

大分子の動き模擬 阪 高速電算機をネット接続

大阪大学蛋白質研究所 製作所の研究者も参加した。阪大内の離れた場所にある三種類の高速コンピュータを毎秒一ギガ(ギは十億)級の高速回路で接続。一台のコンピュータでは困難な膨大な計算を分担してこなせるようにしており、グリッドコンピューティングと呼ばれる手法の一種。

開発にはNEC、日立
異なる計算プログラムが
組み込んである。例えば、

が結合する様子を、たんぱく質の構造や電子状態といった様々な角度から分析できる。
従来、異なる計算プログラムを組み合わせる際には、一台の超高速コンピュータに巨大なプログラムを組み込んでいた。新技術なら既存のプログラムとコンピュータをそのまま活用できるので効率がいいという。成果は文部科学省の「バイオグリッド・プロジェクト」の一環。

大阪大学蛋白質研究所の中村春木教授らは七日、複数のコンピュータをインターネットで結び、分子の振る舞いを高速計算で模擬して割り出す技術を開発したと発表した。医薬品開発の基礎研究などに役立つ。特定非営利活動法人(NPO法人)のバイオグリッドセンター関西(大阪府豊中市)を通じて実用化する。