

ПОРТАЛ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Веригин В.С.¹, Сырбу Е.Н.¹, Лихачев И.В., Балабаев Н.К.

ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 142290, Московская область,
г.Пушино, ул. проф. Виткевича, 1, ИМПБ РАН. ilya_lihachev@mail.ru

¹Тульский государственный университет 300012, г.Тула, пр. Ленина, 92

Метод моделирования молекулярной динамики (МД) широко применяется в научных исследованиях. Результатами вычислительных экспериментов являются траектории молекулярной динамики. Траекторные файлы представляют собой последовательные записи координат атомов макромолекулы через фиксированные промежутки времени. Эти файлы визуализируются специальными программами в виде интерактивного молекулярного кино. Строятся также зависимости различных характеристик от времени.

В настоящее время доступные программы для работы с траекториями – VMD, PyMOL, TAMM – работают в виде приложений на персональном компьютере. Для работы в интернете доступны несколько программ показа статических структур (PDB-файлов). Процесса показа трехмерного интерактивного молекулярного кино в Сети до текущего момента времени не существует в принципе. Разумеется, если не брать во внимание видео-файлы, а также работу с перечисленными выше программами в режиме удаленного рабочего стола.

Создание Портала преследует несколько целей:

- 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.

Портал рассматривается как сетевая альтернатива существующим программам анализа траекторий. Работа демонстрирует возможность интерактивного просмотра молекулярной графики в динамике в условиях среднескоростных Интернет-соединений (скоростью менее 10 Мбит/с).

Портал будет рассчитан на неограниченное число пользователей. Его можно будет рассматривать и как глобальный проект, и как интранет портал для лабораторных серверов, ввиду ограниченности вычислительных ресурсов рассчитанный только на определенный круг лиц.