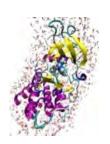
期待される成果および効果

● 最適な治療を実現する 画期的な新薬開発

【現状】

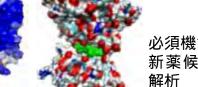
特定の標的タンパク質(病気の原因物質)に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。



新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合ションーション

【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。

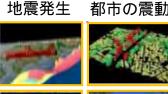


必須機能タンパク質への 新薬候補物質の作用も 解析

● 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。



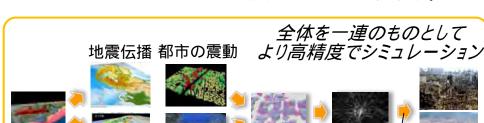




津波発牛 津波朔上

【将来】

地震発生から避難予測までを統合した <u>広域複合災害の被害予測</u>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。



也震発生

津波発生 津波遡上

人の流れ社会科学との連携

復旧

_{・の連携}/ 復旧・復興

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。









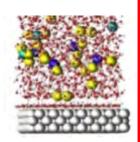


黒い部分が損傷部位

● 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。



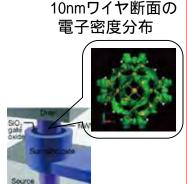
燃料電池等の活性や安定性を 高精度計算で精緻に予測

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】

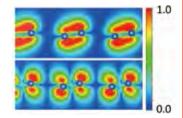
次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーの10万原子レヘルの電子状態計算で、今まで見えなかった電子分布を世界で初めて提示。



ナノワイヤーデバイス 適用例

【将来】

100万原子レヘ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テーハイスの開発に貢献。

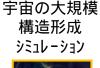


複合材料における 特異な電子状態を解明

● 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。













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。

Matthew Baw (エクセター大学)

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









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、脳の可塑的変化を再現して、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。



分子間相互作用に基づくシステム ズバイオロジー ▼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 ミ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。

