

「蛋白質の分子動力学シミュレーション：その精度と計算効率の改善」

講演者氏名	木寺 詔紀
所属	京都大学大学院理学研究科
講演タイトル	「蛋白質の分子動力学シミュレーション：その精度と計算効率の改善」
講演概略	シンプレクティック積分法による高精度シミュレーションとマルチカノニカル分子動力学による高効率なサンプリングを用いて、巨大な蛋白質のシステムをシミュレートする方法について述べたい。