

# Molekulární dynamika – Software

Vojtěch Stránský



Existuje spousta alternativ

# Abalone

- Proprietární, ale zdarma
- Jen WS
- Biologické simulace
- Široká podpora metod
- Automaticky definovaná pole pro prvky H, C, N, O
- Vizualizace
- Nepěkná dokumentace

# Amber

- Je prastarý
- Zpoplatněný pro komerční užití
- Jen linux
- Rozsáhlá dokumentace
- Mnoho oficiálních příkladů
- Syntax působí nemoderně

Některé jsou rozšířené a pro nás vhodnější

# LAMMPS

- Open source
- WS, Linux, macOS
- Široce používaný
- Umí více metod
- Není primárně zaměřen na biologii
- Dokumentace je přehledná
- Kompatibilní s Python

# GROMACS

- Open-source
- WS, Linux, macOS
- Primárně zaměřen na biologii
- Méně univerzální
- Rychlý
- Lépe se s ním učí

Existují také knihovny pro běžné jazyky



# Molly.js

- Open source
- WS, Linux, macOS
- Knihovna jazyka Julia – něco jako Python
- Simulaci lze zapojit do dalšího kódu ve stejném Jazyce
- Kompilované, rychlé
- Přehledná dokumentace



Jak se rozhodnout co použít?

# Faktory výběru

- Použití
- Jazyk
- Výkonnost
- Dokumentace
- Udržitelnost



Vizualizace

# Ovito

- Používané
- Předné
- Moderní
- Multiplatformní – Python

# VMD

- Starší
- Méně přehledné
- Mnoho možností
- Hůře se v programu orientuje

Děkuji za pozornost