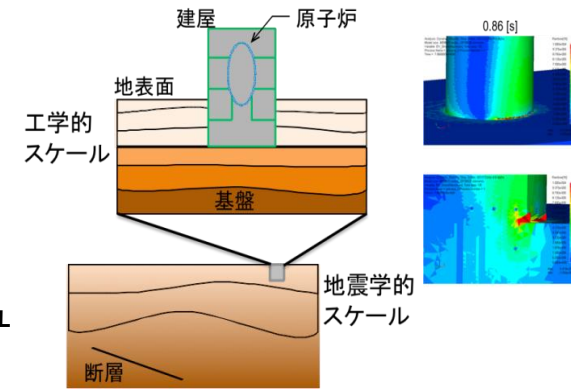


2. サイエンスロードマップ「分野横断的課題」 (2/9)

地震における構造物の耐震性解析

(「防災減災」分野と「ものづくり」分野の横断的課題)

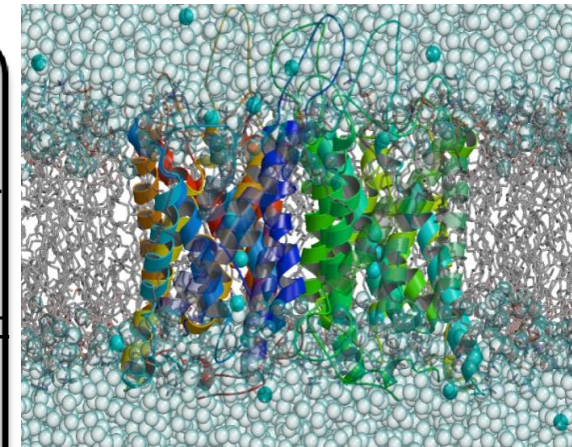
- 地震シミュレーションと構造解析の連成による大規模複雑構造物の地震時挙動の精緻化
 - 設計・保守活動への結果のフィードバック → 構造物のより一層の耐震性向上
 - 被災時の正確な状態予測 → アクシデントマネージメントの高度化
- 例: 最大級の耐震性の確保が必要な原子力発電所の評価
 - 高精度な地震動シミュレーション結果を入力した原子力関連構造物の振動シミュレーション結果の参照
 - 地震とそれが引き起こす津波の多数のシナリオに対する耐震性を調査



タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析

(「生命科学」分野と「物質科学」分野の境界に位置した横断的課題)

- 二つのアプローチの融合
 - 細胞、臓器等の高次の生命現象へのつながりを意識した生命科学的アプローチ
 - 電子や原子・分子さらには分子集団における物質的側面を重視した物質科学的アプローチ
 - 精度の高い物質科学方法論を駆使して、より高次の生命科学的に重要な現象に関わる問題に挑戦
- 効果が高く副作用の少ない薬品分子(低分子, 高分子を含む)の開発の加速
- 生体親和性の高いインプラントや抗原を検知するセンサーの設計などのバイオ・ナノの境界領域のシミュレーションが可能になると期待

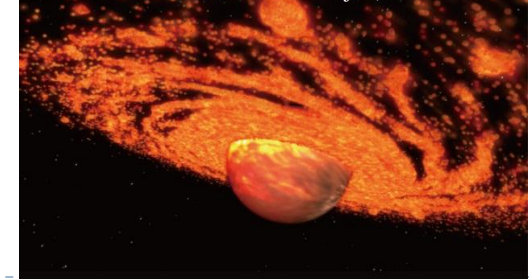


惑星系の形成、惑星の多様性、構造の理解

(宇宙科学分野と地球科学分野の横断的課題)

- 惑星系の形成
 - 太陽系など複数の惑星をもつシステムの形成過程の解明
- 地球・惑星の形成
 - 衛星との相互作用による地球、木星など、様々な惑星の形成過程の解明
- 地球を含めた多くの惑星表層環境・構造の形成と進化の理解

巨大衝突による月形成のシミュレーション例
原始地球に原始惑星が衝突し、月が誕生した。
100,000体の粒子を用いた重力多体計算の結果をもとに作成。(©武田隆顕, 4D2U Project)



横断的課題：生体分子シミュレーション

検討メンバー

分野1(生命科学分野)

杉田有治(理研)

山下雄史(東大)

池口満徳(横浜市大)

分野2(物質科学分野)

藤堂真治(東大)

吉井範行(名古屋大学)

分野4(ものづくり分野)

高木亮治(宇宙航空研究開発機構)

望月祐志(立教) * 物質科学分野も

山崎隆浩(富士通) * 物質科学分野も

全体取りまとめ

富田浩文(理研)

検討会議

2012/9/5 (水)

参加者: 富田, 藤堂, 杉田, 望月, 山崎, 山下, 池口, 吉井

1. 白書(第2版)での記載について

今年度中に作成. 横断的課題の章を新たに設ける.

その中に, 「生命分野」「物質分野」「ものづくり分野」横断的課題である生体分子シミュレーションの節を設ける.

2. 記載内容

基本的に適用対象を軸にしてまとめる. 今回あがった例は,

○創薬 (古典MD, FMO等; 低分子のpKaなどの物性予測等も含む)

○ナノバイオ境界領域 (医療用インプラント, バイオミネラリゼーション, 人造抗体, DNAを利用した医療用診断センサーといったバイオセンサー等)

○ウイルスの機能解析

内容に関しては, 各分野に残すものと, 横断的課題に移すもの, 新規に横断的課題に加えるものなどの切り分けを行う必要がある.

検討会議

3. 作業手順

まずは、池口が箇条書き程度で、内容を記した資料を作る。

富田・杉田らが、横断的課題の章の中の構成案を提示。その構成に沿って執筆分担をお願いする。

4. 学会などでの議論

基本的には、分野ごとの学会等で議論をお願いする。

関係学会・研究会は、理論化学討論会、分子科学討論会、分子シミュレーション研究会、溶液化学研究会、バイオスーパーコンピューティング研究会、生物物理学会、蛋白質科学会、日本バイオインフォマティクス学会 (JSBi)、情報計算化学生物学会 (CBI)。

5. 性能評価用アプリケーション提供

ミニアプリ公開に関して意見が出た。基本的には各分野でアプリを出して、類似アプリは調整する。古典MD, FMOについては担当者間で情報交換をすることになった。