

課題名(タイトル):分子科学計算ソフトウェアの開発と応用

利用者氏名:中嶋 隆人

理研における所属研究室名:計算科学研究センター 量子系分子科学研究チーム

---

1. 利用がなかった場合の理由

われわれは、京コンピュータプロジェクトで、超並列スーパーコンピュータの能力を最大限に発揮することを目指して理論分子科学の計算手法とその計算プログラム「NTChem」を開発している。本年度は、とりわけ京コンピュータ上でのソフトウェア開発と高度化に注力したため、HOKUSAI を利用できなかった。来年度はHOKUSAI での性能評価を実施する予定である。