

分子の挙動、スパコンで解析 中大など

フトウエアを開発。アンモニアと酸素、メチルラジカルの分子について解析することに成功した。成の原理の研究など、幅広い応用を期待している。

中央大学と京都大学、東京工業大学、理化学研究所の共同チームは、アンモニアなどの大きな分子の挙動を解析する方程式を、スーパーコンピュータで計算することに成功した。複雑な分子の挙動をスパコンの模擬実験で解明するのにつながる成果という。将来の新薬や新素材の開発に応用が見込めると説明している。

ループが「半正定値計画問題(SDP)」と呼ばれる行列計算で比較的簡単に解く手法を2001年に提案した。ただ同手法が適用できるのは小さな原子や分子に限られ、大きい分子では計算量が膨大で処理できなかった。共同チームは京大芸術情報メディアセンターに設置した富士通製の「T2Kオープンスパコン」向けに、同手法の計算ソフトウェアを開発。アンモニアと酸素、メチルラジカルの分子について解析することに成功した。計算時間は最大7万2千秒(50日)。

化学反応の仕組みを、実際に実験せずにスパコンで解明する道を開く成果という。超電導や光合

分子の挙動を解析する手法では「シュレディンガー方程式」と呼ぶ複雑な式を解く方法が一般的だが、別の京大などのゲ