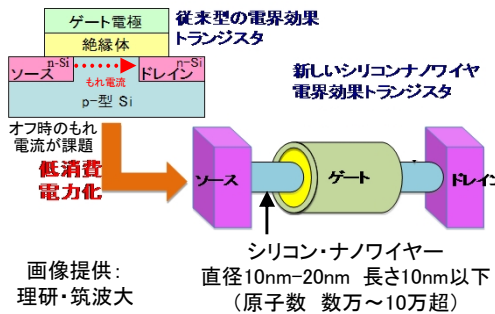
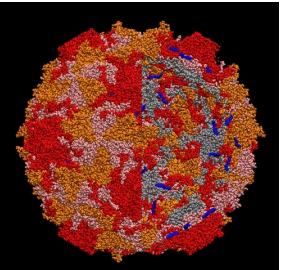
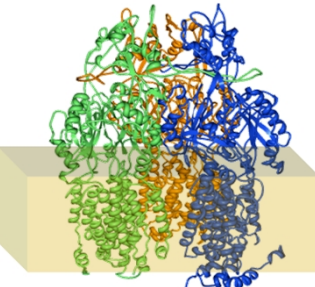
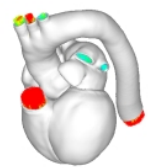


# 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するための ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	ナノテクノロジー分野 〔次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発〕	ライフサイエンス分野 〔次世代生命体統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発〕
概要	ナノ電子デバイスの設計や高効率の触媒・酵素の設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発 (46本のシミュレーションソフトを開発)	タンパク質分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、製薬・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(31本のシミュレーションソフトを開発)
応用例	<p><b>実空間第一原理ナノシミュレータ(HP-RSDFT)</b> ナノワイヤー等の原子構造、電子状態の量子論的計算を、10万原子系(現状は2,000原子程度が限界)で可能とし、高速・高機能、省エネルギーなどの特長を持つ新しいデバイスの設計に貢献する。</p>  <p>画像提供: 理研・筑波大</p> <p>『「京」によるシリコン・ナノワイヤーの第一原理計算』が2011年ゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞</p> <p><b>高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト(MODYLAS)</b> ウイルスとレセプタや抗体の特異な相互作用の解析を、1,000万原子系(現状は5万原子程度が限界)で可能とし、ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化に貢献する。</p>  <p>画像提供: 名古屋大院工学研究科</p>	<p><b>多剤排出トランスポーターにおける薬剤排出シミュレーション</b> (MARBLE/Platypus/CafeMol) 多剤排出トランスポーターについて動作過程を、長時間のサブミリ秒(現状はサブマイクロ秒が限界)での解析を可能とし、薬剤の排出(薬剤の取込、輸送、排出)を再現し、抗生物質等の薬剤が効かなくなるメカニズムの解明に貢献する。</p>  <p>資料提供: 理化学研究所</p> <p><b>マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション(UT-Heart)</b> 細胞レベルから心臓の拍動や血液の拍出などの再現を可能とする心臓シミュレーションを実現し、今までは推測の域を出なかった、ミクロ事象(例えば機能タンパクの異常)とマクロ事象(例えば拡張型心筋症など)の関係を合理的に解明し、医学・医療に貢献する。</p>  <p>資料提供: 東京大学大学院新領域創成科学研究科</p>
体制	分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、京都大学、名古屋大学等、6機関が連携した研究開発体制を構築	理化学研究所を中核に、東京大学医科学研究所、大阪大学、慶應義塾大学等、15機関が連携した研究開発体制を構築