

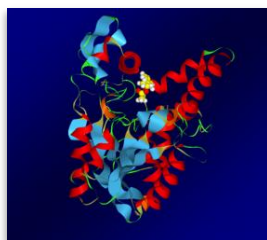
岡山理科大学直島好伸研究室・HPCシステムズ株式会社

連成分子化学計算プラットフォームの開発

～誰でも簡単！迅速！生体・有機分子シミュレーション～

Keywords : シミュレーション・分子(動)力学計算・量子化学計算・使い勝手・簡便化

- ◆分子(動)力学計算・量子化学計算のアプリケーションの使い勝手を改善するソフトウェアを開発しています
- ◆直島研究室の生体・有機分子計算フローをシステム化し、簡単に誰でも使える形にすることで、研究成果の拡大と分子シミュレーション利用の拡大を狙います
- ◆Webアプリケーション技術により、容易なアクセス操作と計算データの管理のしやすさを実現します



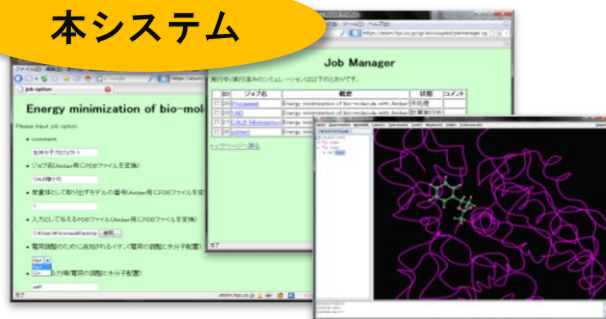
生体分子と有機化合物およびそれら複合体のための分子(動)力学・量子化学計算を支援するシステム

- HIVと治療薬を複合させ結合エネルギーなどから効き目を予測
- 酵素と基質を複合させ結合エネルギーなどから選択性を予測
- タンパク質や有機分子の電荷分布から機能を理解

従来



本システム



- **コマンドインタフェースからの脱却**
計算コマンドを隠蔽し、見つけにくい入力間違いを防止します。
- **ファイル修正の自動化**
数千行ものファイルを手作業で修正する手間を自動化により大幅に低減します。
- **計算データの一元管理**
実行した全ての入出力ファイルに迅速にアクセスできる一元管理インタフェースを提供します。
- **連成計算に対応**
分子(動)力学計算・量子化学計算を連結した計算を構成・自動実行できます。
- **計算機間の自動負荷分散**
バッチジョブシステムに対応し、計算機の最大限の性能を引き出します。
- **計算機のクラウド化**
どこにいてもWebブラウザ経由でアクセスして化学計算を行えます。Windows/Mac/Linux対応。

連絡先 直島好伸研究室 TEL 086-256-9639 E-mail naoshima@sp.ous.ac.jp
HPCシステムズ(株) TEL 03-3599-3652 E-mail renei_sales@hpc.co.jp
担当 渡邊・英