

課題名 (タイトル) :

生体分子粗視化モデルの開発と応用

利用者氏名 : ○木寺 詔紀*, 検崎 博生**

理研での所属研究室名 :

*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 分子スケール研究開発チーム

**京都大学 理学研究科 生物科学専攻 生物物理学教室

現在、我々のグループでは、京での大規模利用にむけての、生体分子粗視化シミュレータ CafeMol の開発とチューニング、性能測定などを行っている。本年度においては、この特別利用において、大規模系のチューニングや性能測定などを行う予定であったが、京において実機でのチューニングや性能測定が、予定通り行えた。結果として、京の特別利用を利用する必要がなくなり、特別利用を利用しての計算は行わなかった。