

## **СОЗДАНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ПРОГРАММНО – АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНО – ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Бессонова П.М.<sup>1</sup>, Ушакова А.М.<sup>1</sup>, Пицхелаури С.С.<sup>1</sup>, Некрасов К.А.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия  
E-mail: pllбsss@yandex.ru

## **CREATION OF A HIGH-PERFORMANCE HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR SOLVING PROBLEMS OF MOLECULAR DYNAMIC MODELING**

Bessonova P.M.<sup>1</sup>, Ushakova A.M.<sup>1</sup>, Pitskhelaury S.S.<sup>1</sup>, Nekrasov K.A.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin,  
Yekaterinburg, Russia

Analysis of existing software solutions and technologies in the field of molecular dynamic modeling, determination of their advantages and disadvantages, creation of new approaches and algorithms to improve the efficiency of molecular dynamic modeling. Conducting research on commercialization.

Создание высокопроизводительного программно-аппаратного комплекса для решения задач молекулярно-динамического моделирования является актуальной проблемой в современной науке и технологиях, так как данный метод находит применение во многих областях, включая фармацевтику, материаловедение, биологию и химию. Для эффективного моделирования динамики молекул необходим комплекс, который будет представлять собой интеграцию программного и аппаратного обеспечения.

Одной из главных проблем, которую необходимо решить при создании такого комплекса, является обеспечение его высокой производительности. При моделировании молекулярной динамики требуется обрабатывать огромные объемы данных и проводить сложные вычисления с высокой точностью. Поэтому важно разработать программное обеспечение, оптимально использующее ресурсы аппаратуры и обеспечивающее высокую скорость расчетов. Кроме того, необходимы современные аппаратные средства, такие как графические процессоры, специализированные вычислительные системы или кластеры, способные эффективно выполнять сложные вычисления.

Также важно обратить внимание на разработку удобного и интуитивно понятного интерфейса для взаимодействия с программно-аппаратным комплексом. Пользователю необходимо иметь возможность легко управлять процессом моделирования, визуализировать результаты и проводить анализ полученных данных.

В рамках исследования проведен анализ существующих программных решений и технологий в области молекулярно-динамического моделирования, определены их преимущества и недостатки и на основе этого представлены новые подходы и алгоритмы, позволяющие повысить эффективность молекулярно-динамического моделирования. Также проведены исследования по коммерциализации программно – аппаратного комплекса.

В этой связи, основные перспективы исследования заключаются в разработке и создании нового высокопроизводительного программно-аппаратного комплекса, обладающего высокой производительностью и эффективностью в решении сложных задач молекулярно - динамического моделирования.

1. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Часть 1. Пер. с англ. – М.: Мир – 1990. – 350 с.