

### 5-3 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」、生命現象や不均一触媒反応のための「界面の化学反応とダイナミクス」、プラズマ医療応用などで見られる「プラズマと中性ガス、液体、固体との相互作用」、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」、各科学分野における「深層学習とデータ科学」、基礎科学における「階層性」等をテーマとした連携シンポジウムを2021年1月7、8日にオンライン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。