

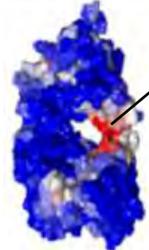
新薬の開発

疾患に対する新薬候補となる化合物の探索を高精度なシミュレーションにより実施。
新薬の開発期間の大幅な短縮。

- 限られた時間内に探索できる化合物の種類が大幅に増大。有効な新薬候補の検出が可能。
- 副作用の有無の予測も可能となり、成功確率が高まる。

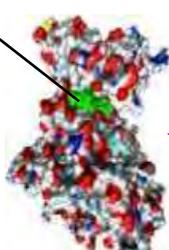
1万種類の新薬候補化合物の探索に要する時間の例
「京」では約**2.4年**に対し、「エクサ」では約**5.5日**。

新薬候補化合物



疾患関連のタンパク質

- 複雑なタンパク質の構造を再現
- 化合物との結合作用を予測



疾患と無関係なタンパク質

副作用

「京」の成果

がんに関するシミュレーションを**300種類**の化合物を対象に約**1ヶ月半**かけて行い、新薬候補を**11個**検出。

自動車の設計

走行安定性能、対衝突性能、燃費性能等の解析の一体的なシミュレーションが可能、迅速な自動車の最適設計の実現が期待。

これまでは、個々の解析プロセスを別々に進め、後ですりあわせ。

数百の解析プロセスを含む設計に要する時間例
「京」では約**1.4年**に対し、「エクサ」では約**3日**。



自動車走行時の空気の流れのシミュレーション例
(スズキ(株)・北海道大学)

「京」の成果

走行安定性能の高精度シミュレーションを個別に実現。