

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成15年度採択研究代表者

長嶋 雲兵

(独立行政法人産業技術総合研究所グリッド研究センター 総括研究員)

「グリッド技術による大規模高精度分子軌道計算技術の開発」

1. 研究実施の概要

新規物質製造の低コスト化のために、分子シミュレーション技術の高度化により、新規物質設計・製造や遺伝子治療の活性化ならびに医薬品開発において、開発時間の短縮や低コスト化等による収益率の向上が期待されている。そのため金属クラスターやタンパク質等の大規模分子系の現象を取り扱える系のサイズ拡大とパラメータの網羅的探索を可能とする分子シミュレーション環境の構築をめざし、グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発を行う。具体的には、1) 射影法による一般化固有値問題解法を分子軌道計算に現れる一般化固有値問題むけに修正し、系のスケーラブルな拡大による大規模分子軌道計算を可能とするシステムを構築する。2) ポテンシャル面探査等網羅的計算を分散処理することで計算効率の向上を図るシステムを開発する。3) 大規模不均一複雑系とプロトンの相互作用の解明を可能とするために、プロトンの波動性を考慮した方法の開発を行い、グリッド技術をもちいて高速計算が可能なプログラムの開発をおこなう。本研究により、生体系やナノサイズの系の現象の理解が格段にすすむばかりでなく、分子シミュレーションの可用性の拡大が加速され、新規材料開発や創薬の効率を上げることが期待される。

2. 研究実施体制

長嶋グループ

- ① 研究分担グループ長：長嶋 雲兵（産業技術総合研究所、総括研究員）
- ② 研究項目：グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発

桜井グループ

- ③ 研究分担グループ長：桜井 鉄也（筑波大学大学院システム情報工学研究科、助教授）
- ④ 研究項目：グリッド環境下でのMO計算用の大規模一般化固有値問題解法の開発