

# 【シミュレーション・モデルの最新技術動向】 バイオとナノシミュレーション技術の最先端

日 時：2005年11月14日（月）13:00～17:00 主 催：横幹技術協議会、横幹連合  
会 場：日本教育会館 7階 中会議室（東京都千代田区一ツ橋2-6-2）

参加費：横幹技術協議会会員企業の関係者、横幹連合会員学会の正会員、学生は無料。

【上記以外】一般5,000円

参加申込：【事前登録】ホームページ(<http://www.trafst.jp/>)よりオンライン登録いただくか、  
下記の参加申込書にご記入のうえ、fax または電子メールにてお申し込みください。  
(氏名、所属、連絡先 Email、TEL、参加費の支払い方法等をご明記ください。)

【当日申込】当日直接、受付へお越しください。(ただし定員に達し次第、受付終了となります)

【企画趣旨】シミュレーション技術あるいは計算科学技術はこれからの科学技術における中心的手法であり、学会のみならず産業界からもきわめて多くの期待が寄せられている。すでに計算科学技術は、あらゆる産業において多かれ少なかれ活用されており、品質、経済性、安全性向上などの面で大きな貢献をしている。特に、バイオとナノは21世紀の産業分野においてもっとも期待がもたれているものであるが、この中でのシミュレーション技術や計算科学技術は不可欠な手法であると考えられている。今回のフォーラムでは、この方面の代表的研究者から最新の動向や今後の方向について多面的に議論をしていただく。

## 【プログラム】

司会：矢川元基（東洋大学）

- |               |   |                         |
|---------------|---|-------------------------|
| 13:00-13:10   | 開会あいさつ  | 木村英紀（横幹連合 副会長）<br>(敬称略) |
| 13:10-13:45   | ◆計算科学技術が拓く新たなナノの世界<br>「ナノテクシミュレーションの現状と課題」              | 寺倉清之（北海道大学）             |
| 13:45-14:20   | 「ナノ物質の物性・機能解析シミュレーション」                                  | 大野隆央（物質・材料研究機構）         |
| (14:20-14:35) | 休憩  |                         |
| 14:35-15:10   | ◆生物の仕組みに挑むバイオ計算科学技術<br>「生体硬組織のイメージベース・マルチスケール・シミュレーション」 | 高野直樹（立命館大学）             |
| 15:10-15:45   | 「バイオシミュレーションのための拡張アンサンブル法」                              | 岡本祐幸（名古屋大学）             |
| (15:45-16:00) | 休憩  |                         |
| 16:00-16:50   | ◆パネルディスカッション<br>「シミュレーションを活用したナノ・バイオの拡大」                | モデレーター：矢川元基（東洋大学）       |
| 16:50-17:00   | 閉会あいさつ  | 桑原 洋（横幹技術協議会 会長）        |

## 第8回横幹技術フォーラム 参加申込書

- 1.お名前：\_\_\_\_\_ 2.ご所属：\_\_\_\_\_
- 3.電子メール：\_\_\_\_\_ 4.TEL：\_\_\_\_\_
- 5.参加費区分：※該当するものに○印をつけてください。  
(a) 横幹技術協議会会員企業の関係者 (b) 横幹連合会員学会の会員 (学会名：\_\_\_\_\_学会)  
(c) 学生 (d) その他
6. 上記5で「その他」に該当する方のみ、参加費についてご記入ください：  
a) 請求書送付が必要な場合：郵送先 〒  
b) 請求書送付が不要な場合：銀行振込予定\_\_\_\_月\_\_\_\_日頃

【お申し込み先】 横幹技術協議会 事務局 フォーラム係 tel & fax : 03-3814-4130 e-mail : forum@trasti.jp  
【お振込先口座】 UFJ銀行 本郷支店 普通 4524554 横幹技術協議会 (オウカンギジュツキョウギカイ)  
※銀行振込手数料はご負担ください。

# 【シミュレーション・モデルの最新技術動向】 バイオとナノシミュレーション技術の最先端

(2005年11月14日(月) 13:30 ~ 17:00 日本教育会館 7階 中会議室)

【講演内容】

(敬称略)

## ◆計算科学技術が拓く新たなナノの世界

### ナノ 「ナノテクシミュレーションの現状と課題」

●寺倉清之(北海道大学 創成科学研究機構 特任教授)

ナノテクでの重要なコンセプトの一つは、サイズが小さくなったことによる、電子状態における量子効果である。従って、電子状態計算はナノテクシミュレーションの基本になる。一方、ナノテクで問題となる系は、従来の電子状態計算が扱ってきた系に比べてはるかに複雑である。そのため、大規模で複雑な系を扱うための、新しい電子状態計算の手法が開発されなければならない。この方向の研究は急速に進展している。

電子状態計算におけるもう一つの課題は、計算の精度に関わることである。特に、ナノバイオといわれるような分野においては、分子間の弱い相互作用が重要であるが、それを正確に記述するための理論の展開はまだ不十分であり、今後の重要な課題となっている。

ナノテクで扱う系では、構造と機能が密接に関係している。構造を探る実験手段は進歩しているが、なお十分ではなく、シミュレーションの助けが必須の場合が多い。複雑な系の安定構造の探索は非常に困難な問題であり、本フォーラムにおいても蛋白の折りたたみのシミュレーションにおいて詳しく紹介されるであろう。本講演においても、関連の手法の進展について紹介する。

### 「ナノ物質の物性・機能解析シミュレーション」

●大野隆央(物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター センター長)

ナノスケール物質で発現する新規な物性・機能を探索することは、新しい知見・科学を創出し、革新的な技術を生み出すものと期待されている。本講演では、ナノ物質の構造と物性・機能を解析するための第一原理シミュレーション技術を、誘電応答、電子伝導、光化学反応等に関する解析例を紹介しつつ概説する。

## ◆生物の仕組みに挑むバイオ計算科学技術

### バイオ 「生体硬組織のイメージベース・マルチスケール・シミュレーション」

●高野直樹(立命館大学 理工学部 マイクロ機械システム工学科 ナノフィジックス・シミュレーション研究室 教授)

海綿骨のマイクロメートルオーダーの3次元骨梁構造を、X線CTを用いたイメージベース・モデリングを行いつつ、骨梁内のナノメートルオーダーの生体アパタイト結晶の配向をも考慮したマルチスケール・バイオメカニカル・シミュレーションを行い、骨粗鬆症診断や骨細胞活動の基礎研究に役立てるための手段を紹介する。

### 「バイオシミュレーションのための拡張アンサンブル法」

●岡本祐幸(名古屋大学 大学院 理学研究科 物理学教室 教授)

拡張アンサンブル法は元々物性物理学の分野で開発された手法であるが、最近、バイオシミュレーションの分野において広く使われるようになってきた。それは、バイオ系が多自由度を持つ複雑系であり、従来のシミュレーション手法ではエネルギー極小状態に留まってしまうという困難に直面するからである。拡張アンサンブル法がこの問題を解決する。本講演では、タンパク質の折り畳み問題に有効な拡張アンサンブル法のいくつかを紹介する。

# 交通案内

■日本教育会館 7階 中会議室  
東京都千代田区一ツ橋 2 - 6 - 2  
道案内専用電話サービス : 03 - 3230 - 2833

- ・地下鉄 都営新宿線・営団半蔵門線「神保町」駅下車、A1 番出口より徒歩 3 分
- ・地下鉄 都営三田線「神保町」駅下車、A8 番出口より徒歩 5 分
- ・地下鉄 都営東西線「竹橋」駅下車、北の丸公園側出口より徒歩 5 分
- ・地下鉄 都営東西線「九段下」駅下車、6 番出口より徒歩 7 分
- ・JR 総武線「水道橋」駅下車、西口出口より徒歩 15 分

