

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 ←→	