

物質科学

年代 課題	2012 ~	2014 ~	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~
半導体電子デバイス	100万原子系の第一原理計算(O(N)法)		1000万原子系		1億原子系	
	1万原子系の第一原理計算(O(N ³)法)		10万原子系			
光・電子材料	10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス			数10nmの実在系ナノ構造体		
生体分子機能・創薬	1000万原子系の古典分子動力学計算		1億原子系		10億原子系	
分子構造・分子機能	ナノスケール分子系の高精度計算			分光学的精度での分子構造の予測		
ソフト分子	量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化					
	マルチスケール手法の開発、統計力学理論の高度化					

図 4.2-1 物質科学ロードマップ (1)

年代 課題	2012 ~	2014 ~	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~
物質・エネルギー変換	数百原子系のQM/MM-MD		1000原子系		数千原子系	
界面・表面	10nmサイズの気相・固相界面		数十nmサイズ		100nmサイズの気液界面	
構造材料	数百パラメータのマルチスケール計算		数千パラメータ		数万パラメータ	
熱交換デバイス	100億原子系の分子動力学計算		1兆原子系		100兆原子系による気液混相流	
強相関電子系	100万格子点の量子モンテカルロ計算		1000万格子点		1億格子点の量子磁性体	
	1000格子点の変分モンテカルロ計算		数千格子点		1万格子点の強相関材料	

図 4.2-2 物質科学ロードマップ (2)

地球科学

気象・気候科学

固体地球科学

年代 課題	2012～	2014～	2016～	2018～	2020～	2022～
地球環境監視 予測システム	中解像度シームレス予測システムの開発 地域スケールの詳細温暖化予測 ・確率的予測手法開発 ・一様格子力学コアの導入 ・領域モデル、GCM改良			高解像度シームレス予測システムの開発 地球環境再解析・再予測システム構築 ・ESM要素モデル開発・結合 ・古気候や惑星大気モデリングによる ESM検証 ・生物化学過程データ同化		
スケール間 相互作用解明	大気・海洋の乱流と大規模場の相互作用解明 GCMパラメタリゼーション改良 ・LES・雲物理モデル結合 ・海洋高解像モデル改良			化学-エアロゾル過程相互作用解明 固体動態と群集動態の関係解明 ・エアロゾル-大気化学結合系モデル開発 ・固体ベース生態系モデル(陸域・海洋)開発		
高解像度 気象予報	高解像度アンサンブル予測モデルの開発 1-2km雲解像モデルによる局地的強雨の直前 予測と確率的予測の実証実験 ・ストームスケール、雲解像スケールのデータ 同化手法の開発と統合			超高解像度アンサンブル予測モデルの開発 0.5-1kmモデルによる確率予報の実証と再生 可能エネルギー供給・大気汚染の精密予測 ・氷相を入れたデータ同化技術開発 ・高精度の風系・物質輸送再現モデル開発		

図 4.3-4 気象・気候科学ロードマップ

年代 課題	2012～	2014～	2016～	2018～	2020～	2022～
被害予測	地震発生・波動伝播・都市震動・ 津波遡上・破壊・漂流等のモデル化				被害予測・ 避難最適化	
地殻モデル	様々な規模の破壊現象のモデル化				地殻モデル構築と 大破壊前状態解明	
プレート境界 モニタリング& 推移予測	プレート境界固着・すべりモニタ& 予測システム構築				推移予測の実用化 と予測情報発信	
全球マントル・ コアダイナミクス	熱輸送・物質循環過程・ 磁場形成メカニズムの解明				大陸形成等の物質分化過程・ コア実粘性計算の実現	

図 4.3-5 固体地球科学ロードマップ

ものづくり

熱流体解析

年代 課題	2012 ~	2014 ~	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~
アルゴリズム開発	エクサに向けた産業利用の全体像の検討、 アルゴリズム開発					
基盤S/W開発		エクサに向けた基盤S/Wの研究開発				
実証・実用化研究	Re数 10^6 に対するLESの実証研究	多目的設計探査手法の実証研究			Re数 10^7 に対するLESの実証研究	
		100億~1,000億格子規模のLES解析(自動車、ターボ機械など)				
実用化フェーズ					10兆~100兆規模格子のLES解析 (航空宇宙、高圧ターボ機械など)	
	RANS計算による設計探査				LES計算による設計探査	

図 4.4-3 熱流体解析ロードマップ

構造解析

年代 課題	2012 ~	2014 ~	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~
解析技術 研究	大規模構造物の まるごと解析技術の開発			熱・流体効果の取込みによる まるごと詳細解析技術の開発		

図 4.4-5 構造解析ロードマップ