

電荷を持つ系の溶質加熱レプリカ交換法

量子科学技術研究開発機構 氏名 桜庭俊

目的 レプリカ交換溶質加熱第二(REST2)法は分子動力学計算のサンプリング効率を上げ、高精度の計算を行うための計算手法である。本研究では電荷を持つ系のREST2法の挙動を調査することを目的とした。

内容 REST2法のOCTOPUSへの移植を行い、サイズと電荷の異なるペプチド系での計算を行いその挙動を調査する予定であった。

結果 REST2法を実装したGROMACSをOCTOPUSに移植し、動作確認と検証を行った。当該年度はtool chain, job managerや認証系の問題等で研究が難航し、OCTOPUSでのプロダクトランに至っておらず、有意な結果を得ていない。

利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間 0時間

使用メモリ

ベクトル化率

並列化