

ペタフロップス分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 の開発とそのタンパク質科学への応用

泰地 真弘人

理化学研究所 ゲノム科学総合研究センター

ゲノム解析用コンピュータ研究開発チーム

現在我々のグループでは、1 ペタフロップス(10^{15} 演算/秒、地球シミュレータの 25 倍)のピーク性能を目標に分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 の開発プロジェクトを進めている。また、既存の高速専用計算機を用いて分子動力学計算のタンパク質科学への応用研究を行っている。講演ではプロジェクトを紹介し、その得失を説明するとともに、創薬・タンパク質機能解析に対し大規模な MD 計算がどのような新しい方法をもたらすかを論じたい。