

УДК 004.75

С.Д. Погорілий, д-р техн. наук, проф.,
Ю.В. Бойко, к.ф.-м.н., доцент,
А.О. Сальніков, к.т.н., асистент,
Є.А. Слюсар к.т.н., асистент,
О.Ф. Борецький, асистент
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
grid@grid.org.ua

Попереднє конфігурування та формування образів віртуальних машин запусчених як ґрід-завдання

Розглянуто особливості використання спеціалізованого прикладного програмного забезпечення у науково-дослідних ґрід-проектах. Описано особливості використання комплексу програмного забезпечення Rainbow для виконання прикладного програмного забезпечення у віртуальних машинах запусчених як ґрід завдання. Запропоновано методи формування, конфігурування образів віртуальних та встановлення потрібного прикладного програмного забезпечення перед запуском віртуальної машини

Ключові слова: ґрід, віртуальна машина, Rainbow, прикладне програмне забезпечення, Windows, GNU/Linux, Docker

DOI: 10.31474/1996-1588-2017-2-25-90-97

Вступ

Для вирішення сучасних ресурсоємних науково-дослідних задач в різних галузях науки і техніки в Україні побудовано академічний ґрід-сегмент, розвинутий до національного масштабу який формує понад 30 кластерів у провідних науково-дослідних інститутах та університетах [1]. У порівнянні з іншими країнами світу характерною особливістю українського національного ґрід є використання ґрід-технологій в різних галузях науки - фізиці, хімії, біології, астрономії, медицині, тощо, тоді як більшість Європейських ґрід-інфраструктур зосереджені лише на задачах фізики високих енергій великого різних експериментів адронного коллайдера [2].

Переважна більшість проектів використовує власне спеціалізоване прикладне програмне забезпечення яке для певних потреб потребує графічного інтерфейсу розроблене виключно під певне сімейство операційних систем(ОС) та потребує наявності інтерактивного доступу до нього.

У роботі [5] було запропоновано використати ґрід-інфраструктуру як платформу для віртуалізації. Даний підхід передбачає у звичайних ґрід-завданнях запуск віртуальних машин з апаратним прискоренням та контейнерних машин, що в свою чергу дозволяє створити ізольоване, контрольоване середовище для запуску спеціалізованого прикладного програмного забезпечення. Однак потребує методів та засобів які дозволять динамічно налаштувати та модифікувати образи віртуальних машин перед їх використанням.

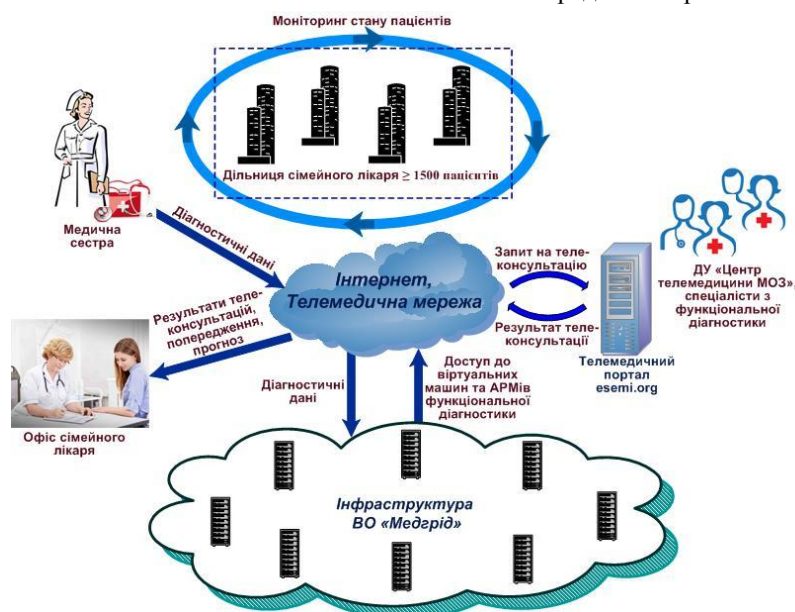


Рисунок 1 - Архітектура сервісу телемедичних консультацій

Особливості використання прикладного програмного забезпечення у науково-дослідних ґрід-проектах

Одним з найбільших ґрід-проектів який динамічно розвивається в Україні в області медицини є проект «Медґрід» [3]. На першому етапі розвитку проекту було вирішено завдання накопичення великих об'ємів медичних даних в ґрід-інфраструктурі для їх надійного збереження. Дані, що потрапляють до ґрід-інфраструктури через спеціалізований веб-портал автоматично реплікуються поміж різними сховищами даних за допомогою сервісу РАПТОР [4].

На актуальному етапі розвитку проекту виконується аналіз популяційні дослідження на основі кардіологічних та спірометричних аналізів також проводиться в ґрід-інфраструктурі. Якісний аналіз медичних досліджень потребує інтерактивного аналізу за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення для ОС Windows в інтерактивному режимі та з візуалізацією. Для вирішення даного завдання було розроблено комплекс програмного забезпечення Rainbow, що реалізує парадигму платформа-як-сервіс в ґрід, та дозволяє забезпечує інтерактивний доступ до віддаленого робочого столу віртуальної машини, що працюють як ґрід-задачі [5].

Наступним кроком інтерактивного аналізу медичних даних є проведення відкладених медичних консультацій для первинної ланки надання медичної допомоги рис.1. Розробка пілотного сервісу, що реалізує платформу для телемедицини з використанням ресурсів УНГ та Rainbow є актуальною задачею, що активно розв'язується проектом [6].

З робочого місця лікаря першої ланки надання медичної допомоги здійснюється надсилання деперсоналізованих медичних досліджень до сервісу накопичення медичних даних у ґрід-інфраструктурі, який забезпечує їх надійне зберігання.

Для надання консультації розробляється сервіс який дозволить, у разі потреби надання відкладених телемедицини консультацій, створювати віртуальну машину, запущену як ґрід-задача, з даними для аналізу та візуалізації, доступ до якої лікарю-діагносту надається засобами віддаленого робочого столу.

Ефективне проведення відкладених консультацій потребує застосування різних наборів пакетів програмного забезпечення (ППЗ) в одній віртуальній машині для різних типів діагностичних даних. На даний момент для кожного пакету діагностичного програмного забезпечення, що використовується в проекті «Медґрід», створено окремі образи віртуальних машин.

Даний підхід передбачає окремі образи віртуальних машин для кожного набору прикладного програмного забезпечення або відповідних комбінацій, що потребує великого об'єму для збереження всіх образів віртуальних машин і ускладнює їх обслуговування.

Іншим українським ґрід-проектом який динамічно розвивається є проект віртуальної лабораторії MolDynGrid який підтримується більшістю обчислювальних кластерів українського національного ґрід. Лабораторія надає науковцям зручний інструментарій для проведення розрахунків молекулярної динаміки біологічних макромолекул

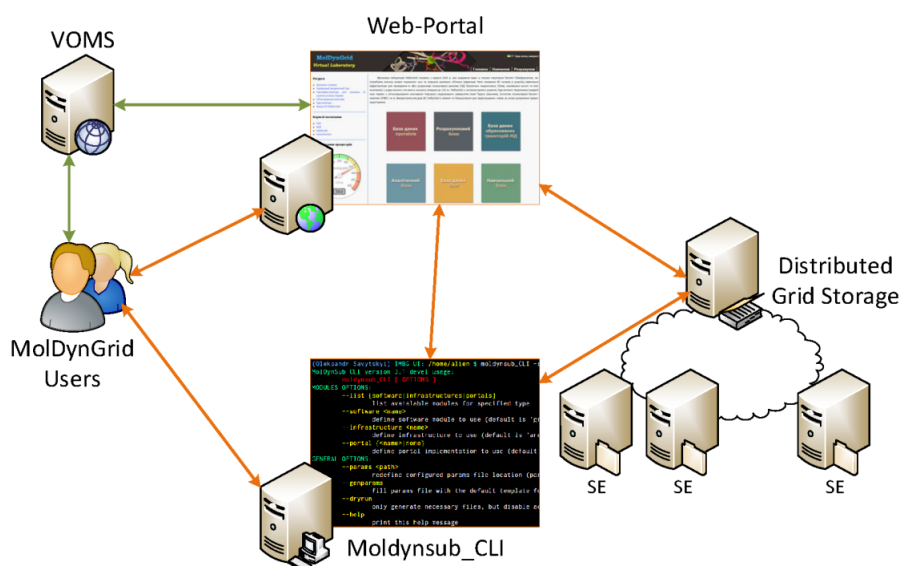


Рисунок 2 - Сервіси віртуальної лабораторії MolDynGrid

(білків, нуклеїнових кислот та їхніх комплексів) у водно-іонному оточенні з наближенням до фізіологічних умов [7-8]. Із використанням сервісів MolDunGrid 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 цитокинової активності (проангіогенні властивості, що полягають у стимуляції розвитку кровоносних судин) за рахунок екранування цитокиного ELR-мотиву в повнорозмірній структурі тирозил-тРНК синтетази людини [9-10].

Виявлено локальні конформаційні зміни із формуванням β-структурних елементів в CP1-вставці згортки Россмана для мутантних форм G41R і del153-156VKQV тирозил-тРНК синтетази людини, що асоційовані з нейрологічним захворюванням Шарко-Мари-Туса (DI-CMTC) [11]. Запропоновано нову роль неструктурованої петлі CP1 вставки при взаємодії з низькомолекулярними субстратами [12].

При проведенні комп'ютерних моделювань науковцями використовується спеціалізоване програмне забезпечення GROMACS, NAMD та інші у різних конфігураціях і різних версій з використанням великої інфраструктури лабораторії (рис. 2 та ряду існуючих засобів на кшталт утиліти Moldynsub_CLI.

Підтримка, обслуговування та оновлення цього прикладного програмного забезпечення на всіх обчислювальних кластерах грид-інфраструктури які підтримують віртуальну лабораторію MolDunGrid створює значне адміністративне навантаження на технічних спеціалістів проекту.

Для вирішення даної проблеми у попередніх роботах було запропоновано та використано виконання спеціалізованого прикладного програмного забезпечення у контейнерній віртуальній машині запусненій як грид-завдання. Даний підхід дозволив запуснути потрібне прикладне програмне забезпечення у ізольованому, незалежному від архітектури обчислювального кластера, керованому середовищі контейнерної віртуальної машини без накладних витрат на емуляцію апаратних компонент комп'ютера.

Особливості використання Rainbow для виконання прикладного програмного забезпечення

Rainbow[5] – комплекс програмного забезпечення який реалізує запуск віртуальних машин як грид-завдань. Складається з елементів (рис. 3):

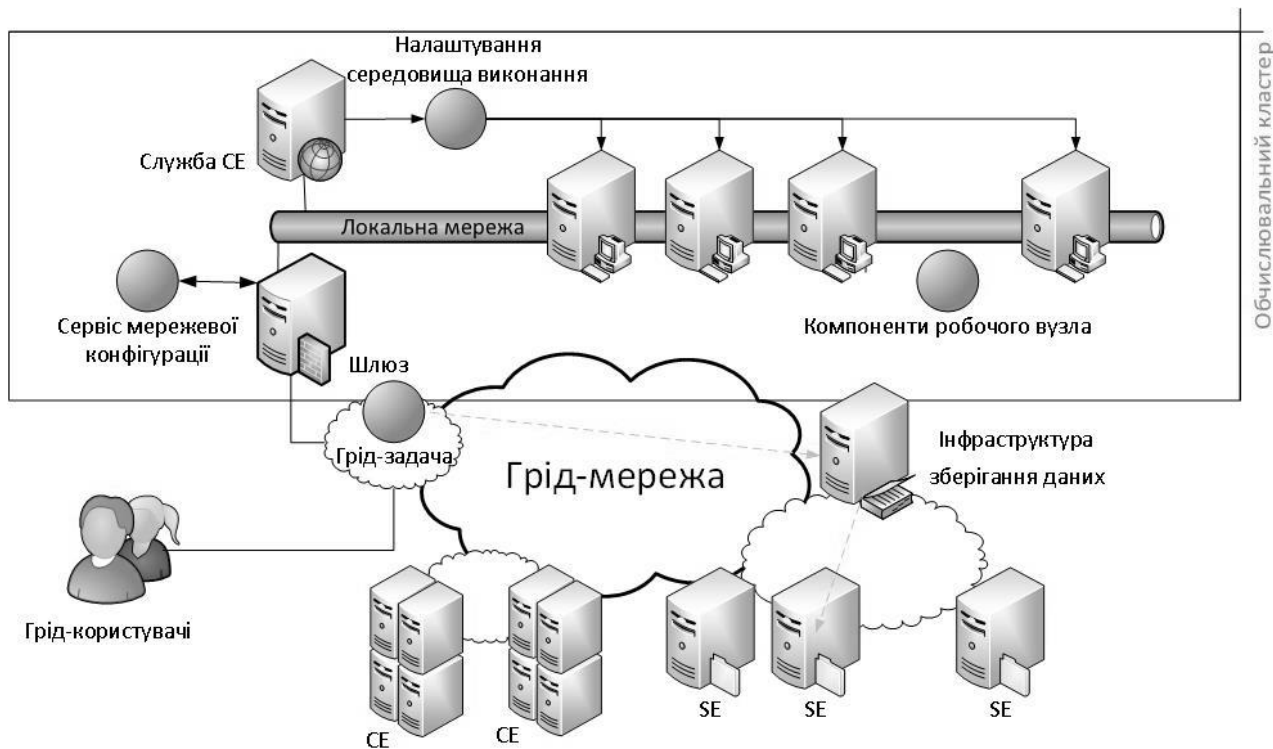


Рисунок 3 - Компоненти Rainbow

- Обчислювального грід-вузла (налаштування середовища виконання);
- Обчислювального вузла кластера;
- Мережевого шлюзу.

Елемент обчислювального грід-вузла виконує передачу параметрів з файлу опису грід-завдання та завантаження вхідних даних.

Елемент обчислювального вузла кластера виконує всі потрібні завдання попередньої підготовки до запуску віртуальної машини та керує її життєвим циклом.

Елемент Мережевого шлюзу забезпечує мережеву конфігурацію для віртуальної машини та інтерактивний доступ до неї із зовнішніх мереж.

При запуску віртуальної машини віртуальної машини як грід-завдання з обчислювального елементу грід виконується передача параметрів віртуальної машини та інтерактивного доступу, а також образу віртуальної машини і вхідних файлів у разі потреби безпосередньо до обчислювального вузла кластера. Образи віртуальних машин та вхідні файли зберігаються у розподіленій інфраструктурі зберігання даних грід. Образ віртуальної машини це попередньо встановлена ОС бібліотеки та потрібне програмне забезпечення [13].

На обчислювальному вузлі кластера виконується запуск віртуальної машини із заданими параметрами та передача вхідних файлів до віртуальної машини.

Після запуску віртуальної машини вона надсилає запит на отримання мережевої конфігурації по протоколу DHCP. Після видачі IP-адреси виконується налаштування мережевого екрану для перенаправлення портів для протоколів SSH або RDP що забезпечує інтерактивний доступ до запущеної віртуальної машини.

Встановлення прикладного програмного забезпечення в образі віртуальних машин.

Щоб забезпечити потрібний набір ППЗ у віртуальній машині можна заздалегідь створити один загальний образ, який міститиме усі пакети ПЗ, створити окремі образи на кожен комбінацію пакетів ПЗ, або створювати образ з потрібними пакетами ПЗ динамічно, на вимогу користувача.

Образ який міститиме усі пакети ПЗ матиме великий розмір, що значно збільшить час запуску віртуальної машини та не дозволить контролювати доступ до пакетів ППЗ згідно наданим ліцензіям кінцевим користувачам. Також, такий підхід при збільшенні кількості ППЗ, не є дружнім до користувача, якому знадобиться час віднайти потрібне йому ППЗ серед всіх наявних.

Створення образів віртуальних машин з усіма комбінаціями пакетів ПЗ призведе до великої кількості образів і їх кількість буде тільки зростати із збільшенням кількості пакетів ПЗ як **n!**.

Розглянемо особливості встановлення прикладного програмного забезпечення для сімейств операційних систем Windows так і GNU/Linux, що наразі використовуються в проєктах Медгрід та віртуальній лабораторії MolDun-Grid.

У сімействі операційних систем GNU/Linux для розповсюдження програмного забезпечення використовуються менеджери пакетів відповідних дистрибутивів, які дозволяють встановити потрібне програмне забезпечення з репозиторіїв з усіма необхідними бібліотеками та компонентами. Програмне забезпечення, яке не має готових пакетів можна легко встановлювати та налаштувати за допомогою сценаріїв інтерпретатора команд інтерфейсу командного рядка.

Для встановлення програмного забезпечення у віртуальній машині з ОС GNU/Linux запропоновано метод автоматичного додавання ППЗ до образу ВМ, що спираються на використання сценарію встановлення та налаштування для кожного пакету ПЗ, що створюються завчасно. Такий сценарій розробляється як для ПЗ доступного з репозиторіїв, так і для ПЗ, яке потрібно компілювати з вихідних кодів.

Технологічний ланцюжок функціонування компонентів Rainbow для реалізації методу наступний:

- Створені сценарії зберігаються на грід-сховищах даних з реплікацією так само як базові образи віртуальних машин.

- На етапі запуску завдання користувач задає перелік потрібного ПЗ у файлі опису грід-завдачі.

- Сценарії завантажуватись разом з образом віртуальної машини та обробляться на етапі налаштування середовища виконання (Рис. 1).

- Одразу після запуску віртуальної машини за допомогою компонентів мережевого шлюзу по протоколу SSH послідовно ініціюється запуск сценаріїв встановлення потрібного програмного забезпечення.

- Після завершення виконання сценаріїв доступ до віртуальної машини надається кінцевому користувачу.

Даний метод дозволяє забезпечити гнучкий спосіб встановлення та налаштування пакетів програмного забезпечення для сімейства операційних систем GNU/Linux без прив'язки до менеджера пакетів дистрибутиву.

Починаючи з Windows 8 [14] компанія Microsoft стала використовувати інтернет-магазин застосувань Windows Store як основну платформу розповсюдження для сертифікованого програмного забезпечення, інсталяції промірників якого мають прив'язку до облікових записів користувачів. У попередніх версіях операційних систем Windows не існувало єдиного стандартного засобу встановлення пакетів програмного забезпечення, а використовувались системи інсталяторів від різ-

них розробників які використовуються і для самих сучасних версій Windows 8 та Windows 10.

Найбільш поширеними системами для встановлення програмного забезпечення у сімействі операційних систем Windows є: Wise Solutions Installer [15], Nullsoft Scriptable Install System [16], InstallShield [17], Inno Setup [18] та Microsoft Installer [19]. Серед доступних рішень найбільш універсальним та стандартизованим є Microsoft Installer, що має ряд переваг: підтримку деінсталяції ПЗ, відміну усіх змін в будь-який момент встановлення та інтеграцію з системними засобами керування правами доступу.

Однак не всі постачальники пакетів ПЗ поширюють їх у потрібному форматі. Для того щоб таке ППЗ можна було встановлювати за допомогою системи Microsoft Installer, його потрібно перетворити у формат msi. Аналіз існуючих рішень для конвертації інсталяційних пакетів у формат msi показав, що єдиними безкоштовним рішенням яке формує інсталяційні пакети в коректному форматі є набір інструментів WiX [20]. Інші безкоштовні рішення формують не коректний msi пакет для встановлення, а платні рішення є занадто дорогими для використання у проекті.

Для автоматизації встановлення програмного забезпечення у віртуальні машини з ОС сімейства Windows пропонується метод реалізований у наступному технологічному ланцюжку:

- Інсталяційні файли у форматі msi та файли відповідей встановлення без відслідковування стану розміщуються на грид-сховищах даних з реплікацією так само як базові образи віртуальних машин.

Перелік потрібного ППЗ задається користувачем у файлі опису грид-задачі та завантажується разом з образом віртуальної машини та обробляється на етапі налаштування середовища виконання.

- Після запуску віртуальної машини за допомогою компонентів робочого вузла з інсталяційних фалів та сценарію встановлення без відслідковування стану [21] генерується образ компакт-диску, який підключається у віртуальну машину.

- Базовий образ віртуальної машини налаштований таким чином, що після монтування диску виконується автоматичний запуск сценарію інсталяції ПЗ, який встановлює всі ППЗ, наявних на віртуальному носії.

- По завершенню інсталяції віртуальна машина перезавантажується. Після перезавантаження доступ до віртуальної машини надається користувачу.

При використанні контейнерної віртуалізації Docker яка дозволяє запускати прикладне програмне забезпечення без накладних витрат віртуалізації реалізована підтримка централізованого реєстру образів Registry віртуальної організації(ВО). В даному варіанті використання Rainbow можливі два сценарії використання:

- Генерування образу засобами Docker з файлу-конфігурації;
- Завантаження готового образу Контейнера з реєстру образів.

Перши підхід дозволяє внести зміни до файлу-конфігурації та згенерувати образ з потрібним набором прикладного забезпечення і з найновішими версіями бібліотек і самого програмного забезпечення, але потребує додаткового часу на генерування образу.

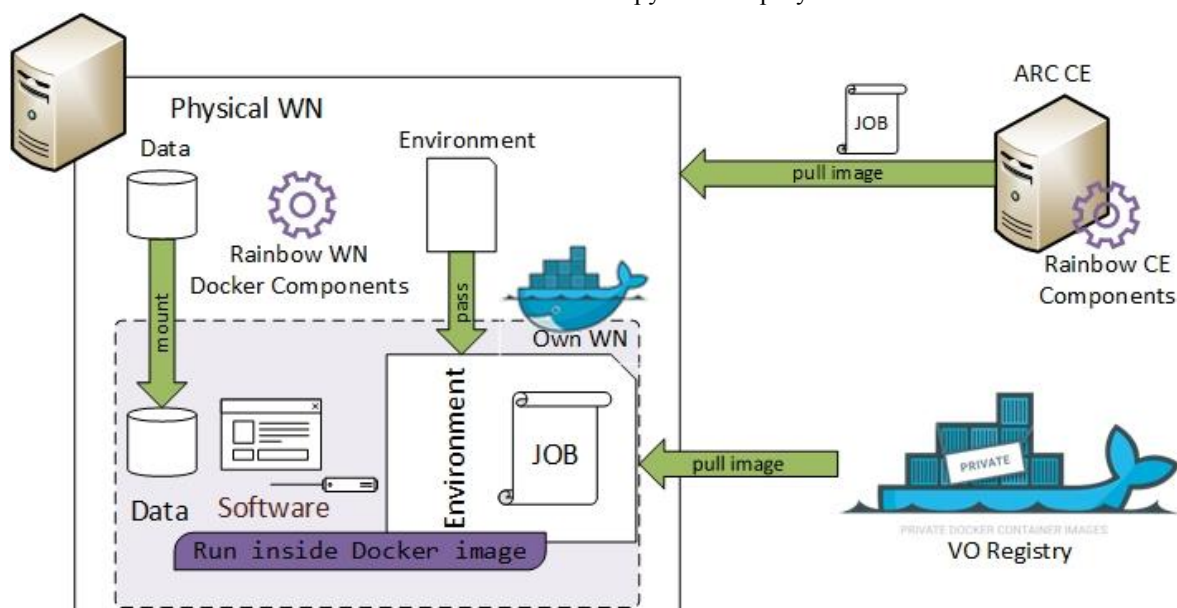


Рисунок 4 - Використання реєстру образів Registry віртуальних машин у Rainbow

У іншому випадку потрібно попередньо створити образ контейнера, завантажити його в реєстр віртуальної організації. Однак даний сценарій передбачає, що буде використано саме ту версію бібліотек і програмного забезпечення що вже знаходиться в контейнері.

Конфігурування образів віртуальних машин перед запуском

Комплекс програмного забезпечення Rainbow дозволяє перед запуском віртуальної машини Виконати додаткове налаштування параметрів самої віртуальної машини.

Безпосередньо перед запуском віртуальної машини виконується монтування образу віртуальної машини та забезпечується доступ до її файлової системи. Параметри налаштування сімейств Windows та GNU/Linux доступні у відповідних конфігураційних файлах.

Розглянемо такий метод попередньої конфігурації віртуальної машини як технологічний ланцюжок встановлення паролю для віддаленого доступу:

- Образ віртуальної машини монтується як частина локальної файлової системи робочого вузла
- Генерується або використовується попередньо заданий пароль для віддаленого доступу

- Генерується хеш відповідного формату для заданого паролю
- З генерований хеш встановлюється у файлі конфігурації (Для сімейства ОС Windows – як файлова система монтується реєстр, для сімейства ОС GNU/Linux безпосередньо редагується відповідний конфігураційний файл)

Запропонований підхід може бути використаний для виконання всіх потрібних налаштувань віртуальної машини перед її запуском на обчислювальному вузлі кластера.

Висновки

У роботі запропоновано методи, що дозволяють на вимогу встановлювати прикладне програмне забезпечення та виконувати конфігурування образів віртуальних машин з ОС сімейства Windows та GNU/Linux як для апаратно-прискореної віртуалізації так і для контейнерної.

Методи реалізовані як компоненти програмного комплексу засобів «Rainbow». Запропоновані методи дозволяють повністю задовольнити потреби науково-дослідних проектів українського національного грід до розгортання спеціалізованого програмного забезпечення для аналізу та візуалізації медичних досліджень та проведення моделювання молекулярної динаміки білків.

Список літератури

1. Базовий координаційний центр УНГ [Електронний ресурс] Режим доступу <http://ung.in.ua/ua/resources/>.
2. Український академічний Грід: досвід створення й перші результати експлуатації / Ю.В. Бойко, М.Г. Зинов'єв, О.О. Судаков, С.Я. Свістунов // Математичні машини і системи. – 2008. – Випуск 1. – С. 67–84
3. Проект «Медгрід» [Електронний ресурс] Режим доступу <http://medgrid.immsp.kiev.ua/>
4. Слюсар, Е. А., Волжева, М. В. Использование грид-инфраструктуры как распределенного отказоустойчивого хранилища данных для веб-сервисов.
5. Борецкий А.Ф., Вишневыский В. В.; Сальников А. А. «Платформа как сервис» в ГРИД для интерактивного анализа медицинских данных. Математические машины и системы, 2015, 1.
6. Вишневыский, В. В., Осташко, В. Г., Динник, О. Б., Мостовий, С. Є. Використання ресурсів ВО «МЕДГРІД» для відкладених телеконсультацій лікарем з функціональної діагностики. // Матеріали міжнародної наук.-практ. конф. "Системи підтримки прийняття рішень. Теорія і практика (СППР 2015)". - Київ: ІПММС НАНУ, 2015. – С. 126-128.
7. Salnikov A.O., Sliusar I.A., Sudakov O.O., Savytskyi O.V., Kornelyuk O.I. MolDynGrid Virtual Laboratory as a part of Ukrainian Academic Grid infrastructure// Proceedings of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications. - 2009. - P. 237-240.
8. Salnikov A., Sliusar I., Sudakov O., Savytskyi O. and Kornelyuk A. / Virtual laboratory MolDynGrid as a part of scientific infrastructure for biomolecular simulations. // International Journal of Computing. — 2010. — V. 9, N 4. — P. 294-300.
9. Yang X.-L., Skene R.J., McRee D.E. and Schimmel P. / Crystal structure of a human aminoacyl-tRNA synthetase cytokine // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. — 2002. — V. 99, N 24. — P. 15369-15374.
10. Savytskyi O. V. and Kornelyuk A. I. / Computational modeling of molecular dynamics of G41R mutant form of human tyrosyl-tRNA synthetase, associated with Charcot-Marie-Tooth neuropathy // Ukr Biochem J. — 2015. — V. 87, N 6. — P. 142-53.

11. High Throughput Computing [Електронний ресурс] – Режим доступу: https://wiki.egi.eu/wiki/Glossary_V1#High_Throughput_Computing
12. OSG Usage Graphs, [Електронний ресурс] – Режим доступу: <http://display.grid.iu.edu/>
13. Boretskyi, O., Salnikov, A., Sliusar, I., Sudakov, O., & Boyko, Y. (2015), Rainbow framework: Running virtual machines on demand as a grid jobs. In Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS), 2015 IEEE 8th International Conference, Vol. 2, pp. 972-976.
14. Honeycutt, J. (2012). Introducing Windows 8. Microsoft.
15. Wise Solutions Installer [Електронний ресурс] – Режим доступу: <http://www.installaware.com/wise-comparison.htm>
16. Nullsoft Scriptable Install System [Електронний ресурс] – Режим доступу: http://nsis.sourceforge.net/Main_Page.
17. InstallShield [Електронний ресурс] – Режим доступу: <http://www.flexerasoftware.com/producer/products/software-installation/installshield-software-installer/>
18. Inno Setup [Електронний ресурс] – Режим доступу: <http://www.jrsoftware.org/isinfo.php>
19. Microsoft Installer [Електронний ресурс] Режим доступу [https://msdn.microsoft.com/en-us/library/aa372463\(v=vs.85\).aspx](https://msdn.microsoft.com/en-us/library/aa372463(v=vs.85).aspx)
20. Windows Installer Xml (WiX) toolset [Електронний ресурс] – Режим доступу: <http://wixtoolset.org/>
21. Unattended setup [Електронний ресурс] – Режим доступу: [https://technet.microsoft.com/en-us/library/cc785644\(v=ws.10\).aspx](https://technet.microsoft.com/en-us/library/cc785644(v=ws.10).aspx).

Надійшла до редакції 10.10.2017

References

1. Ukrainian National Grid Basic Coordination Centre (2017), available at: <http://ung.in.ua/ua/resources/> (accessed 10 October 2017).
2. Boyko Y.V., Zinoviev M.G., Sudakov O.O., and Svistunov S.Y. (2008) Ukrainian Academic Grid: Experience of Creation and First Results of Operation [Ukrayins'kyu akademichnyy Hrid: dosvid stvorennya u pershi rezul'taty ekspluatatsiyi], Mathematical Machines and Systems, 2008, iss.1, p. 67–84.
3. Medgrid Project (2017), available at: <http://medgrid.immsp.kiev.ua/> (accessed 10 October 2017)/
4. Slusar E.A. and Volzheva M.V. (2013). Using the Grid Infrastructure as a Distributed Failover Storage for Web Services [Ispol'zovaniye grid-infrastruktury kak raspredelennoye otkazoustoychivogo khranilishcha danykh dlya veb-servisov] Second International Conference "Cluster Computing" CC 2013, Ukraine, Lviv, June 3-5, 2013, p. 212-215.
5. Boretsky A.F., Vishnevsky V.V. and Salnikov A. A. (2015) "Platform as a Service" in GRID for the interactive analysis of medical data [«Platforma kak servis» v GRID dlya inte-raktivnogo analiza meditsinskikh danykh], Mathematical Machines and Systems, 2015, iss.1, p.53-64.
6. Vishnevsky, V.V., Ostashko, V.G., Dinnik, O. B. and Mostovyy, S.Ye. (2015), Use of resources of "MEDGRID" for delayed teleconsultations by the doctor on functional diagnostics [Vykorystannya resursiv VO «MEDHRID» dlya vidkladenykh telekonsul'tatsiy likarem z funktsional'noyi diahnostryky], Materials of international sciences-practice. conf. "Decision Support Systems: Theory and Practice (DSS 2015)", Kyiv, IPAMP NASU, 2015, P. 126-128.
7. Salnikov A.O., Sliusar I.A., Sudakov O.O., Savytskyi O.V. and Kornelyuk O.I. (2009) MolDynGrid Virtual Laboratory as a part of Ukrainian Academic Grid infrastructure, Proceedings of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications, 2009, p. 237-240.
8. Salnikov A., Sliusar I., Sudakov O., Savytskyi O. and Kornelyuk A. (2010), Virtual laboratory MolDynGrid as a part of scientific infrastructure for biomolecular simulations, International Journal of Computing, 2010, vol. 9, N 4, p. 294-300.
9. Yang X.-L., Skene R.J., McRee D.E. and Schimmel P. (2002), Crystal structure of a human aminoacyl-tRNA synthetase cytosine, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2002, vol. 99, N 24, p. 15369-15374.
10. Savytskyi O. V. and Kornelyuk A. I. (2015), Computational modeling of molecular dynamics of G41R mutant form of human tyrosyl-tRNA synthetase, associated with Charcot-Marie-Tooth neuropathy, Ukrainian Biochemical Journal, 2015, vol. 87, N 6, p. 142-53.

-
11. High Throughput Computing, available at: https://wiki.egi.eu/wiki/Glossary_V1#High_Throughput_Computing
 12. OSG Usage Graphs, available at: <http://display.grid.iu.edu/>
 13. Boretskyi, O., Salnikov, A., Sliusar, I., Sudakov, O., & Boyko, Y. (2015), Rainbow framework: Running virtual machines on demand as a grid jobs. In Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS), 2015 IEEE 8th International Conference, Vol. 2, pp. 972-976.
 14. Honeycutt, J. (2012). Introducing Windows 8. Microsoft.
 15. Wise Solutions Installer, available at: <http://www.installaware.com/wise-comparison.htm>
 16. Nullsoft Scriptable Install System, available at: http://nsis.sourceforge.net/Main_Page.
 17. InstallShield, available at: <http://www.flexerasoftware.com/producer/products/software-installation/installshield-software-installer/>
 18. Inno Setup, available at: <http://www.jrsoftware.org/isinfo.php>
 19. Microsoft Installer, available at: [Електронний ресурс] Режим доступу [https://msdn.microsoft.com/en-us/library/aa372463\(v=vs.85\).aspx](https://msdn.microsoft.com/en-us/library/aa372463(v=vs.85).aspx)
 20. Windows Installer Xml (WiX) toolset, available at: <http://wixtoolset.org/>
 21. Unattended setup, available at: [https://technet.microsoft.com/en-us/library/cc785644\(v=ws.10\).aspx](https://technet.microsoft.com/en-us/library/cc785644(v=ws.10).aspx).

С.Д. ПОГОРЕЛЫЙ, Ю.В. БОЙКО, А.А. САЛЬНИКОВ, Є.А. СЛЮСАР, А.Ф. БОРЕЦКИЙ

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ КОНФИГУРИРОВАНИЕ И ФОРМИРОВАНИЕ ОБРАЗОВ ВИРТУАЛЬНЫХ МАШИН ЗАПУЩЕННЫХ КАК ГРИД-ЗАДАНИЯ

Рассмотрены особенности использования специализированного прикладного программного обеспечения в научно-исследовательских грид-проектах. Описаны особенности использования комплекса программного обеспечения Rainbow для выполнения прикладного программного обеспечения в виртуальных машинах запущенных как грид задачи. Предложены методы формирования, конфигурирования образов виртуальных и установки нужного прикладного программного обеспечения перед запуском виртуальной машины.

Ключевые слова: *грид, виртуальна машина, Rainbow, прикладное программное обеспечение, Windows, GNU/Linux, Docker*

S.D. POGORILYY, Y. BOYKO, SALNIKOV A.O., SLIUSAR IE.A., O. BORETSKYI

Taras Shevchenko National University of Kyiv

IMAGES OF VIRTUAL MACHINES RUNNING AS GRID TASKS PROVISIONAL CONFIGURATION AND FORMATION

Ukrainian grid infrastructure is used for storage, processing and analyzing large volumes of medical data and biological modeling results. In particular, such project as MedGrid runs accumulation of cardiograms for population studies and provides remote medical consultations by visualization of cardiograms using specialized application software. MolDynGrid virtual laboratory using the number of different specialized application software for modeling protein trajectory dynamics. The features of using of specialized software in scientific research grid projects are considered. The features of the use of the Rainbow framework for performing software applications in virtual machines running as grid tasks are described. The methods of forming, configuring of virtual machines images and installing of the necessary software before launching it are proposed.

Keywords: *grid, virtual machine, Rainbow, application software, Windows, GNU/Linux, Docker.*