

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

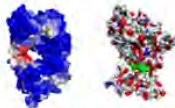
● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

【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



● 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。

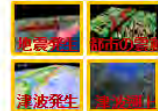


※ 黒い部分が損傷部位



● 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。



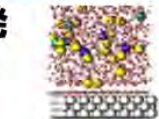
【将来】地震発生から避難予測までを統合した広域複合災害の被害予測によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには社会科学との連携により復興対策に貢献。



全体を一連のものとしてより高精度でシミュレーション

● 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。

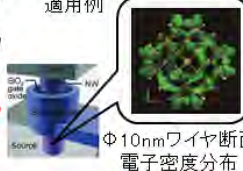


燃料電池等の活性や安定性を高精度計算で精緻に予測

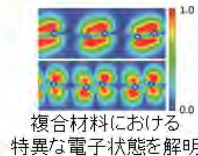
● ナノの世界を操る次世代デバイス科学

【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

● 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 Bary (MIT) 大衆