

07 インタラクティブ MD シミュレーション

これはコンピュータシミュレーションによって動いているタンパク質を、PHANTOMと呼ばれる装置を使って操作している様子です。PHANTOMにはフォースフィードバック機能があるため、操作する人は動かしている原子が受ける力を感じながら、タンパク質を自由に操作できます。

操作によって新たに加わった力を即座にシミュレーションに反映させ表示するためには、非常に高速な計算機が必要となります。このシミュレーションでは分子のシミュレーションを高速に行うために開発された、分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 を使用しています。これにより、普通のパソコンの100倍以上速いスピードで計算を行っています。

PHANTOMとMDGRAPE-2を使用することでリアルタイムでタンパク質を操作することのできるシミュレーションが実現しました。