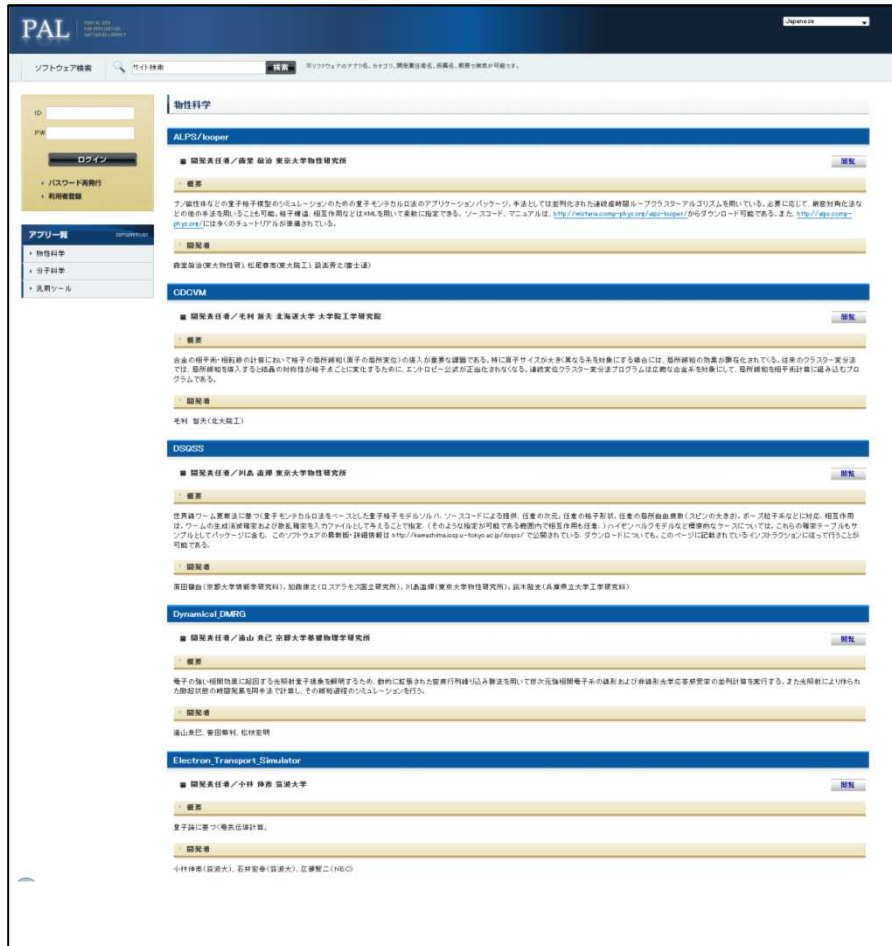


(3) アプリケーションの拡大促進のための取組(1)

- ◆ ナノ、ライフともに、利用マニュアルも整備し、開発したアプリケーションをポータルサイトで公開。
- ◆ ナノでは、実験研究者や企業研究者との連続研究会を開催し、連携を実現。公開後1年間で、アカデミックと産業界合わせて、59件の利用(予定含む)、39件の引き合い。
- ◆ ライフでは、医薬品産業界を対象にしたセミナーを開催し、開発ソフトの紹介や利用事例を紹介。製薬企業を中心にのべ参加数は13社、330名。

ナノアプリ・ポータルサイト
<http://pal.ims.ac.jp>



ライフアプリ・ポータルサイト
http://www.csrp.riken.jp/application_j.html

ライフサイエンスのグランドチャレンジ・アプリケーション・プロジェクト
 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
 Next-Generation Integrated Simulation of Living Matter

HOME 概要 研究チーム紹介 開発アプリケーション 行事・研究会 情報ライブラリ 問合せ先 リンク

開発アプリケーション

分子スケール・アプリケーション

Geno-Central Model (GCM) 量子科学計算(QM)、分子動力学計算(MM)、粗視化モデル計算(CG)の手法を結合したQM/MM、MM/CG法によって、マルチスケールシミュレーションを実現するためのプログラム。

番号	アプリケーション	コード名	開発責任者	所属
M-1	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法 開発の基盤となるクラスライブラリ	mu2lib-K(開発コード名 Platypus-MM/CG)	木寺詔紀	理化学研究所
M-2	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス	REIN-K(開発コード名 Platypus-REIN)	杉田有治	理化学研究所
M-3	全原子分子動力学計算	MARBLE	池口鴻徳	横浜市立大学
M-4	粗視化モデル計算	CafeMol	高田彰二	京都大学
M-5	密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算	ProteinDF	佐藤文俊	東京大学
M-6	ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算	Platypus-QM/MM-FE	林重彦	京都大学
M-7	量子化学計算	Platypus-QM	中村春木	大阪大学
M-8	量子化学計算/分子動力学計算	Platypus-QM/MM	中村春木	大阪大学

個々のコードについてはこちらをご覧ください。
[研究チームのページはこちらです。](#) [このページのTOP▲](#)

細胞スケール・アプリケーション

細胞スケール研究の要となる、細胞シミュレーション統合プラットフォーム。

ボクセル分割で細胞内の現象をシミュレーション

番号	アプリケーション	コード名	開発責任者	所属
C-1	細胞シミュレーションプラットフォーム	RICS	横田秀夫	理化学研究所

個々のコードについてはこちらをご覧ください。

(3) アプリケーションの拡大促進のための取組(2)

ナノ統合ソフト説明会、講習会
(計5回、のべ280名が参加)



ポスターセッションや実習も交えて開催し、アプリ開発者と利用者をより身近に。

生命体統合ソフト説明会、講習会
(計4回、のべ300名が参加)



実験研究者や企業研究者との連続研究会
(計21回、のべ400名が参加、うち民間企業70名)



実験研究者や企業研究者と連携し、半導体材料や燃料電池等の様々なテーマでディスカッション。実験研究と計算科学研究の共通課題を抽出し、アプリ実証研究を実施。

医薬品産業界向けセミナー
(計4回、のべ330名が参加)



創薬研究におけるスパコンへの期待等、利用事例を交えて紹介。製薬企業を中心にのべ13社が参加。

グランドチャレンジアプリケーション
公開シンポジウム
(計8回、のべ1500名が参加)



開発者による講演だけでなく、産業界での利用事例講演やパネルディスカッションも交えて実施。

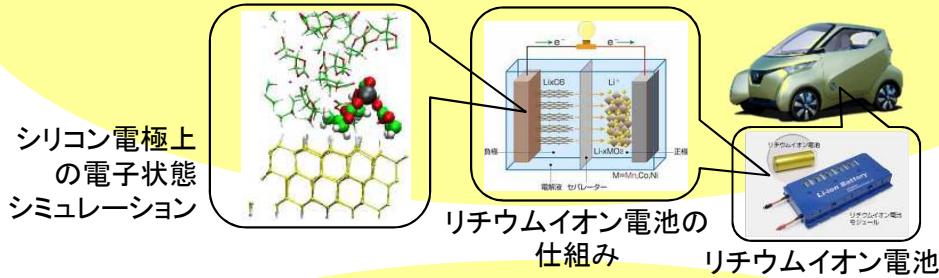
バイオスーパーコンピューティング
シンポジウム
(計4回、のべ640名が参加)



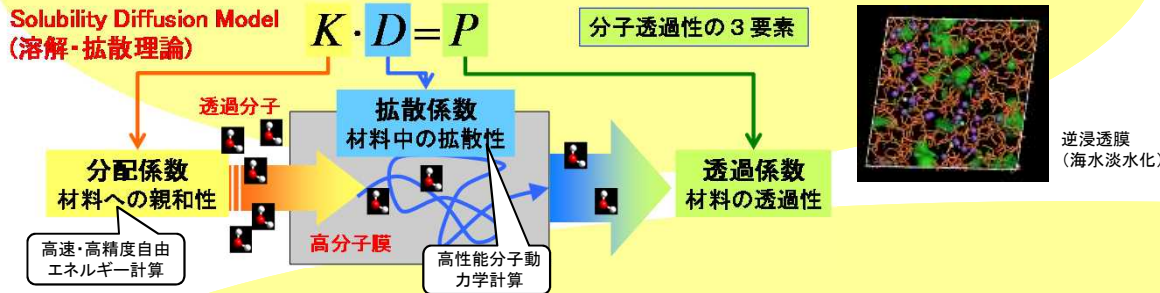
海外から著名な講演者を招待して開催。

(3) アプリケーションの拡大促進のための取組(3)

- 長寿命高安定出力の電池開発のため、日産自動車(株)と共同で、リチウムイオン電池の電極付近の電解質の挙動を、第一原理電子状態計算プログラム「OpenMX」で解析。



- 東レ(株)において、分子動力学シミュレーションソフト「MODYLAS」や「ermod」「REM」を活用して、高分子膜設計における分子シミュレーション技術を構築。海水淡水化用逆浸透膜設計等に展開。



- 超音波治療シミュレーションソフト「ZZ-HIFU」を用いて治療器設計に向けたシミュレーションを行い、超音波治療器の開発に向けて日立アロカメディカル(株)と共同研究。

- 第一三共(株)と共同で、全原子分子動力学シミュレーションソフト「MARBLE」を用いて、創薬のための新しい手法開発に着手。

