

УДК 004.94+547.022

# ОРГАНИЗАЦИЯ РЕСУРСОВ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

**Бекмуратов Т.Ф.**

Академик АН РУз д.т.н., главный научный сотрудник  
Научно-инновационного центра информационно-коммуникационных технологий  
при Ташкентском университете информационных технологий,  
тел.: +(99871) 234-07-59, e-mail: bek.tulkun@yandex.com

**Базаров Р.К.**

младший научный сотрудник Научно-инновационного центра информационно-коммуникационных технологий  
при Ташкентском университете информационных технологий,  
тел.: +(99897) 787-48-05, e-mail: rustam.bazarov@gmail.com

**Базаров Д.К.**

младший научный сотрудник Научно-инновационного центра информационно-коммуникационных технологий  
при Ташкентском университете информационных технологий,  
тел.: +(99890) 187-48-05, e-mail: marvelday@mail.ru

Задачи химической информатики относятся к классу многозадачных вычислений и требуют построения распределенных вычислительных систем. В статье описываются типы ресурсов и способы их рациональной организации в распределенную вычислительную систему с целью сокращения времени проведения вычислительных экспериментов и минимизации времени простоя оборудования объединяемых ресурсных центров.

**Ключевые слова:** распределенная вычислительная система, аппаратный ресурс, программный ресурс, информационный ресурс, организация ресурсов, кластер, видеокарта, грид-компьютинг, клауд-компьютинг.

## ORGANIZING OF RESOURCES FOR PROBLEM-ORIENTED DISTRIBUTED COMPUTING SYSTEMS

Bekmuratov T.F., Bazarov R.K., Bazarov D.K.

The Chemical informatics problems belong to the class of multitask computing and require the construction of distributed computing systems. The article describes the types of resources and their rational organizing in a distributed computer system with the aim of reducing the time of computational experiments and to minimize downtime of equipment combined resource centers.

**Keywords:** distributed computing system, a hardware resource, a software resource, an informational resource, organization resource, cluster, graphic processor unit, grid-computing, cloud-computing.

## MUAMMOGA YO'NALTIRILGAN TAQSIMLANGAN HISOBLASH TIZIMLARI RESURSLARINI TASHKIL ETISH

Bekmuratov T.F., Bazarov R.K., Bazarov D.K.

Kimyoviy informatika masalalari ko'p masalali hisoblash sinfiga kiradi va taqsimlangan hisoblash tizimlarini qurishni talab etadi. Maqolada hisoblash eksperimentlarini o'tkazish vaqtini qisqartirish va resurs markazlariga birlashgan bekor ishlab turgan qurilmalarni ishlash vaqtini kamaytirish maqsadida taqsimlangan hisoblash tizimi resurslarining tiplari va ularni oqilona tashkil etish usullari tavsiflangan.

**Tayanch iboralar:** taqsimlangan hisoblash tizimlari, apparat resurslari, dasturiy resurslari, axborot resurslari, resurslarni tashkil etish, klaster, videoharita, grid-komputing, kloud-komputing.

### 1. Введение

Моделирование структуры нового лекарства с заранее определенными свойствами относится к

классу задач со множеством параметров, имеющих не в полной мере выявленные взаимосвязи. Грубая предварительная модель объекта исследования постепенно уточняется в как процессе

вычислительного эксперимента (ВЭ) так и анализа его результатов.

Эффективное решение таких задач требует построения проблемно-ориентированных распределенных вычислительных систем (РВС), представляющих собой совокупность территориально распределенных информационно-вычислительных ресурсных центров (РЦ), включающих аппаратные (hardware), программные (software) и информационные (information) ресурсы, функционирующие параллельно, взаимосвязано и координировано в соответствии с общим алгоритмом решения задач.

Цель статьи - анализ и выбор способов рациональной организации ресурсов в РВС, обеспечивающих требуемую эффективность их функционирования при проведении ВЭ для решения фармакологических задач.

К фармакологическим задачам относятся: фолдинг (сворачивание) белковых макромолекул, моделирование электронной структуры низкомолекулярных соединений, изучение поведения макромолекул в водном окружении, виртуальный скрининг веществ, выполняемые исследователями на информационно-вычислительных комплексах при разработке новых лекарственных средств.

## 2. Постановка задачи.

Прежде чем сформулировать постановку задачи рациональной организации ресурсов РВС введем ряд пояснений и определений.

Задачи  $W_u = \{w\}$  каждого пользователя  $u \in U$ , связанные с осуществлением определенного ВЭ на РВС, оформляются в виде потока заданий  $w(u)$ , который обычно описывается графом соответствующего вида.

Задания потока могут быть вычислительными (параллельными и последовательными), выполняющими расчетные операции, или аналитическими, - анализирующими результаты ранее проведенных вычислений.

Результат выполнения каждого задания может быть предсказуемым и непредсказуемым. Задания, выдающие непредсказуемые результаты, требуют контроля со стороны пользователя или аналитических заданий. Задания с непредсказуемыми результатами могут быть: «интерактивными» или «с контрольными точками» [1].

Общее время  $T_w$  проведения ВЭ, состоит из  $T_{pr}$  - времени подготовки (prepare) к ВЭ,  $T_{cl}$  - времени вычислений (calculate) и  $T_{an}$  - времени анализа результатов ВЭ (analyse), т.е.:

$$T_w = T_{pr} + T_{cl} + T_{an}$$

Подготовка к ВЭ включает процедуры поиска и анализа исходных данных и средств прикладного программного обеспечения (ПО) для проведения ВЭ.

Анализ результатов также подразумевает поиск дополнительной справочной информации, необходимой исследователю для принятия решения

о направлении дальнейших исследований. Чтобы сократить  $T_{pr}$  - время подготовки к ВЭ пользователей, работающих в одной предметной области, группируют в, так называемые, виртуальные организации (ВО) и выделяют им аппаратные ресурсы с предустановленным прикладным ПО.

Время подготовки  $T_{pr}$  включает: время поиска подходящих аппаратных ресурсов для ВЭ, поиска и установки необходимого прикладного ПО на эти ресурсы, поиска и подготовки исходных данных для ВЭ, время формирования файла описания задания (ФОЗ) в соответствии с типом используемого промежуточного ПО, обеспечивающего доступ к найденным аппаратным ресурсам.

Все эти задачи могут быть сведены к одной — поиску ВО, обладающей нужными программными, аппаратными и информационными ресурсами. Если подходящей ВО в РВС нет, то пользователь создает собственную ВО и решает все вышеперечисленные задачи самостоятельно. ВО сокращает время подготовки к ВЭ тем, что позволяет накапливать опыт проведения ВЭ в заданной предметной области.

Каждая ВО имеет собственный центр сертификации СА (certificate authority) для регистрации новых пользователей и аппаратных ресурсов и, как минимум, один пользовательский интерфейс UI (user interface) для доступа к ее ресурсам.

Совокупность информационных, аппаратных и программных ресурсов одной ВО образуют виртуальные лаборатории (ВЛ) [2].

Время вычислений  $T_{cl}$  — это суммарное время, с момента отправки заданий в РВС до получения конечного результата ВЭ.

$$T_{cl} = T_{sb} + T_{run} + T_{get}$$

где

$T_{sb}$  (submit) – время простоя в очереди на вычислительный ресурс.

$T_{run}$  – время, в течение которого задания потока выполняются.

$T_{get}$  – время извлечения полученных результатов.

Время  $T_{cl}$  сокращается выбором необходимого подмножества аппаратных ресурсов для каждого задания. Эта задача решается службой «брокер ресурсов». Сведения о ресурсах содержатся в файле описания ресурсов ресурсного центра (ФОРЦ). Тип задания, требования к вычислительным ресурсам указываются пользователем в ФОЗ. Брокер ресурсов, при поступлении запроса на выделение ресурса, сравнивает содержимое ФОЗ поступившего к нему задания и ФОРЦ известных ему РЦ и выбирает на основе этого требуемый пользователю ресурс еще до запуска задания.

ФОРЦ обычно заполняется администратором РЦ и не содержит сведений о степени доступности его ресурсов и средней длины очереди заданий, которые также важны при выборе ресурса.

Поэтому, с целью сокращения времени простоя задания в очереди  $T_{pr}$  желательно иметь возможность изменять объем ранее выделенных

ресурсов и на основе данных системы мониторинга их состояния [3] перенаправлять задания на менее загруженные ресурсы в то время, когда задания уже выполняются.

Для сокращения времени извлечения  $T_{get}$  ресурсов хранения промежуточных результатов выбирают в том РЦ, где выполняются сами расчеты.

Время анализа результатов  $T_{an}$  - это время, затрачиваемое пользователем на анализ и интерпретацию промежуточных результатов ВЭ между запусками заданий одного потока. Оно минимизируется автоматизацией процесса принятия решений о направлении ВЭ, а именно, введением аналитических заданий в поток или программных агентов, действующих в РВС от имени пользователя. Для заданий, выдающих непредсказуемые результаты — визуализацией промежуточных результатов, когда пользователь проводит анализ во время вычислений [4].

С учетом приведенных определений, сформулируем постановку задачи рациональной организации ресурсов РВС в следующем виде:

Задано:

- множество территориально удаленных друг от друга ресурсов проблемно-ориентированной РВС

$$R = (R_h, R_s, R_i)$$

где:

$R_h$  – аппаратные ресурсы,  $R_s$  – программные ресурсы,  $R_i$  – информационные ресурсы;

- поток заданий  $W(u)$ , характеризующих последовательность взаимосвязанных задач  $w$ , выполняемых пользователем  $u$  при осуществлении ВЭ на ресурсах РВС;

- множество пользователей  $U$ , запускающих потоки заданий  $W(u)$  с использованием заданных ресурсов  $R$ ;

Требуется:

- для заданного множества пользователей  $U$  и ресурсов  $R$  определить необходимые ресурсы и организовать их взаимосвязанное и координированное функционирование в РВС таким образом, чтобы минимизировать суммарное время  $T_w$  выполнения заданий потока  $W(u)$ , определяемое соотношением:

$$T_w = T_{pr} + T_{cl} + T_{an}$$

В следующих разделах анализируются характеристики ресурсов виртуальных организаций и лабораторий, ориентированных на решение фармакологических задач и способы организации их в РВС с соответствии со сформулированной выше постановкой задачи.

### 3. Типы ресурсов РВС

Основными типами ресурсов РВС являются: аппаратные, программные и информационные.

Аппаратные ресурсы включают вычислительные ресурсы (computing elements, CE), ресурсы хранения (storage elements, SE) и специализированные устройства, предоставленные во всеобщее пользование (physical elements, PE). Это могут быть

синхрофазотроны, спектрометры, датчики, принтеры и пр., предназначенные для генерации исходных данных и воспроизведения результатов ВЭ.

Вычислительные ресурсы характеризуются числом элементарных машин, быстродействием каждой из них (ед.изм.: число операций в секунду), а также скоростью межзвенового взаимодействия в кластере: около 100Мб/с. Если задача состоит из нескольких заданий, считаемых на ресурсах одного РЦ, то на время выполнения влияет и скорость межресурсного взаимодействия: до 10 Мб/с. А если задания используют ресурсы разных РЦ, то следует учитывать, что между РЦ скорость не более 1 Мб/с.

Еще одной важной характеристикой аппаратных ресурсов является среднее время их бесперебойной работы (mean time between failures). Для персональных компьютеров - не более суток, для серверов - около 1 месяца.

Аппаратное обеспечение выбирается исходя из специфики решаемых задач. Для высокопроизводительных приложений в качестве вычислительных ресурсов используют суперкомпьютеры, для многопоточных вычислений - инфраструктуры из персональных компьютеров, а для приложений с интенсивной обработкой данных внимание акцентируется на высоконадежные и масштабируемые хранилища данных. Фармакологические задачи относятся к многозадачным приложениям, представленным в виде подзадач, относящихся ко всем вышеперечисленным типам [1].

Наиболее распространенным средством аппаратного обеспечения РЦ РВС являются параллельные многопроцессорные компьютеры [5]. В создаваемой РВС используются графические процессоры и кластеры. В качестве вычислительных узлов последних могут выступать серверы, рабочие станции и обычные персональные компьютеры (ПК). Для их связи используются сетевые технологии: Fast/Gigabit Ethernet, Myrinet, Infiniband. В [6] показано, что для молекулярно-динамических расчетов, описывающих поведение макромолекул в водной среде лучше использовать Infiniband, чем Gigabit Ethernet.

Графические процессоры (graphics processing units, GPUs) – миниатюрные суперкомпьютеры в корпусе обычного ПК. Они являются универсальными вычислительными модулями, обеспечивающими многопоточное параллельное программирование. Вычисления на GPU компании NVIDIA обеспечивает технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture) [7].

Программные ресурсы – это ПО, условно подразделяемое на четыре уровня:

- базовое или системное ПО — операционные системы, устанавливаемые на отдельные узлы аппаратных ресурсов;
- прикладное ПО, предназначенное для решения конкретных задач;
- промежуточное (ППО) - для объединения ресурсов в РВС;

– интерфейсное (ИПО) - для обеспечения унифицированного доступа к РВС, использующей различные типы ППО.

Прикладное ПО может быть параллельным и последовательным, платным и бесплатным, поддерживать один или несколько типов операционных систем.

Базовое ПО характеризуется эффективностью использования процессорного времени вычислительного узла ресурса, интерфейсное — числом поддерживаемых типов ППО, промежуточное — производительностью, т. е. числом элементарных заданий, выполняемых в сутки. При выборе ПО для создания РВС следует учитывать характер решаемых задач, число потенциальных пользователей, объем объединяемых ресурсов, а также качество каналов между отдельными РЦ.

**Информационные ресурсы** – это совокупность баз данных, хранящих библиотеки типовых моделей, исходных данных, программных средств моделирования, результаты и публикации о ранее выполненных ВЭ. Эта информация отображает накопленный опыт организации по проведению ВЭ при моделировании сложных объектов конкретной предметной области. Она может быть полезной для выполнения проводимых ВЭ и интерпретации их результатов пользователями. Актуальность и корректность предоставляемой пользователю информации влияет на время и качество исследований так же, как и объем используемых вычислительных ресурсов.

Информационные ресурсы характеризуются объемом накопленной информации, уровнем систематизации, удобством представления, возможностями поиска информации и масштабирования за счет подключения дополнительных информационных ресурсов.

Рассмотрим типы ресурсов и способы их рациональной организации в РВС, обеспечивающие пользователям возможность эффективного проведения серии ВЭ для решения рассматриваемых фармакологических задач.

Анализ ресурсов выполнен на примере РЦ четырех организаций: Института математики (ИМ АН РУз), Ташкентского государственного технического университета (ТГТУ), Научно-инновационного центра информационно-коммуникационных технологий (НИЦ ИКТ), Института химии растительных веществ (ИХРВ АН РУз).

Рис 1. Структурная схема организации РВС, объединяющей РЦ ИМ АН РУз, ИХРВ и ЦРППиАПК (для сравнения показан РЦ ТГТУ).

На (рис.1) показаны типы ресурсов, используемые в РВС для решения фармакологических задач:

UI - пользовательский интерфейс к ресурсам одного РЦ.

СА - центр сертификации — выдает сертификаты на временное пользование ресурсами РВС. Сколько ВО, столько и СА.

WN - рабочие узлы вычислительных ресурсов.

CE - управляющие узлы кластерных систем участников интеграции.

DB - база исходных данных для ВЭ содержит сведения о лигандах — кандидатах в лекарственные средства, выделенные химиками ИХРВ [8,9].

PX - хранилище сертификатов пользователей.

WMS + LB — службы поиска свободных вычислительных ресурсов CE и отслеживания статуса запущенных заданий.

WI1 - веб-интерфейс для отправки задания в РВС, мониторинга статуса заданий и состояния ресурсов этих РЦ. Интерфейс WI1 может интегрировать в себя WI2 - интерфейс для ввода пользователями РВС исходных данных для ВЭ в DB - базу физико-химических данных органических соединений.

WI0 - интерфейс для отправки заданий на ресурсы РЦ ИМНУУ. Содержит программный модуль M0 - портлет визуализации промежуточных результатов отдельных заданий, запущенных на ресурсах РВС.

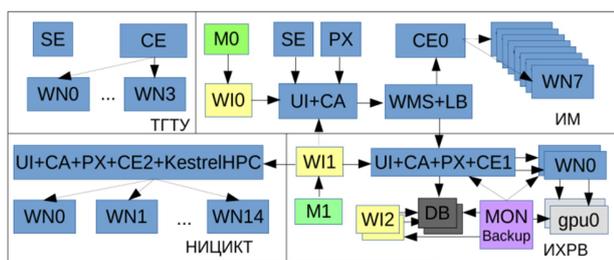
M1 - портлет для извлечения и визуализации исходных данных для ВЭ из DB.

GPU - графические сопроцессоры к рабочим узлам ИХРВ.

MON+BCK - система мониторинга состояния удаленных вычислительных ресурсов РВС [3] и полного резервного копирования важных ее компонентов: базы исходных данных и интерфейса пользовательского доступа к ней [10].

В этой РВС в качестве вычислительных ресурсов используются кластерные системы и рабочие станции с графическими сопроцессорами (рис. 2).

Молекулярно-динамические расчеты, выполняемые при поиске сайтов связывания лиганда с биологической мишенью, конформационной перестройке белковых цепей, моделировании мембран осуществляются на рабочих станциях с GPU (рис. 2, б).



а.ТГТУ

б. ИХРВ АН РУз



в. ИМ АНРУз

г. НИЦ ИКТ

Рис.2 Аппаратное обеспечение РВС

Расчеты для определения параметров электронной структуры лигандов и сайтов связывания, химических реакций, в том числе и ферментативных, требующие применения смешанных квантовых и классических методов, осуществляются на серверах других РЦ (Таблица 1). Сравнительная характеристика ресурсов ТГТУ и ИМ АН РУз представлена в [11].

Таблица 1. Аппаратные ресурсы РЦ РВС.

РЦ	Вычислительные ресурсы	Хранилища
НИЦ ИКТ	ПК: Intel Core i3, 3.6ГГц (15)	Нет
ИМ АН РУз	HP ProLiant DL 160 G5, 2.0 ГГц (8)	3.0 Тбайт
ТГТУ	HP ProLiant DL165 G6, 2.6ГГц (4)	1.5 Тбайт
ИХРВ АН РУз	ПК: Intel Core i7, 3.6ГГц (2), GPU: Nvidia GTX-760Ti, 1152 ядер	Нет

Для молекулярного докинга [12] используются программы: Autodock и Autodock-vina, а для расчета электронной структуры лигандов и сайтов связывания: Gromacs и Морас (Таблица 2).

Таблица 2. Программные ресурсы РВС.

РЦ	Базовое ПО	Прикладное ПО	ППО	ИПО
НИЦ ИКТ	Ubuntu-14	Нет	Open Stack, Kestrel HPC, GT-5.2.5	Нет
ИМ	SL-5.4	Autodock-4.2.3, Vina-1.1.1, FireFly-7.1	gLite-3.2	P-Grade 2.10.1
ТГТУ	Ubuntu-11	Gromacs-4.5.3, Морас-7	Нет	Нет
ИХРВ	Debian-8.2	Gromacs-5.0.4, Морас-12	GT-5.2.5	gUse-3.7.4

В качестве базового ПО установлены unix-подобные ОС, поскольку они гораздо эффективнее используют процессорное время вычислительных узлов, чем более универсальные ОС семейства MS Windows. Так, прикладное ПО Auto-Dock-4.2.3, установленное на один и тот же рабочий узел кластера РЦ ИМ АН РУз с ОС MS Windows-7, занимает 70% процессорного времени, а с Scientific Linux-5.4 - до 99%.

Пользователь вводит в ресурсы хранения исходные данные для моделирования, проводит вычисления, следит за состоянием ресурсов [3], отслеживает статус заданий, извлекает и визуализирует промежуточные результаты

молекулярного докинга [4] через интерфейсное ПО, представленное порталами P-Grade 2.10.1 и gUse-3.7.4.

## 4 Способы организации ресурсов РВС

1. Рабочий узел (Worker Node, WN) или кластер, состоящий из двух и более однотипных рабочих узлов WN, как ресурс: CE+WN. Это простейший из возможных способов организации вычислительных ресурсов. Если убрать один из компонентов (CE или WN), то он уже не будет ресурсом.

В данном случае каждый пользователь получает под свои задачи подмножество узлов кластера. Этот способ подходит только для доступа к кластеру пользователей одного РЦ по локальной сети. Главный недостаток - отсутствие анонимности: администратор получает полный доступ к исходным данным и результатам ВЭ всех пользователей РЦ, которых знает поименно.

Для организации ресурса на один из узлов кластера устанавливается подсистема управления локальными ресурсами и создается из него управляющий узел: CE с поддержкой системы пакетной обработки заданий (Batch Processing Systems). Это могут быть: Condor, NQS, PBS, DQS, EASY-LL, CODINE [13]. Сам кластер можно сделать с общим доступом и без общего доступа к внешним устройствам (жестким дискам).

Примером простейшего способа организации ресурсов является вычислительный ресурс ТГТУ. Кластера ИМ АН РУз и НИЦ ИКТ имеют организацию с общим доступом к внешним устройствам.

2. Кластер как РЦ: UI+CE+WN. Установка пользовательского интерфейса (User Interface, UI) с возможностью регистрации новых пользователей и ресурсов в центре сертификации некоторой ВО и получения сессионных ключей для проведения ВЭ превращает ресурс в РЦ. Пользователь получает в свое распоряжение подмножество кластерных систем одного РЦ.

3. Кластер как совокупность ресурсов ВО: UI+CA+CE+WN. Наличие собственного центра сертификации позволяет на базе имеющихся аппаратно-программных средств создавать новые РЦ и регистрировать новых пользователей ВО. Конечному пользователю предоставляется подмножество аппаратных ресурсов нескольких РЦ одной ВО. Каждый из участников интеграции на рис. 1 (кроме ТГТУ) имеет собственный СА и способен привлекать аппаратные ресурсы независимо от других. Пример подобной РВС состоящей из трех РЦ представлен в [14].

4. Кластер как основа для создания РВС с поддержкой множества ВО, использующих различные типы ППО: WI+UI+CA+CE+WN. Современные грид- и клауд-порталы - интерфейсы доступа (Web Interfaces, WI) к РВС позволяют объединять ресурсы ВО с различными типами ППО и аппаратного обеспечения. При таком способе организации пользователь может создавать потоки заданий, считающихся на ресурсах нескольких ВО.

Пример грид-инфраструктуры на основе ППО glite-3.2, ориентированной на фармакологические исследования, состоящей только из одного грид-сайта с веб-интерфейсом W10 на основе P-Grade 2.10.1 описан в [15].

Веб-интерфейс W11 на основе gUse-3.7.4 в ИХРВ позволяет создавать потоки заданий, запускаемых на ресурсах с ППО gLite-3.2 (ИМ АН РУз) и gt-5.2.5 (НИЦ ИКТ, ИХРВ) [16].

5. Кластер как облачная инфраструктура. Это самый сложный, известный на сегодня, способ организации аппаратных ресурсов. Пользователь создает на множестве предоставляемых ему виртуальных ресурсов РВС требуемой производительности с требуемой скоростью взаимодействия между рабочими узлами этих ресурсов и самими ресурсами; устанавливает на виртуальные узлы соответствующее базовое, прикладное, промежуточное и интерфейсное ПО. Можно утверждать, что ресурсом в облаке является сама РВС, в которой пользователь может создавать собственные облачные инфраструктуры и т. д.

В настоящий момент ведутся работы по созданию облачной инфраструктуры в НИЦ ИКТ. В частности, установлено ППО OpenStack-Juno на узлы кластера этого РЦ (см. Таблица 2).

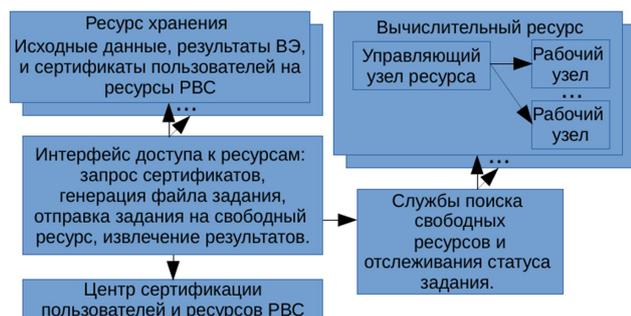


Рис.3 Архитектура РВС.

На рис. 3 представлена обобщенная архитектура РВС, построенной в соответствии с вышеизложенными способами организации ресурсов, обеспечивающими минимизацию общего времени выполнения ВЭ с целью решения фармакологических задач. Эта структура содержит все минимально необходимые компоненты для ее функционирования как РВС.

## 5. Использование ресурсов РВС.

Для ресурсов РЦ ИХРВ — рабочих станций с видеокартами написаны программы, реализующие муравьиный алгоритм фолдинга белков [17] и метод Гаусса для решения систем линейных алгебраических уравнений [18,19]. Сама грид-

инфраструктура с поддержкой вычислений на графических процессорах описана в [20]. Там же сравнивается производительность ресурсов ИМ АН РУз и ИХРВ АН РУз для набора тестов пакета Gromacs. Показано, что каждый рабочий узел с видеокартой ресурса ИХРВ в пять раз превосходит рабочий узел ресурса ИМ АН РУз для прикладного ПО gromacs-4.5.5. В [21,22] представлена сравнительная характеристика производительности муравьиного алгоритма комивояджера на кластерных системах РЦ ИМНУУ и Центра РПП и АПК. В [23] сравниваются алгоритмы фолдинга белков для трех типов вычислительных систем: рабочие станции с видеокартами [17], кластерная [21] и грид-системы из слабосвязанных персональных компьютеров [24]. На программные реализации алгоритмов получены свидетельства [25-27].

Ресурсы ИМ АН РУз использовались для виртуального скрининга флавоноидов на ингибирование мембранного белка - «натрий-калиевого насоса» [15]. На ресурсах ИХРВ исследовались молекулярные механизмы ингибирования мускариновых рецепторов [28]. Задачи, решаемые в ТГТУ, описаны в работе [12].

На веб-интерфейс W12 и портлет M0 получены свидетельства на программный продукт соответственно [29,30].

## 6. Выводы

Разрабатываемая РВС содержит ресурсы трех ресурсных центров и предназначена для виртуального скрининга веществ на их биологическую активность. В настоящее время создается информационная подсистема РВС, в частности, база физико-химических данных органических соединений, полученных в ИХРВ. Такая информационная подсистема совмещает в себе как базу данных, так и базу знаний исследуемой предметной области, в данном случае, фармакологической химии. Предполагается, что структуры исследуемых органических соединений, вводимые в эту информационную подсистему, после соответствующей обработки будут использоваться в качестве исходной информации для последующих ВЭ для синтеза новых органических соединений. Обобщение и систематизация результатов этих ВЭ позволит актуализировать содержимое указанной информационной подсистемы, т.е. осуществлять ее пополнение и обновление новыми данными и знаниями.

## Литература

- [1] Бекмуратов Т.Ф., Брусков В.П., Базаров Д.К., Базаров Р.К. Алгоритмы и программные средства для организации вычислительных экспериментов в распределенных вычислительных системах // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – Ташкент, 2016. – № 4. – С. 106-115.

- [2] Виртуальная лаборатория: биохимия *in silico* [Электронный ресурс] / S.Yu. Yunusov; Institute of the Chemistry of Plant Substances NAS RUz. – Режим доступа: <http://www.icps.org.uz/grid.html>.
- [3] Базаров Д.К. Система мониторинга состояния ресурсов распределенной вычислительной системы / Проблемы вычислительной и прикладной математики. - 2017, вып. 3(9) С. 117-125
- [4] Брусков В.П., Базаров Д.К., Базаров Р.К. Программный модуль визуализации промежуточных результатов молекулярного докинга. // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – Ташкент, 2016. – № 2. – С. 101-107.
- [5] Основные классы современных параллельных компьютеров [Электронный ресурс] / Лаборатория НИВЦ МГУ. - Режим доступа: <http://www.parallel.ru/computers/classes.html>
- [6] Душанов Э.Б., Холмуродов Х.Т., Кутковский Н.А., Кореньков В.В., Адылова Ф.Т., Базаров Р.К., Базаров Д.К. Поиск оптимальной вычислительной системы для молекулярно-динамических расчетов. // Вопросы вычислительной и прикладной математики: Сб. Науч.тр. - Ташкент, ИМИТ АН РУз, 2010. - вып. 124. - С. 135-143.
- [7] CUDA Zone [Электронный ресурс] / NVIDIA Corporation. – Режим доступа: <https://developer.nvidia.com/cuda-zone>
- [8] Базаров Р.К., Базаров Д.К., Брусков В.П. Концептуальное проектирование базы данных по физико-химическим свойствам органических соединений. // Современное состояние и перспективы применения информационных технологий в управлении : материалы республиканской научно-технической конференции, 7-8 сентября 2015г. - Ташкент: Центр РПП и АПК при ТУИТ, 2015. - С.122-128.
- [9] Базаров Д.К., Брусков В.П. Разработка базы данных по физико-химическим свойствам органических соединений, Информатика: проблемы, методология, технологии: И74 сборник материалов XVI международной научно-методической конференции, 11–12 февраля 2016 г. – Воронеж: Издательство «Научно-исследовательские публикации», 2016. – С. 346-350.
- [10] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, №DGU03919. Программный продукт «Скрипты резервного копирования базы данных по физико-химическим свойствам органических соединений и интерфейса пользовательского доступа на удаленные информационные ресурсы на основе rsync.» / Брусков В.П., Базаров Д.К., Абдуллаев Н.Д.; заявитель и правообладатель Институт химии растительных веществ АН РУз. - № DGU20160424; заявл. 20.07.2016; опубл. 12.08.2016. - 1 с.
- [11] Ж.И. Раззоков, Д.К. Базаров, В.П. Брусков, А.А. Фридман, Многопроцессорные кластерные расчеты методом молекулярной динамики, УФЖ, том 14, № 3, С.194-200, 2012.
- [12] Драг-дизайн: как в современном мире создаются новые лекарства [Электронный ресурс]/ Чугунов А. - Режим доступа: <http://biomolecula.ru/content/15>
- [13] The Pickett Group [Электронный ресурс] / Warren Pickett. –Режим доступа: <http://yclept.ucdavis.edu/Beowulf/notes/batchprocessingsystem.html>
- [14] Р.К. Базаров, Д.Д.Ахмедов, Р.К.Джанарова, Д.К.Базаров. Распределенная вычислительная инфраструктура для науки и образования. European Researcher, 2014, Vol(76), №6-1 Режим доступа: [http://www.erjournal.ru/journals\\_n/1403784377.pdf](http://www.erjournal.ru/journals_n/1403784377.pdf)
- [15] V. Bruskov, R. Bazarov, D. Bazarov. Development of the grid-infrastructure for molecular docking problems, in proceeding of NEC'2011, Varna, Bulgaria, Pp.64-68.
- [16] Базаров Р.К., Базаров Д.К., Брусков В.П. Информационная система для обработки физико-химических данных органических соединений // Современное состояние и перспективы применения информационных технологий в управлении: Доклады Республиканской научно-технической конференции, Джизак, 5-6 сентября 2016 г. – Ташкент, 2016.– С. 213-219.
- [17] Базаров Р.К. Реализация муравьиного алгоритма для изучения фолдинга белков на графических процессорах. / Проблемы вычислительной и прикладной математики. - 2017, вып. 1(7) С. 86-91
- [18] Равшанов Н., Базаров Р.К., Базаров Д.К. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса на графических процессорах // Информационные технологии: наука, техника, технология, образование, здоровье (MicroCAD-2015): материалы XXIII международной научно-практической конференции, 20-22 мая 2015 г. – Харьков, 2015. – С. 241.
- [19] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, № DGU04102. Программный продукт «Реализация алгоритма решения систем линейных алгебраических уравнений на графических процессорах.» / Базаров Р.К.; заявитель и правообладатель Центр разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий. - № DGU20160587; заявл. 28.10.2016; опубл. 09.12.2016. -1 с.
- [20] Брусков В.П. Базаров Д.К. Грид-инфраструктура с поддержкой вычислений на графических процессорах. // Информатика: проблемы, методология, технологии. Сборник материалы XVII международной научно-методической конференции, 9-10 февраля 2017 г. - Воронеж: Издательство «Научно-исследовательские публикации», 2017. - С. 190-195.
- [21] Бекмуратов Т.Ф., Мухамедиева Д.Т., Базаров Р., Ахмедов Д.Д. Параллельный муравьиный алгоритм оптимизации. Проблемы информатики и энергетики. – 2014, вып. 1-2. - С.11-15.
- [22] Базаров Р.К., Ахмедов Д.Д. Параллельный алгоритм оптимизации муравьиной колонии. // Перспективы эффективного развития информационных технологий и телекоммуникационных систем: сборник докладов республиканской научно-технической конференции. Ч. 2. Т., 2014. - С. 211-213.

- [23] *Базаров Р.К.* Решение задачи фолдинга белков в распределенных вычислительных грид-системах. // «Проблемы информационных и телекоммуникационных технологий»: сборник докладов республиканской научно-технической конференции. 10-11 марта 2016 г. - Ташкент, 2016. Ч.2. - С. 130-131.
- [24] *Бекмуратов Т.Ф., Базаров Р.К., Базаров Д.К.* Реализация муравьиного алгоритма фолдинга белков методами программных агентов в распределенных системах. / Проблемы вычислительной и прикладной математики. - 2017, вып. 2(8) С. 103-113.
- [25] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, № DGU02697. Программный продукт «Параллельная версия программы, реализующей муравьиный алгоритм сворачивания белков на плоскости (АСО-НППФР-2)» / Р.К. Базаров; - № DGU 20120260; заявл. 26.12.2012; опубл. 25.01.2013. - 1 с.
- [26] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, №DGU03215. Программный продукт «Реализация муравьиного алгоритма для изучения фолдинга белков на плоскости с помощью графических процессоров (GPU-АСО-НППФР-2)» / БазаровР.К.; заявитель и правообладатель Центр разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий. - № DGU20150148; заявл. 18.05.2015; опубл. 08.07.2015. -1 с.
- [27] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, №DGU04104. Программный продукт «Реализация муравьиного алгоритма для изучения фолдинга белков на плоскости методами программных агентов (AGENT-АСО-НППФР-2) / Базаров Р.К.; заявитель и правообладатель Центр разработки программных продуктов и аппаратно-программных комплексов при Ташкентском университете информационных технологий. - № DGU20160516; заявл. 14.09.2016; опубл. 09.12.2016. -1 с.]
- [28] *V. P. Bruskov, Yu.R. Mirzaev, N. D. Abdullaev, D.K. Bazarov.* Molecular mechanism of muscarinic receptors inhibition by imperialine and its haloid derivatives // Proceedings of the Xth International symposium on the Chemistry of Natural Compounds. - Tashkent-Bukhara, Nov 21-23., P. 63, 2013
- [29] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, № DGU03389. «Ruby on Rails веб-интерфейс доступа к базе данных по физико-химическим свойствам органических соединений». / Равшанов Н., Абдуллаев Н.Д., Брусков В.П., Базаров Р.К., Базаров Д.К.; заявитель и правообладатель Институт химии растительных веществ АН РУз. – № DGU20150372; заявл. 19.10.2015; опубл. 16.11.2015. – 1 с.
- [30] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, № DGU03140. «Портлет визуализации промежуточных результатов молекулярного докинга на основе Jmol» / Брусков В.П., Базаров Р.К., Базаров Д.К., Абдуллаев Н. Д.; заявитель и правообладатель Институт химии растительных веществ АН РУз. – № DGU20150372; заявл. 21.04.2015; опубл. 11.05.2015. – 1 с.