

## **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](mailto: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.