生命科学

年代 課題	2012～	2014～	2016～	2018～	2020～	2022～
分子創薬	タンパク質、生体膜、DNAなどのダイナミクス		生体超分子複合体や細胞環境など巨大系のダイナミクス			
	MD計算を用いた医薬品候補の探索（数百から数千）		膜タンパク質を含めた複雑なターゲットタンパク質への適用			
細胞臓器医療	細胞内シグナル伝達反応経路のモデル構築	分子混雑等の細胞環境の導入	細胞の分化、癌化、増殖等の機構の解明と細胞集団への拡大（1，000秒オーダーの予測性）		シグナル伝達に加え、代謝系、遺伝子発現系を導入へ（10，000秒オーダーの予測性へ）	
	血小板や血小板による血栓形成		細胞反応を基とした組織・臓器・器官の生化学血流連成シミュレーション			
	血流解析シミュレーションの大規模化と並列化		生物の代謝反応のモデリングと、その血流解析シミュレーションへの導入		代謝反応と血流解析連成による循環器シミュレーションへの適用	
	超音波治療シミュレーション		Drug Delivery System (DDS)において超音波制御を用いる			
脳神経	視覚野神経回路網モデルシミュレーション		人間全脳単純モデルシミュレーション			
	カイコガ詳細モデルでの嗅覚＝運動系リアルタイムシミュレーション		カイコガモデルでの全脳詳細モデルリアルタイムシミュレーション		人間の全脳の詳細モデルシミュレーション	
遺伝子ネットワーク解析	現状256サンプル512 ネットワークの解析	40倍の規模の解析		100倍～の規模の解析		
ガンゲノム解析	2,000人規模	第3世代シークエンサー		第4世代シークエンサー200,000人規模による解析		

図 4.1-2　生命科学ロードマップ

出所）計算科学ロードマップ　中間報告書　2013年9月
将来のHPCIシステムの在り方に関する調査研究「アプリケーション分野」

物質科学

図 4.2-1 物質科学ロードマップ（1）

図 4.2-2 物質科学ロードマップ（2）

出所）計算科学ロードマップ　中間報告書　2013年9月
将来のHPCIシステムの在り方に関する調査研究「アプリケーション分野」

地球科学

気象・気候科学

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 ・海洋渦解像モデル改良	化学－エアロゾル過程相互作用解明 個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 ・個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

固体地球科学

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
	地震発生から都市災害までの連携計算・復旧過程	
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
	変形・破壊モデルと地震波散乱・減衰モデルの統合	
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
	モニタ実用化・予測システム妥当性検証・改良	
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
	プレート運動とマントル対流・マントルとコアのカップリング	

図 4.3-5 固体地球科学ロードマップ

出所）計算科学ロードマップ　中間報告書　2013年9月
将来のHPCIシステムの在り方に関する調査研究「アプリケーション分野」