

生体分子高速シミュレーターPeach-Grape システム

古明地勇人^{*}、上林正巳

産業技術総合研究所 生物機能工学研究部門・計算科学研究部門
305-8566 つくば市東1-1-1 産総研中央第6

^{*}E-mail: y-komeiji@aist.go.jp

要旨

分子シミュレーションソフトウェアPeachと、多体問題専用計算機Grapeを組み合わせることで、生体分子用高速分子動力学シミュレーションシステムを構築した。完成したPeach-Grapeシステムは、Hin/DNA複合体、トリプトファン・リプレッサー/DNA複合体、カルモジュリンなどの、重要な生体高分子の解析に利用された。なお、Peach-Grapeシステム以外の専用計算機による研究についても、簡単に紹介する。

キーワード：分子動力学、シミュレーション、Peach、Grape、タンパク質、DNA

領域区分：分子計算