

新グリッド技術開発

研大蛋白阪

短時間で複雑な分子計算 バイオ研究に威力

大阪大学は七日、同大蛋白質研究所の中村春木教授らのグループが異種種の高速コンピュータをインターネットで接続し、複雑な分子計算を高速で行えるグリッド計

算技術を開発したと発表。算プログラムを連携し、三種類の巨大な計算分散設備されている計算

機を同時に稼働させることができるといふ、こうした技術の確立は世界で初めてという。遺伝子組み換えなどのバイオ研究のスピードアップに威力を発揮しようで、同大医学部が開発を進めているヒトトキチャネル電流シミュレーションプログラムなどに活用する。

中村教授は今回の新技術の研究で、同大サイバームニアセンタの大阪・豊中、同・吹田の二カ所に設置しているコンピュータと蛋白質研究所の分子動力学用計算機を接続した。NECの新プログラムを使いハートレット・フォック方程式を解く分子軌道法計算や、同大理学研究所の山口兆教授が開発したGS-O-Xと呼ばれる新プログラムによるDFT(密度汎関数法)計算などを別々に実行しながら、長大な分子計算を短時間で

行えるという。

これまでの研究では、シミュレーション計算をやめとめる中間データが巨大になるため、バイナリー形式で中間データが処理されるケースが多く、標準化が難しかった。中村教授のグループは、バイナリー形式の一・三倍程度の大きさの異なるプログラムで中間データのやり取りを行えるようにして、高速で複雑な分子計算ができるようにした。

器官・組織などの生体シミュレーションに最適で、同大医学部はこの新技術を使い、筋電位信号発生と心臓呼吸のシミュレーションプログラムの開発を進める。中村教授はこの新技術を企業に公開したいと考えており、創業分野などの発展に貢献したい」と話している。