

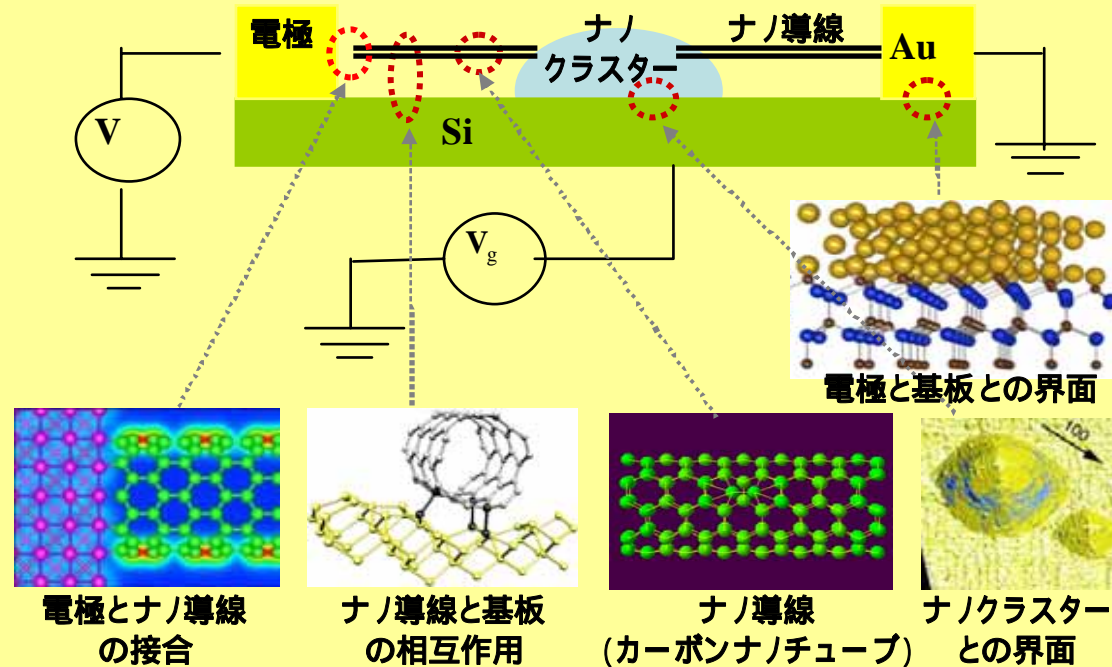
本プロジェクトの実施により期待される 具体的なアウトカム

原子・電子レベルのシミュレーションのナノ電子デバイス開発への活用

従来の半導体デバイスの
限界を超える微細かつ
高性能なナノ電子デバイスの
開発の必要性



デバイスを実現する上で、
材料の選択や全体の電氣的
特性の制御が重要



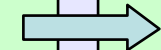
現在のコンピュータ

2千原子程度
(デバイスの一部)
の計算が可能



次世代スーパーコンピュータ

10万原子程度
(デバイス全体)
の計算が可能



デバイスとして最適な
材料や構造の組合せ
を探索

期待される具体的
アウトカム

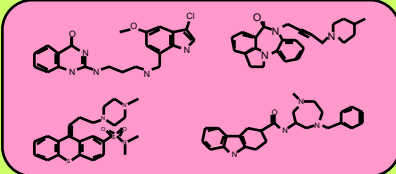
従来にない高速応答、低消費電力デバイスの実現を加速する。

分子シミュレーション等の創薬への活用

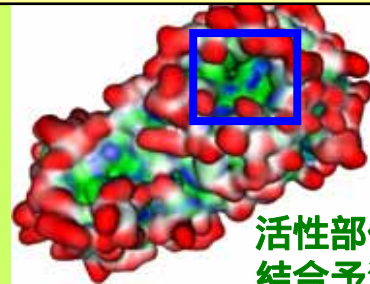
薬剤候補物質の絞り込みと最適化

絞り込み(薬剤候補物質の抽出:約100万個 数100個)

様々な薬剤候補物質



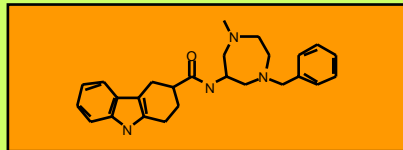
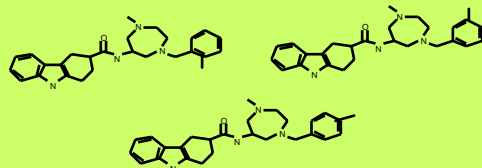
作用



活性部位への結合予測など

候補物質の作用をより高精度・高速にシミュレーション

最適化(毒性の軽減、水溶性の向上など)



従来は実験手法のみであった新薬候補物質の最適化をシミュレーションで実現

最適化に要する計算時間

現状

150年

次世代スパコン

6ヶ月(アプリケーションの工夫により短縮を検討中)

シミュレーションの適用による効果

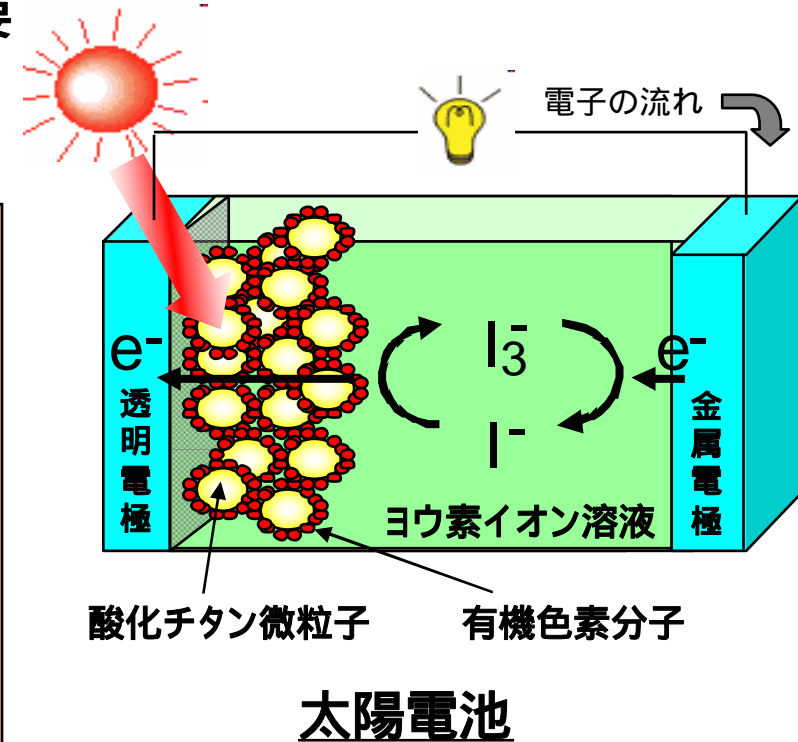
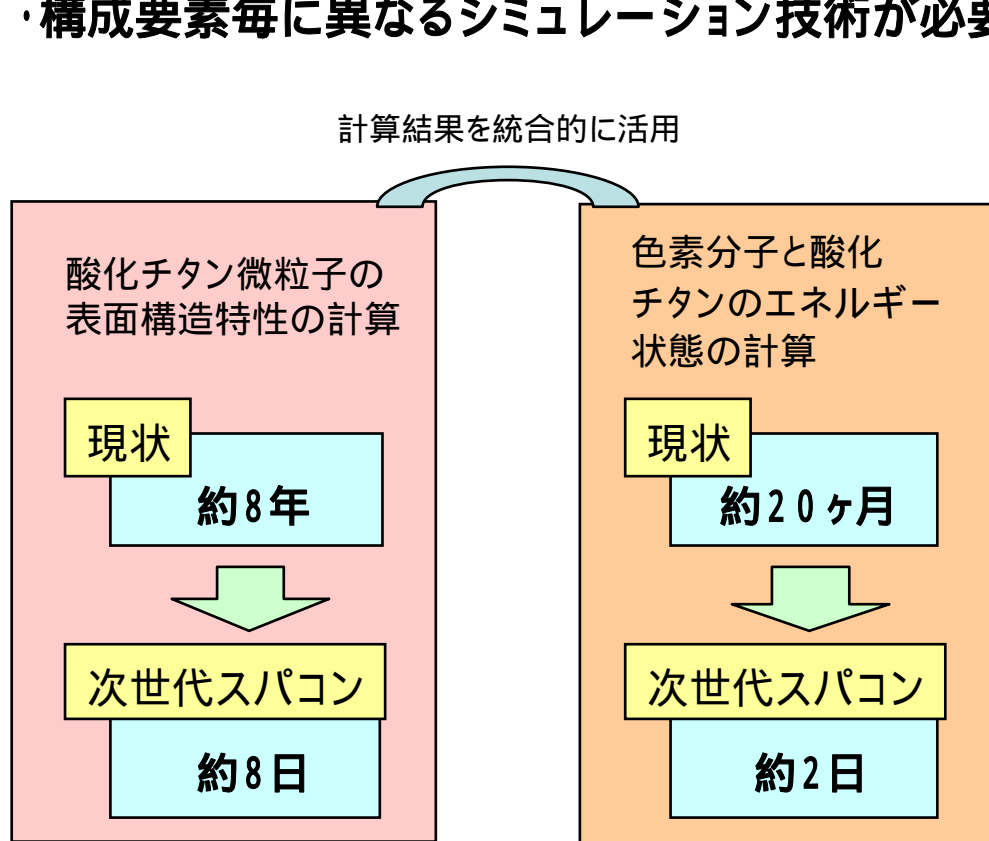
実験動物を用いた前臨床研究の段階まで、コストと時間のかかる実験の必要性を大幅に縮減。

期待される
具体的アウトカム

シミュレーションに基づいて新薬候補物質を高精度かつ高速に探索することにより、新薬開発の期間短縮及びコスト削減を実現して、新薬開発の国際競争力強化に資する。

原子・電子レベルのシミュレーションの太陽電池設計への活用

- ・色素増感型太陽電池の構成要素のシミュレーション
- ・構成要素毎に異なるシミュレーション技術が必要

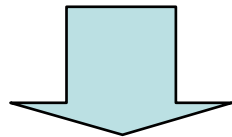


期待される
具体的アウトカム

構成要素毎に適した原子・電子レベルのシミュレーションを活用し、エネルギー変換効率の高い太陽電池の開発期間が短縮される。

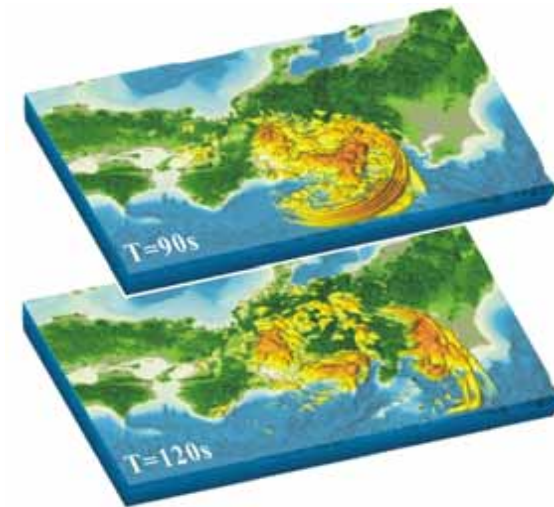
地震波伝播・強震動シミュレーションの 地震防災・耐震設計への活用

複雑で不均質な地下構造を地震波が伝わり、地表に強い揺れを作り出す過程の計算を行い、地面の揺れを見積もる。



次世代スパコン

次世代スパコンでは約100倍の細かさで計算可能



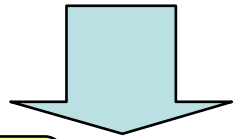
地振動のシミュレーション結果

期待される具体的アウトカム

- ・木造家屋から超高層ビルなどの多様な人工建造物の揺れに対応した広帯域の強震動の予測を実現し、地震防災への実用化が期待される。
- ・計算した地震波形は、大地震時の震度の予測だけでなく、個々の建物被害の予測まで適用範囲が広がり、地震に強い社会基盤とビル設計等に直接活かされる。

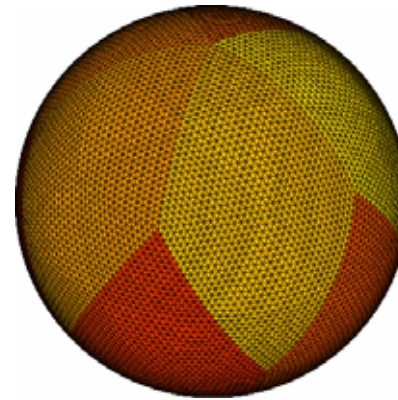
全球雲解像大気大循環モデルの 台風・集中豪雨の予測への活用

全球を対象とした気象
シミュレーション

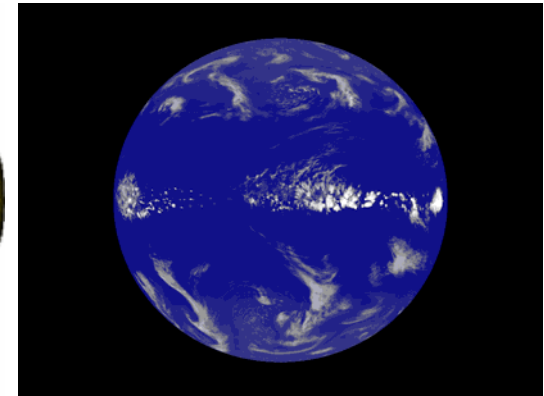


次世代スパコン

従来の3.5kmスケールが、400m
スケールでシミュレーションが可能
になる。



正20面体格子



3.5kmメッシュ全球雲解像モデルによる水惑星実験の雲画像

期待される具体的アウトカム

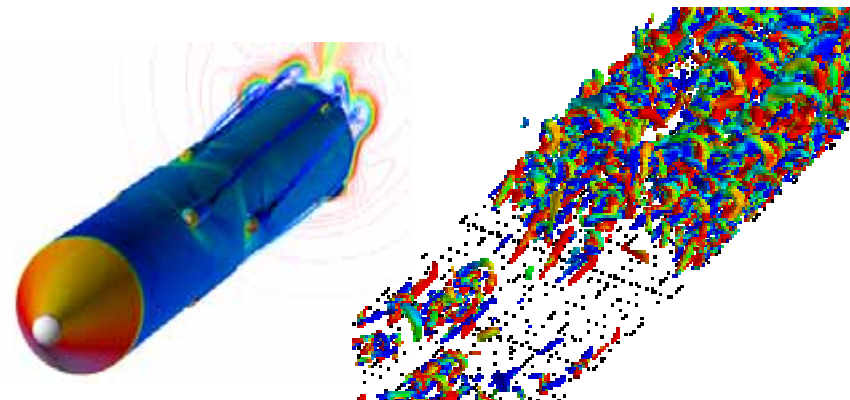
- ・雲に関する任意性の少ない、より精度の高い気候予測が可能になる。
- ・背の高い積雲(高さ 10 km)から浅い層積雲(高さ 1 km)までの雲を直接計算することが可能になる。
- ・気候変動に伴う台風や集中豪雨など極端現象の予測情報を提供できる。

航空・宇宙機解析における圧縮性流体計算の 空力性能の改善への活用

航空・宇宙機全機周りで発生する乱流の予測と発生メカニズムの解明を行うためには、十分に細かい格子で計算を行う必要がある

次世代スパコン

従来は粗い格子(150x100x200)でシミュレーションを行っていたが、細かい格子(5,000x5,000x200)でシミュレーションが可能となる。



M-Vロケットのローリング
モーメント評価解析

乱流の渦構造の発達

期待される具体的アウトカム

・航空・宇宙機周りの流れのシミュレーションが高精度で可能となり、これまで不可能であった乱流の予測と発生メカニズムが解明できるようになる。これにより、航空・宇宙機の大幅な空力性能の改善や、革新的な設計開発に資する。