

期待される成果および効果

● 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。

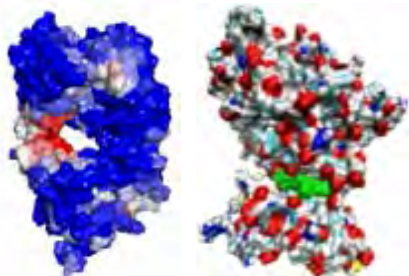


新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション



【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。

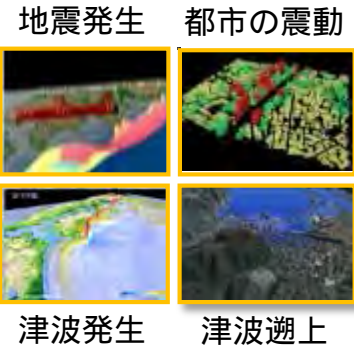


必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

● 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

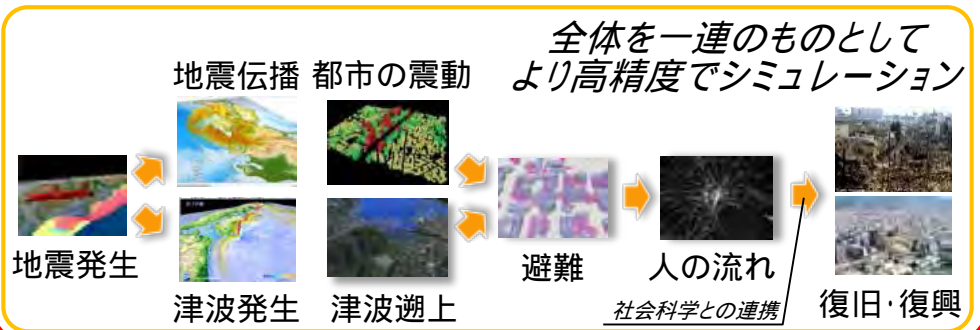
【現状】

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。



期待される成果および効果

● 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。

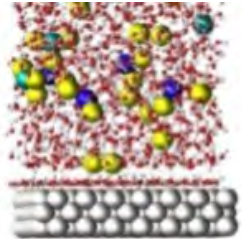


黒い部分が損傷部位

● 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。

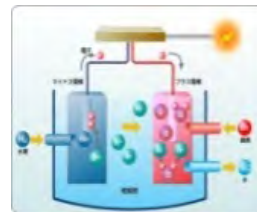


白金電極上の電子状態シミュレーション



【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

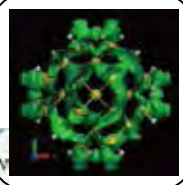
期待される成果および効果

● 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。

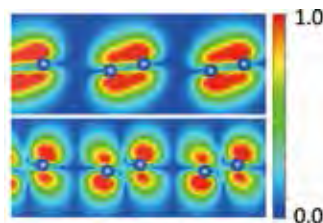
10nmワイヤ断面の
電子密度分布



ナノワイヤデバイス
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

● 宇宙の起源と進化の探求

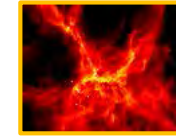
【現状】

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。

宇宙の大規模
構造形成
シミュレーション



銀河形成
シミュレーション



星形成
シミュレーション

惑星形成
シミュレーション

【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。

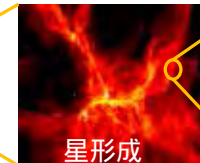
宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成にいたる
宇宙全体を一連のものとしたシミュレーション



宇宙の大規模
構造形成



銀河形成



星形成



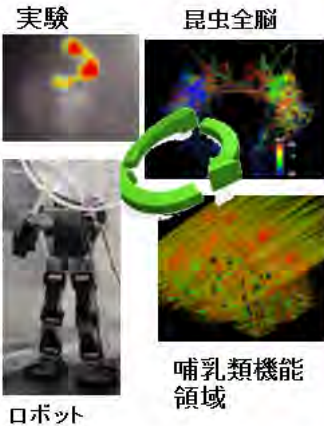
惑星形成

より発展的・挑戦的テーマ (例)

● 知能を再現する脳研究

【現状】 単一神経記録や組織学からつみあげた局所回路とそれを束ねた皮質・小脳や昆虫ニューロパイルという**脳の一部のシミュレーション**

【将来】 人間脳規模の神経回路シミュレーションや昆虫全脳規模のリアルタイムシミュレーションに基づき**入出力する脳領域や昆虫全脳**を詳細に構築。イメージングや、ロボット等からの環境情報を用いインタラクティブな計算を行い、**脳の可塑的变化を再現して、考えるコンピュータや脳の病気の治療・こころの理解**



● ビッグデータを活かした次世代ゲリラ豪雨予測

【現状】 **1～数時間毎**の観測データを使った**数キロメートル解像度**のシミュレーションにより、**10数時間後の天気**を予測。

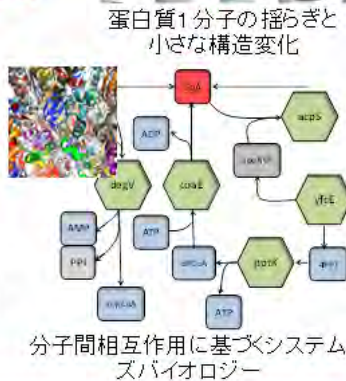
【将来】 **30秒毎**の観測データを使った**数10メートル解像度**のシミュレーションにより、**30分後のゲリラ豪雨**をピンポイントに予測。



● 分子機能と細胞システムの接続

【現状】 **蛋白質、核酸など1分子**の揺らぎと小さな構造変化の**分子動力学計算**

【将来】 **複数の蛋白質や核酸**の分子間相互作用で**細胞システム**を記述し、信号伝達や細胞分化、遺伝子発現など**細胞機能の理解と予測**につなげるマルチスケール計算。これにより、**疾患の治療や再生医療に将来的に貢献**。



● 天然光合成の解明と人工光合成の構築

【現状】 光合成系の**部分的なシミュレーション**は可能。例: 光合成系の活性中心の**高精度電子状態計算**、**2万原子程度**のタンパク質の大規模量子化学計算。

【将来】 電子理論とダイナミクスの連成によるマイクロからマクロに渡る**多階層な現象**をシームレスに記述し、**天然光合成のメカニズム**を理解する。これにより、**人工光合成を制御するためのエネルギー原理を確立、次世代エネルギー源の開発に貢献**。



Spring-8による構造解析。構造はわかるがメカニズムはわからない。

