

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В СЕТИ

Веригин В.А., Лихачев И.В., Балабаев Н.К.

Тульский государственный университет. 300012, г.Тула, пр. Ленина, 92 ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 142290, Московская область, г.Пушино, ул. проф. Виткевича, 1, ИМПБ РАН. ilya_lihachev@mail.ru

При проведении крупных серий молекулярно-динамических численных экспериментов в научных лабораториях накапливается большое количество траекторий молекулярной динамики. Возникает потребность в средстве коллективной работы с ними. Цель данной работы – создание интернет-портала, позволяющего визуализировать траектории в сети. Существует множество программ, которые могут предоставить схожий функционал, но большинство из них являются программными продуктами, предназначенными исключительно для использования на персональном компьютере, к ним относятся VMD, PyMOL и TAMM.

Помимо уже упомянутых программных продуктов, также существуют сервисы, позволяющие просматривать статические структуры (PDB-файлов) в сети, но они не обладают функционалом, позволяющим визуализировать трехмерное интерактивное молекулярное кино в сети, если не считать сервисы, которые предоставляют доступ к заранее снятому видео со структурой.

Нами был разработан клиент-серверный программный пакет – Портал анализа траекторий молекулярной динамики – со следующими возможностями:

- Визуализация траекторий молекулярной динамики в виде трехмерного интерактивного молекулярного кино.
- Хранение базы данных вычислительных экспериментов.
- Построение характеристик от времени.
- Хранение базы рассчитанных характеристик.
- Возможность коллективной работы с результатами вычислительных экспериментов.
- Наличие клиент-серверной архитектуры. Как следствие, перенос вычислительной нагрузки на сервер.
- Использование Портала в качестве проигрывателя для демонстрационного материала.
- Интерактивное выделение подструктур (изменение цвета, размера, видимости отдельных групп атомов)

Сервис должен послужить сетевой альтернативой существующим программам анализа траекторий.

Текущая структура Портала позволяет добиться масштабируемости, переноса вычислительной нагрузки на серверное аппаратное обеспечение, коллективной работы над вычислительными экспериментами, а также минимизации сетевого трафика.