

开发研究与设计技术

GridMol系统中蛋白质可视化与建模的性能优化

欧阳刘彬, 孙衍华, 刘继凤, 金 钟, 陆忠华, 迟学斌

(中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心, 北京 100190)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 基于网格计算思想开发一个具有计算化学前、后处理功能的系统GridMol, 其主要功能包括分子可视化、分子建模和计算作业提交。针对GridMol系统中蛋白质大分子显示和建模遇到的性能问题, 给出调整Java 3D场景图进行性能优化的方法, 通过GridMol和其他分子可视化软件的性能比较以及自身优化前后的性能比较, 证明优化方法取得了良好的效果。

关键词 [分子可视化](#); [分子建模](#); [性能分析](#); [GridMol系统](#)

分类号 [TP311](#)

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: [欧阳刘彬](#); [孙衍华](#); [刘继凤](#); [金 钟](#); [陆忠华](#); [迟学斌](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(261KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子可视化; 分子建模; 性能分析; GridMol系统”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)