

5-2 シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する 新たな学術分野の開拓（自然科学研究機構）

自然界の事象はマイクロからマクロまでの多数の階層で構成され、それぞれの階層に固有の運動法則に支配されている。さらに全体としては階層間で相互作用しながら時間発展し、その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは国立天文台、核融合科学研究所、分子科学研究所が連携して、自然科学における階層性、構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに、関連研究機関との連携を推進することにより、学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として、物質創成過程などを対象とした「分子シミュレーションとその応用」、階層的構造の物理を結びつける「連結階層シミュレーション」、惑星形成や星間ダスト進化などに関連した「ダスト成長・破壊」、地球外知的生命探査計画「SETI (Search for Extra-Terrestrial Intelligence)」、表面・界面での反応や分光、「プラズマと中性ガス、液体、固体との相互作用」、「データ科学におけるシミュレーション」、「シミュレーション未来学」、基礎科学における「階層性」等の学際的な研究テーマで連携シンポジウムを2022年1月6、7日にオンラインおよびオンサイトでのハイブリッド研究会として開催した。さらに、理論・計算分子科学に関する人材育成を目的とした電子状態理論、分子シミュレーションに関する講習会も開催した。