

На шляху до екзабайтного інформаційного середовища е-науки

Згуровський М.З., Петренко А.І.

Доступність інформаційних комп'ютерних технологій, з одного боку, і необхідність нових досліджень, як в традиційних, так і в предметних галузях, що тільки сформувалися, з іншого боку, обумовлюють тенденцію лавиноподібного зростання об'ємів наукових даних, які зараз вимірюються екзабайтами (екзабайт = 10^{18} байт) і для аналізу і організації яких вимагаються нові наукові методи. Щороку об'єми даних майже подвоюються. Зараз йдеться про одночасну обробку петабайтних наборів даних (петабайт= 10^{15} байт), отриманих завдяки підвищеній точності вимірів при спостереженнях та експериментах і удосконаленні процедур моделювання, що потребує розроблення інтелектуальних методів організації даних для скорочення об'єму пошуку, паралельної обробки і доступу до даних при виконанні пошуку у величезних наборах. При цьому можливе виявлення тонких ефектів, які залишилися невиявленими при попередніх дослідженнях. Переконливими прикладами джерела петабайтних наборів даних є Великий Андронний Коллайдер (LHC), який працює в ЦЕРН і який вироблятиме близько 10 Петабайт необроблених даних в галузі фізики високих енергій у рік; новітній телескопу (Large Synoptic Survey Telescope) з міжнародного проекту Sloan Digital Sky Survey, з допомогою якого досліджується спектр зірок на хвилях за межами видимого спектру; проект GEOSS (Global Earth Observation System of Systems), який базується на використанні супутникових даних для багатьох галузей господарства: прогнозування погоди і можливих врожаїв, спостереження змін клімату і екологічного стану, розповсюдження стихійних лихв (поводів, пожарів, засухи) та багато іншого.

Забезпечити можливість зберігання постійно зростаючих об'ємів даних, зробити їх доступними для спільного використання і ефективно керованими, надати вченим ефективні засоби обробки даних - ось завдання сьогодення. Істотні удосконалення в менеджменті даними збільшать дослідницьку продуктивність вчених в розв'язанні складних наукових проблем. Наступне покоління інфраструктури е-науки буде мати справу з прикладними застосуваннями, для функціонування яких будуть одночасно потрібні мільйони процесорів. До 2020 року очікуються наукові дані обсягом в сотні екзабайт, розподілені в кількох центрах, доступні через різноманітні сховища аналізу, оброблення і іншої наукової діяльності. Найбільш вагомими з можливих рішень побудови інфраструктури для оброблення даних екзабайтних обсягів розглянуті нижче.

Розподілення: інфраструктура для екзабайтних даних включатиме багато розподілених сховищ, розміщених в різних країнах і доступних на міжнародному рівні. Набори даних зберігатимуться на різних сайтах, можливо, в єдиному форматі замість теперешніх численних стандартів, по суті, по одному для кожної наукової дисципліни. Можливості агрегування і організації паралельного доступу до даних допомагатимуть клієнтським е-науковим застосуванням з різних галузей (наприклад, з проблеми зміни клімату) в отриманні потрібних даних з розподілених сховищ для вивчення і аналізу.

Копіювання: копіювання (реплікація) даних представляє собою основний засіб поліпшення локалізації даних, підвищення їх доступності, зменшення ризиків втрати. Процес копіювання екзабайтних даних повинен враховувати можливі перешкоди при передачі даних (наприклад, мережеві відмови і відмови сховищ) і відновлювати дані в таких випадках. Копіювання даних потребує подальше дослідження нових алгоритмів, протоколів, схем копіювання, стратегії розміщення сховищ. Буде потрібно дослідити взаємодію між каталогами копій і пристроями збереження даних і проблеми тривалості життя точної копії. Удосконалена контролююча система дозволить перевіряти статус кожної точної копії в термінах наявності, пропускну здатності (мережевого часу считування/очікування), використання, і т.п.. Нові точні копії повинні автоматично створюватися, виходячи з потреб користувача і інформації про попередній доступ.

Дані про дані (метадані): це описова інформація про дані, яка пояснює вимірювані атрибути, їх імена, одиниці виміру, точність, формат даних та інше. Найбільш важливе те, що метадані включають інформацію про походження даних, описують, як вимірювалися, генерувалися або обчислювалися дані. Використання метаданих спрощує доступ до даних, їх взаємообмін і інтеграцію, забезпечує розуміння даних як інструментальними засобами, так і людьми.

Зберігання і кешування даних : технології зберігання є важливою частиною менеджменту великих об'ємів даних. Технічне забезпечення і програмні компоненти гратимуть вирішальну роль в управлінні великими наборами наукових даних. Паралельний вхід/ вихід будуть критичними з декількох причин: швидкість генерації даних (важлива для зберігання, коли паралельні застосування реалізуються на мільйонах ядер) і швидкість считування даних (що здійснюється інструментами аналізу) - це тільки два з можливих прикладів. Потрібен новий ефективний алгоритм кешування для покращення менеджменту даних. Потрібне впровадження нового покоління об'єктно-реляційних систем баз даних, які сприймають будь-який тип даних (будь то звичайне число, масив, рядок символів або складений об'єкт, такий як XML або HTML -документ) як інкапсульований тип, значення якого можуть зберігатися в полі запису. Такі системи баз даних забезпечують потужний асоціативний пошук (пошук за значенням, а не за містом розташування), а також автоматичний паралельний доступ і виконання, що істотно для аналізу петабайтних даних.

Доступ до середовища даних : компоненти середовища екзабайтних даних (сховища, сервіси метаданих, реєстратори, інструментарій аналізу, онтології і т.п.) повинні бути сумісними і взаємодіяти між собою безпосередньо. Уніфіковані інтерфейси повинні приховати різноманітність основних систем і спрощувати доступ до наявних ресурсів. Окрім, доступ до основної інфраструктури має бути и і повсюдний. Інтегроване середовище, що базується на веб-сервісах, гратиме ключову роль в зміні і поліпшення щоденної діяльності наукових користувачів.

Окрім того, можливості удосконалення систем управління маршрутами виконання сервісів (workflow-систем) дозволять дослідникам складати комплексні наукові завдання для розподілених сховищ, обчислювальних ресурсів, баз даних і т.д.. Портали даних наступного покоління забезпечать високий рівень партнерської функціональності в щоденній діяльності дослідників і вчених. Можливості соціальних мереж збільшать рівень обговорень, зворотного зв'язку, обміну науковими результатами і їх розповсюдження серед тематичних груп, науковим команд і т.д.

Пошук і відкриття даних : в екзабайтному середовищі процедури пошуку і відкриття даних продовжать грати вирішальну роль. Будуть використовуватися одночасно декілька джерел метаданих, вносячи свій вклад в опис наборів існуючих даних. Ієрархії метаданих і індексів допомагатимуть в прискоренні пошуку і відкритті даних в такому великому масштабі. Вони будуть основою для створення запитів, їх композиції, відновлення і фільтрації даних.

Ефективні збираючі протоколи будуть збирати інформацію про метадані з різних сайтів, відображаючи доступні розподілені набори даних. Стандарти метаданих і асоційовані процеси стандартизації будуть базою для опису даних через прийняті і адаптовані набори інформації.

Автоматичне считування метаданих гратиме ключову роль в об'єднанні і прискоренні використання метаданих. Інформація про походження даних буде і більш і більш важливішою для ідентифікації, простежуванням і реєстрації історії даних, для етапів оброблення і аналізу даних.

Аналіз даних : в екзамасштабі для аналізу даних будуть потрібні нові математичні підходи, алгоритми і пов'язані з ними паралельні реалізації, здатні завантажити велику кількість доступних процесорів і також забезпечити ефективні доступ і менеджмент даних у файлової системі і на рівні зберігання. При наявності петабайтних наборів даних вимагається нова методологія роботи наукових центрів, яка передбачає переміщення прикладних програм до даних і передачу в наукові центри тільки запитів і отримання відповідів, а не переміщення початкових даних і додатків в локальну систему користувача.

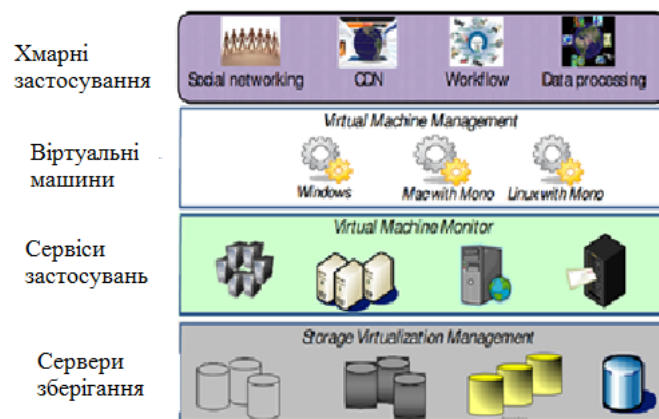


Рис.1. Типовий центр наукових даних

Обчислювальна потужність хмарного середовища створюється множиною центрів даних, на яких зазвичай встановлюються сотні і тисячі серверів. Багаторівнева архітектура типового центру даних, заснованого на хмарі, показана на рис. 1. На її нижніх рівнях розташовані фізичні ресурси центру (сервери зберігання і сервери застосувань), які визначають його потужність. Ці сервери прозоро керуються вище розташованими рівнями віртуалізації сервісів і інструментарія, які допускають спільне їх використання віртуальними серверами. Ці віртуальні сервери ізолюються один від одного, що допомагає досягнути необхідний рівень безпеки.

Хмарні застосування, такі як соціальні мережі, ігрові портали, ділові застосування, доставка змісту, і наукові workflows-системи діють на найвищому рівні архітектури. Тип використовуємих застосувань змінюються з часом непередбачуваним чином. Ці застосування мають різну якість сервісних вимог (QoS) залежно від режиму використання (online/offline) і часу використання.

Використовується нова технологія інтелектуального аналізу даних з метою виявлення прихованих закономірностей у вигляді значущих особливостей, кореляцій, тенденцій і шаблонів. Сучасні системи вилучення знань з «сирих» дозволяють знаходити розчинену в петабайтних сховищах не очевидну, але вельми цінну інформацію. В основу технології Data Mining встановлена концепція шаблонів (pattern), що відображають фрагменти багатоаспектних взаємостосунків в даних. Цими шаблонами є закономірності, властиві підвбіркам даних, які можуть бути компактно виражені у формі, зрозумілій людині. Пошук шаблонів проводиться методами, не обмеженими рамками апріорних припущень про структуру вибірки і вид розподілів значень аналізованих показників.

Клієнтський інструментарій: на клієнтській стороні потрібні нові інструменти, що перевершують існуючі можливості ПК. Перш за все, маються на увазі інструменти з паралельним виконанням процедур доступу, візуалізації і аналізу даних. Паралельні застосування могли би забезпечити високий рівень відгуку, надзвичайно необхідного для майбутніх сценаріїв. Оскільки непрактично завантажити великий об'єм даних на клієнтській стороні, буде важливим збільшити можливості клієнта з зменшення обсягів даних до наборів, які необхідні з точки зору користувача.

Засновані на хмарних обчисленнях сервіси даних: сьогодні платформа оброблення даних визначається більше самими даними, а її архітектура орієнтована на сервіси, з яких процедурою композиції можна за бажанням користувача складати прикладні додатки оброблення даних. Серед головних принципів такої сервісо-орієнтованої архітектури (SOA) виділяють наступні: максимальне повторне використання, модульність, здатність до поєднання (композиції), функціональна сумісність, відповідність стандартам. Для роботи з петабайтними наборами даних вимагаються величезні масиви пам'яті і тисячі обчислювальних вузлів, що сьогодні найефективніше забезпечується грид- або хмарними обчислювальними інфраструктурами.



Рис.2. Взаємодія користувачів з центрами даних

Через засновані на хмарних обчисленнях сервіси, які здатні запропонувати високий рівень надійності, масштабованості (через динамічне постачання ресурсів) і безпеки, можна керувати зберіганням даних, метаданими і науковими доменними онтологіями, розташованими в центрах даних (рис.2).

Розміщення метаданих і даних на хмарних сервісах сприяють зростанню ефективності одночасно сервісів даних і доступу до них.

Сумісність (interoperability): із-за великого розміру середовища, різноманітності платформ і складності екзамасштабних системи сумісність грає важливу роль в забезпеченні продуктивної взаємодії всіх задіяних компонентів, сервісів і акторів. Сумісність може бути досягнута шляхом прийняття відповідних стандартів.

З іншого боку, процес стандартизації повинен заохочувати розробників звертатися до реальних потреб і призводить до прийняття ефективних і широко погоджених документів. Сумісність робить дійсно "відкритим" екзамасштабне середовище. Стандарти повинні охоплювати проблеми метаданих, протоколів даних і інтерфейсів сховищ. Відомим прикладом може слугувати SRM (Storage Resource Manager- Менеджер ресурсів зберігання). Сумісність серед інтерфейсів багаторазових реалізацій SRM поліпшить доступ до даних, копіювання, їх переміщення серед декількох (різномірних) сховищ, що працюють на різних і географічно розподілених сайтах.

Освіта і підготовка кадрів: важливо в наступні роки забезпечити можливість зберігання постійно зростаючих об'ємів даних, зробити їх ефективно керованими і доступними для спільного використання, надати вченим ефективні засоби інтелектуальної обробки даних. З цією метою в Інституті прикладного системного аналізу НТУУ «КПІ» в 2011 році відкрита магістерська програма з нової спеціальності 8.06010301 «Системне проектування», що входить до напрямку 6.050101 „Комп'ютерні науки” і пов'язана з забезпеченням сучасної науки (е-наука) і інженерії (е-інженерія) заходами і новими технологіями з оброблення потенційно величезних обсягів інформації *незалежно від місць знаходження* комп'ютерів, сховищ даних, програмних додатків, унікальних приладів для виконання великого об'єму складних обчислень при підтримці ефективного спілкування і *творчій співпраці* дослідників чи проєктантів під час досліджень. Вона враховує той факт, що ІТ середовище швидко змінюється і вже зараз все більша і більша частина програмного забезпечення переміщується в Веб (тепер в Хмари) і доступна через звичайні браузері.