

課題名(タイトル):

長時間分子動力学シミュレーションのデータ解析プログラムの開発と応用

利用者氏名: 小山 洋平

理研における所属研究室名: 生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム

---

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

所属研究室で開発が行われている分子動力学専用計算機 MDGRAPE-4A では長時間の分子動力学シミュレーションが可能になる予定である。その結果得られる大量の構造データを解析するためのプログラムの開発や応用を行う。

2. 利用がなかった場合の理由

本年度は MDGRAPE-4A で用いるクーロン力の計算手法の参照コードの実装やテストを行うことになり、開発環境の関係で研究室内の計算機を利用することが必須であったため、HOKUSAI の利用がなかった。