

# CHITON – ФРЕЙМВОРК ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НАУЧНЫХ ВЕБ-СЕРВИСОВ

Соболев Е. В., Соболев О. В., Пятков М. И.

Институт математических проблем биологии РАН

Абрау–Дюрсо – 2013

# Веб-сервис



Программное обеспечение как услуга (SaaS, англ. Software-as-a-Service) – модель, в которой пользователю предоставляется доступ через Интернет к программе, работающей в облачной инфраструктуре.

## Преимущества для конечного пользователя

Нет затрат по установке и поддержке оборудования и программ.

# Вычислительная программа как сервис

Веб-сервис на основе вычислительной программы – это ...

... **графический интерфейс**, который

- запрашивает параметры запуска в наглядном виде с контекстными подсказками
- скрывает подробности запуска программы и отслеживания ее выполнения на конкретном вычислителе

... **удаленный доступ** без установки, который

- предоставляет возможность быстро показать программу, например на конференции
- позволяет использовать программу со значительно меньшими затратами и рисками

... **наглядное пособие** и информационное сопровождение научных проектов

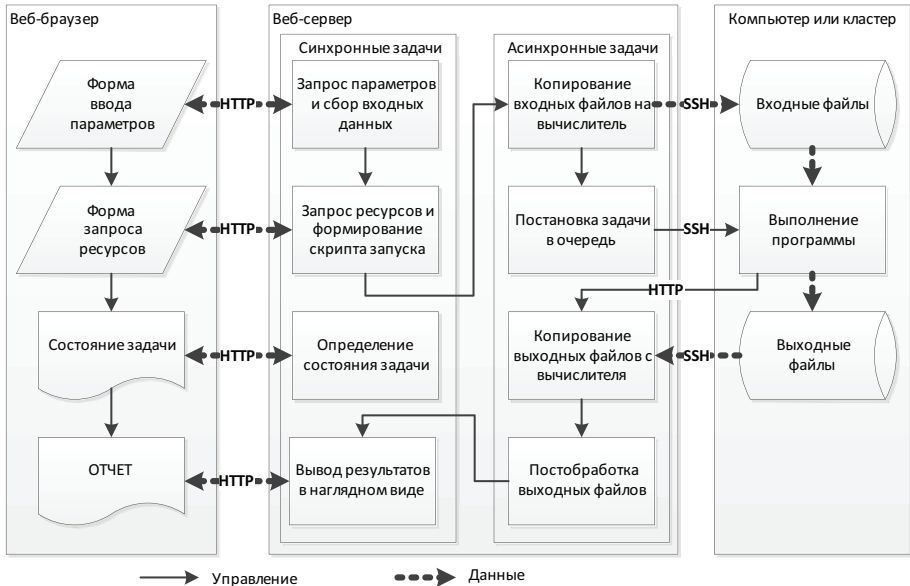
## Организации, предоставляющие веб-сервисы



YSBL software

и др.

# Схема веб-сервиса с удаленным вычислителем



# Постановка задачи

## Актуальность

Веб-интерфейс вычислительной программы расширяет возможное применение программы

## Проблема

Создание веб-сервиса с нуля связано со значительными затратами

## Решение – автоматизация разработки

CHITON – фреймворк для разработки научного веб-сервиса на основе вычислительной программы

# Принципы построения CHITON'a

## Принципы

- Максимальная автоматизация
- Соккрытие реализации
- Расширяемость
- Широкое применение готовых отлаженных инструментов

## Инструменты

- Язык Python
- Фреймворк Django для написания веб-приложений, включает множество инструментов
- Библиотеки вычислительных методов numpy и Matplotlib

# Описание исполняемой программы в CHITON'е

## myapp.py

```
1 from chiton.app import Application, options
2
3 class MyApp(Application):
4     pdb1 = options.FileOption(type='IP1', label='.pdb file before TUR')
5     pdb2 = options.FileOption(type='IP2', label='.pdb file after TUR', )
6     refprog = options.ChoiceOption(type='IK', key='', label='Refinement program:',
7         options = [
8             ('', 'phenix'), ('--refmac', 'refmac'),
9         ])
10    crit = options.ChoiceOption(type='IK', key='', label='Criterion:',
11        options = [
12            ('-t', 'threshold'), ('-l', 'likelihood')
13        ])
14    res = options.FileOption(type = "OK", key='-o', mimetype='text/plain')
15    pic = options.FileOption(type = "OI", filename = 'pic.png')
16    log = options.FileOption(type = "OI", filename = 'pic.log')
```

## celery\_local.cmd

```
1 /home/oleg/webproj/bin/ac_prediction.py {{ opts }} >out 2>err
2 /home/oleg/webproj/bin/shift_plot.py pdb1 pdb2 -opic >>out 2>>err
```


Всего 18 строк




# Страницы запуска задачи

## Форма ввода параметров

### NEW TASK

Refinement program:  

Criterion:  

.pdb file before TUR:

.pdb file after TUR:

## Информация о состоянии задачи

### TASK VFYG4E STATUS

Phase: submitted

Id	State	Nodes	Tasks	Walltime	Elapsed	CPU	Mem	VMem
7861e894-582f-498e-8a45-d1a9b8315ea6	queued	1	1					

# Описание отчета

## report.py

```
1 from chiton.report import Report
2 from chiton.report.items import TextCat, Table, Image
3 from string import find

4 class MyReport(Report):
5     tab = Table('res', label = 'Residues for visual inspection', filter = res2csv)
6     pic = Image('pic.png', label = 'shift_plot result', height=600)
7     res = TextCat('res', label = 'Results')
8     out = TextCat('out', label = 'Standard output')
9     err = TextCat('err', label = 'Standard error')

10 def res2csv(fname):
11     head = ["Residue number", "chain", "mean_dr/thr", "mean_dr"]
12     logtypemean = True
13     data=[]
14     with open(fname, 'rb') as f:

...

30     return head, data
```

Всего 30 строк

# Отчет (оглавление, таблица)

## TASK VFYG4E REPORT

### TABLE OF CONTENTS

[Residues for visual inspection](#)

[shift\\_plot result](#)

[Results](#)

[Standard output](#)

[Standard error](#)

### RESIDUES FOR VISUAL INSPECTION

[toggle top download](#)

Residue Number	Chain	ln(Palt/Pnoalt)	Palt	Pnoalt
82	A	1.9958	0.0963	0.0131
120D	A	1.9958	0.0963	0.0131
129	A	1.9958	0.0963	0.0131
141	A	1.9958	0.0963	0.0131
202	A	1.9958	0.0963	0.0131
120A	A	1.9742	0.0373	0.0052
182	A	1.9742	0.0373	0.0052
190	A	1.9742	0.0373	0.0052
174	A	1.9609	0.0491	0.0069
222C	A	1.9609	0.0491	0.0069
36	A	1.7398	0.1434	0.0252
38	A	1.7398	0.1434	0.0252

# Отчет (картинка)

SHIFT\_PLOT RESULT

[toggle top](#) [download](#)



# Отчет (текст/лог)

## RESULTS

[toggle top](#) [download](#)

```
ac_prediction ver. 1.1 (09.11.2012)

Atoms read from 1st pdb:      1391
Match atoms from 2nd pdb:    1391
Total residues for analysis:  198
Command line arguments: ['pdb1', 'pdb2', '-ores', '--refmac', '-l']
Input pdb 1: pdb1
Input pdb 2: pdb2
Refinement program: refmac
Resolution : 0.8300
Rfactor    : 0.1135
Criterion  : mean_shift_lik

0 warnings
Everything OK

Total residues read: 198
Candidates for side chain alternative conformation:
#res  chain
82    A      ln(Palt/Pnoalt): 1.9958; Palt: 0.0963; Pnoalt: 0.0131
```

## STANDARD OUTPUT

[toggle top](#) [download](#)

...

## Возможности

На данный момент реализованы следующие основные функции:

- Автоматическое создание страницы для ввода данных
- Сбор и проверка входных данных, запрос ресурсов
- Копирование файлов на удаленный вычислитель и обратно
- Постановка задачи в очередь
- Вывод информации о состоянии задачи
- Интерфейсы для менеджера ресурсов/очереди TORQUE и Celery
- Доступ к удаленным вычислителям по SSH
- Постобработка выходных файлов
- Формирование страницы отчета с помощью элементов: Текст, Таблица, Картинка, График

# Планы

В ближайшее время планируется реализовать:

- Формы для создания файлов параметров
- Автоматическое включение в отчет файлов с predetermined способом отображения
- Просмотр и поиск готовых расчетов
- Управление готовыми расчетами и текущими задачами
- Пользователи и пользовательские настройки
- Разграничение доступа
- Информирование об изменении статуса задач по e-mail
- Сбор статистики запусков

Спасибо за внимание!

Тестовые версии доступны у авторов по запросу: [egor@impb.psn.ru](mailto:egor@impb.psn.ru)