



GPU加速分子动力学模拟的热力学量提取

<http://www.firstlight.cn> 2010-05-01

近年来，统一计算设备架构(CUDA)的提出和图形处理器（GPU）快速提升的并行处理能力和数据传输能力，使得基于CUDA的GPU通用计算迅速成为一个研究热点。针对含有大规模分子动力学模拟的热力学量提取效率低下的问题,提出了分子动力学模拟的热力学量提取的新方法，利用CUDA设计了并行算法，实现了利用GPU加速分子动力学模拟的热力学量提取。实验结果表明，与基于CPU的算法相比，GPU可以提高速度500倍左右。

[存档文本](#)