

複雑な分子計算 高速で

阪大、グリッド技術開発

大阪大学蛋白質研究所の中村春木教授、阪大サイバーメディアセンターは7日、学内に分散して存在する3種類の高速コンピュータを結び、それぞれ異なる3種類の巨大な計算プログラムを組み合わせることで複雑な分子計

算を高速処理するグリッド計算技術を開発したと発表した。分子軌道計算、密度汎関数法計算、分子動力学計算を用いた3種類の巨大な計算プログラムと分散している計算機をつないで同時に稼働させたのは初めて。たんぱ

く質など生体高分子の化学反応や分子認識の理解には、複雑なたんぱく質全体の動的構造と局所機能部位での電子状態の詳細な解析が必要になる。全体の解析には分子動力学計算を用い、局所の電子状態を解析するには密度汎関数法を用いるなどプログラムは異なる。た

だ、たんぱく質の相互作用などを解明するうえで、プログラムを組み合わせて同時に解析するシミュレーション技術のニーズは高まっている。分子の電子状態、たんぱく質、細胞、器官・組

織などの個別に開発したシミュレーションプログラムなどの活用も可能なため生体・細胞シミュレーション技術などへの応用が期待できる。研究は文科省のITプログラム「スーパーコン

ピューターネットワークの構築」の一環。同プログラムの成果の産業界への技術移転を目的とした民間非営利団体(NPO)「パイオグリッドセンター関西」の会員なれば開発技術を活用できる。