GENESIS Users' Groupの活動

事務局
株式会社理研数理
info@riken-suuri.jp
〒102-0074 東京都千代田区九段南
1-6-5 九段会館テラス

GENESIS Users' Groupでは、次のような活動を行います。

①開発者による最新バージョンの開発状況の紹介と討論
②会員または計算化学の専門家によるGENESISを用いた研究発表と質疑応答
③企業またはアカデミア向け講習会
④その他必要な企画

上記記載の活動を年3回の研究会（講習会を含む）にて実施することを予定しています。このような研究会を通じて、ユーザーはGENESISの開発状況や利用情報を速やかに知ることができ、ユーザー間での情報共有を通じて、より効率的にGENESISを活用できます。

入会条件・会費

GENESIS Users' Groupは、GENESIS開発者または分子シミュレーションおよびその関連分野における研究者からなる、個人会員および法人会員により構成されます。
法人会員は、参加者を複数名、指名することが可能です。会費は無料です。

会員区分	備考
個人会員（企業所属）	
個人会員（大学および研究機関）	学生含む
法人会員	参加者を複数名指名できる

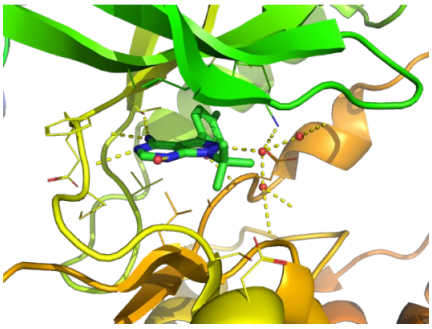
入会方法

理研数理HPにてGENESIS Users' Groupの入会申込みを受付中！
https://www.riken-suuri.jp/solution/users-group/index.html

分子動力学ソフトウェア「GENESIS」

GENESIS
Generalized-ensemble simulation system

「GENESIS」は、国立研究開発法人理化学研究所を中心に開発している分子動力学ソフトウェア（フリーソフトウェア：LGPLv3で配布）で、生体分子を含むさまざまな分子システムのダイナミクスを計算します。生命科学や創薬に加え材料開発分野での応用計算も念頭に種々のアルゴリズムを実装しており、産業界などで幅広い活用が期待されます。



タンパク質とリガンドの結合のシミュレーション結果

「GENESIS」の強み

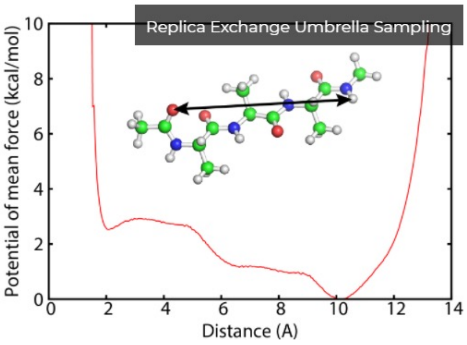
① 大規模計算が可能
- 「富岳」で稼働、高い並列性能

② 自由エネルギー計算（分子の構造探索、タンパク質と薬の結合など）の評価を高度化

③ 高い汎用性と最新機能の実装
- GPU、QM/MM※、反応経路探索、振動解析、粗視化、電顕フィット、など

④ 国産技術における、日本国内でのコミュニティの設立

※Quantum Mechanics/Molecular Mechanics法の略



分子構造自由エネルギー評価のシミュレーション結果