

АННОТАЦИЯ
научного доклада к.т.н. Н. Н. Никитиной
«Теоретико-игровые модели управления заданиями для виртуального скрининга
лекарств»

Создание новых лекарств представляет собой трудоемкую и времязатратную задачу. Современное развитие высокоточных компьютерных моделей органических молекул и процессов их взаимодействия в организме человека позволило перенести начальный этап разработки лекарства из пробирки («in vitro») в компьютер («in silico»), а значит, значительно снизить его продолжительность и стоимость.

В то же время, компьютеризованный перебор большого числа молекул для поиска лекарства требует привлечения инструментов высокопроизводительных вычислений. Одним из таких инструментов являются вычислительные системы типа Desktop Grid, объединяющие персональные компьютеры и другие неспециализированные вычислители и позволяющие обеспечить высокую производительность и масштабируемость при низкой стоимости.

Аппаратная и программная разнородность вычислительных узлов, а также неопределенности в их доступности и надежности оказывают существенное влияние на производительность системы Desktop Grid. В связи с этим, актуальной представляется разработка специализированных математических моделей и алгоритмов управления вычислительными ресурсами, учитывающих свойства решаемых задач.

В докладе представлены результаты исследований, связанных с построением математических моделей планирования заданий и их реализацией в вычислительной системе Desktop Grid для поиска лекарств.

Представлена теоретико-игровая математическая модель взаимодействия администратора системы и хозяев вычислительных узлов при проведении поиска лекарств в Desktop Grid. Показано, что предложенная модель позволяет существенно снизить нагрузку на сервер системы.

Представлена теоретико-игровая математическая модель взаимодействия вычислительных узлов при проведении поиска лекарств в Desktop Grid. Показано, что предложенная модель позволяет быстро получить множество химически разнообразных молекул – кандидатов в лекарства, необходимых для тестирования в лаборатории.

Для обеих моделей найдены принципы оптимального поведения участников вычислительного процесса. Разработаны алгоритмы управления вычислительными ресурсами на основе моделей. Описаны особенности программной реализации алгоритмов в Desktop Grid. Проиллюстрирована эффективность полученных моделей и алгоритмов на основе экспериментальных данных.