

分子动力学粗粒化模拟软件

王婷¹ 徐进² 王延颋³

1. 中科院软件所18600103106 wangting@iscas.ac.cn
2. 中科院软件所15110030623 xu_jin@iscas.ac.cn
3. 中科院理论物理所

模拟软件具体内容介绍

1. 分子动力学由计算每个质点上所受的合力求解多体牛顿方程来模拟多体系的运动过程。常用的全原子模型由于粒子规模大、自由度多，无法对研究体系的相行为、相态及相性质有效模拟。但通过粗粒化模拟的方法可以建立微观、介观甚至宏观间的衔接，具有重要意义。
2. 此软件是为计算模拟分子粗粒化后运动变化现象的并行计算软件，结合开源软件DLPOLY/GROMACS/LAMMPS进行粗粒化模拟过程。
3. 通过并行文件读取与优化方程求解计算方法的策略，对应不同的计算规模（构型数），较原方法提升分子动力学（MD）粗粒化建模的计算速度13~17倍（共轭梯度法CG）、53~69倍（Lapack）。
4. 用户使用软件模拟图形界面操作全原子MD模拟、粗粒化建模、粗粒化MD模拟的计算，自动实现其中文件格式转换与计算，更加简易、便捷。

表 MSCG并行优化程序加速比

构型数	500	1000	2000
CG	13.86	17.40	14.43
Lapack	69.42	63.30	53.54



图 分子动力学粗粒化模拟软件界面