УДК 004.75

**В.В. ОРДА[*], О.Ф. БОРЕЦЬКИЙ[*], А.О. САЛЬНІКОВ[*], О.І. КОРНЕЛЮК[**]**

# МЕТОДИКИ ІНТЕГРАЦІЇ ПРОГРАМНОЇ АРХІТЕКТУРИ ВІРТУАЛЬНОЇ ЛАБОРАТОРІЇ MOLDYNGRID З ЛОКАЛЬНИМИ СИСТЕМАМИ КЕРУВАННЯ ЗАВДАННЯМИ HTCONDOR ТА PBS

[*]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, м. Київ, Україна
[**]Інститут молекулярної біології і генетики НАН України, м. Київ, Україна

***Анотація.*** *У статті проведено аналіз особливостей запуску прикладного програмного забезпечення віртуальної лабораторії MolDynGrid. Сформовано методики автоматизації запуску задач на обчислювальні кластери під управлінням систем HTCondor та PBS. Запропоновані методики реалізовані у вигляді програмних модулів, що дозволило використовувати єдиний програмний інтерфейс для запуску задач на обчислювальні ресурси грід-інфраструктури та на локальні кластери. Запропоновано підходи, що дають можливість адаптувати та доповнювати методики для використання інших обчислювальних ресурсів.*
***Ключові слова:*** *грід, автоматизація, молекулярна динаміка, обчислювальний кластер.*

***Аннотация.*** *В статье проведен анализ особенностей запуска прикладного программного обеспечения виртуальной лаборатории MolDynGrid. Сформированы методики автоматизации запуска задач на вычислительные кластеры под управлением систем HTCondor и PBS. Предложенные методики реализованы в виде программных модулей, что позволило использовать единый программный интерфейс для запуска задач на вычислительные ресурсы грид-инфраструктуры и локальные кластеры. Предложены подходы, позволяющие адаптировать и дополнять методики для использования других вычислительных ресурсов.*
***Ключевые слова:*** *грид, автоматизация, молекулярная динамика, вычислительный кластер.*

***Abstract.*** *Analysis of features of MolDynGrid virtual laboratory application software running was conducted. Automation methods of task submitting on computing clusters managed by HTCondor and PBS systems were formed. The proposed methods were implemented as software modules for existing solution that allows using a single software interface to run tasks on both computing resources of grid-infrastructure and computing clusters. Approaches that allow adapting and complementing methods of usage of different computing resources were proposed.*
***Keywords:*** *grid, automation, molecular dynamics, computational cluster.*

## 1. Вступ

Метод комп'ютерного моделювання молекулярної динаміки (МД) – теоретичний метод дослідження поведінки біологічних макромолекул та молекулярних систем. Розроблений на засадах теоретичної фізики, метод молекулярної динаміки широко використовується в комп'ютерній структурній біології та біофізиці. В основу методу покладений чисельний розрахунок класичних траєкторій руху макромолекул у фазовому просторі координат та імпульсів їх атомів [1].

Інтенсивні дослідження конформаційної рухливості білків та їх комплексів методом моделювання молекулярної динаміки в останні роки проводяться і в Україні, зокрема, в Інституті молекулярної біології та генетики (ІМБіГ) Національної академії наук України [2].

Для розрахунків молекулярної динаміки необхідні значні комп’ютерні ресурси: час обчислення однієї траєкторії у наносекундному діапазоні, як правило, перевищує кілька місяців на одному процесорі, загальний розмір файлів з результатами моделювання може перевищувати 250 Гбайт. Багато застосувань вимагають одночасної обробки декількох


© Орда В.В., Борецький О.Ф., Сальніков А.О., Корнелюк О.І., 2017

($\sim 10^2$) траєкторій і повинні враховувати вплив температури, початкових умов, значної кількості статистичних даних.

Одним із інструментів, що дає можливість задовольнити потреби у таких значних обчислювальних ресурсах та ресурсах зберігання даних, є обчислювальний грід. Так, у 2008 р. для вирішення задач у галузях структурної біології та біоінформатики на базі Інституту молекулярної біології і генетики НАН України була заснована віртуальна лабораторія MolDynGrid (http://moldyngrid.org). Лабораторія надає науковцям зручний інструментарій для проведення розрахунків молекулярної динаміки біологічних макромолекул (білків, нуклеїнових кислот та їхніх комплексів) у водно-іонному оточенні з наближенням до фізіологічних умов [3–4]. З використанням сервісів MolDynGrid на сьогодні проводяться дослідження молекулярної динаміки аміноацил-тРНК синтетаз та їх мутантних форм, що є ключовими ферментами на дорибосомному етапі біосинтезу протеїнів. За результатами досліджень було підтверджено гіпотезу Шиммеля про відсутність цитокінової активності (проангіогенні властивості, що полягають у стимуляції розвитку кровоносних судин) за рахунок екранування цитокінового ELR-мотиву в повнорозмірній структурі тирозил-тРНК синтетази людини [5–6]. Даний цитокіновий мотив дає змогу виступати як протизапальний цитокін, як інтерлейкін 8 (англ. Interleukin-8, IL-8) [7]. Виявлено локальні конформаційні зміни з формуванням $\beta$-структурних елементів у CP1-вставці згортки Россмана для мутантних форм G41R і del153-156VKQV тирозил-тРНК синтетази людини, що асоційовані з нейрологічним захворюванням Шарко-Марі-Туса (DI-CMTC) [8]. Запропоновано нову роль неструктурованої петлі CP1 вставки при взаємодії з низькомолекулярними субстратами [9].

Як і відображає назва цієї віртуальної лабораторії, цільовими ресурсами, які надавали обчислювальні потужності для розрахунків молекулярної динаміки, були ресурси української національної грід-інфраструктури. MolDynGrid є частиною проекту розвитку грід-сегмента Національної академії наук України на базі обчислювальних кластерів, що входять у цей грід-сегмент.

З розвитком віртуальної лабораторії змінювався її програмний інструментарій та залучались все нові й нові обчислювальні ресурси, що використовуються для вирішення задач. За роки співпраці з EGI (European Grid Infrastructure) для MolDynGrid стали доступні такі ресурси європейської грід-інфраструктури, як EGI Federated Cloud, LRZ Linux Cluster (Leibniz Supercomputer Center) та болгарський обчислювальний кластер у Софії (в рамках проекту Virtual Team GPGPU).

Однак варто зауважити, що існують інші ресурси, які не є елементами української національної грід-інфраструктури, але також дозволяють їх використання для виконання обчислень шляхом локального запуску задач. Зокрема, розробка методик для використання локальних ресурсів актуальна і для залучення хмарних ресурсів у вигляді окремо запущених не пов’язаних віртуальних машин.

Тому, незважаючи на початкову орієнтацію на грід, наявність доступних для ВЛ гетерогенних платформ (включаючи хмарні ресурси) поза грід-інфраструктурою обумовлює необхідність подальшого розвитку програмних засобів MolDynGrid для прозорого залучення таких ресурсів. Найбільш популярними локальними системами керування завдань, доступних для використання у MolDynGrid, є PBS та HTCondor. Питанням інтеграції з такими платформами і призначена дана робота.

## 2. Аналіз поточної програмної інфраструктури MolDynGrid

Поточна програмна інфраструктура віртуальної лабораторії MolDynGrid (рис. 1) орієнтована на використання грід-сервісів і була спрямована на вирішення грід-специфічних задач для забезпечення життєвого циклу моделювання МД на розподілених ресурсах та інтеграцію зберігання даних у грід.

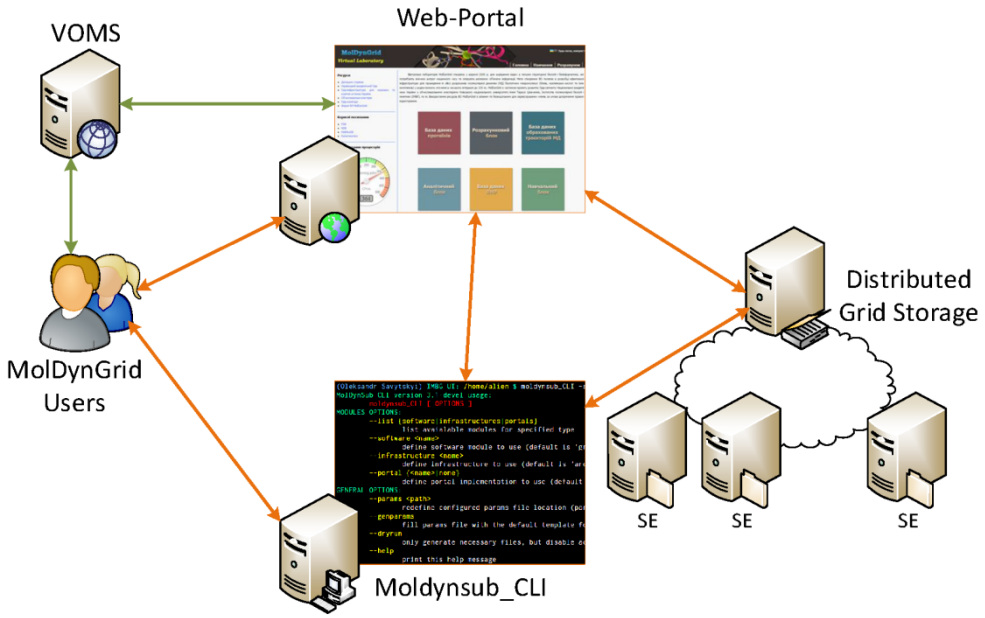


Рис. 1. Структура ВЛ MolDynGrid

Для користувачів, які не мають значного досвіду роботи з грід-інфраструктурою та з її користувацьким програмним забезпеченням, був створений веб-портал. Він складається з розрахункового, аналітичного, навчального блоків і баз даних для ресурсів, необхідних для виконання обчислень.

Для того, щоб надати можливість більш гнучко керувати запуском ПЗ користувачам, які знають особливості архітектури грід та детальні параметри використання програмного забезпечення, був розроблений модульний застосунок з інтерфейсом командного рядка moldynsub_CLI, який і автоматизує процеси запуску задач у грід-інфраструктуру. Рішення дозволяє динамічно завантажувати та обирати такі категорії модулів (рис. 2):

• модулі, які забезпечують запуск прикладного програмного забезпечення;

• модулі, які забезпечують зв'язок з обчислювальними інфраструктурами;

• модулі, які забезпечують зв'язок з веб-порталом віртуальної лабораторії і дозволяють здійснювати моніторинг та керування запущених задач.

Рис. 2. Компоненти moldynsub_CLI

Модуль для зв'язку з обчислювальними інфраструктурами виконує запуск задач на той чи інший обчислювальний ресурс грід-інфраструктури. Даний модуль реалізований з урахуванням особливостей взаємодії з відповідними системами керування завданнями.

Розглянемо детальніше структуру інфраструктурного модуля moldynsub_CLI. Він складається з кількох компонентів, що відповідають етапам запуску задачі на обчислювальні ресурси:

• авторизація (authorization);
• завантаження вхідних та вихідних файлів (data staging);
• створення файла опису задачі (job description);
• запуск задачі (job submission).

На вхід moldynsub_CLI передається файл з параметрами запуску задачі, після чого модуль формує файл опису задачі відповідно до обраної інфраструктури.

Технологічний ланцюжок функціонування moldynsub_CLI для запуску завдання в грід-інфраструктуру такий:

1. Створення шаблона файла, що містить параметри запуску задачі з урахуванням особливостей інфраструктури (можливість задати необхідні параметри виконання: кількість процесорів, обсяг пам'яті і т.д.) та прикладного ПЗ (версія ПЗ, список вхідних файлів). Даний файл може бути змінений перед запуском задачі на виконання.

2. Зчитування файла конфігурації для визначення параметрів роботи утиліти (віртуальної організації, від імені якої здійснюється доступ до ресурсів грід; ПЗ та інфраструктура, що використовуються за замовчанням; URL, що вказує на директорії для завантаження вхідних та вихідних файлів і т.д.).

3. Встановлення змінних оточення, що визначають параметри роботи утиліти (назви файлів опису задачі та безпосередньо виконуваного файла, параметри ПЗ).

4. Генерація проксі-сертифіката делегації повноважень у грід. Для доступу до ресурсів грід-інфраструктури необхідна наявність проксі-сертифіката, що свідчить про належність до певної віртуальної організації, від імені якої і здійснюється запуск задач.

5. З'єднання з веб-порталом для реєстрації нової задачі.

6. Створення виконуваного файла, який і буде завантажений та запущений на обчислювальних ресурсах.

7. Створення списку вхідних файлів та їх завантаження на елементи зберігання даних грід-інфраструктури. Під час виконання задачі ці файли будуть доступні у вигляді списку URL-посилань. Для доступу до цих файлів необхідний проксі-сертифікат, згенерований у п. 4.

8. Створення списку вихідних файлів. Формується список URL-посилань, які вказують на розташування, куди будуть вивантажені вихідні файли після завершення обчислень.

9. Створення файла опису задачі відповідно до обраної обчислювальної інфраструктури. Даний файл є вхідним файлом під час запуску задачі і містить параметри запуску (як параметри самої задачі – час виконання, назва і т.д., так і параметри обчислень – необхідну кількість пам'яті, процесорів і т.д.).

10. Запуск задачі на обрану обчислювальну інфраструктуру.

11. З'єднання з веб-порталом для зміни статусу задачі після виконання обчислень.

Особливості роботи даної утиліти необхідно відобразити на локальні системи керування задачами (ЛСКЗ) HTCondor та PBS. У роботі було проведено аналіз життєвого циклу завдань у таких системах, зокрема, проаналізовано доступний синтаксис опису задачі та можливості роботи з вхідними і вихідними файлами.

### 3. Аналіз особливостей запуску завдань у ЛСКЗ HTCondor та PBS

Portable Batch System або PBS – програмне забезпечення для керування розподіленими обчисленнями, яке було розроблено у NASA і зараз є де-факто стандартною системою на обчислювальних кластерах, що працюють під керуванням ОС сімейства Unix/Linux. Зокрема, переважна більшість локальних кластерів в Україні працює під керуванням системи PBS.

HTCondor – це програмна система, яка реалізує середовище з високою пропускною здатністю (HTC). High-Throughput Computing (HTC) – обчислювальна парадигма, яка фо-

кусується на ефективному виконанні великого числа слабкопов'язаних завдань, у той час, як системи високопродуктивних обчислень, як правило, зосереджені на тіснопов'язаних паралельних задачах та принципах їх виконання в межах певного середовища з невеликими затримками з'єднань [10].

Ресурси під керуванням вищевказаних систем надають значні обчислювальні потужності (наприклад, у OpenScienceGrid щоденно виконується більше 300 тисяч задач, які використовують більше $3*10^6$ годин процесорного часу [11]), тому їх використання дозволить науковцям прискорити та збільшити ефективність проведення досліджень.

Однак кожна з цих систем має власні методи запуску задач, мови опису задач, методи роботи з вхідними та вихідними файлами. Важливою задачею при інтеграції PBS та HTCondor у moldynsub_CLI є досягнення єдиного уніфікованого інтерфейсу для запуску задач як у грід, так і в ЛСКЗ. Користувач матиме можливість ознайомитися з утилітою та навчитися користуватися нею на локальній тестовій системі, після чого за допомогою тих самих засобів здійснюватиме запуск задач на значних обчислювальних потужностях незалежно від їх системи керування (грід-інфраструктура, HTCondor чи PBS).

Результати аналізу архітектур HTCondor та PBS на відповідність компонентам інфраструктурного модуля moldynsub_CLI представлені у табл. 1.

Таблиця 1. Відповідність між архітектурою ЛСКЗ HTCondor і PBS та компонентами moldynsub_CLI

| | HTCondor | PBS |
|---|---|---|
| Авторизація | Запуск задач відбувається з окремого «submit-вузла», на якому працює так званий «shadow»-процес, який виконує роль менеджера ресурсів для кожної задачі. Необхідно реалізувати додатковий модуль для входу на цей вузол за допомогою SSH | Ресурси під керуванням PBS, як правило, є локальними кластерами, тому необхідно реалізувати додатковий модуль для входу на вузли цих кластерів за допомогою SSH |
| Завантаження файлів | У HTCondor існує декілька середовищ (так званий «universe»), які визначають особливості виконання задач. Завантаження та вивантаження файлів за URL підтримується не в усіх середовищах, тому для забезпечення більш повної підтримки роботи з даною системою потрібно реалізувати додатковий функціонал для копіювання файлів на віддалений обчислювальний вузол (наприклад, за допомогою утиліти SCP) | PBS розроблявся як локальна система керування задачами, тому він не підтримує завантаження та вивантаження файлів за URL.<br>Необхідно зберігати файли локально під час запуску задачі та реалізувати додатковий функціонал для їх копіювання на віддалений обчислювальний вузол (наприклад, за допомогою утиліти SCP) |
| Створення файла опису задачі | Система має власний синтаксис файла опису задачі, зокрема, вона дозволяє гнучко визначити ресурси, необхідні для виконан- | Система має власний синтаксис файла опису задачі, надає можливість явно вказати командну оболонку, яка буде використана |

Продовження табл. 1

| | | |
|---|---|---|
| | ня задачі за допомогою системи ClassAds | для запуску виконавчого файла і має набір змінних середовища, що дозволяють визначати параметри запуску задачі |
| Запуск задачі | Запуск та керування задачами відбувається за допомогою окремих утиліт системи (наприклад, condor_submit, condor_q, condor_rm) | Запуск та керування задачами відбувається за допомогою окремих утиліт системи (наприклад, qsub, qstat, qdel) |

Відповідно до проведеного аналізу запропоновано таку модифіковану методику запуску задачі на ЛСКЗ HTCondor, яка інтегрується в існуючий процес забезпечення життєвого циклу задач у moldynsub_CLI (нові та змінені етапи виконання виділені курсивом):

1. Створення шаблона файла з параметрами запуску задачі.
2. Зчитування файла конфігурації для визначення параметрів роботи утиліти.
3. Встановлення необхідних змінних оточення.
4. Генерація проксі-сертифіката.
5. З'єднання з веб-порталом для реєстрації нової задачі.
6. Створення списку вхідних файлів та їх завантаження на елементи зберігання даних гріда.
7. На етапі попереднього створення сценарію виконання (новий етап у послідовності запуску moldynsub_CLI) у виконуваний файл додаються команди для реалізації таких дій:

a) збереження файла з проксі-сертифікатом у текстовому вигляді в тілі сценарію;

b) завантаження портативного клієнта для роботи з інфраструктурою зберігання грід;

c) встановлення змінних середовища для роботи клієнта з п. 6 b;

d) завантаження вхідних файлів за URL-посиланнями з елементів зберігання даних грід-інфраструктури.

8. Додавання команд, які безпосередньо запускають обчислення.
9. Створення списку вихідних файлів.
10. Створення файла опису задачі.
11. У виконуваний файл додаються команди для вивантаження вихідних файлів на елементи зберігання даних грід-інфраструктури після завершення обчислень за допомогою портативного клієнта.
12. Копіювання виконуваного файла та файла опису задачі на submit-вузол HTCondor, з якого можливий запуск задач.
13. Запуск задачі на обрану обчислювальну інфраструктуру шляхом входу на submit-вузол за допомогою SSH.
14. З'єднання з веб-порталом для зміни статусу задачі після виконання обчислень.

Методику запуску задачі у системи під керуванням PBS пропонується реалізувати таким чином:

1. Створення шаблона файла з параметрами запуску задачі.
2. Зчитування файла конфігурації для визначення параметрів роботи утиліти.
3. Встановлення необхідних змінних середовища.
4. Генерація проксі-сертифіката.
5. З'єднання з веб-порталом для реєстрації нової задачі.
6. Створення списку вхідних файлів та їх завантаження на елементи зберігання даних гріда.

7. Система PBS не потребує окремих файлів опису задачі та виконуваного файла, тому у даному випадку єдиний файл містить як команди виконання обчислень, так і параметри запуску. На етапі попереднього створення сценарію виконання у файл опису задачі додаються команди для реалізації таких дій:

a) збереження файла з проксі-сертифікатом у текстовому вигляді в тілі сценарію;

b) завантаження портативного клієнта для роботи з інфраструктурою зберігання грід;

c) встановлення змінних середовища для роботи клієнта з п. 6b;

d) завантаження вхідних файлів за URL-посиланнями з елементів зберігання даних грід-інфраструктури.

8. Додавання команд, що безпосередньо запускають обчислення у файл опису задачі.

9. Створення списку вихідних файлів.

10. У файл опису задачі додаються команди для вивантаження вихідних файлів на елементи зберігання даних грід-інфраструктури після завершення обчислень за допомогою портативного клієнта.

11. Копіювання файла опису задачі на вузол, що працює під керуванням PBS.

12. Запуск задачі на обрану обчислювальну інфраструктуру шляхом входу на вузол, куди був скопійований виконуваний файл.

13. З'єднання з веб-порталом для зміни статусу задачі після виконання обчислень.

Вищеописані методики реалізовані в moldynsub_CLI шляхом додавання відповідних інфраструктурних модулів та нових умовних етапів у процес роботи утиліти.

Для доступу до елементів зберігання даних грід-інфраструктури було створено мінімальний дистрибутив портативного клієнта на базі пакетів EMI-UI-3.17.1, який доступний з веб-порталу віртуальної лабораторії MolDynGrid. Даний клієнт дозволяє копіювати файли з елементів зберігання даних та на них.

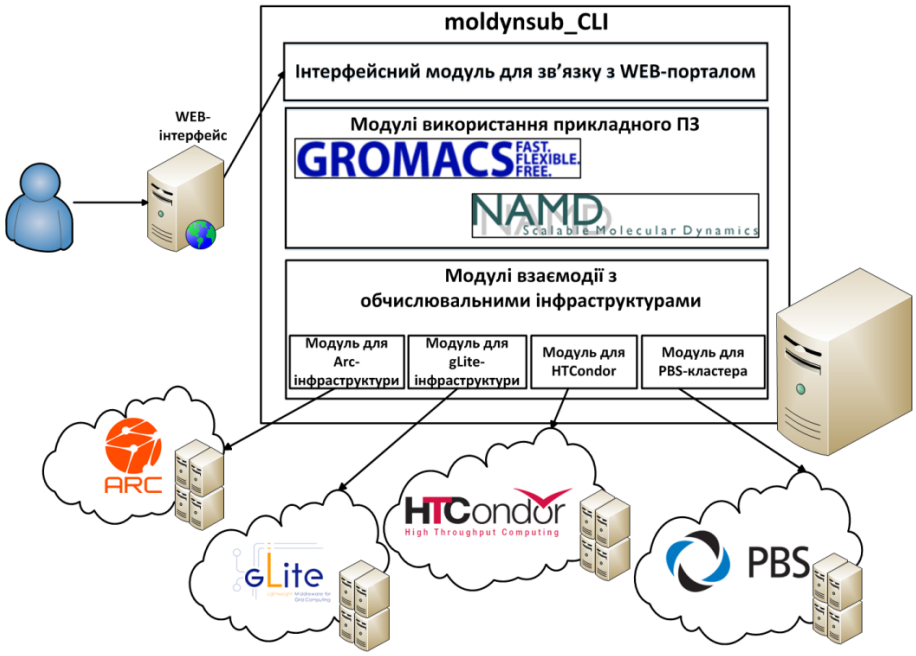


Рис. 3. Модифікована архітектура утиліти moldynsub_CLI

На рис. 4 та 5 наведено приклад використання оновленої утиліти для запуску завдань на системи під керуванням HTCondor.

```
[orda@localhost namd]$  moldynsub_CLI --software namd --infrastructure condor
INFO: Generating proxy certificate for VO moldyngrid
Enter pass phrase for private key:
Your identity: /C=UA/O=KNU/OU=People/L=RPD/CN=Viktor Orda
Contacting VOMS server (named moldyngrid): voms.grid.org.ua on port: 15110
Proxy generation succeeded
Your proxy is valid until: 2017-06-21 06:40:29
Getting UUID for job from MolDynGrid portal...
Received UUID: d1357e90-55ce-11e7-b05f-001a4a785603
Transfering job input data to srm://se.imbg.org.ua/pnfs/imbg.org.ua/data/moldyng
rid/mdsjobs/d1357e90-55ce-11e7-b05f-001a4a785603
Uploading ionized_Mg.pdb:
|=================================================================================/|
Uploading ionized_Mg.psf:
|=================================================================================-|
Uploading Par_all27_prot_na.prm:
|=================================================================================||
Uploading ionized.namd:
|=================================================================================||
Sending executable to the HTCondor.
moldynsub.20170620184029.condor                100%  302     0.3KB/s   00:00
moldynsub.20170620184029.script                100% 9000     8.8KB/s   00:00
Starting job.
Submitting job(s).
1 job(s) submitted to cluster 46323587.
[orda@localhost namd]$
```

Рис. 4. Вивід консолі під час запуску задачі у систему HTCondor

```
CHTC:UW:submit-5 [nu_andrii ~]$ condor_q


-- Schedd: submit-5.chtc.wisc.edu : <128.104.101.92:9618?... @ 06/21/17 07:45:45
OWNER     BATCH_NAME                              SUBMITTED   DONE   RUN    IDLE  TOTAL JOB_IDS
nu_andrii CMD: moldynsub.20170621135209.script   6/21 07:44      _      1      _      1 46323587.0

1 jobs; 0 completed, 0 removed, 0 idle, 1 running, 0 held, 0 suspended
```

Рис. 5. Вивід консолі зі списком запущених задач HTCondor на кластері University of Wisconsin-Madison, США

На рис. 6 та 7 наведено приклад використання оновленої утиліти moldynsub_CLI для запуску завдань на обчислювальний кластер під керуванням PBS. Як видно з рис. 6, єдиний програмний інтерфейс користувача надає можливість запуску задач на обчислювальні ресурси під керуванням PBS в КНУ імені Тараса Шевченка, ІМБіГ та більшість локальних кластерів України.

```
[orda@localhost namd]$ moldynsub_CLI --software namd --infrastructure pbs
INFO: Generating proxy certificate for VO moldyngrid
Enter pass phrase for private key:
Your identity: /C=UA/O=KNU/OU=People/L=RPD/CN=Viktor Orda
Contacting VOMS server (named moldyngrid): voms.grid.org.ua on port: 15110
Proxy generation succeeded
Your proxy is valid until: 2017-06-22 04:09:43
Getting UUID for job from MolDynGrid portal...
Received UUID: eb21f9b4-5682-11e7-b05f-001a4a785603
Transfering job input data to srm://se.imbg.org.ua/pnfs/imbg.org.ua/data/moldyngrid/
mdsjobs/eb21f9b4-5682-11e7-b05f-001a4a785603
Uploading ionized_Mg.pdb:
|=================================================================================/|
Uploading ionized_Mg.psf:
|=================================================================================-|
Uploading Par_all27_prot_na.prm:
|=================================================================================/|
Uploading ionized.namd:
|=================================================================================/|
Sending executable to the Portable Batch System.
moldynsub.20170621160943.pbs                   100% 9143     8.9KB/s   00:00
Starting job.
2549407
[orda@localhost namd]$
```

Рис. 6. Вивід консолі під час запуску задачі у систему PBS

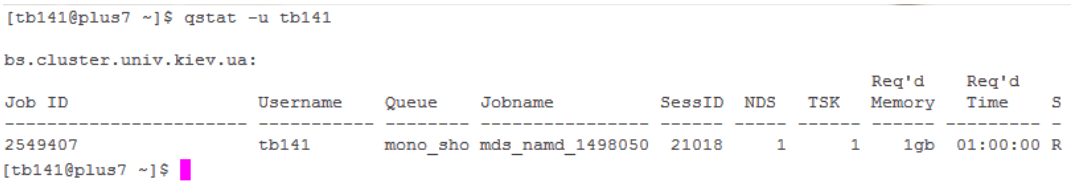


Рис. 7. Вивід консолі зі списком запущених задач PBS на обчислювальному кластері КНУ імені Тараса Шевченка

## 4. Висновки

Аналіз особливостей керування прикладним ПЗ у віртуальній лабораторії MolDynGrid дозволив визначити шляхи інтеграції гетерогенних обчислювальних ресурсів поза межами грід-інфраструктури до програмних засобів лабораторії.

Запропоновані методики автоматизації запуску задач розрахунку траєкторій молекулярної динаміки безпосередньо на обчислювальні кластери під управлінням систем HTCondor та PBS дозволили запровадити єдиний програмний інтерфейс для запуску задач у грід-інфраструктури та інші гетерогенні обчислювальні ресурси.

Реалізація запропонованих методик у складі програмних модулів moldynsub_CLI дозволила віртуальній лабораторії MolDynGrid використовувати обчислювальні ресурси кластерів, не під'єднаних до грід, зокрема, ресурси розподіленої обчислювальної інфраструктури HTCondor США.

Завдяки відокремленню етапу завантаження вхідних та вихідних файлів при роботі з інфраструктурою зберігання даних грід, запропоновані методики можуть бути адаптовані для використання інших обчислювальних ресурсів, у тому числі хмарних технологій.

## Подяка

Роботу підтримано грантами Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грід-технологій на 2009–2013 роки та комплексної цільової програми НАН України «Грід-інфраструктура, грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» 2014–2017 рр. Автори висловлюють подяку О.В. Савицькому за обговорення результатів.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Шайтан К.В. Метод молекулярной динамики [Электронный ресурс] / К.В. Шайтан, С.С. Сарайкин. – 1999. – Режим доступа: www.moldyn.ru/library/md.
2. Інтегроване середовище віртуальної лабораторії MolDynGrid для розрахунків молекулярної динаміки біополімерів / А.О. Сальніков, О.О. Судаков, О.В. Савицький [та ін.] // Медична інформатика та інженерія. – 2010. – № 1. – С. 24 – 33.
3. Virtual Laboratory as a part of Ukrainian Academic Grid infrastructure / A.O. Salnikov, I.A. Sliusar, O.O. Sudakov [et al.] // Proc. of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications, 2009. – P. 237 – 240.
4. Virtual laboratory MolDynGrid as a part of scientific infrastructure for biomolecular simulations / A. Salnikov, I. Sliusar, O. Sudakov [et al.] // International Journal of Computing. – 2010. – Vol. 9, N 4. – P. 294 – 300.
5. Savytskyi O.V. Asymmetric structure and domain binding interfaces of human tyrosyl-tRNA synthetase studied by molecular dynamics simulations / O.V. Savytskyi, S.O. Yesylevskyy, A.I. Kornelyuk // J Mol Recognit. – 2013. – Vol. 26, N 2. – P. 113 – 20.
6. Interdomain compactization in human tyrosyl-tRNA synthetase studied by the hierarchical rotations technique / S.O. Yesylevskyy, O.V. Savytskyi, K.A. Odynets [et al.] // Biophysical Chemistry. – 2011. – Vol. 154, N 2 – 3. – P. 90 – 98.
7. Crystal structure of a human aminoacyl-tRNA synthetase cytokine / X.-L. Yang, R.J. Skene, D.E. McRee [et al.] // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. – 2002. – Vol. 99, N 24. – P. 15369 – 15374.

8. Savytskyi O.V. Computational modeling of molecular dynamics of G41R mutant form of human tyrosyl-tRNA synthetase, associated with Charcot-Marie-Tooth neuropathy / O.V. Savytskyi, A.I. Kornelyuk // Ukr Biochem J. – 2015. – Vol. 87, N 6. – P. 142 – 53.
9. Computational modeling and molecular dynamics simulations of mammalian cytoplasmic tyrosyl-tRNA synthetase and its complexes with substrates / V.O. Kravchuk, V.O. Savytskyi, K.O. Odynets [et al.] // J Biomol Struct Dyn. – 2016 (у друці, DOI: 10.1080/07391102.2016.1235512).
10. High Throughput Computing [Електронний ресурс]. – Режим доступу: https://wiki.egi.eu/wiki/Glossary_V1#High_Throughput_Computing.
11. OSG Usage Graphs [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://display.grid.iu.edu/.

*Стаття надійшла до редакції 27.07.2017*