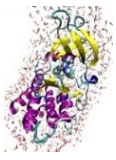


エクサスケール・スーパーコンピュータで解決すべき主な社会的・科学的課題

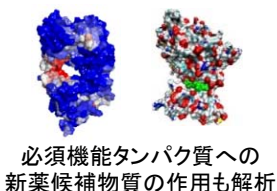
● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

【現状】 **特定の標的タンパク質** (病気の原因物質) に対するシミュレーションにより、**新薬候補物質の絞り込みを効率化**。

新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション



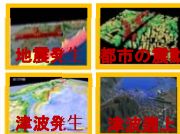
【将来】 **複数タンパク質** (病気の原因物質と必須機能物質) に対する新薬候補物質の影響解析を、**複雑な細胞環境下で行い、副作用の少ない画期的な新薬の早期発見**に貢献。



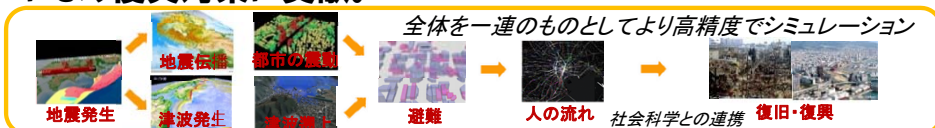
必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

● 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

【現状】 地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な**計算をそれぞれ実施**。



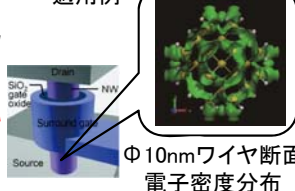
【将来】 地震発生から避難予測までを統合した**広域複合災害の被害予測**によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには**社会科学との連携**により復興対策に貢献。



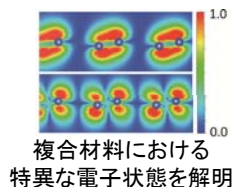
● ナノの世界を操る次世代デバイス科学

【現状】 次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーの**10万原子レベルの電子状態計算**で、**今まで見えなかった電子分布を世界で初めて提示**。

ナノワイヤーデバイス適用例



【将来】 **100万原子レベルの精緻なシミュレーション**により、**ナノ形状がもたらす複合材料や化合物半導体の特異な物性を予測・解明し、画期的な次世代ナノデバイスの開発**に貢献。



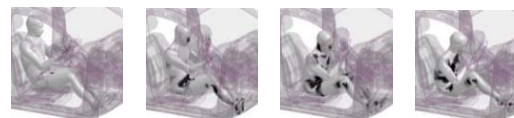
複合材料における特異な電子状態を解明

● 安全性の高い自動車開発

【現状】 様々な衝突条件に対して、**車体の衝突変形の定量的評価**を実現。



【将来】 車への影響だけでなく、**乗員の体への影響** (骨や内臓等の損傷) も評価し、**より安全性の高い車体の開発**に貢献。

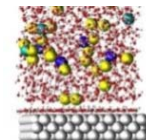


※黒い部分が損傷部位



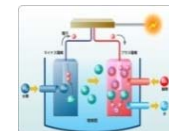
● 安全性・耐性に優れた高性能電池の開発

【現状】 燃料電池等の電極とその周りの電解質との反応を、**簡略化されたモデルで計算**し、電極材料や電解質の電池性能への影響を**定性的に評価**。



白金電極上の電子状態シミュレーション

【将来】 複雑な電子の挙動を、**現実の電極構造のもとで定量的に評価**し、**最適な電極材料や電解質の組合せを実現**。**安全性・耐性に優れた高性能電池開発**に貢献。



燃料電池等の活性や安定性を高精度計算で精緻に予測

● 宇宙の起源と進化の探求

【現状】 宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成のシミュレーションを**それぞれ実施**。



【将来】 宇宙の大規模構造形成から惑星形成にいたる**宇宙全体のシミュレーション**により、**銀河系や惑星系の多様性の起源や進化を解明し、天文学・宇宙物理学の発展**に貢献。

宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成にいたる宇宙全体を一連のものとしたシミュレーション



※ Matthew Baw (エプソン大学)