Scientific Applications // Procedia Computer Science. 2015. Т. 66. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877050915034055?pes=vor>.
- [36] 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. 
- [37] Condition - pSeven 6.31.1 User Manual [Электронный ресурс] [Офиц. сайт]. 2022. (дата обращения 07.03.2022).
- [38] Соколов А.П. Першин А.Ю. Графоориентированный программный каркас для реализации сложных вычислительных методов // Программирование. 2018. № X.
- [39] Соколов А.П. Першин А.Ю. Описание формата данных aDOT (advanced DOT). 2020.
- [40] 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.
- [41] 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.
- [42] The HDF Group [Электронный ресурс] [Оф. сайт]. 2022. Дата обращения: 17.05.2022.

- [43] JSON vs XML: What's the difference? | Guru99 [Электронный ресурс]. 2022. Дата обращения: 18.05.2022.
- [44] SSH. // ru.wikipedia.org – URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/SSH>. (Дата обращения 6.05.2022).
- [45] Памятка пользователям ssh. // habr.com – URL: <https://habr.com/ru/post/122445/>. (Дата обращения 6.05.2022).
- [46] Управляем файлами и директориями в Linux. // infobox.ru – URL: <https://infobox.ru/community/blog/linuxvps/310.html>. (Дата обращения 6.05.2022).
- [47] Копирование файлов и папок через SSH. // ru.flamix.software – URL: <https://ru.flamix.software/about/news-article/kopirovanie-faylov-i-papok-cherez-ssh/>. (Дата обращения 6.05.2022).
- [48] Fabric documentation. // docs.fabfile.org – URL: <https://docs.fabfile.org/en/1.11/tutorial.html>. (Дата обращения 16.05.2022).
- [49] Fabric. // runebook.dev – URL: <https://runebook.dev/ru/docs/flask/patterns/fabric/index>. (Дата обращения 16.05.2022).
- [50] The environment dictionary, env. // docs.fabfile.org – URL: <https://docs.fabfile.org/en/1.11/usage/env.html>. (Дата обращения 16.05.2022).
- [51] Python-блог: Fabric: Операции. // python-lab.blogspot.com – URL: <http://python-lab.blogspot.com/2013/02/fabric.html>. (Дата обращения 16.05.2022).
- [52] Начало работы с библиотекой Fabric Python. // coderlessons.com – URL: <https://coderlessons.com/articles/programmirovaniye/nachalo-raboty-s-bibliotekoi-fabric-python>. (Дата обращения 16.05.2022).