

対話型分子動力学シミュレーション

■ 成見 哲他 (理研GSC・高速分子シミュレーション研究チーム、narumi@gsc.riken.jp)

■ 概要

- 3次元のジョイスティックを使って、分子に働く力を感じ、また力を加えながらシミュレーションできるシステムを開発した。
- 高速の専用計算機MDGRAPE-3により、実用的な規模でスムーズなシミュレーションを実現。
- ここでは、シタロン脱水酵素から阻害剤(カルプロパミド、農薬の一種)を引き剥がす過程をシミュレーションしている。シタロン脱水酵素は稲いもち病の病原菌内でメラニン合成に必須の酵素である。この酵素の働きを止めることにより、稲に進入するときに必要なメラニン合成が阻害され、結果として感染力を弱めることができる。

■ アルゴリズム

- 分子動力学シミュレーション (Amber 8)
- 可視化 (MDVIS)

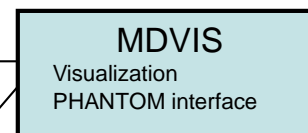
■ 計算規模

- MDGRAPE-3 PCI-X 1枚を利用
- 水を含めて約5,000原子の系でシミュレーション

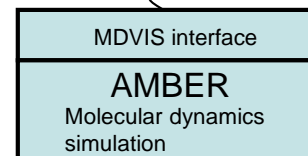
Display in Stereo



PHANTOM
3D pointing
Force feed-back



Socket
communication



MDGRAPE-3 board
Accelerates non-bonding
force calculation

■ どんないことが期待されるか？

- 薬剤開発への応用
- 教育での利用