

分野名: ライフ

巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算

■ プログラム名: ProteinDF

■ 開発

□ 東京大学情報基盤センター・生研 助教授 佐藤文俊

■ 概要

- 複雑かつ大規模・高精度が要求されるタンパク質の全電子を密度汎関数法に基づきカノニカル軌道で計算する。
- 励起状態・電子移動・化学反応をシミュレートするため、これまでの基底状態計算に加えて、励起状態も含めた第一原理分子動力学計算を実行する。

■ アルゴリズム

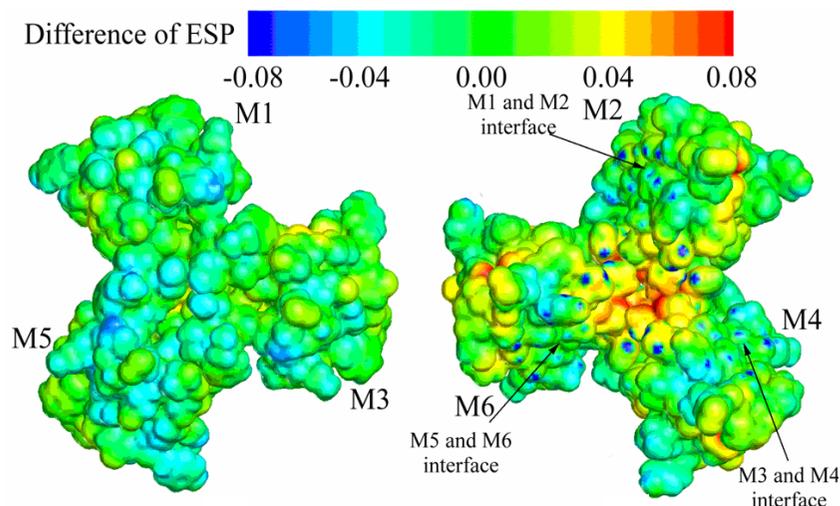
- 基底状態計算: 分子積分・交換相関積分・行列演算のSCF 計算(カノニカル)。計算量は軌道数の3乗に依存。
- 励起状態計算(開発中)。上記+AOダイレクトアルゴリズム。計算量は軌道数の5乗に依存。
- C++
- 行列演算の並列化はライブラリ使用。交換相関積分は原子分割法。分子積分は RT アルゴリズム+シェルタイプ分類均等分割法。全て MPI を使用。

■ 現状での計算規模

- 306 残基、27,000 軌道、基底状態計算(世界最大)
- Altix3700(64 CPU)で実行、300 GFlops
- メモリ容量 256 GB、ディスク容量 1 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- ほぼ全てのタンパク質に対応するため計算規模を3倍に
- 基底状態だけでなく、励起状態のダイナミクスを解析
- メモリ容量 10 PB、ディスク容量 10 PB(励起状態)



インスリン6量体静電ポテンシャルの古典計算との差

■ どんないことが期待されるか?

- 創薬の信頼性の高い基礎研究のみならず、医薬品開発の高品位化および高効率化、ならびに次世代の医薬品研究開発モデルの創成といった応用に貢献できる。
- 方法特許やビジネスモデル特許などを含め欧米に対する優位性を実現できる。
- 触媒、分子素子、環境物質などへの応用も大いに期待できる。

