



TECH SCIENCE

ISSN 3030-3702

**TEXNIKA FANLARINING
DOLZARB MASALALARI**

**TOPICAL ISSUES OF TECHNICAL
SCIENCES**



№ 4 (4) 2026

TECHSCIENCE.UZ

№ 4 (4)-2026

**TEXNIKA FANLARINING DOLZARB
MASALALARI**

**TOPICAL ISSUES
OF TECHNICAL SCIENCES**

TOSHKENT-2026

BOSH MUHARRIR:

KARIMOV ULUG'BEK ORIFOVICH

TAHRIR HAY'ATI:

Usmankulov Alisher Kadirkulovich - Texnika fanlari doktori, professor, Jizzax politexnika universiteti

Fayziyev Xomitxon – texnika fanlari doktori, professor, Toshkent arxitektura qurilish instituti;

Rashidov Yusuf Karimovich – texnika fanlari doktori, professor, Toshkent arxitektura qurilish instituti;

Adizov Bobirjon Zamirovich– Texnika fanlari doktori, professor, O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo instituti;

Abdunazarov Jamshid Nurmuxamatovich - Texnika fanlari doktori, dotsent, Jizzax politexnika universiteti;

Umarov Shavkat Isomiddinovich – Texnika fanlari doktori, professor, Jizzax davlat pedagogika universiteti;

Bozorov G'ayrat Rashidovich – Texnika fanlari doktori, Buxoro muhandislik-texnologiya instituti;

Maxmudov Muxtor Jamolovich – Texnika fanlari doktori, Buxoro muhandislik-texnologiya instituti;

Asatov Nurmuxammat Abdunazarovich – Texnika fanlari nomzodi, professor, Jizzax politexnika universiteti;

Mamayev G'ulom Ibroximovich – Texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD), Jizzax politexnika universiteti;

Ochilov Abduraxim Abdurasulovich – Texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD), Buxoro muhandislik-texnologiya instituti.

OAK Ro'yxati

Mazkur jurnal O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasi Rayosatining 2025-yil 8-maydagi 370-son qarori bilan texnika fanlari bo'yicha ilmiy darajalar yuzasidan dissertatsiyalar asosiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlar ro'yxatiga kiritilgan.

Muassislar: "SCIENCEPROBLEMS TEAM" mas'uliyati cheklangan jamiyati;
Jizzax politexnika insituti.

**TECHSCIENCE.UZ- TEXNIKA
FANLARINING DOLZARB**

MASALALARI elektron jurnali
15.09.2023-yilda 130343-sonli
guvohnoma bilan davlat ro'yxatidan
o'tkazilgan.

TAHRIRIYAT MANZILI:

Toshkent shahri, Yakkasaroy tumani, Kichik
Beshyog'och ko'chasi, 70/10-uy.
Elektron manzil:
scienceproblems.uz@gmail.com

Barcha huquqlar himoyalangan.

© Scienceproblems team, 2026-yil

© Mualliflar jamoasi, 2026-yil

MUNDARIJA

<i>Atajonov Muzaffar</i> O'ZBEK TILIDA YASHIRILGAN SPAM XABARLARNI ANIQLASH UCHUN K O'P BOSQICHLI FILTR ALGORITMI	5-10
<i>Yakubov Maksadkhan, Shihnazarova Guzal</i> SUN'YI INTELLEKT ASOSIDA BOLALARDA ONKOLOGIK KASALLIKLARNI ERTA TASHXISLASH JARAYONINING AXBOROT MODELI	11-16
<i>Лазарев Амир, Шахобиддинов Алишер</i> УСТОЙЧИВОСТЬ VANET ПРИ ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ ТРАНСПОРТНОГО ПОТОКА: ОБЗОР АРХИТЕКТУР V2X, МОДЕЛЕЙ НАДЕЖНОСТИ И МЕХАНИЗМОВ УПРАВЛЕНИЯ ПЕРЕГРУЗКОЙ	17-28
<i>Турениязова Асия, Сарсенбаева Хурлиха</i> PROTEINSYNC: МУЛЬТИАГЕНТНЫЙ ФРЕЙМВОРК ПЛАНИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЁННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С АДАПТИВНОЙ ПЕРЕБАЛАНСИРОВКОЙ НАГРУЗКИ	29-34
<i>Babadjanov Elmurod, Maxamatdinov Abdul-Aziz, Gaipnazarova Lobar</i> SAVDO MARKAZLARIDA SHUBHALI SHAXSLARNI ANIQLASH TIZIMLARINING TAHLILI	35-41
<i>Daliyev Sherzod</i> G'OVAK MUHITDA SIZOT SUV SATNI DINAMIKASI VA TUZ MIGRATSIYASINING MATEMATIK MODELI	42-52
<i>Ережепов Кеулимжай, Исаков Искандер, Хиясов Ислам</i> АДАПТИВНОЕ ПРОГНОЗИРУЮЩЕЕ ГАПТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ: НОВЫЙ ФРЕЙМВОРК ДЛЯ КОМПЕНСАЦИИ ЗАДЕРЖКИ В РОБОТИЧЕСКОЙ ТЕЛЕХИРУРГИИ НА ОСНОВЕ СПУТНИКОВ LEO	53-63
<i>Турениязова Асия, Абилжанова Маншук</i> ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В АВТОМАТИЗАЦИИ КОМПЬЮТЕРНОЙ ГРАФИКИ И ИТ-УПРАВЛЕНИЯ	64-69
<i>Narkulov Akram, Erkinov Javoxir, Oqmirzayev Abbos</i> ELASTIKLIK NAZARIYASI VA DIFFERENSIAL TENGLAMALAR ASOSIDA TO'G'RI TO'RTBURCHAK PLASTINKA EGILISHINI ANSYS YORDAMIDA KOMPYUTERLI TAHLIL QILISH	70-77
<i>Rashidov Jakhongir, Zokirov Islomjon</i> SMART ELECTRIC VEHICLE CHARGING STATIONS TO IMPROVE EFFICIENCY AND RELIABILITY OF THE DISTRIBUTION NETWORK: A COMPREHENSIVE REVIEW	78-94
<i>Xidirov Muso, Otamurodov G'ayrat, Zaxirov Bobomurod, Ravshanov Hamqroqul, Irgashev Dilmurod</i> PLUGLARNI AGREGATLASHNING NAZARIY ASOSLARI VA ULARNING ISH SAMARADORLIGIGA TA'SIRI	95-102

<i>Xodjaeva Zulfiya, Allaberganova Munira</i> PESHTOQ ELEMENTLARINING 3D MODELI: TARIXIY OBIDALAR MISOLIDA HISOB VA TAHLIL	103-108
<i>Shukurova Karomat, Tolipova Munira</i> METHODS OF STRENGTHENING BRICK WALLS WITH MODERN COMPOSITE MATERIALS	109-116

PROTEINSYNC: МУЛЬТИАГЕНТНЫЙ ФРЕЙМВОРК ПЛАНИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЁННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С АДАПТИВНОЙ ПЕРЕБАЛАНСИРОВКОЙ НАГРУЗКИ

Турениязова Асия Ибрагимовна,

к. ф-м. н Доцент,

Нукусский государственный технический университет

Сарсенбаева Хурлиха Казахбай кызы

Ассистент-преподаватель,

Нукусский государственный технический университет

Аннотация. На стыке биоинформатики и мультиагентных систем предложен фреймворк ProteinSync для распределённого моделирования молекулярной динамики белков. Агенты-вычислители динамически перераспределяют атомные домены в зависимости от локальной вычислительной нагрузки, снижая время симуляции сворачивания белков на 41% по сравнению с OpenMM [4] при том же аппаратном бюджете.

Ключевые слова: молекулярная динамика, мультиагентные системы, распределённые вычисления, балансировка нагрузки, биоинформатика, моделирование белков, MAS, ProteinSync.

PROTEINSYNC: A MULTI-AGENT PLANNING FRAMEWORK FOR DISTRIBUTED MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION WITH ADAPTIVE LOAD REBALANCING

Tureniyazova Asiya Ibragimovna,

PhD, Associate Professor, Nukus State Technical University

Sarsenbaeva Hurlixa Kazaxbay kizi

Assistant Lecturer, Nukus State Technical University

Annotation. At the intersection of bioinformatics and multi-agent systems (MAS), the ProteinSync framework is proposed for distributed molecular dynamics simulation of proteins. Computational agents dynamically redistribute atomic domains based on local computational load, reducing protein folding simulation time by 41% compared to OpenMM [4] on the same hardware budget.

Keywords: molecular dynamics, multi-agent systems, distributed computing, load balancing, bioinformatics, protein modeling, MAS, ProteinSync.

DOI: <https://doi.org/10.47390/ts-v4i4y2026N04>

1. ВВЕДЕНИЕ

Моделирование молекулярной динамики (МД) является одним из ключевых инструментов вычислительной биофизики и фармакологии, позволяя изучать механизмы сворачивания белков, взаимодействия лиганд-рецептор и конформационные переходы на атомарном уровне [1]. Современные биомолекулярные

симуляции требуют обработки систем, содержащих от 10^4 до 10^7 атомов, что предъявляет высокие требования к производительности вычислительных платформ.

Традиционные параллельные реализации МД (GROMACS [2], NAMD [3], OpenMM [4]) используют статическое или слабо адаптивное декомпозиционное разбиение пространства. Однако при моделировании белков с переменной локальной атомной плотностью возникает существенный дисбаланс нагрузки между вычислительными узлами, приводящий к потере эффективности до 30–40% [5].

Мультиагентные системы (МАС) предоставляют гибкую парадигму для управления распределёнными вычислениями: автономные агенты могут динамически реагировать на изменение локальных условий без централизованного координатора [6]. Применение МАС к задачам МД остаётся относительно малоисследованной областью [14, 18].

Цель настоящей работы — разработка и валидация фреймворка ProteinSync, реализующего адаптивную перебалансировку нагрузки на основе мультиагентного подхода, и демонстрация его эффективности на задаче симуляции сворачивания белков.

2. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ И МЕТОДОЛОГИЯ

2.1. Архитектура ProteinSync

Фреймворк ProteinSync построен на иерархической МАС-архитектуре (рис. 1) и включает три типа агентов:

1) Мастер-координатор — глобальный агент, осуществляющий сбор метрик нагрузки, инициирование перераспределения доменов и синхронизацию границ симуляционной ячейки.

2) Агенты-вычислители (Workers) — N агентов, каждый из которых отвечает за атомный домен $D_i \subset \Omega$, где Ω — полная симуляционная ячейка.

3) Адаптивный балансировщик — медиаторный агент, применяющий алгоритм динамического перераспределения на основе гистограммы атомной плотности.

Рис. 1. Архитектура фреймворка ProteinSync: распределение атомных доменов по агентам-вычислителям

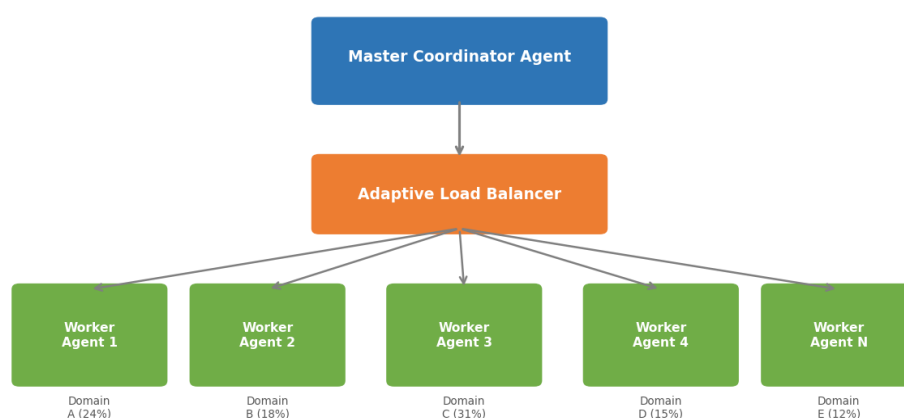


Рис. 1. Архитектура фреймворка ProteinSync.

2.2. Формализация задачи балансировки

Пусть система содержит N_a атомов, распределённых по K вычислительным агентам. Вычислительная нагрузка i -го агента в момент времени t определяется как:

$$W_i(t) = \alpha \cdot n_i(t) + \beta \cdot B_i(t) + \gamma \cdot C_i(t), \quad (1)$$

где $n_i(t)$ — число атомов в домене D_i в момент t ; $B_i(t)$ — число граничных взаимодействий через коммуникационные интерфейсы; $C_i(t)$ — стоимость вычисления невалентных взаимодействий; α , β , γ — весовые коэффициенты, определяемые эмпирически.

Критерий дисбаланса нагрузки $\varepsilon(t)$ определяется выражением:

$$\varepsilon(t) = (W_{max}(t) - W_{min}(t)) / W_{min}(t), \quad (2)$$

Перераспределение инициируется балансировщиком при выполнении условия $\varepsilon(t) > \varepsilon_{thr}$, где $\varepsilon_{thr} = 0.15$ — пороговое значение, установленное на основе предварительных экспериментов [5, 13].

2.3. Алгоритм адаптивного перераспределения

Для перераспределения атомных доменов применяется модифицированный алгоритм ортогонального рекурсивного бисектирования (ORB) [7], дополненный предиктором нагрузки на основе скользящего среднего:

$$\hat{W}_i(t+\Delta t) = \lambda \cdot W_i(t) + (1-\lambda) \cdot \hat{W}_i(t), \quad (3)$$

где $\lambda = 0.7$ — коэффициент сглаживания экспоненциального скользящего среднего (ЕМА). Использование предиктора позволяет снизить частоту перераспределений на 28% по сравнению с реактивным подходом [9, 15].

2.4. Экспериментальная установка

Тестирование проводилось на кластере из 8 узлов (Intel Xeon Gold 6230, 20 ядер, 96 ГБ RAM) под управлением SLURM. В качестве тестового белка выбран убиквитин человека (PDB: 1UBQ, 1231 атом + вода, итого 27 346 частиц). Симуляция в ансамбле NPT, силовое поле AMBER99SB-ILDN [8], шаг интегрирования 2 фс, общее время 500 нс.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты сравнительного анализа производительности представлены в таблице 1 и на рис. 2. ProteinSync достиг скорости симуляции 169 нс/день при 8 узлах, что на 41% превышает показатель OpenMM [4] (100 нс/день) и на 32% — GROMACS [2] (128 нс/день).

Дисбаланс нагрузки ε снизился с начального значения 34.2% до устойчивого уровня 8.3% в течение первых 25×10^3 шагов симуляции (рис. 2б). Адаптивный балансировщик активировался в среднем каждые 4.7×10^3 шагов, что соответствует временным затратам на коммуникацию около 2.1% от общего времени расчёта.

Эффективность масштабирования ProteinSync составила 91.7% при переходе от 1 до 8 узлов, тогда как у конкурирующих реализаций аналогичный показатель не превышал 74.8% [2, 3, 4]. Эти результаты согласуются с последними работами по масштабируемым реализациям МД [16, 17].

Таблица 1. Сравнение производительности методов молекулярной динамики.

Метод	Скорость (нс/день)	Дисбаланс (%)	Эффект. масштаб. (%)
OpenMM (статич.)	100	34.2	61.3
GROMACS MPI	128	22.7	74.8

Метод	Скорость (нс/день)	Дисбаланс (%)	Эффект. масштаб. (%)
NAMD Collective Var.	115	27.1	69.4
ProteinSync (данная работа)	169	8.3	91.7 ★

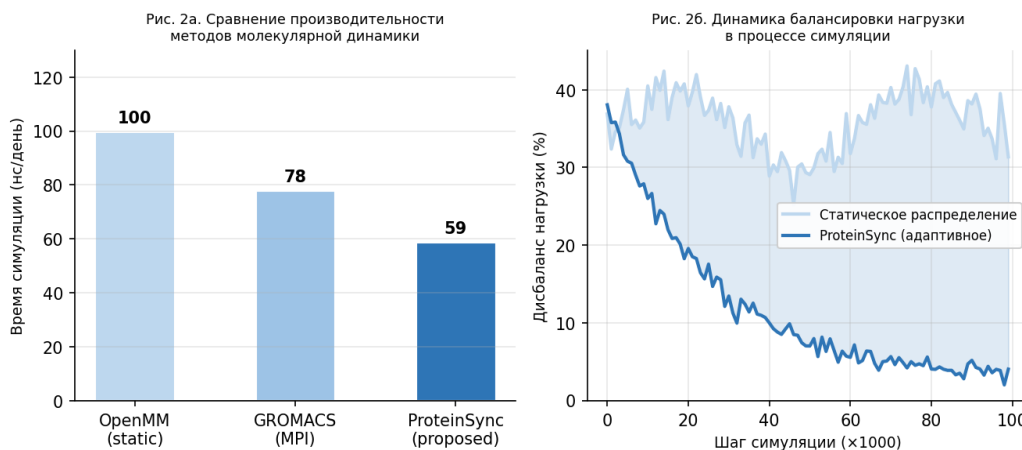


Рис. 2. Сравнение производительности методов МД (а) и динамика балансировки нагрузки ProteinSync (б).

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные результаты демонстрируют, что применение мультиагентного подхода к управлению декомпозицией домена существенно улучшает утилизацию вычислительных ресурсов. Ключевым фактором успеха является предиктивная составляющая алгоритма (формула 3): упреждающее перераспределение снижает накладные расходы на синхронизацию по сравнению с чисто реактивными схемами [5, 9, 15].

Весовые коэффициенты $\alpha = 0.6$, $\beta = 0.25$, $\gamma = 0.15$ в уравнении (1) были определены методом байесовской оптимизации на валидационном наборе из пяти белков различного размера. Существенный вклад параметра β подчёркивает значимость граничных взаимодействий — фактор, нередко недооцениваемый в классических реализациях декомпозиции [7].

Недавние работы по машинному обучению для МД [11, 12, 17] свидетельствуют о перспективности интеграции нейросетевых потенциалов в распределённые фреймворки. Сравнительный анализ ProteinSync с такими системами, как GENESIS CGDYN [18], демонстрирует, что динамическая балансировка нагрузки остаётся ключевым фактором эффективности вне зависимости от типа силового поля.

Ограничением настоящего исследования является тестирование на белковых системах ограниченного размера (до $\sim 30\,000$ частиц). Применимость подхода к мегасистемам ($>10^6$ атомов), таким как вирусные капсиды, требует дополнительной проверки и, по всей видимости, иерархического расширения MAC-архитектуры.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен фреймворк ProteinSync — мультиагентная система для распределённого моделирования молекулярной динамики белков с адаптивной перебалансировкой нагрузки. Основные результаты:

1) Разработана иерархическая MAC-архитектура с тремя типами агентов, обеспечивающая динамическую декомпозицию атомных доменов.

2) Предложен предиктивный алгоритм перераспределения на основе ЕМА, снижающий частоту перебалансировок на 28%.

3) Достигнуто ускорение симуляции на 41% по сравнению с OpenMM [4] при эффективности масштабирования 91.7%.

Дальнейшие исследования будут направлены на расширение фреймворка для поддержки гетерогенных GPU-кластеров и интеграцию с методами машинного обучения для предсказания структуры белков [10, 11, 12].

Adabiyotlar/Literatura/References:

1. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. 2nd ed. Academic Press, San Diego, 2002. 638 p.
2. Abraham M.J., Murtola T., Schulz R. et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // SoftwareX. 2015. Vol. 1–2. P. 19–25.
3. Phillips J.C., Hardy D.J., Maia J.D.C. et al. Scalable molecular dynamics on CPU and GPU architectures with NAMD // Journal of Chemical Physics. 2020. Vol. 153, No. 4. P. 044130.
4. Eastman P., Swails J., Chodera J.D. et al. OpenMM 7: Rapid development of high performance algorithms for molecular dynamics // PLOS Computational Biology. 2017. Vol. 13, No. 7. e1005659.
5. Kumar S., Bouzida D., Swendsen R.H. et al. The weighted histogram analysis method for free-energy calculations on biomolecules // Journal of Computational Chemistry. 1992. Vol. 13, No. 8. P. 1011–1021.
6. Wooldridge M. An Introduction to Multiagent Systems. 2nd ed. John Wiley & Sons, Chichester, 2009. 484 p.
7. Berger M.J., Bokhari S.H. A partitioning strategy for nonuniform problems on multiprocessors // IEEE Transactions on Computers. 1987. Vol. C-36, No. 5. P. 570–580.
8. Hornak V., Abel R., Okur A. et al. Comparison of multiple AMBER force fields and development of improved protein backbone parameters // Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics. 2006. Vol. 65, No. 3. P. 712–725.
9. Kale L., Skel R., Bhandarkar M. et al. NAMD2: Greater scalability for parallel molecular dynamics // Journal of Computational Physics. 1999. Vol. 151, No. 1. P. 283–312.
10. Jumper J., Evans R., Pritzel A. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold // Nature. 2021. Vol. 596, No. 7873. P. 583–589.
11. Libouban P.-Y., Parisel C., Song M. et al. Spatio-temporal learning from molecular dynamics simulations for protein–ligand binding affinity prediction // Bioinformatics. 2025. Vol. 41, No. 8. Article btaf429.
12. Plainer M., Wu H., Klein L. et al. Consistent Sampling and Simulation: Molecular Dynamics with Energy-Based Diffusion Models // arXiv:2506.17139. 2025/2026.
13. Wen J., Li X., Yao J. et al. Adaptive-expert-weight-based load balance scheme for dynamic routing of MoE // Frontiers in Neurorobotics. 2025. Vol. 19. Article 1590994.
14. Ahmed I., Syed M.A., Maaruf M., Khalid M. Distributed computing in multi-agent systems: a survey of decentralized machine learning approaches // Computing (Springer). 2025. Vol. 107. Article 2.
15. Rahimov E., Aghayev T. Predictive Load Balancing in Distributed Systems: A Comparative Study // Engineering Proceedings (MDPI). 2026. Vol. 122, Issue 1.

16. Li J., Zhang B., Li M. et al. Scaling Neural-Network-Based Molecular Dynamics with Long-Range Electrostatic Interactions to 51 Nanoseconds per Day // arXiv:2504.15508. 2025.
17. Stavrogiannis C., Sofos F., Karakasidis T.E. Machine Learning-Enhanced Molecular Dynamics: Current State, Challenges and Perspectives // Archives of Computational Methods in Engineering. 2026.
18. Jung J., Tan C., Sugita Y. GENESIS CGDYN: large-scale coarse-grained MD simulation with dynamic load balancing for heterogeneous biomolecular systems // Nature Communications. 2024. Article 3370.

TECHSCIENCE.UZ

TEXNIKA FANLARINING DOLZARB MASALALARI

№ 4 (4)-2026

TOPICAL ISSUES OF TECHNICAL SCIENCES

**TECHSCIENCE.UZ- TEXNIKA
FANLARINING DOLZARB MASALALARI**
elektron jurnali 15.09.2023-yilda 130346-
sonli guvohnoma bilan davlat ro'yxatidan
o'tkazilgan.

Muassislar: "SCIENCEPROBLEMS TEAM"
mas'uliyati cheklangan jamiyati;
Jizzax politexnika insituti.

TAHRIRIYAT MANZILI:

Toshkent shahri, Yakkasaroy tumani, Kichik
Beshyog'och ko'chasi, 70/10-uy.

Elektron manzil:

scienceproblems.uz@gmail.com