

# Эволюция компьютерных систем: новые возможности и вызовы

Шульга Д.А., Палюлин В.А., Зефиоров Н.С.

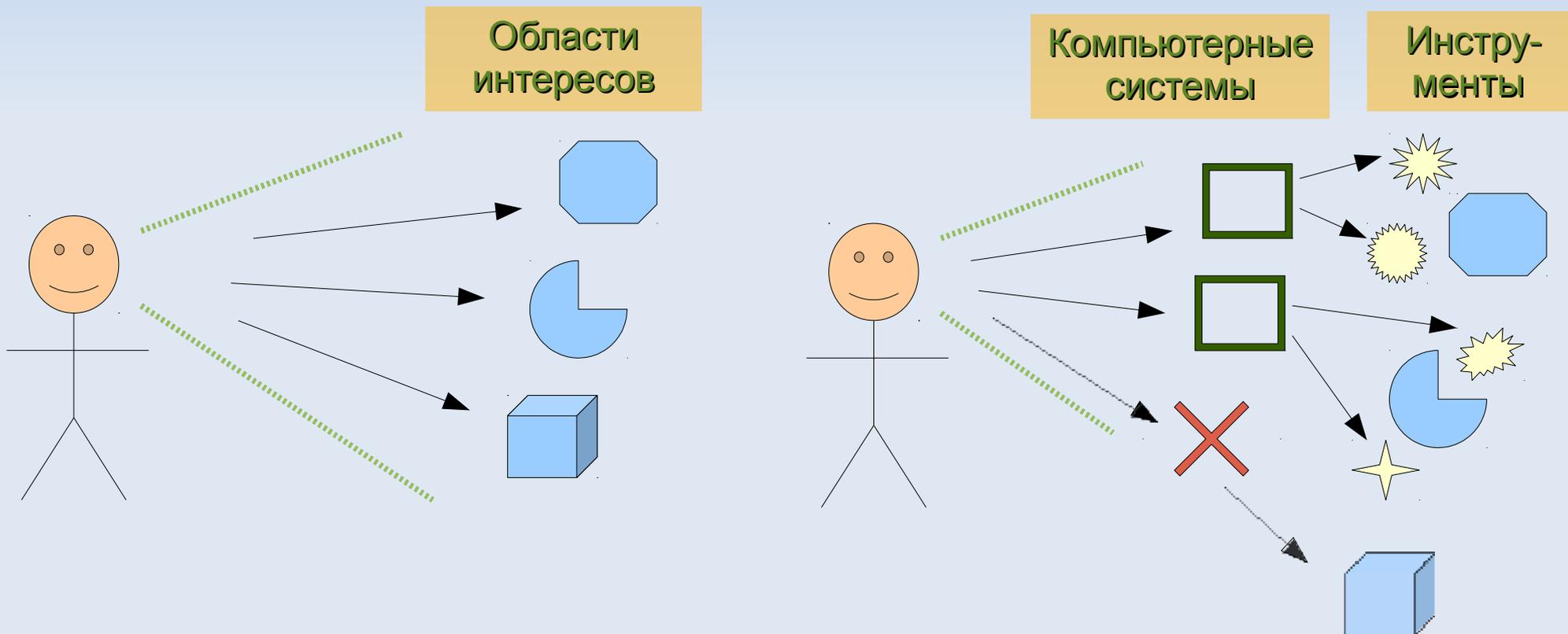
*Химический факультет МГУ  
им. М.В. Ломоносова*

г. Таруса

2011

# Традиционное устройство КОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ

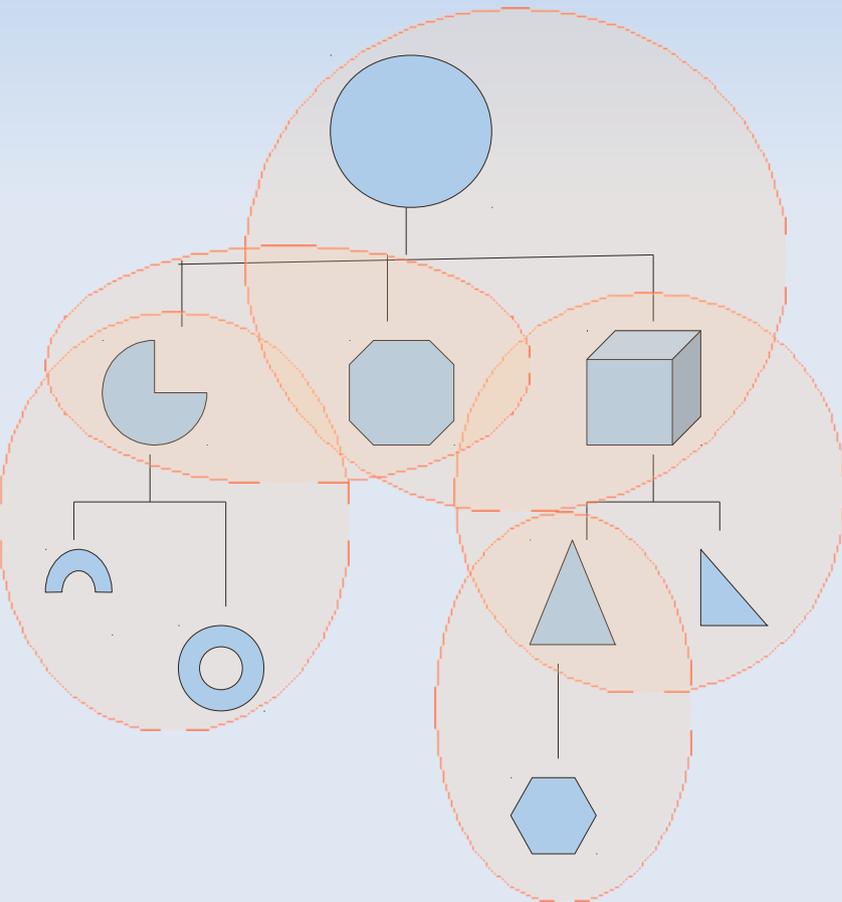
*Умный, высокоспециализированный инструмент!*



*Аналитический подход*

# Традиционное устройство КОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ

*Декомпозиция задачи на специализированные области с «каноническим» решением или подходом к нему*

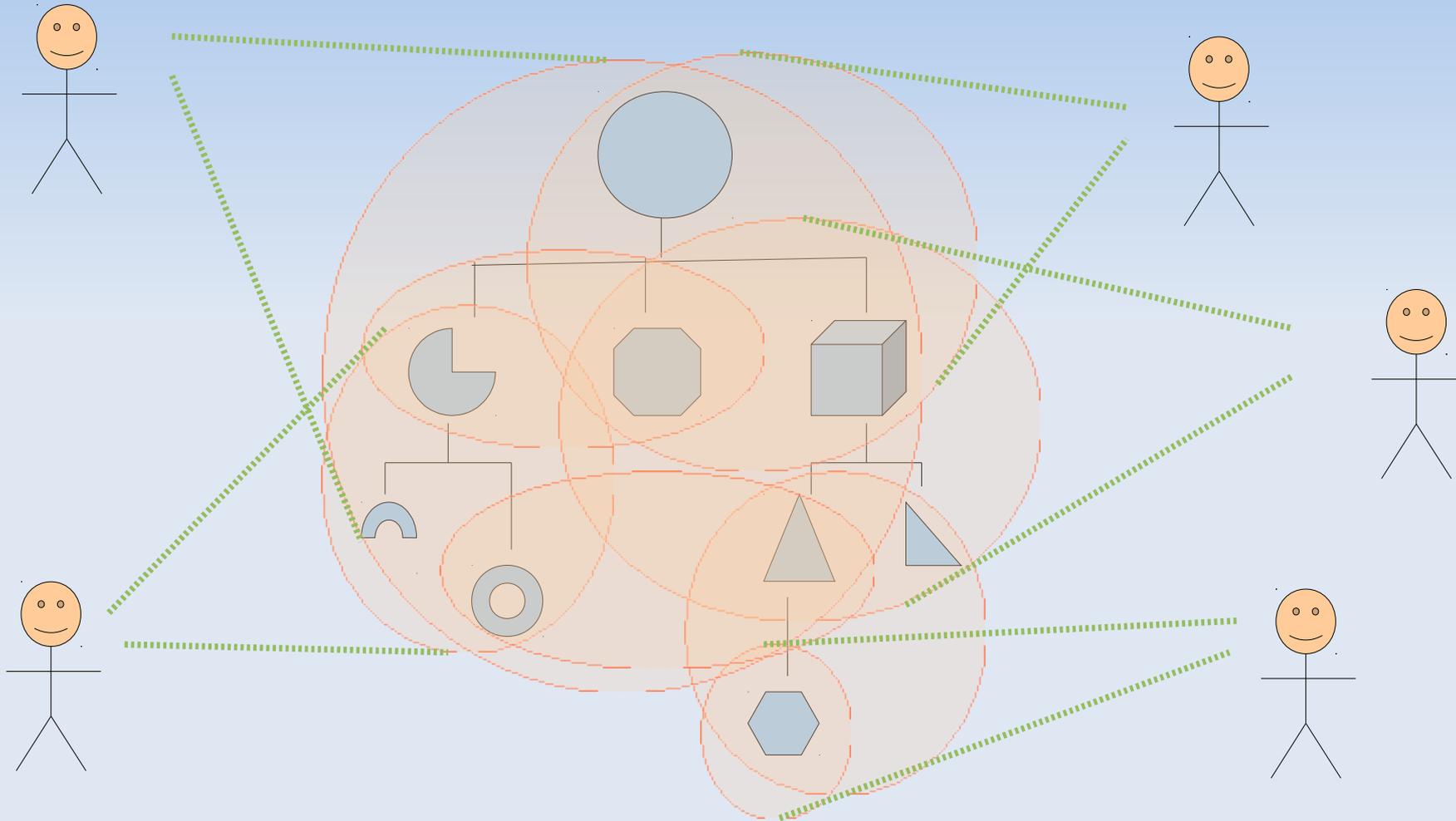


- ✓ В каждой области важны 2-3 фактора
- ✓ Обратная связь минимальна

# Новые вызовы времени

- ✓ Задачи междисциплинарные (на стыке традиционных дисциплин)
- ✓ Многоуровневые (время, масштаб)
- ✓ Одновременная важность многих факторов
- ✓ Мощный поток информации (нет единственного/идеального решения)

# Новая идеология



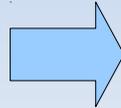
*Системный, сетевой подход*

Примеры: коллайдер,  
космос, даже военка!

# Ответ на вызовы

*Сдвиг идеологии:*

Узкоспециализированный  
закрытый  
инструмент

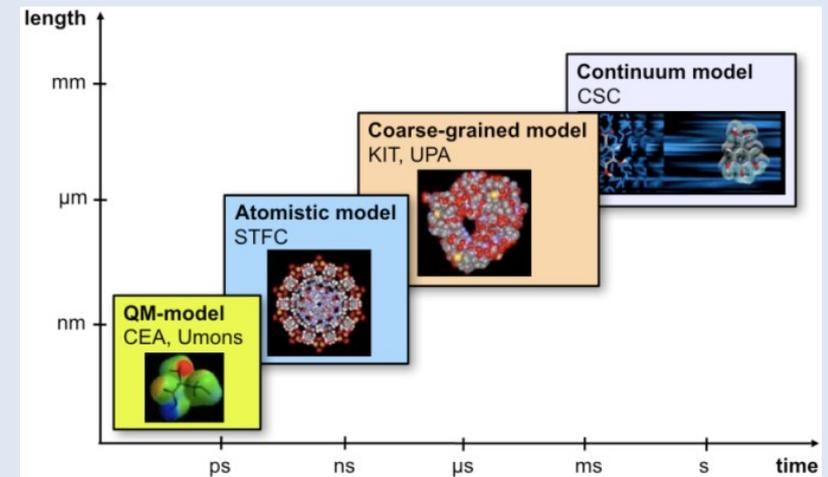
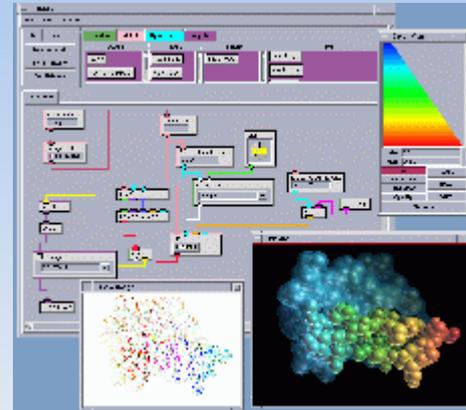


Среда для  
исследования и  
эксперимента

- ✓ Аналогия: расширенная мастерская (лаборатория)
- ✓ Акцент на интеграции (возможных) инструментов
- ✓ Возможность создания/организации/изменения процессов: микроконвейеры
- ✓ Быстрое прототипирование
- ✓ Организаторский опыт, сообщества, центры компетенции

# Примеры

- ✓ ADT Vision
- ✓ Многомасштабные среды
- ✓ Интегрированная линейка продуктов в фармацевтических стартапах
- ✓ MATLAB и др.
- ✓ ...и многие другие

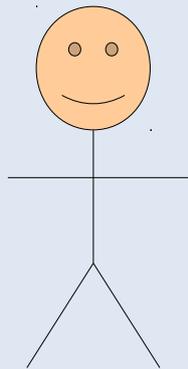


# Гибкость (возможности)

- ✓ Создание базисных «кирпичиков» со стандартными интерфейсами
- ✓ Обеспечение заведомой интеграции (системный анализ)
- ✓ Гибкость и легкость соединения кирпичиков в конструкции (скриптовые возможности)
- ✓ Глобальная интеграция и стандартизация (облачные вычисления, SaaS, OpenDocument, etc.)

# Сложности входа (вызовы)

- ✓ Крутизна кривой обучения для любого специалиста (разделы науки, технология, программирование)
- ✓ Мобилизация творческого подхода
- ✓ Ответственность за множественный выбор



*Свобода и творчество не даются легко!*

# Следствия для ПО

- ✓ Массированное использование скриптовых возможностей
- ✓ Бизнес модель: свободное ПО, плата за обучение и компетенцию
- ✓ Среда активных и разнородных пользователей (сообщества)
- ✓ Средства для организации процесса общения в разнородной команде

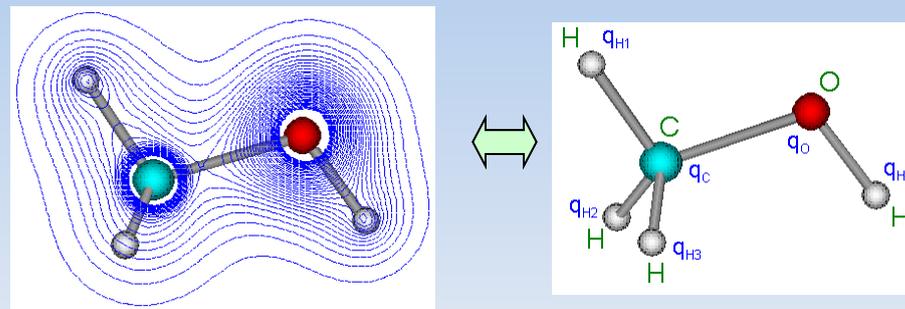
# Наши примеры

- ✓ Комплекс для расчета эмпирических атомных зарядов и оптимизации их параметров
- ✓ Визуализация молекулярных полей (ВизМП/VizMF)

# Комплекс для расчета эмпирических атомных зарядов и оптимизации их параметров

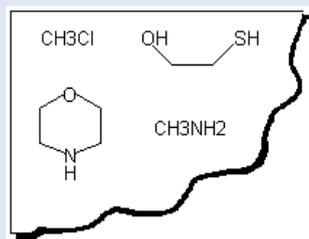
Заряды на атомах — быстрое описание электростатических взаимодействий

Параметры эмпирического метода — электроотрицательность и жёсткость атома

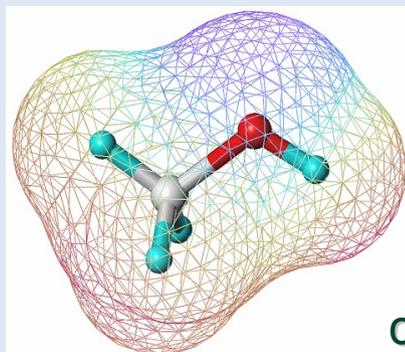


Воспроизведение МЭП — мера качества зарядов.

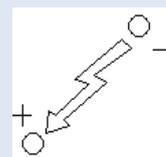
227 structures



QC MEP calculation  
RHF/6-31G (1p)



$V^{qc}$



Charge calculation with current parameter values

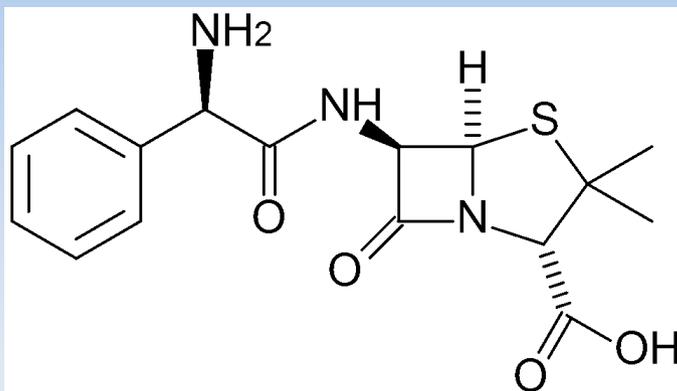
Simplex Annealing iterations

$\delta\chi_M, \delta\eta_M$

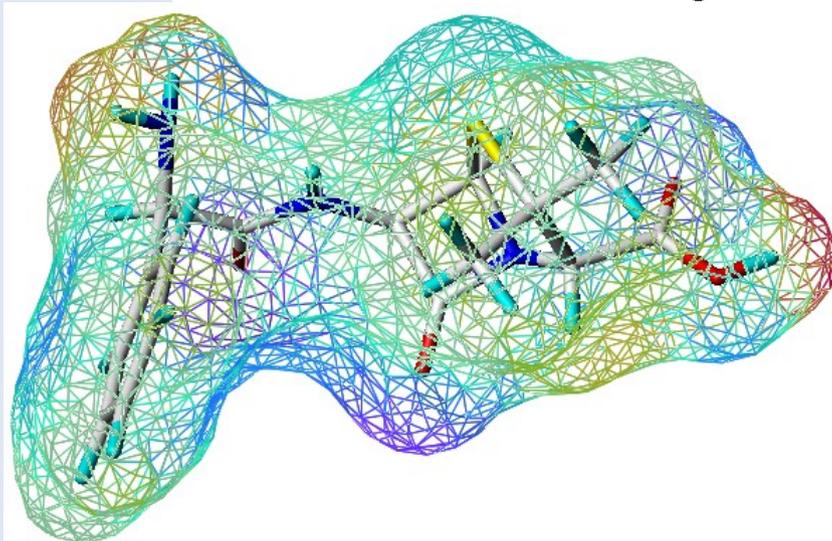
$F(\chi^0, \eta^0) \rightarrow \min$

# Комплекс для расчета эмпирических атомных зарядов и оптимизации их параметров

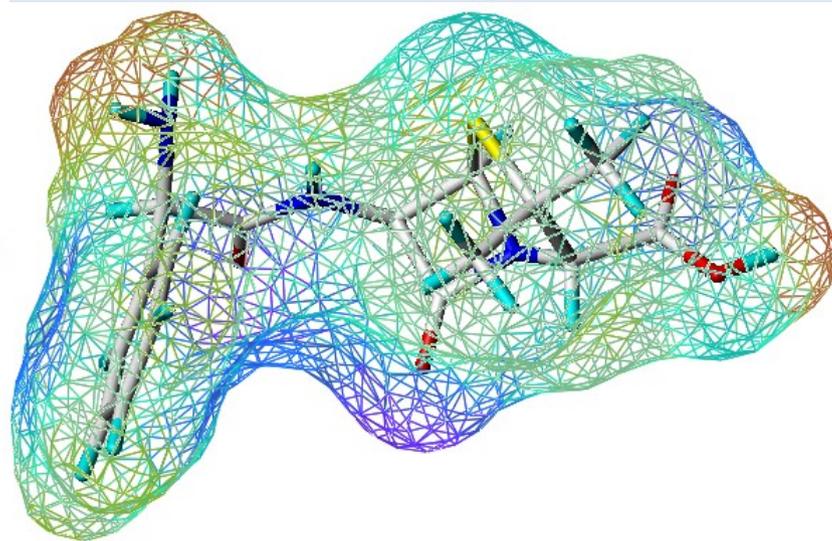
Результаты



Воспроизведение МЭП на поверхности молекулы ампициллина



RESP

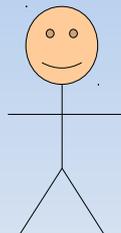


ДРЭО

10 час. на ПК

0.01 сек. на ПК

# Комплекс для расчета эмпирических атомных зарядов и оптимизации их параметров



- **Пользователь:** заряды для прикладного моделирования
- **Разработчик:** среда для подбора параметров метода

## *Возможности комплекса*

- ✓ Несколько методов расчета зарядов
- ✓ Несколько целевых функций для оптимизации
- ✓ Несколько алгоритмов оптимизации
- ✓ Параметры запуска в виде текстового файла
- ✓ Расчет дипольных и квадрупольных моментов

# Визуализация молекулярных полей

- ✓ **Цели:** среда визуализации МЭП для дальнейшей разработки зарядовых методов
- ✓ **Основные принципы**
  - Кросс-платформенность (Qt, C++)
  - Модульность / настраиваемость
  - Интерфейс к расчетным методам
- ✓ **Текущая разработка:** готов начальный проект системы, готовится выпуск версии 0.1
- ✓ **Перспективы:** скриптовые связки для методов-кирпичиков

# Выводы

## *Вызовы времени*

- ✓ Междисциплинарность, многофакторность, иерархичность современных задач
- ✓ Гигантский объем информации (мало ценной)

## *Ответ ПО — среда для работы*

- ✓ Возможности: гибкость, творческая реализация
- ✓ Плата: сложность входа, междисциплинарность, ответственность за множество решений

## *Бизнес*

- ✓ ПО свободное
- ✓ Накопление и умножение компетенции
- ✓ Деньги за компетенцию

**Спасибо за внимание!**