

29979

# e-Science、 网格及其可扩展性体系结构

e-Science、  
WANGGE JIQI KE KUOZHANXING  
TIXI JIEGOU

黄理灿 刘元安 编著



北京邮电大学出版社  
[www.buptpress.com](http://www.buptpress.com)

24  
9

# e-Science、网格及 具可扩展性体系结构

黄理灿 刘元安 编著

北京邮电大学出版社  
·北京·

## 内 容 简 介

本书较为详细地描述了 e-Science 与网格。重点分析了网格体系结构 OGSI 以及网格的一个可扩展的、基于语义的 e-Science 网格体系结构——虚拟动态分层体系结构(Virtual and Dynamic Hierarchical Architecture, VDHA)。介绍了以虚拟动态分层体系结构为基础的原型系统——VDHA-Grid，并在此基础上，详细介绍了以教育部网上合作中心为基础的中国大学 e-Science 网格项目及其原型系统。此外，对基于 VDHA 体系结构高效的、可扩展的服务发现协议以及可扩展的安全体系结构和基于本体论的网格服务描述语言(OGSDL)等做了专门分析。

本书可作为 e-Science 和网格研究工作者的参考资料，也可作为计算机专业高年级和研究生的教材。

### 图书在版编目(CIP)数据

e-Science、网格及其可扩展性体系结构/黄理灿,刘元安编著. —北京:北京邮电大学出版社,2004  
ISBN 7-5635-0942-9

I . e... II . ①黄... ②刘... III . 网络—研究 IV . 0243

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 092261 号

---

书 名:e-Science、网格及其可扩展性体系结构  
编 著:黄理灿 刘元安  
责任编辑:李茂林  
出版者:北京邮电大学出版社(北京市海淀区西土城路 10 号) 邮编:100876  
发行部电话:(010)62282185 62283578(传真)  
经 销:各地新华书店  
印 刷:北京源海印刷有限责任公司  
开 本:787 mm×1 092 mm 1/16  
印 张:14.75  
字 数:345 千字  
印 数:1—3 000 册  
版 次:2005 年 3 月第 1 版 2005 年 3 月第 1 次印刷

---

ISBN 7-5635-0942-9/TP·122

定价: 32.00 元

•如有印装质量问题,请与北京邮电大学出版社发行部联系•

# 前　　言

e-Science 主要研究科学领域的全球合作以及与之相适应的基础体系结构, 它将对未来科学研究所产生革命性的影响。网格(Grid)是使 e-Science 成为可能的基础体系结构。本书把那些节点位于大学或相关研究机构、主要从事科学的研究的网格称为 e-Science 网格(e-Science Grid)。这些节点可以是巨型机、小型机、PC 服务器等等。一般来说, 这些节点都比较稳定。

目前, 主要存在两种计算模式: 一种为普遍存在的 C/S 模式。C/S 模式适用于瘦客户端的情况, 特别是诸如 PDA 等移动设备作为客户端的情况。另一种计算模式为 P2P (Peer to Peer) 模式。P2P 模式能解决可扩展和容错性问题, 但依然存在安全性、网络带宽和体系结构设计等问题。

本书介绍了一个可扩展的、基于语义的 e-Science 体系结构——虚拟动态分层体系结构(Virtual and Dynamic Hierarchical Architecture, VDHA)。VDHA 结构综合了 C/S 模式和 P2P 模式的优点, 能够有效解决 e-Science 网格的动态和可扩展性问题。本书还介绍了两类基于 VDHA 体系结构的有效和可扩展的服务发现协议: 完全查询和发现服务协议(Full Search Query and Discovery Protocol, FSQDP); 领域相关查询和发现服务协议(Domain-Specific Query and Discovery Protocol, DSQDP)。

本书介绍了基于可扩展的网格安全体系结构(SGSI)。SGSI 描述了身份认证及访问控制的策略及其相关协议。介绍了基于本体论的网格服务描述语言(Ontology-based Grid Service Description Language, OGSDL)。OGSDL 能够描述用于发现服务的信息, 描述协议是如何绑定和串行化的, 同时描述实现服务的信息、对服务的使用记账、服务的访问控制和服务的 QoS 保证等。

之后, 本书介绍了基于 VDHA 结构实现的可扩展的网格原型系统——VDHA-Grid, 以及其核心服务(如网格监控的模型)。作为例子, 本书详细介绍了中国大学 e-Science 网格项目。中国大学 e-Science 网格项目是在教育部网上合作研究中心基础上提出的开展 e-Science 的研究项目。介绍了基于 VDHA 文件共享服务和虚拟学术讨论服务模型, 以及基于 VDHA 的异质信息共享服务和知识检索服务原型。

感谢潘云鹤院士、吴朝晖教授、陈卫东副教授、徐从富副教授给予的帮助。由于编者水平有限, 书中难免有不完善和谬误之处, 敬请读者批评指正。

# 目 录

## 第 1 章 概 述

1.1 引 言 .....	1
1.2 e-Science .....	4
1.2.1 e-Science 概述 .....	4
1.2.2 e-Science 的主要研究范围 .....	6
1.2.3 e-Science 的关键难题 .....	7
1.2.4 e-Science 的主要项目 .....	7
1.3 网格计算 .....	9
1.3.1 网格计算的关键问题和关键技术 .....	10
1.3.2 主流网格技术 .....	11
1.3.3 主要网格项目 .....	14
1.4 可扩展的 e-Science 网格 .....	15
1.5 小结 .....	16

## 第 2 章 Web Service 和网格计算

2.1 Web Service .....	17
2.1.1 Web Service 架构 .....	17
2.1.2 Web Service 核心技术 .....	18
2.1.3 Web Service 的实现 .....	28
2.1.4 基于 Web Service 的工作流 .....	32
2.2 网格计算 .....	35
2.2.1 网格计算的关键问题和关键技术 .....	35
2.2.2 主要网格项目 .....	36
2.2.3 开放网格服务基础结构(OGSI) .....	37
2.2.4 GT3 软件 .....	40
2.2.5 Globus Toolkit4 .....	48
2.3 小结 .....	50

## 第 3 章 e-Science 技术与 Science 项目

3.1 英国 e-Science 基础设施及其应用投资预算 .....	51
-------------------------------------	----

3.2 英国 e-Science 的中心 .....	52
3.2.1 e-Science 国家中心(National e-Science Centre, NeSC) .....	52
3.2.2 贝尔法斯特 e-Science 中心(Belfast e-Science Centre, BeSC) .....	54
3.2.3 剑桥 e-Science 中心(Cambridge e-Science Centre, CeSC) .....	54
3.2.4 CCLRC e-Science 中心(CCLRC e-Science Centre, CCLRCeSC) .....	54
3.2.5 英国 e-Science 西北中心(e-Science North West, eSNW) .....	55
3.2.6 英国网格支持中心(Grid Support Centre, GSC) .....	56
3.2.7 英国伦敦 e-Science 中心(London e-Science Centre, LeSC) .....	56
3.2.8 英国东北地区 e-Science 中心(North East Regional e-Science Centre, NEReSC) .....	57
3.2.9 牛津 e-Science 中心(Oxford e-Science Centre, OeSC) .....	57
3.2.10 开普顿 e-Science 中心(Southampton e-Science Centre, SeSC) .....	57
3.2.11 威尔士 e-Science 中心(Welsh e-Science Centre, WeSC) .....	58
3.3 英国 e-Science 的主要研究项目 .....	58
3.3.1 AcessGrid .....	58
3.3.2 Mygrid 项目 .....	60
3.3.3 Discovery-NET .....	66
3.4 小结 .....	67

#### 第 4 章 P2P 与 JXTA

4.1 Peer to Peer(P2P) .....	68
4.2 JXTA .....	72
4.2.1 JXTA 的概述 .....	72
4.2.2 JXTA 设计目标和层次结构 .....	74
4.2.3 JXTA 协议 .....	79
4.2.4 JXTA 的应用与发展 .....	80
4.3 小结 .....	82

#### 第 5 章 e-Science 网格的可扩展体系结构——虚拟动态体系结构

5.1 引言 .....	83
5.2 虚拟动态分层体系结构概述 .....	84
5.2.1 VDHA 的形式化描述 .....	85
5.2.2 网格组管理协议(Grid Group Management Protocol, GGMP) .....	86
5.2.3 网格组管理协议的协议工程分析 .....	86
5.3 可扩展网格系统的体系结构 .....	90
5.4 基于本体论的网路服务描述语言(OGSDL) .....	91
5.5 小结 .....	93

**第 6 章 基于 VDHA 的可扩展的网格信息服务**

6.1 引言 .....	94
6.2 服务发现协议(Service Discovery Protocols) .....	95
6.2.1 完全查询和发现协议(FSQDP) .....	95
6.2.2 领域相关查询和发现协议(DSQDP) .....	100
6.3 小结 .....	101

**第 7 章 基于 VDHA 的可扩展的安全体系结构**

7.1 引言 .....	102
7.2 有关定义 .....	102
7.3 可扩展的网格安全体系结构 .....	104
7.3.1 身份认证(Authentication) .....	104
7.3.2 访问控制(Access control) .....	109
7.4 小结 .....	111

**第 8 章 VDHA-Grid 的监控服务、资源分配及管理服务**

8.1 引言 .....	112
8.2 分层集中式的网格监控服务 .....	112
8.3 网格监控服务通信协议描述 .....	114
8.3.1 包格式 .....	114
8.3.2 命令 ID .....	114
8.4 网格监控服务通信协议的通信量分析 .....	115
8.5 分层领域相关的网格资源分配与管理服务(HDGRAM) .....	116
8.6 HDGRAM 的模拟分析 .....	117
8.7 小结 .....	120

**第 9 章 原型系统 VDHA-Grid 的实现**

9.1 VDHA-Grid 的总体设计 .....	121
9.2 核心协议的设计 .....	125
9.3 服务接口——ServiceClass .....	127
9.4 SGSI 可扩展的安全体系结构的实现 .....	129
9.5 MCS .....	130

**第 10 章 基于 VDHA 的 e-Science 网格原型系统**

10.1 背景—学术交流平台及示范系统研究 .....	132
10.1.1 项目主要研究内容 .....	132
10.1.2 主要系统简介 .....	133

10.2 基于 VDHA 的 e-Science 网格原型系统 .....	134
10.2.1 基于 VDHA 的文献资源服务 .....	135
10.2.2 基于 VDHA 的虚拟学术讨论服务的模型 .....	138
10.2.3 基于 VDHA 的分布式知识检索服务 .....	139
10.3 小结.....	142

## 第 11 章 从分布式系统上构建基于 VDHA 的网格服务

11.1 基于 VDHA 的分布式信息共享与审核服务 .....	143
11.1.1 背景—分布式异构审核系统.....	143
11.1.2 基于 VDHA 的信息共享与审核服务 .....	145
11.2 基于 VDHA 的分布式工作流管理服务 .....	147
11.3 小结.....	149

## 附录

附录 A GGMP 的协议算法、原语与函数 .....	150
附录 B OGSDL 的大纲(Schema) .....	155
附录 C 文献资源共享的 OGSDL 的描述 .....	165
附录 D VDHA_Grid API .....	169
附录 E VDHA_Grid 源程序 .....	180
参考文献(Bibliography) .....	216

# 第 1 章 概 述

本章概要性地介绍了 e-Science 和网格计算技术、定义和特点。

## 1.1 引 言

现代科学研究的主要趋势是多学科、跨专业、大规模的协作研究,涉及到各种不同类型、不同水平、不同角色的研究人员合作地使用和创造知识。随着计算机网络的迅猛发展,科学的研究的过程和手段已经发生了非常深刻的变化,通信和计算机技术已成为目前科学的研究活动的必备手段。这主要表现为分布于世界各地的多个大型研究队伍利用先进的信息技术进行协作研究和资源共享。科学的研究的上述特点导致 e-Science 技术的出现。e-Science 是关于关键科学领域的全球协作的技术,以及与之相适应的下一代体系结构。e-Science 的这种分布式、全球大规模合作的科学的研究方式将有助于科研人员获得海量的数据、大量的计算资源以及高性能可视环境等。e-Science 对于非常昂贵和稀缺的科研设备(如同步加速器、卫星、哈勃望远镜等)的共享具有非常重要的作用。通过 e-Science 技术,科研人员可有效地访问和管理在地理上分布的数据、计算和网络资源,并能及时地分析这些海量数据(如进行数据挖掘和知识发现等)。

e-Science 因 2000 年 11 月英国国家研究总局主任 John Taylor 宣布 1.2 亿英镑的 3 年研究计划而得名。英国 e-Science 计划是英国经济和社会研究机构(ESRC)、英国自然环境研究机构(NERC)、英国生物技术和生物科学研究中心(BBSRC)、英国医学研究机构(MRC)、英国工程与物理科学研究中心(EPSRC)、英国粒子物理与天文学研究机构(PPARC)、英国中心研究实验室机构(CLRC)等单位参加的跨区域的英国国家项目。该计划的目标是为建立支持 e-Science 和电子商务的下一代 IT 基础体系结构,使英国在网格(Grid)领域保持世界领先地位。该计划的第一阶段目标是开始网格研究,进行 e-Science 测试床的开发与支持工作;第二阶段是一个长期的研究计划,其目的是使第一阶段的研究成果达到成熟和分发使用的地步。

e-Science 作为刚兴起的技术,在国外也处在探索阶段,支撑 e-Science 体系结构等关键技术目前还未定论。尽管如此,可以预见 e-Science 将对科学的研究本身带来革命性的影响,同时它将极大地推动诸如 e-Business、e-Government 等 e-Anything 的进步。

支撑 e-Science 的计算技术一般认为是网格技术。网格技术作为 Internet 革命的下一次变革,正取得飞速的发展。网格技术的目标是将成千上万的计算机组成一台虚拟的计

算机,以获得巨大的计算能力、巨大的资源与信息的共享和无数参与者的相互协作。

随着互联网的快速发展以及人类对资源的共享及强大的计算处理能力的需求增加,网格(Grid)计算正成为目前的科学技术前沿。网格技术把分散在不同地理位置的计算机组织成一个虚拟的超级计算机,其中每一台就是一个节点,成千上万个节点组成一个完整的网格状系统。网格术语来源于人们非常熟悉的电力网格。能使电器正常工作的电与其来源和传输无关。只要将电器插头插入到插座中,电器就能工作。然而,目前的计算机网格还远未达到此种境界。于是各国政府、科学界、教育界及产业界正在推动一个像电力网格一样的计算机网格的建设。

然而,计算机网格比之电力网格要复杂得多。我们可以把电力网格电流与计算机网格字节流相比拟。但是计算机网格的字节不是单一的,是有结构的、有语义的。由于网格由分布在广域网上不同管理域的各种计算资源组成,很多硬件、软件以及信息存在着异构性,这是网格技术必须解决的异构性问题;我们希望网格的节点能不断地增加,然而前提是要在网格资源规模不断扩大、应用不断增长的情况下,不降低性能,这就是网格技术必须解决的可扩展性问题;当某些计算机加入或脱离网格,或某些网络通信发生故障时,如何保障网格的正常运行,这就是网格技术必须解决的动态自适应性问题;当用户及节点很多时,如何保证资源仅被授权的用户使用,这就是网格技术中的安全问题;在网格中,如何在大量的信息中找到正确的信息,信息如何被计算机理解以便某些工作能自动执行,这是网格技术中的语义问题。

目前,Globus 和 Web Service 技术是网格技术的主流技术。其设计思想都是集中式和基于 C/S 模式的。当网格规模很大时,上述模式会出现如下问题:管理困难、实现困难、空间复杂度困难、时间复杂度困难等等。同时,存在因单点失败引起整个系统崩溃的问题。Peer to Peer 具有可扩展性、容错性等特点,然而它在安全性、体系结构等方面还存在不少缺陷。

网格这一术语最早出现于 20 世纪 90 年代中期,它用来描述在科学工程计算领域由个体或机构等各种类型的网络资源提供者组成的动态环境下的一种灵活、安全、协同资源共享模式。网格计算的构想来源于另一专业领域术语“power grid(电力网)”。Power grid 的原意是电力供应商根据用户的需要供应电力,消费者只需支付自己使用的那部分电费。网格计算的基本思想也因此被引申——像人们日常生活中从电网中获取电能一样获取高性能的计算能力。

网格计算(Grid Computing)是计算机各个领域(软、硬件等)技术的进步以及人们对计算机应用的需求不断提高的产物(见图 1.1)。超级计算的需求导致超级计算机的发展。但是超级计算机一般都很昂贵。网格技术能在任何时间、任何地点,通过廉价的 PC 或 PDA 等设备获取相当于超级计算机的计算能力和资源。此外,由于计算机应用系统都是从小系统开始建设,导致系统之间的信息不能共享,即产生了大量所谓的“信息孤岛”问题。网格计算技术同样能够解决此类问题。

网格计算也是互联网发展的产物。以 e-mail 为主要应用的第一代 Internet 把遍布于世界各地的计算机用 TCP/IP 协议连接在一起;第二代 Internet 则通过 Web 信息浏览及

电子商务应用等信息服务,实现了全球网页的连通;第三代 Internet 将试图实现互联网上所有资源的全面连通,包括计算资源、存储资源、通信资源、软件资源、信息资源、知识资源等,这就是网格计算。网格计算是属于 20 世纪 90 年代非常热门的分布式计算(Distributed Computing)的技术延续。网格计算模式是利用互联网把分散在不同地理位置的电脑组织成一个“虚拟的超级计算机”,其中每一台参与计算的计算机就是一个“节点”(node),而整个计算是由成千上万个“节点”组成的一个巨大的网格。这样组织起来的“虚拟的超级计算机”有两个优势,一个是数据处理能力特别强大;另一个是能充分利用网上的闲置处理能力。网格的最终目标是将地区间乃至国际间的计算网格连接起来,形成一个规模空前的计算环境。

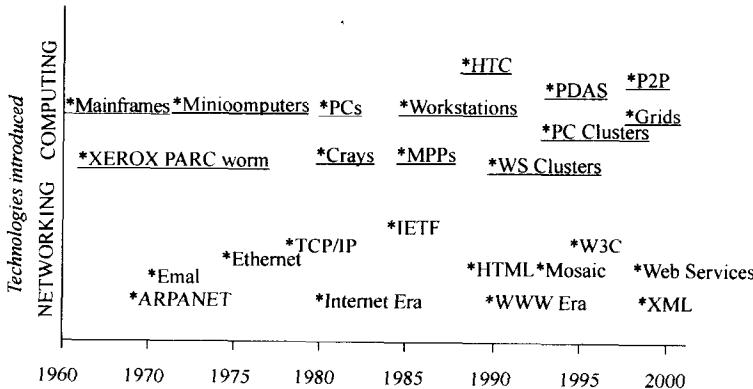


图 1.1 计算与网络技术的发展进程

网格技术研究工作分为三个层次,即数据/计算网格、信息网格、知识网格。

计算网格(Data/computational Grid)主要关注数据和计算的共享及协作。计算网格的目标是将大量的计算机与其它资源连接为一虚拟计算机。在计算网格中,数据由没有其它附加信息的比特和字节组成。信息网格(Information Grid)处理信息的表示、储存、访问、共享及保存。在信息网格中,数据具有某些信息成分。知识网格(Knowledge Grid)处理知识的获取、使用、抽取、发布和维护。在知识网格中,数据是获取目标、解决问题及作出决定的知识信息。

由于网格是一种新技术,还没有一致的名称和精确的定义。图 1.2 表明了一些比较广义的网格的实例。

e-Science 网格是主要用于科学研究目的网格系统。其节点一般位于大学或研究机构。一般地 e-Science 网格的节点都比较稳定。在 e-Science 网格中,一般相关领域的科研机构会建立虚拟组织进行某一项目的研究。通常,这些虚拟合作研究项目由学术带头人牵头组织。这些虚拟组织有长期存在的组织,也有临时的组织。此外,全球协作研究的方式必须建立在体系结构的自治机制上,允许节点进入和离开 e-Science 网格系统。e-Science 需要解决计算密集型的问题,例如利用大量计算机进行寻找外星人的 SETI@ home 项目。e-Science 需要解决数据密集型的问题,如用于欧洲的粒子加速器数据的

dataGrid 项目。此外, e-Science 需要解决异构的信息共享和合作问题以及地理上分散的知识语义问题。所以,e-Science 网格包括了计算网格、信息网格和知识网格的内容。

e-Science 是解决关键科学领域内全球协作的技术。因此,建立一个大规模可扩展的网格系统是非常重要的。当前,网格计算的主要模式是基于 C/S 结构的。此计算模式不适应节点很多的大规模网格系统。我们提出的具有 P2P 性质的虚拟动态分层的体系结构解决了网格系统的可扩展性问题。



图 1.2 网格的一些实例

## 1.2 e-Science

### 1.2.1 e-Science 概述

e-Science 的关键在于全球范围的资源共享与合作。例如,它充分利用信息技术形成虚拟实验室来进行全球范围内分布式大规模的合作研究。e-Science 不仅仅是高带宽通信和高性能计算,而且它更强调科研团体之间的协作研究。通常地,相关研究团体组成虚拟组织(Virtual Organization,简称 VO),以协作研究某些领域内的科学技术。e-Science 的目标在于使科研过程中与计算相关的那些部分完全透明和简便化,使得科学家仅仅关注科学的研究本身,而不是一大堆与计算相关的问题。在 e-Science 中,科学的研究的“e”化是很复杂和困难的技术,其根本挑战在于:建立一整套全新的概念、理论、范例、机制和技术,并形成 e-Science 平台的全新的设计、开发和测试途径。

e-Science 和网格技术紧密相关。一般认为,e-Science 的需求只有通过网格技术才能实现,而网格技术的推动力目前主要来源于科学研究领域。e-Science 领域中的网格划分为三个层次:数据/计算网格、信息网格及知识网格,如图 1.3、1.4 所示。其中,数据/计算网格主要关注数据和计算的共享及协作,其目标是将大量的计算机与其他资源联接为一

个虚拟计算机,其数据由无附加信息的比特和字节组成;信息网格处理信息的表示、储存、访问、共享及保存,其数据具有某些信息成分;知识网格处理知识的获取、使用、抽取、发布和维护,其数据是获取目标、解决问题及作出抉择的知识信息。

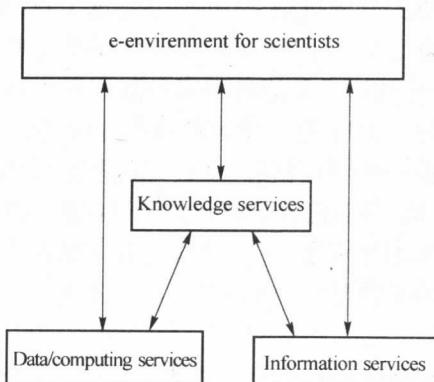


图 1.3 e-Science 服务及相互关系

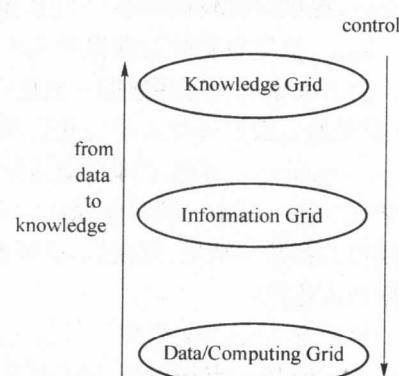


图 1.4 网格的三层抽象

现以一个未来科学的研究的典型场景为例说明 e-Science 在样品分析中的工作过程,如图 1.5 所示。

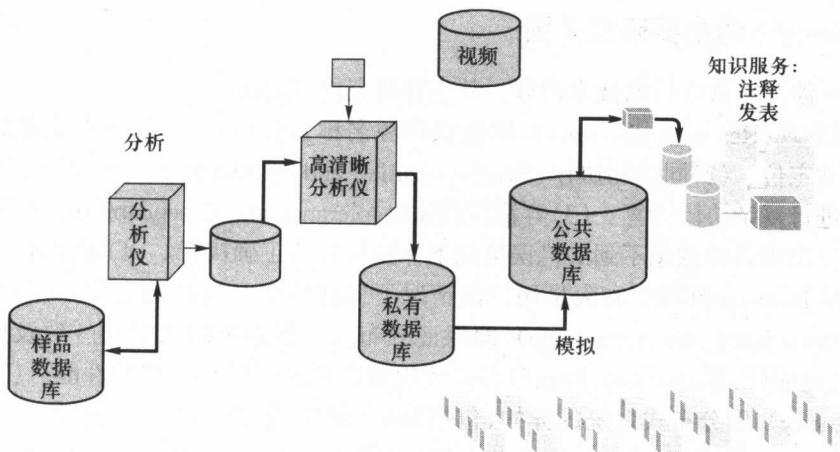


图 1.5 一个未来的科学研究所的工作流程场景

实验员先给待分析的样品设定一个 ID 代码,并将其输入数据库中,此时计算机显示此样品的信息资料,然后设置一台普通分析仪的合适参数,并将样品放入其中。此后,该普通分析仪自动工作,并保存设定的参数、实验室条件和分析结果。在分析过程中,系统自动提醒与该实验相关的科学家进行例行检查。该科学家在远程办公室评估实验结果后,并决定对样品进行进一步的分析。这时他请求使用一台十分昂贵的高清晰度分析仪,在取得许可的情况下,系统显示其他相似样品的配置参数以供参考,该科学家选择合适的参数并设置该高清晰度分析仪。实验员将样品放入仪器中,锁好实验室门,并通过图像监

控实验过程。在持续整个晚上的实验过程中,系统自动并完整地保存实验设备产生的实时数据和监控图像数据。随后该科学家将收到计算机发来的实验结果资源定位(URL),他通过该URL仔细观察实验结果。这时该科学家对实验结果很感兴趣,利用录像和相关数据重放实验过程,在按下“查询”键后,系统汇总所有分析结果,并搜寻全球节点的文献资源,提供并比较该领域中的其他科学家的相关工作,该科学家发现他的结果是唯一的。随后,他发布实验数据以便实验室同事访问,并邀请相关的科学家参加视频学术会议。会后大家认为这些数据应被更广泛的团体访问。于是,该科学家把这些分析结果、日志、有关的元数据等加入到公共数据库中,同时提供一些封面信息,并标记这些数据的溯源(provenance)。系统立即自动通知任何符合条件的、并对此样品或其分析过程感兴趣的科学家群体。其中一位科学家决定利用远程资源和本地观察结果,并通过公共数据库获得模拟的参数与结果,以模拟、验证或改进该样品的实验过程。另外几个科学家对发布的数据加入注释。

最适合e-Science模型一般认为是面向服务(Service-oriented)模型,David DeRoure等提出了一种基于市场的服务所有者-服务消费者(Service owner-service consumer)模型。该模型的服务所有者在特定的协定下为服务消费者提供服务,它们基于市场规则发生相互作用,而市场规则是由市场所有者提供。市场所有者可以是服务所有者、服务消费者或者是第三方中立的团体。

### 1.2.2 e-Science的主要研究范围

e-Science涉及非常广泛的技术领域。其主要研究内容包括:

(1)资源发现(Resource discovery),即提供资源名称及特点,以便在分布式系统中对资源进行自动定位。(2)同步和协作(Synchronization and coordination),即如何协作利用各种资源和进行复杂协同计算。(3)容错性(Fault tolerance and dependability),即如何在分布式系统中出现各种意想不到的错误情况下保证任务的正确执行。(4)安全性(Security),即确保在Internet环境下和大量用户的情况下保证信息及资源的安全。(5)并发性和一致性(Concurrency and consistency),即保证分布式异构系统的数据的一致及操作的原语性。(6)性能(Performance),即在分布式大规模的系统中保持适当的性能。(7)异构性(Heterogeneity),即分布式系统的异构,包括网络、硬件、软件、功能、协议等。(8)可扩展性(Scalability),即扩展到成千上万个节点后,仍能正常工作。(9)数字版权,即科学内容的数字版权管理。(10)溯源创建和管理,即为了更便利地重复使用信息及重复实验记录、创建和管理数据产生的时间。(11)元数据及其描述工具。(12)服务描述及工具。(13)工作流描述及工具。(14)新设备的信息获取和表示。(15)发布和定位知识水平的服务语言。(16)提供大规模本体服务的方法与工具。(17)注解服务。(18)知识获取工具。(19)从大量内容中动态搜索需要的内容。(20)自然语言处理。(21)推理服务,知识发现服务。(22)多种知识服务的协作。(23)在无所不在的设备中嵌入知识服务。(24)面向服务的体系结构。(25)基于Agent的技术。(26)网络协议研究。(27)e-相关(e-Anything)与e-Science的关系,等等。

### 1.2.3 e-Science 的关键难题

e-Science 融合了很多领域(如计算机、通信、控制等)的复杂技术,下面主要叙述它所涉及到的 e-Science 网格方面的重大问题:

(1) 异构(Heterogeneity)问题。由于 e-Science 涉及到资源的多样性,而这些资源从本质上说是异构的,这里的异构可以指硬件、软件、数据等方面的问题。

(2) 可扩展性(Scalability)问题。e-Science 网格节点可能从几个到数百万个,这可能造成随着网格节点数量的增加而引起性能下降,甚至根本无法工作的严重后果。可扩展性涉及到自主性(节点能动态加入或退出系统)和管理层次化(Administrative Hierarchy),其中管理层次化是 Grid 将自身划分层次,以适应全球范围的大量节点的管理需求。

(3) 自适应性(Adaptability)问题。在网格系统中,由于资源失效是经常发生的,所以需要动态调节资源以获得最大的性能。同时,在资源失效时,必须有一种机制保证任务的正确执行。

(4) 安全性(Security)问题。由于 Grid 中有很多节点和用户,信息的安全是一个非常重大的问题。

(5) 通信服务(Communication Services)问题。通信服务应适应不同的环境,即从可靠的点对点到不可靠的多播。支撑这种通信服务的通信体系结构应满足支持大量数据传输、组传输的需求,同时提供响应时间、带宽、可靠性、容错性及抖动控制等 QoS 质量保证。

(6) 信息服务(Information Services)问题。如何采用注册和目录机制来满足网格的地点及服务类型的变化。信息服务应提供结构、资源、服务、状态及环境等的注册和目录服务。

### 1.2.4 e-Science 的主要项目

目前英国正在进行的一些主要的 e-Science 项目,如表 1.1 所示。

表 1.1 e-Science 主要项目一览表

项目名	研究内容	领域资助中心
Comb-e-Chem	关于组合化学的项目。对于化学知识进行组合计算和设计新的化合物。	EPSRC
DAME	分布式飞机维护系统。目的是建立一个 Grid 试验台,用来进行分布式诊断和维护。	EPSRC
The Reality Grid	凝聚态物质建模和显示系统,开发用于建模和显示凝聚态物质和材料的工具。	EPSRC
My Grid	面向科学领域的 Grid 设计、开发和验证系统。目的是在现有的 Grid 体系结构上开发高层的科学领域的设计、开发和验证功能。	EPSRC
GEODISE	基于 Grid 的无缝访问知识库系统。	EPSRC
DiscoveryNet	实时数据的知识发现系统。目的是设计、开发和实现支持实时处理,解释、集成、可视化和挖掘高带宽设备采取的大量实时数据的系统。	EPSRC

续表

项目名	研究内容	领域资助中心
GridPP	目的是建造英国的 Grid 以及发布 Grid 中间件和硬件体系结构以支持 LHC(Large Hadron Collider CERN 的项目)测试的工作。	PPARC
AstroGrid	目的是构建 Grid 体系结构以支持虚拟天文学(Virtual Observatories)的研究。	PPARC
Grid for ESDV	目的是开发海洋诊断 Grid。	NERC
Climate prediction	目的是构建运行 10 000 台 PC 的气候预测系统。	NERC
Env from the molecular level	目的是建立环境的分子水平模型,模拟污染物质的传输过程和放射性污染的环境网格系统。	NERC
Access Grid	目的是建立多媒体交流平台,支持大规模的分布式会议、协同工作、讨论会、报告等。	CLRC
EVE	基于 Grid 和 Web Services 的问题求解系统,提供凝聚态物理数据的分析和模拟。	CLRC
Certificate Authority	网格身份认证技术研究。	CLRC
Beowulf clusters	目的是开发基于并行机群的产品,以作为 e-Science 项目的技术验证。	CLRC
GAPtk	开发 Grid 应用程序入口的工具集。	CLRC
GODIVA	建立海洋逆环流对大气的长期影响的网格应用系统。	CLRC
Data Portal	目的是开发一工具使得科学家能够用统一的接口来浏览数据资源,发现和检索相关的地理上分布的数据。	CLRC
DataGrid	为 EU DataGrid 项目的早期测试床项目。	CLRC
Earth Observation Grid	研究基于 Grid 的技术如何提高 BADC(British Atmospheric Data Centre)的服务和提供 EU DataGrid 的一个组成部分。	CLRC
Gigabit Networking	提高 CLRC 的网络性能以适应 e-Science 的需要。	CLRC
UK Grid Support Centre	英国 Grid 的支持中心。	CLRC
Grid Reference	开发和支持 Grid 中间件的参考实现平台。	CLRC
Grid Services Portal	建立广泛的基于 Grid 的服务接口,以支持 UK 高性能设施。	CLRC
Petabyte Data Storage	提高 CLRC 中心的存储能力。	CLRC
SMART experiments	开发远程控制与数据检索的灵巧实验系统。	CLRC
StarGRID	基于 Grid 的天文数据的访问系统。	CLRC

例如目前英国 CLRC 正在研究的 Data Portal 项目,旨在开发一个工具使得科学家能够用统一的接口来浏览、发现和检索地理上分散的相关数据资源。图 1.6 为 DataPortal 的体系结构。通过以 XML 描述元数据结构,而形成统一的数据接口。

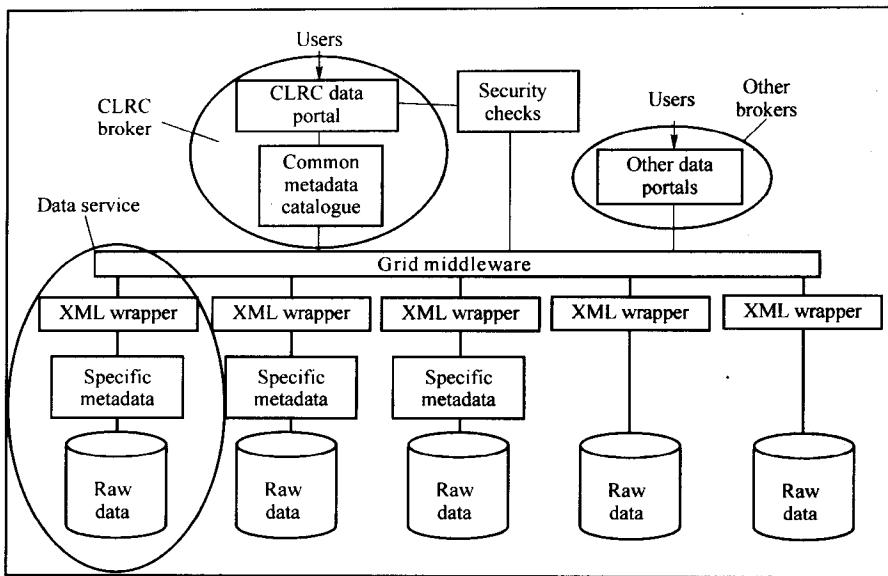


图 1.6 Data Portal 的体系结构

### 1.3 网格计算

支持 e-Science 的技术一般为网格计算技术。下面我们对网格技术进行综述。

网格的特点是网格包含虚拟组织 VO(Virtual Organization)的概念。虚拟组织是由分布式节点构成的问题处理环境。虚拟组织的成员互相协作完成某一共同目标，这些成员可以是任意 Internet 上的节点。比如参与天文观测实验的研究机构、企业的原料供应商、销售商与存储仓库提供商和远程教学系统等等都可以认为是虚拟组织的实例。虚拟组织成员间的协作是通过资源共享来实现的，每个成员都可以是资源的提供者和使用者，它们之间根据一定的共享规则建立服务关系。各虚拟组织的成员共享的资源类型十分广泛，主要可以划分为以下几类：

- (1) 计算资源：资源节点执行某项任务，接受请求者的输入参数，调动进程进行处理，返回结果。
- (2) 存储资源：资源节点具有存储设备，提供海量数据的存储服务。
- (3) 网络资源：资源节点提供网络连接服务，负责带宽分配，负载控制。
- (4) 代码资源：特殊的存储资源，资源节点是一个程序代码库，存放公用的程序代码，在协同的应用开发过程中经常用到，具有版本管理功能。
- (5) 目录资源：特殊的存储资源，存放结构化数据，例如关系数据库等等。