

УДК: 61.002.6:681.31(100)

ІНТЕГРОВАНЕ СЕРЕДОВИЩЕ АВТОМАТИЗАЦІЇ РОБОТИ З ВЕЛИКИМИ ОБ'ЄМАМИ ДАНИХ В ГРІД

А.О. Сальніков¹, О.О. Судаков^{1,2}, О.І. Корнелюк²

*Інформаційно-обчислювальний центр Київського національного університету
імені Тараса Шевченка¹*

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України²

Проаналізовано існуючі проблеми взаємодії програмного забезпечення та дослідників з Грід-середовищем. Запропоновано методики створення інтегрованого середовища автоматизації роботи з великими об'ємами даних в Грід. Методики реалізовано для автоматизації задач розрахунку молекулярної динаміки біологічних макромолекул. Інтегроване середовище впроваджено в віртуальній лабораторії MolDynGrid для автоматизації розрахунків для вирішення задач комп'ютерної структурної біології.

Ключові слова: Грід-технології, інтегроване середовище; веб-портал, віртуальна організація.

ИНТЕГРИРОВАННАЯ СРЕДА АВТОМАТИЗАЦИИ РАБОТЫ С БОЛЬШИМИ ОБЪЕМАМИ ДАННЫХ В ГРИД

А.О. Сальников¹, О.О. Судаков^{1,2}, А.И. Корнелюк²

*Информационно-вычислительный центр Киевского национального университета
имени Тараса Шевченко¹*

Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины²

Проанализированы существующие проблемы взаимодействия программного обеспечения и исследователей с Грід-средой. Предложена методика создания интегрированной среды автоматизации работы с большими объемами данных в Грід. Методики реализованы для автоматизации задач расчета молекулярной динамики биологических макромолекул. Интегрированная среда внедрена в виртуальной лаборатории MolDynGrid для автоматизации расчетов при решении задач компьютерной структурной биологии.

Ключевые слова: Грід-технологии; интегрированная среда; веб-портал, виртуальная лаборатория

INTEGRATED ENVIRONMENT OF AUTOMATIZATION OF WORK WITH GREAT VOLUMES OF DATA IN GRID

A.O. Salnikov¹, O.O. Sudakov^{1,2}, O.I. Kornelyuk²

*Information and Computer Center of Taras Shevchenko Kyiv National University¹
Institute of Molecular Biology and Genetics of NAS of Ukraine²*

Existing problems of interaction of the software and researchers with Grid-environment are analysed. The technique of creation of the integrated environment of automatization of work with great volumes of data in Grid is offered. Techniques are realised for automatization of problems of calculation of molecular dynamics of biological macromolecules. The integrated environment is introduced in virtual laboratory MolDynGrid for automatization of calculations at the solving of problems of computer structural biology.

Key words: Grid technologies, integrated environment, web-portal, virtual laboratory.

Вступ. Грід-технології є перспективним новітнім напрямком комп'ютерних технологій, який швидко розвивається і інтенсивно застосовується в різних галузях науки [1-3]. Грід визначається як "погодже-

не, відкрите і стандартизоване комп'ютерне середовище, яке забезпечує гнучке, скоординоване та безпечне розподілення комп'ютерних ресурсів в рамках віртуальної організації" [1, 2]. Останнім часом

© А.О. Сальніков, О.О. Судаков, О.І. Корнелюк

Грід-технології знайшли широке застосування в біологічних та медичних дослідженнях [4-7].

Ключовою концепцією Грід-технологій є створення віртуальної організації - групи розподілених територіально користувачів, які мають загальну мету і спільно використовують свої ресурси. Грід-середовище ідеально підходить для такого класу задач і відкриває нові перспективи для розвитку досліджень в даній галузі. Робота з Грід-середовищем має свою специфіку і потребує як адаптації роботи програмного забезпечення, так і спеціальних знань та навичок роботи від дослідника за межами предметної області його роботи. Для підвищення ефективності комп'ютерних обчислень необхідно створити комплекс засобів, що дозволить використовувати великі розподілені обчислювальні потужності та елементи збереження для розв'язання задач великої складності в рамках одного інтегрованого з Грід середовища.

Метою даної роботи є розробка методики побудови інтегрованого середовища, виходячи з вимог віртуальних організацій, що займаються інтенсивною обробкою даних. Робота реалізована на прикладі досліджень молекулярної динаміки біологічних макромолекул (білків, нуклеїнових кислот та їхніх комплексів) в рамках віртуальної лабораторії MolDynGrid (<http://moldyngrid.org>), створеної в Інституті молекулярної біології та генетики Національної академії наук України.

Основна частина

Автоматизація роботи з даними

Розподілена комп'ютерна обробка даних полягає в виконанні декількох послідовних алгоритмів одночасно. Використання багатьох обчислювальних вузлів дозволяє запустити на кожному з них окремий процес обробки і, відповідно, отримати прискорення обчислень в кількість разів, що рівна кількості вузлів, обробляючи декілька наборів даних одночасно. Для розподілених обчислень необхідні апаратна та програмна платформи, що надають засоби контролю та автоматизації розрахунків. При роботі з великими об'ємами даних апаратних потужностей одного кластера може виявитись недостатньо для ефективного та своєчасного отримання результатів. Використання Грід-технологій дозволяє збільшити доступні для дослідження обчислювальні потужності, проте значно ускладнює роботу, пов'язану з постановкою завдання на виконання та керуванням процесу. Виникає необхідність в автоматизації інтерфейсів роботи з Грід та створенні інтегрованого середовища для проведення повного циклу виконання обчислень. Об'єднання всіх необхідних компонент в єдине інтегроване середовище дозволяє забезпечити автоматизацію досліджень, а застосуван-

ня розподілених обчислень надає необхідні потужності для ефективної обробки великої кількості даних та їх збереження.

Віртуальна організація (ВО) - це динамічне об'єднання окремих користувачів, інститутів та ресурсів, які спрямовані на вирішення спільної проблеми чи класу проблем. Грід-технології дозволяють розв'язати такі задачі, як однозначна аутентифікація, авторизація, індикація ресурсів та обмеження доступу до них. Використання стандартних протоколів інтернет та моделі відкритих систем дозволяє вирішувати задачі авторизації та безпеки зв'язку стандартизованими методами. Грід працює як поєднувальна ланка між апаратними географічно розподіленими ресурсами, а для реалізації методик побудови Грід використовують проміжне програмне забезпечення (middleware).

Методики побудови архітектури Грід-систем створювались з метою забезпечення ефективної діяльності віртуальних організацій. Перш за все це можливість встановлювати відношення розподілу між будь-якими учасниками. При цьому необхідно забезпечити інтероперабельність різноманітних програмних та апаратних засобів. Для інформаційних систем таким критерієм є використання загальних протоколів, що застосовуються у кінцевих точках системи зв'язку під час обміну даними. Тому архітектура Грід базується в першу чергу на протоколах, що визначають базові механізми, за якими користувачі та ресурси ВО встановлюють, керують та використовують відношення розподілу.

В Грід використовуються стандартні та відкриті інтернет-протоколи на рівні зв'язку і інтерфейсів, що забезпечують такі фундаментальні моменти, як ідентифікація, авторизація і доступ до ресурсів. Архітектура цих протоколів в Грід може бути представлена багаторівневою моделлю, що наведена на рис. 1.

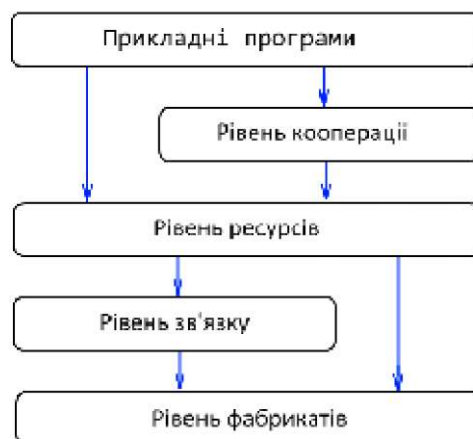


Рис. 1. Архітектура протоколів Грід.

Критерії побудови інтегрованого середовища.

Для вирішення задач, що працюють з великими об'ємами даних, можуть бути сформульовані наступні критерії побудови інтегрованого Грід-середовища. Першою вимогою є мобільність інтегрованого середовища. Насамперед це використання технологій, що не вимагають специфічного програмного забезпечення чи операційної системи на комп'ютері дослідника, надаючи можливість працювати в будь-якому середовищі. Для мобільності серверних компонент, їх реалізація має використовувати стандартні та відкриті протоколи, та виключати орієнтацію на певне програмне забезпечення. Для порталу необхідно створити єдиний механізм аутентифікації та авторизації користувачів. Інтегроване середовище, як частина Грід-інфраструктури, повинно будуватись на тих самих засадах і концепціях, що закладені в Грід. Персональним посвідченням користувача в Грід є його сертифікат, що може бути використаний в тому числі і для авторизації на порталі. Концепцією Грід, що закладена вже в його визначенні, є робота в рамках віртуальних організацій. Всі розглянуті середовища інтеграції з Грід працюють з окремими користувачами, жодним чином не враховуючи їх членство в віртуальних організаціях. Метою створення інтегрованого середовища є автоматизація роботи певної віртуальної організації, тому робота з ВО має бути закладена вже на рівні застосувань Грід.

Всі реалізації програмного забезпечення проміжного рівня працюють за принципом "single sign-on", авторизація в системі відбувається тільки один раз, а за допомогою делегацій служби взаємодіють між собою без запитів інтерактивних дій від користувача. Створення середовища, яке інтегрується в Грід як складова системи, повинно також наслідувати цей принцип, а саме, отримання делегації сервером порталу має відбуватися автоматично, без додаткових дій користувача після успішної авторизації.

Необхідно передбачити роботу порталу з різним програмним забезпеченням проміжного рівня, з можливістю підтримки нових версій. Прив'язка до вибраного програмного забезпечення значно обмежує сферу використання інтегрованого середовища. Найбільш гнучкою є технологія використання адаптерів, яка використовується в віртуальній лабораторії BioSimGrid [9].

Для проведення досліджень з великою кількістю інформації необхідна база даних, що забезпечить її структурування за параметрами досліджень.

Кожна задача в Грід має свій унікальний ідентифікатор. Процес виконання завдання відображається

в інформаційній системі за цим ідентифікатором. Множина даних про завдання, яку містить інформаційна система, не включає віртуальної організації. Якщо користувач бере участь в дослідженнях більш ніж одної віртуальної організації, то відрізнити задачі різних ВО засобами виключно інформаційної системи неможливо. Тому потрібен механізм, що надасть порталу можливість оперувати з завданнями окремої ВО. Не виключена розробка зовнішніх додатків, що використовуються віртуальною організацією для роботи з Грід. Необхідно передбачити інтерфейси для їх інтеграції з порталом в одне середовище.

В даній роботі створені методики побудови інтегрованого середовища, орієнтовані на структурування та роботу з великими об'ємами даних, що базуються на стандартних та відкритих протоколах зв'язку без використання специфічного програмного забезпечення, виконують інтеграцію з віртуальними організаціями на рівні застосувань Грід, надають інтерфейси постановки та керування розрахунками, передбачають взаємодію з зовнішніми додатками та дозволяють працювати з різним програмним забезпеченням проміжного рівня.

Методики побудови інтегрованого середовища.

Побудову інтегрованого середовища можна представити як задачу композиції набору компонент, що взаємодіючи один з одним досягають мети роботи порталу. Першим елементом, який необхідний для виконання будь-яких подальших операцій, є модуль авторизації користувачів.

Авторизація користувачів. При роботі в Грід-середовищі персональним посвідченням користувача є його сертифікат. Доступ до порталу здійснюється користувачем через веб-браузер, тому для роботи з сертифікатами необхідно використати протокол HTTPS. Протокол шифрує канал передачі, а також має можливість перевіряти цифровий підпис відповідно до бази даних кореневих центрів сертифікації на комп'ютері користувача. Таким чином, використання HTTPS- з'єднання з включеною опцією перевірки підпису клієнта сервером дозволяє однозначно встановити особу та забезпечити безпеку. Після проходження валідації засобами протоколу HTTPS виконується перевірка на членство в віртуальній організації. Такий підхід дозволяє вирішити проблему інтеграції з ВО на рівні застосувань Грід на першому етапі роботи. Для перевірки сервер порталу звертається до служби обліку користувачів віртуальних організацій (Virtual Organization Membership Service - VOMS), звіряючи DN користувача, що звертається до порталу з списком DN дійсних членів ВО.

Для реалізації інтерфейсів роботи з зовнішніми додатками необхідно передбачити механізм авторизації і для них. Будь-який додаток, що працює з Грід делеговано від імені користувача, але в жодному разі не містить в собі його приватний ключ, що не дозволяє використати перевірку за сертифікатом засобами виключно HTTPS протоколу. Ви-

користання проксі-сертифіката, як сертифіката клієнта також не підтримується стандартними засобами валідації HTTPS на стороні сервера, а зміни вихідного коду веб-сервера позбавлять розроблюване інтегроване середовище мобільності. Для вирішення цієї проблеми запропонована наступна методика (рис. 2):

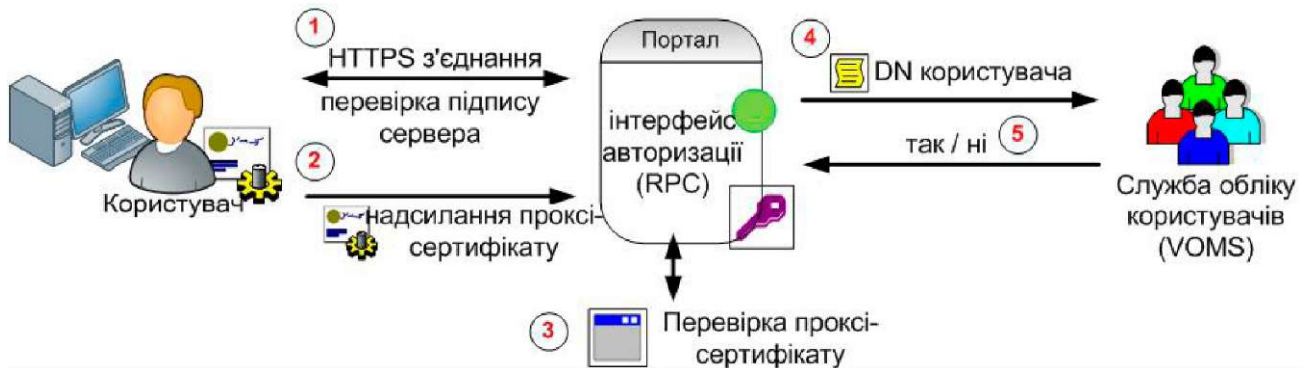


Рис. 2. Методика авторизації користувачів з віддаленим викликом процедур.

1. Встановлення HTTPS з'єднання без валідації підпису клієнта;

2. Методом POST по шифрованому каналу додатком надсилається проксі-сертифікат користувача;

3. Валідація проксі-сертифіката засобами SSL. Визначення DN користувача;

4. Перевірка членства у віртуальній організації на сервері VOMS.

Отримання делегації. Успішна авторизація на порталі дозволяє отримати доступ до інтерфейсів, що виконують операції з завданнями та файлами в Грід. Для роботи з Грід потрібна делегація - проксі-сертифікат, який генерується з персональних публічного та приватного ключів користувача. Проте в інтегрованому середовищі наявна інформація тільки про DN користувача, а необхідні для роботи ключі принципово не можуть бути передані на сервер з міркувань безпеки. Вимагати від користувача кожного разу генерувати та завантажувати проксі-сертифікат для постановки завдання неефективно при роботі з великою кількістю даних. Отримання делегації з сервера MyProxy за допомогою імені та паролю зменшує кількість додаткових дій користувача, але все-ще потребує інтерактивного втручання. Завдяки тому, що портал інтегрується як складова частина Грід-системи та має свій сертифікат, наступна методика роботи з MyProxy сервером дозволяє автоматизувати процес отримання делегації. Конфігурація сервера MyProxy дозволяє використати механізм "довірих отримувачів" (trusted retrievers). Довірений отримувач - сервер або людина (що ідентифікує себе

за допомогою персонального сертифіката), якому дозволено отримати делегацію без використання паролю. Засоби SSL перевіряють цифровий підпис клієнта при з'єднанні, гарантуючи валідність джерела запити.

Щоб дозволити інтегрованому середовищу автоматично отримувати делегацію, при завантаженні проксі-сертифіката до MyProxy користувач має зазначити DN порталу довіреним отримувачем. За допомогою інтерфейсу користувача UNIX необхідно виконати наступну команду:

```
myproxy-init -x --retrievable_by_cert <PORTAL DN> \
- dn_as_username -s <MYPROXY SERVER> \
-m <VO NAME>
```

Портал в свою чергу використовує DN користувача, що отримано модулем авторизації і звертається до сервера MyProxy. При умові, якщо проксі-сертифікат користувача завантажений на сервер MyProxy і портал є довіреним отримувачем, процес автоматичного отримання делегації завершиться успішно, в протилежному випадку буде видано повідомлення про помилку (рис. 3).

Модуль отримання делегації буде прозоро викликано кожного разу, коли необхідно звернутися до інших елементів Грід від імені користувача.

Формування задачі для виконання. Слідування алгоритму виконання розрахунку є необхідним для роботи з завданнями Грід. Виконується наступна послідовність етапів, що автоматично керовані інтерфейсом командного рядка та службами Грід:

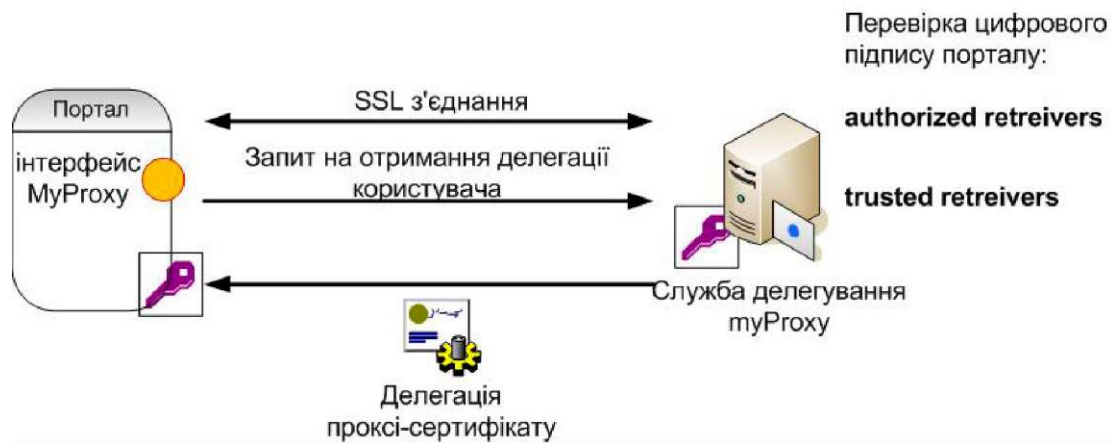


Рис. 3. Автоматичне отримання делегації порталом.

1. Підготовка вхідних файлів та параметрів додатка, що буде використовуватись для проведення досліджень;

2. Створення файлу опису завдання для Грід та виклик інтерфейсу командного рядка програмного забезпечення проміжного рівня;

3. Інтерфейс командного рядка звертається до служби інформації, для визначення обчислювального елемента що відповідає вимогам задачі;

4. Інтерфейс командного рядка надсилає всі необхідні файли завдання до обраного обчислювального елемента;

5. Виконання розрахунку на обчислювальному елементі;

6. Під час виконання розрахунку обчислювальний елемент робить записи в інформаційній системі про стан завдання;

7. Після завершення виконання обчислень вихідні файли розміщуються на елементі збереження;

8. Запис про нові файли на елементі збереження додається до каталогу файлів Грід.

Після надсилання завдання до обчислювального елемента кожна задача отримує свій унікальний ідентифікатор (JobID), за яким дослідник має відслідковувати її стан, використовуючи інтерфейс командного рядка до інформаційної системи. При роботі з великими об'ємами даних проведення обчислень вимагатиме від користувача зберігати та упорядкувати ідентифікатори, і це ще один момент, що потребує автоматизації.

Портал виступає як управляюча ланка, що стоїть між користувачем та обчисленнями. Враховуючи вищенаведений аналіз, для формування задачі необхідними є три інтерфейси:

1. Інтерфейс підготовки вхідних файлів та параметрів;

2. Інтерфейс до програмного забезпечення проміжного рівня Грід;

3. Інтерфейс до бази даних порталу.

Завданням інтерфейсу підготовки вхідних файлів та параметрів є інтерактивне опитування користувача про можливі варіанти постановки завдання, результатом якого є створення файлів параметрів та опису завдання. Для досягнення найбільш гнучкої взаємодії інтерфейсу з іншими компонентами порталу створюється саме файл з параметрами, який обробляється відповідним адаптером, що створено для кожного додатка. Використання адаптерів дозволяє працювати з різними додатками, створюючи виключно нові інтерфейси підготовки вхідних файлів, залишаючи інші компоненти порталу незмінними.

Інтерфейс до програмного забезпечення проміжного рівня також представляється набором адаптерів, що забезпечують роботу з Грід, викликаючи відповідні інтерфейси командного рядка. База даних порталу призначення для автоматичного упорядкування інформації та збереження зв'язків між даними та параметрами задачі, її ідентифікатором в процесі виконання, та знаходженням вихідних файлів у системі збереження. Всі елементи які мають відношення до процесу обрахунку одного завдання пов'язані один з одним через базу даних.

Методика формування задачі для виконання за допомогою порталу представлена на рисунку 4. Для проведення розрахунків користувач повинен виконати наступні дії:

1. Користувач проходить авторизацію на порталі (модуль авторизації);

2. Використовується інтерфейс формування вхідних файлів та параметрів;

3. Для того, щоб розпочати використання інтерфейсу до програмного забезпечення проміжного рівня

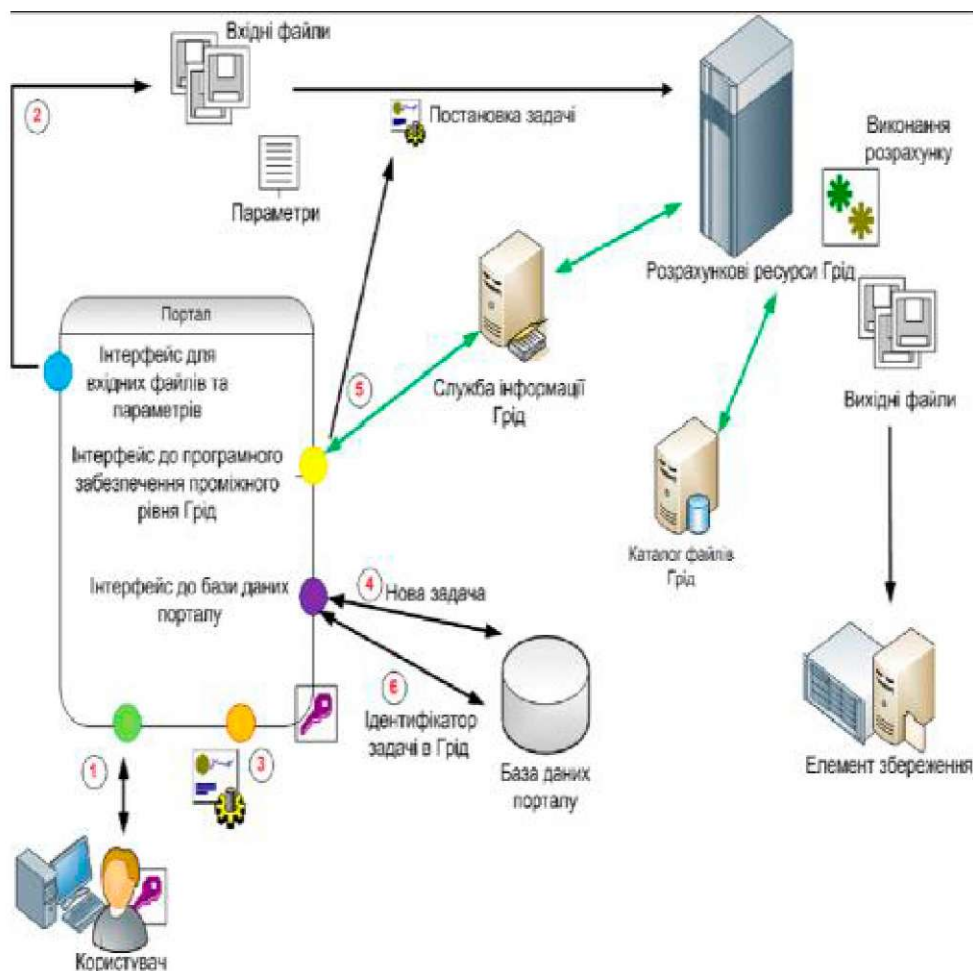


Рис. 4. Методика формування задачі для виконання за допомогою порталу.

отримується делегація з серверу МуРгоху (модуль отримання делегації);

4. Створюється запит в базі даних порталу про нову задачу та її параметри;

5. Інтерфейс до програмного забезпечення проміжного рівня виконує постановку завдання;

6. До бази даних порталу розміщується інформація про ідентифікатор завдання.

Віддалений виклик процедур. Для обчислень в рамках певної віртуальної організації можлива ситуація, коли необхідно використати додатки, які не є безпосередньо вбудованими в веб-портал. Для забезпечення інтеграції їх в єдине середовище необхідний інтерфейс, який надасть можливість обмінюватись інформацією з базою даних та іншими інтерфейсами порталу для подальшого централізованого моніторингу та керування. Робота зовнішніх додатків базується на реалізації певних кроків алгоритмів роботи з Грід. Виконання інших етапів алгоритму можна проводити за допомогою порталу через методику віддаленого виклику процедур (рис. 5).

Додаток має встановити HTTPS з'єднання з сервером порталу. В тілі запиту POST передається проксі-сертифікат користувача, ім'я віддаленої процедури та її параметри. Отриманий проксі-сертифікат перевіряється інтерфейсом авторизації, після чого процедура виконується.

Взаємодія з інформаційною системою Грід. Інформація в Грід є динамічною, при цьому кожен обчислювальний елемент та елемент збереження періодично оновлюють інформацію про завдання та параметри (наприклад вільні процесори, вільний дисковий простір тощо.) Портал, як елемент Грід-середовища, повинен отримувати цю динамічну інформацію. Тривалість процесу опитування інформаційної системи залежить від кількості елементів в Грід і може тривати достатньо довго. Використання безпосереднього опитування інформаційної системи кожного разу, коли користувач бажає отримати інформацію про стан завдання, створить затримки в роботі інтерфейсу і при обробці великої кількості даних є незручним.

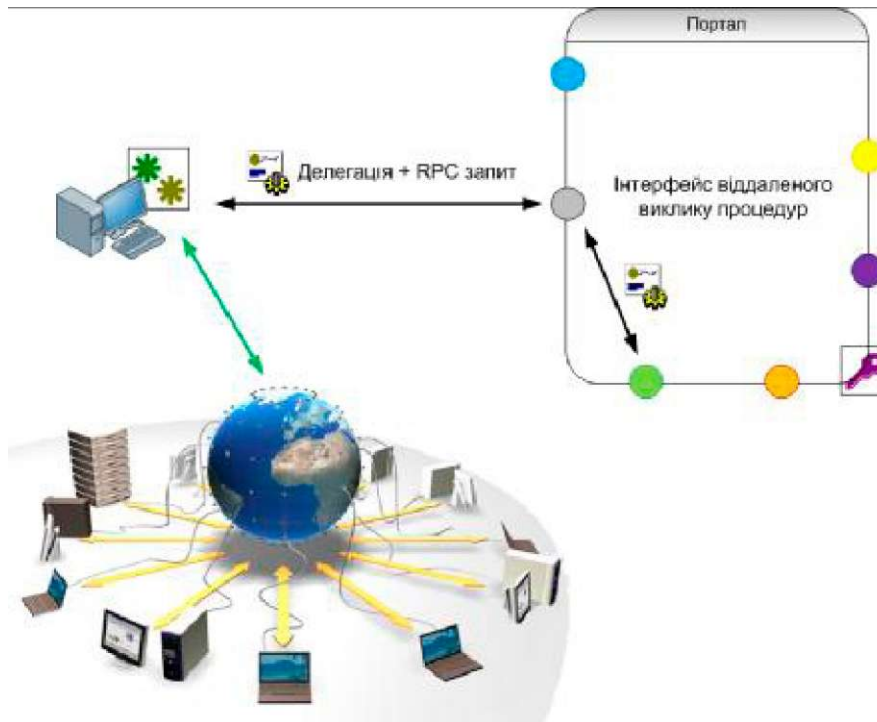


Рис. 5. Методика віддаленого виклику процедур.

Враховуючи час оновлення інформаційної системи, доцільним є використання служби періодичного запуску завдань. При обиранні періоду часу мен-

шим за час оновлення (3 хв), виконується алгоритм роботи з інформаційною системою, зображений на рис. 6:

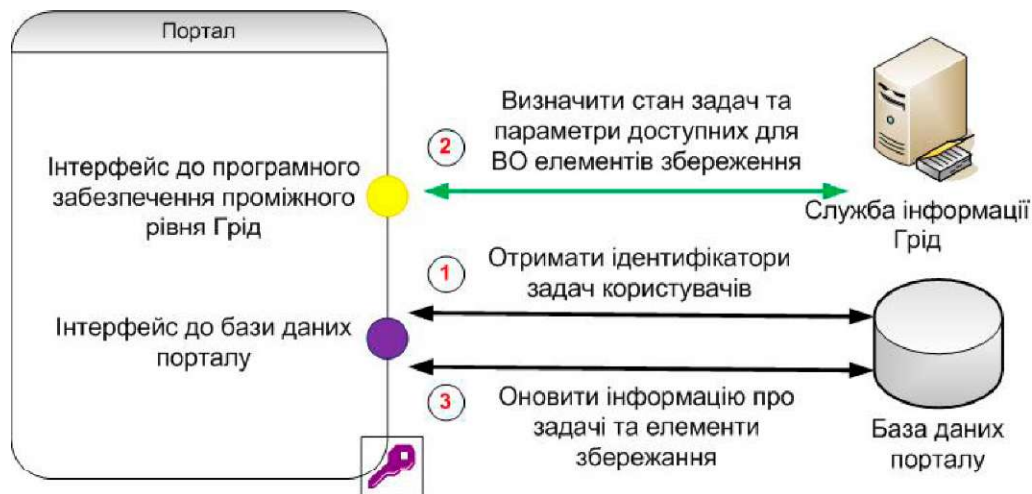


Рис. 6. Алгоритм роботи з інформаційною системою.

1. З бази даних отримується перелік ідентифікаторів поточних завдань;

2. Опитується інформаційна система про стан завдань за ідентифікаторами та параметри елементів збереження;

3. Оновлюється інформація в базі даних про задачі та елементи збереження.

У випадку, коли необхідно отримати інформацію про завдання, система керування та моніторингу звертається до локальної бази даних, а не опитує інфор-

маційну систему Грід, що значно підвищує ефективність.

Керування завданнями. Під час розрахунку задачі необхідним є інтерфейс для моніторингу та керування її станом. До дій над виконуваною задачею відносяться: видалення задачі, зупинка виконання задачі, перегляд журналів стандартного виводу та потоку помилок. Всі ці дії виконуються за допомогою інтерфейсу до програмного забезпечення проміжного рівня Грід. Завершені завдання також потребують інтерфейсу для

взаємодії з користувачем, це такі операції, як перегляд та отримання вихідних файлів завдання та публікація результатів. Публікація результатів - процес надання доступу до отриманих результатів іншим користувачам, що працюють в віртуальній лабораторії. Розподіл обчислень одного дослідника і публікації результатів для всієї ВО є необхідним при інтенсивній обробці да-

них. Для того щоб фільтрувати непотрібну інформацію, база даних корисних результатів відокремлюється від бази даних усіх задач, і запис до неї проводиться виключно після свідомих дій дослідника - публікації власних результатів.

Загальна схема методики керування завданнями зображена на рис. 7:

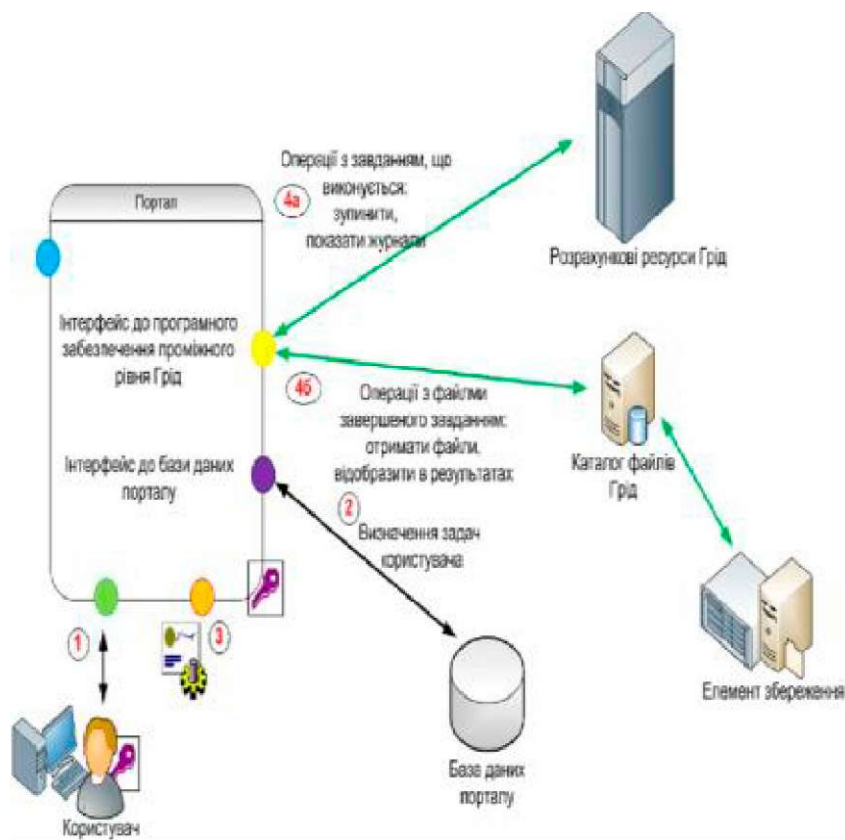


Рис. 7. Методика керування завданнями.

1. Користувач проходить авторизацію на порталі;
2. З бази даних порталу отримується список задач користувача;

3. Інтерфейс отримання делегації завантажує проксі-сертифікат з серверу MyProxy;

4а. За допомогою адаптерів інтерфейсу роботи з програмним забезпеченням проміжного рівня Грід виконуються операції над завданням на обчислювальному елементі;

4б. За допомогою адаптерів інтерфейсу роботи з програмним забезпеченням проміжного рівня Грід виконуються операції над файлами завдання на елементі збереження та в каталозі файлів.

Методики побудови інтегрованого середовища були успішно реалізовані в рамках віртуальної лабораторії MolDynGrid (<http://moldyngrid.org>) [10-11]. Віртуальна лабораторія MolDynGrid створена в 2008 р. для вирішення задач в галузях структурної біології і біо-

інформатики, які потребують значних витрат машинного часу та оперують великими об'ємами інформації. Мета створення лабораторії полягає в розробці ефективної інфраструктури для проведення *in silico* розрахунків молекулярної динаміки біологічних макромолекул у водно-іонному оточенні в часовому інтервалі до 100 нс. MolDynGrid є частиною проекту розвитку Грід-сегмента Національної академії наук України на базі обчислювальних кластерів.

Проблема побудови інтегрованого середовища є актуальною і вирішувалась також в інших віртуальних організаціях [12-13], в тому числі при створенні DrugScreener-G для віртуального скринінгу та дизайну нових лікарських препаратів з використанням Грід-технологій [12].

Висновки. Проведено аналіз існуючих проблем взаємодії програмного забезпечення та дослідників при використанні великих розподілених обчислюваль-

них потужностей та елементів збереження даних в Грід-середовищі. Запропоновано методики створення інтегрованого середовища автоматизації роботи з великими об'ємами даних в Грід. Методики успішно реалізовані для автоматизації задач розрахунків молекулярної динаміки біологічних макромолекул. Інтегроване середовище впроваджено в віртуальній

лабораторії MolDynGrid для автоматизації розрахунків для вирішення задач комп'ютерної структурної біології.

Подяка. Робота підтримана грантом програми "Впровадження Грід-технологій і створення кластерів в НАН України" Національної академії наук України.

Література

1. Foster I., Kesselman C. *The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure*. Second Edition. Elsevier, 2003.
2. Foster I. *The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations* / Foster I., Kesselman C., Tuecke S. // *International Journal of High Performance Computing Applications*. - 2001. 15, № 3. - P. 200-222.
3. Загородній А.Г. Грід - нова інформаційно-обчислювальна технологія для науки / Загородній А.Г., Зіновьев Г.М., Мартинов С.С., Свистунов С.Я., Шадура В.Н. // *Вісник НАН України*. - 2005. - № 6. - С. 17-25.
4. Корнелюк О.І. Сучасні комп'ютерні Грід-технології та їх застосування в медичних дослідженнях / Корнелюк О.І., Мінцер О.П. // *Медична інформатика та інженерія*. - 2008. - Т. 1, № 1. - С. 23-29.
5. Oliveira I.C. A Grid requirements for the integration of biomedical information resources for health applications / Oliveira I.C., Oliveira J.L., Sanchez J.P., Lypez-Alonso V., Martin-Sanchez F., Maojo V., Sousa Pereira A. // *Methods Inf. Med.* - 2005. - Vol. 44, № 2. - P. 161-167.
6. Breton V. *Innovative in silico approaches to address avian flu using grid technology* / Breton V., da Costa A.L., de Vlieger P., Kim Y.M., Maigne L., Reuillon R., Sarramia D., Truong N.H., Nguyen H.Q., Kim D., Wu Y.T. // *Infect. Disord. Drug Targets*. - 2009. - Vol. 9, № 3. - P. 358-365.
7. Konagaya A. *Trends in life science grid: from computing grid to knowledge grid* / Konagaya A. // *BMC Bioinformatics*. - 2006. - Vol. 18, № 7, Suppl 5. - P. 10.
8. Roman I. Improving healthcare middleware standards with semantic methods and technologies / Roman I., Calvillo J., Roa L.M., Madinabeitia G. // *Stud, Health Technol. Inform.* - 2008. - Vol. 137. - P. 181-189.
9. Tai K. *BioSimGrid: towards a worldwide repository for biomolecular simulations* / Tai K., Murdock S., Wu B., Ng M.H., Johnston S., Fangohr H., Cox S.J., Jeffreys P., Essex J.W., Sansom M.S. // *Org. Biomol. Chem.* - 2004. - Vol. 2, № 22. - P. 3219-3221.
10. Salnikov A.O. *Implementing the File Storage System in the Ukrainian Academic Grid Infrastructure* / Salnikov A.O., Sliusar I.A., Sudakov O.O., Boyko Yu V., Kornelyuk O.I. // *Abstracts of 21th International CODATA Conference "Scientific Information for Society-from Today to the Future"*. - 2008. - P. 31.
11. Salnikov A.O. *MolDynGrid Virtual Laboratory as a part of Ukrainian Academic Grid infrastructure* / Salnikov A.O., Sliusar I.A., Sudakov O.O., Savytskyi O.V., Kornelyuk O.I. // *Proceedings of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications*. - 2009. - P. 59-63.
12. Kim B.G. *Drug Screener-G: Towards an Integrated Environment for Grid-Enabled Large-Scale Virtual Screening and Drug Discovery* / Kim B.G., Nhan N.D., Lee S., Hwang S., Breton B. // *Fourth IEEE International Conference on eScience*. - 2008. - P. 666-671.
13. Jin H. *Components and workflow based Grid programming environment for integrated image-processing applications* / Jin H., Zheng R., Zhang Q., Li Y. // *Concurrency and Computation: Practice and Experience*. - 2006. - Vol. 18, № 14. - P. 1857-1869.