



計算化学から計算科学へ



青柳 睦

(九州大学 情報基盤研究開発センター 教授/システム情報科学府情報理学専攻 教授 (併任))

あおやぎ むつみ / 1985年 慶応義塾大学工学研究科計測工学専攻修士課程修了、1987年 名古屋大学理学研究科化学専攻後期博士課程単位取得退学、1987年 分子科学研究所理論研究系 研究技官、1988年 米アルゴン国立研究所 博士研究員、1990年 通産省工業技術院化学技術研究所 研究員 (1992年 同主任研究員)、1993年 分子科学研究所 電子計算機センター助教授、2002年 九州大学情報基盤研究開発センター 教授、2002年 九州大学 システム情報科学府 (併任) 教授、現在に至る。
学位 1988年10月 名古屋大学理学研究科 理学博士、趣味は魚釣りと音楽鑑賞。

わたしは1993年春に電子計算機センターに就任して以来2002年までの8年余を分子研で過ごさせていただきました。

九大に移った時「分子研を去るにあたり」の執筆ができず申し訳ありませんでした。今回は「OBの今」の原稿を書く機会を頂き、わたしの現在置かれている情報科学寄りの視点からの計算科学について思っていることを書かせていただきました。雑文で恐縮ですが、日ごろ計算化学や理論分子科学分野でご活躍の若手研究者に計算科学からの観点で少しでもお役に立てれば幸いです。

1954年Fermi, Pasta, Ulamらは複数の非線型バネから成る結合振動子系の数値実験を行い、この数値実験は今日言うところの非線型結合を持つ有限多体系(ハミルトン系)におけるカオス的振る舞いと再帰現象のシミュレーションに相当するわけですが、「振動モード間のエネルギー移動は一見複雑に見えるが、Fermiらの予想に反し、ある時間間隔で初期振動励起モードにエネルギーが集中する再帰的な現象」を「発見」しました。この現象は当時、Fermiの再帰現象と呼ばれ、その後のソリトン等の物理分野へ大きな影響を及ぼしています。Fermiほどの理論研究者が計算機実験により「予想に反した発見」を行っていることに驚きます。

分子科学の分野では、1958年頃B. J. AlderとT.E. Wainwrightらは多数の分子の古典的な運動をシミュレーション (今の言葉で言えば分子動力学計算)

により研究していました。斥力だけを及ぼしあう剛体球(模型を用いた)分子の集まりに圧力を加えていくと、無秩序な状態(流相)から秩序ある状態(固相)に相転移することを数値実験によって初めて見いだした数値実験(B. J. Alder and T. E. Wainwright, "Phase transition in elastic disks", Phys. Rev. 127, 359-361 (1962).)は「Alder転移」として今日では物理の教科書にも載っています。今日では気相・液相間相転移では引力が支配的な役割を果たし、液相・固相転移では斥力が重要な役割を果たしていることが知られています。

前置きは、さておき、これらの数値実験例は、いずれもコンピュータでの大規模計算により予期されなかった現象が発見された好例です。現在のパーソナルコンピュータにも遙かに及ばない能力のコンピュータによりこのような基本的な発見がなされたことはとても驚きます。実験科学は、実験データや観測データを「帰納的に」分析して何らかの法則性を見だしモデル化を行うという方法論が根幹ではないでしょうか。一方、理論は、既存のモデルを改良・解析したり、自ら法則や原理を提案した上で、その論理的帰結を「演繹的に」推論する研究手法が多く見られます。これに対して、計算科学では、前の例で示したように、観測を通じた「予期せぬ発見」があります。計算科学は第一原理(理論)やモデルに基礎を置く点では理論科学に類似し、データ

を帰納的に分析する点では実験科学に近い点、どちらでもない第三の科学と呼ばれることもあります。

言うまでもなく、コンピュータ・シミュレーションは、多くの構成要素から成る系の振る舞いを、構成要素間の基本法則に従ってコンピュータで計算し、そのマクロな振る舞いを観測する手法です。ここで基本法則になら数学的または経験的な近似を用いずに(ある意味では)力づくで基礎方程式を数値的に解く方法を特に第一原理シミュレーションと呼ぶことがあるようですが、理論化学・理論物理の背景なしには困難です。対象が連続系と見なしうる場合は、(時空の)離散化により多くの要素に分解した上で、コンピュータで操作可能な離散データに変換した後にシミュレーションを実行することになります。ここで構成要素間の基本法則をマイクロ法則と呼ぶことにすれば、計算によりマイクロからマクロを予言するのがシミュレーションの方法論であるとも言えなくもないでしょう。例えば、分子動力学シミュレーションにおける「分子」は構成要素であり、分子間力に基づく多体系古典力学はマイクロな基礎方程式で、同様に天体シミュレーションにおける「惑星」もここではマイクロ要素として考えます。基礎方程式は分子動力学と同じく、多体系古典力学または求める精度と目的に依っては電磁輻射を考慮したり、一部に相対論的補正を行った多体問題です。電子状態計算の例では、「電子」

を構成要素として分子全体の電子状態を Schrödinger 方程式によって解いており、この場合は解析したい分子の諸物性がマクロ量となります。このような意味で、計算シミュレーションは“構成的手法”であるとも言われます。また、解けるかどうかには、計算機科学（ハード、通信・基幹ソフト、ツール類）、計算量理論、アルゴリズム論、数値解析、応用数学といった近接境界分野の研究者と協力することも必要であった（特に欧米で）歴史には学ぶべき姿があるように思います。

おわりに私が九大に移ってから始めたシミュレーション手法の一つとしての連成シミュレーション手法について触れたいと思います。シミュレーションの対象は粒子と連続体の双方が関係する問題や、複数の物理法則が絡んだ複雑な系が多いのは疑問の余地はありません。また、時間や空間スケールの異なる物理現象が互いに関わっている問題があります。これらは、Multi-Physics問題とか Multi-Scale問題と言われ、実験的手法や純粋理論手法でも扱いが非常に困難です。このような複雑系を対象とする計算シミュレーションでは、ミクロ階層からマクロ（全体系）を構成するプロセスを一旦、階層化する作業が必要です。すなわち系全体を複数の部分系に（再）構成し、まず部分系についてそれを支配するミクロ要素と基礎方程式に従い部分系を正確に解くことから始めます。次に部分系を代表する（と思われる）中間物理量を、部分系“相互を”結びつける外部パラメータとして導入し、全体が無矛盾となるまで部分と全体のシミュレーションを繰り返す手法が連成問題にはよく使われています。このような階層化による計算手法は“構成的手法”ならではの利点です。連成手法では部分系を代表する（と思われる）中間物理量を如何にして選択するか、またどのように他の部分系にその物

理量を取り込むかが鍵となります。例を挙げると、真空中の分子の電子構造を厳密に解く手法と、溶媒分子を統計力学的に解析する手法を結合させ、溶媒中のタンパク質分子の挙動をシミュレーションするなどがあります。また細部（亀裂などの注目部分）を分子動力学シミュレーションによって解析し、全体を有限要素法に基づく構造力学シミュレーションで扱いながら構造変形や亀裂の問題を扱ったり、大気シミュレーションと海洋シミュレーションを組み合わせ、台風の進路を数値予想したり、全地球規模の連成シミュレーションを行うなどがあります。溶液の例では遠方（溶媒側の）分子の形や分子個々の性質をいったん捨象し、分布関数という統計的な物理量で「疎視化」しているとも考えられます。また構造力学の問題でも、変形や亀裂が起こっていない部分では分子レベルのシミュレーションを行わずに、多粒子からなる固体結晶を連続弾性体として疎視化しています。大気海洋シミュレーションでは、界面における保存量に着目し中間物理情報を交換しています。わたしは、この連成シミュレーション手法の一般化について考え始めてまだ間もない段階ですが、空間次元の疎視化、接合面の（ある意味近似的）保存量と接合の対称性、時間次元では断熱性（時間軸での疎視化・平均化）という比喻が過ぎるかもしれませんが、いかにして、大自由度部分系の“ゆっくりした運動”を抽出して、もう一方の系に伝えるかに注目しています。分子研時代に計算センターや理論研究系との交流で学んだことが大きく役立っています。

連成シミュレーションにおいては、各部分系の背後にある物理理論（またはモデル）が異なるため、中間物理量の交換は当然のことながらユニークではない場合が少なくありません。ある場合には中間物理量の「意味の変換」が必要となり

ます。わたしは、前述のような溶液内タンパク質や界面の問題では、系の振舞いに長距離相関が支配的でなく、部分系の深部に他の部分系が介入することが無い場合に限って（界面の一意性）、それぞれの部分系を担当するシミュレーションプログラム間でのデータ量と情報交換の頻度が部分系の演算量に比べ低く抑えられることがかなり一般的に成立すると予想しています。かなり大胆な表現で恐縮ですが、連成問題（としてとらえること）は、裏にある物理法則の階層性の探求にも関係していると信じています。また情報科学的な視点からは、離散化手法や通信アルゴリズムの改良により通信遅延を隠蔽できる可能性を秘めている点から、ヘテロな計算機資源を活用する計算科学や将来のグリッドコンピューティング手法も少し模索しています。

最後に繰り返しになりますが、計算科学の1領域としての分子計算科学においても、これからのベタスケール時代を見据え、計算機科学（ハード、通信・基幹ソフト、ツール類）、計算量理論、アルゴリズム論、数値解析、応用数学といった近接境界分野の研究者との縦階層間の交流、そして構造数値解析、流体、天文、気象、電磁波、などの計算科学諸分野との横型の学術交流がこれまで以上に盛んになることを期待しています。

謝辞

本稿を書くにあたって、工学院大学の小柳教授（前、東京大学）から教えていただいた計算科学全般に関する書籍や教授ご本人の随筆を参考にさせていただきました。また計算機科学と計算科学の接点では九州大学 村上教授（専門は再構成可能LSIの設計とHPCへの応用）と国立情報学研究所の三浦教授（NAREGIグリッドプロジェクト代表）との議論が多いに役立ちました。これらの先生に厚く御礼申し上げます。



理工系学生のための英語教育のすすめ



西原 康師

(岡山大学大学院自然科学研究科 准教授)

にしはら・やすし / 1992年3月 広島大学理学部化学科卒業後、同大学大学院理学研究科化学専攻修士課程、総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻博士後期課程単位取得退学、日本学術振興会特別研究員、東京工業大学資源化学研究所助手、岡山大学理学部化学科助教授、岡山大学大学院自然科学研究科(理学系)助教授を経て、2007年4月より現職。2006年1月より新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)「産業技術研究助成事業」を兼任。

あれから16年。まったく月日のたつのは早いものである。

先日、分子研(総研大)OBとしての寄稿を櫻井英博先生に依頼された。一瞬躊躇したが、卒業生としての多少なりとも義務感を感じたので観念してお引き受けすることにした。しばし駄文にお付き合いいただければ幸いである。

海外での大学院入学を目指した学部生時代

1991年当時、私は広島大学理学部化学科の4回生であり、助教授になられたばかりの中沢 浩先生(現在 大阪市立大学教授)に師事して錯体化学に関する卒業研究をおこなっていたが、研究室において英語の重要性を再認識した。特に、研究室が招へいした外国人研究者の講演内容(講演は言うまでもなく英語で行われる)がほとんど理解できなかった日には悔しくて眠れなかったことを思い出す。この時から海外に留学したい、できることなら海外の大学院に入学したいという野望が膨らんでいった。元々英語は好きではなかったが、研究室に配属して以来、将来化学で飯を食っていくのならいずれ英語は必要になるという半ば諦めを伴う危機感を抱き、実験の空いた時間を利用してよく屋上で「ラジオ英会話」を聞いたものだ(冬は寒かった)。

いざ分子研へ

そんな中、私が分子研を最初に訪れたのは1991年11月下旬のことである。中沢先生が海外の大学院に行くのなら日本人の先生のところが無難では、との考えからアメリカ パーデュー大学教授である根岸英一先生(現在も72歳の現役教授)が、当時、分子研錯体化学実験施設の助教授だった高橋 保先生(現在北海道大学触媒化学研究センター教授)を訪問されるというので、滞在期間内に分子研を訪れ、海外留学を含めて根岸先生に色々相談する機会をセッティングしてくださった。私は、その有難い提案に甘え、その数日後、分子研に向った。東岡崎駅から分子研に向う途中、「研究所」とは一体どんな感じの場所なのだろう、まあ大学と同じような感じかな、などと勝手な想像をしながら分子研の正門から構内に入って驚いた。とにかく建物は極めて立派で広いのだが、構内(建物外)にほとんど人が歩いていないのである。当時は電子メールもない時代なので中沢先生の手書きのメモを片手に高橋先生のお部屋を多少迷子になりながら探し出し、高橋先生への挨拶を終えて部屋に通されるとそこに根岸先生がいらっちゃった。私の意向を根岸先生に説明すると、パーデュー大学の大学院入学に際して根岸先生から以下の2つの条件が提示された: 1) TOEFLで最低620点は必要であること、2) アメリカの大学院は博士前期・後期一貫なので博士号取得には通常5年かかる、というものであった。

つまり、日本の修士課程を修了したところで入学しなすと、そこから5年要するので博士号取得するころには30歳近くになっていることになる。理想と現実のギャップを目の当たりにし、海外大学院入学の夢が一瞬にして崩れ去った。いろんな意味で自分が何も知らないことを認識し、失意とともに広島に帰った。

それでもやはり留学の夢は捨てきれない、そして、実現へ

広島大学の大学院に入学し、M1の学生として初めての学会発表を終えた1992年9月下旬のことである。広島市内に実家のある私は、週末に奈良女子大学でおこなわれた「錯体化学討論会」終了後、月曜日の午前中に広島市内のホテルに海外からの講演者を迎えに行ってから一緒に東広島市に移転したばかりの広島大学に来るように中沢先生に厳命されていた。それにもかかわらず、学会参加前に依頼されていた上記の内容について、初めての学会発表を終えた安堵感からかすっかり忘れてしまったのである。何気なくいつもの調子で中沢先生に「おはようございます」と挨拶をすると「やけに早いな。お連れした先生はどちらに?」と。最初は何のことだかピンと来なかったが、そのうち自分のしでかした大変な失態に気付くが後の祭り。至急ホテルに電話をして改めて広島市内に自宅のある三吉克彦教授が直接、先生をお迎えにくという事態になってしまった。午後近

くになってようやくその先生が研究室に到着された。もちろん、私の失態はその先生に説明されており、研究室にお越しになられた際に挨拶したが、極めてバツが悪かったのを今でもはっきり覚えている。しかし、人生とは不思議なもので、この先生がその後、M1の冬から11ヶ月間お世話になったアメリカ ノートルダム大学のFehlner教授である。しかも毎月1000ドルの滞在費を援助していただきながらの滞在なのだから信じ難い。

アメリカで高橋先生と再会

アメリカ滞在中の1993年4月、滞在3か月目を迎えようやく生活にも慣れてきた頃、アメリカ化学会の春季年會に参加されていた高橋先生から連絡をいただき、シカゴ空港でお会いすることになった。約1年半ぶりの再会であったが、高橋先生は私のことをよく覚えてくださっていて、今後の進路について色々相談にのっていただいた。その頃、違う分野の化学をやってみたいと思っていた私にとって、高橋先生の研究テーマである「ジルコノセン錯体を用いた有機合成」は非常に魅力的なものであったが、それ以上に私がその後、博士後期課程の学生として入学することを決意させたのは、高橋研究室の特色にあった。当時（現在でもそうだが）高橋研究室には外国人が常時2-4人いて、研究室でのミーティングはもちろん、会話もほとんど英語でおこなっているという点であった。様々な葛藤があったが、結局、再び分子研の門をたたくことを決意した。1993年9月のことである。

分子研での学生生活

分子研での研究生活で驚いたことは、実験室と居室が1階と3階にそれぞれ分

かれてあって、そのたびに階段がエレベーターをつかって移動すること、居室には現在使っている机より大きな机が学生1人ひとりに与えられ、十分な実験スペース、居室スペースがあったこと、(実にくだらなくも知れないが)冷暖房が完備されていたこと、などである。

今から分子研（高橋研）での研究生活を振り返ると、まさにかげがえのない人々との繋がり、研究者として必要なものを学んだ日々を回想する。当時、錯体化学実験施設には2年間の「流動部門」という研究室が2つあったが、1つは、私が修士までお世話になった前出の中沢助教授であり、もう1つの研究室が、私が現在所属している岡山大学理学部化学科の前学科長である吉川雄三教授（岡山大学名誉教授）であった。今から考えるとこれもまた不思議な縁である。1994年4月から高橋先生が北海道大学の教授に昇任された1995年11月までの約1年半、分子研で研究に没頭できる充実した生活を過ごした。

自分が歩んできて良かったことを自分の学生にも

私は、その後、北海道大学へ受託学生として異動し、総研大生を中退して東京工業大学資源化学研究所助手となり、4年前に今の岡山大学に助教授として着任してきた。研究内容はさておき、現在おこなっている研究室運営、学生に対する英語教育について残りの紙面を割きたい。岡山大学に着任してすぐに始めたことは海外の大学とのネットワークを形成することであった。もちろん、研究室、ひいては学部、研究科、岡山大学の学生を送り出す、あるいは、受け入れるためである。高橋研究室で一緒だった北京大学化学学院の席 振峰教授や旧知の友人である国立台湾大学の陳 竹亭教授の協力の

もと、部局間協定、大学間協定をそれぞれ締結した。それらを利用してこれまでに当研究室の大学院生3名を2-4か月間派遣し、2名受け入れた。帰国後、派遣した大学院生の英語力が少なからず向上していることを実感できることが最大の喜びである。彼らは彼らなりに現地で慣れない文化に触れながら、同年代の友人をつくり、違う分野の化学と格闘しながら英語力を磨いて戻ってきたのである。

東アジアとの連携

私は、理工系の研究者にとって英語とは学問ではなく、あくまでお互いにコミュニケーションをとるための手段であると思っている。実際、私の話す英語など文法も出たらめで単語の羅列であることも多い。しかし、通訳を介して話をすると直接相手の目を見ながら自分の言葉で自分の意思を伝えることには大きな差があると思う。先日、北京大学の学生に学位取得後の進路を聞いたところ、1人はアメリカに、もう1人はドイツにボストクに行きたいと答えた。そして、その理由として「日本の化学の質が高いことはよく知っているが、日本に行っても英語が上手にならない」ことを挙げた。これが現実である。昨今、学部教育、大学院教育の改革が叫ばれて久しいが、同時に英語教育も見直すべきである。東大・京大などのトップの大学は、国内の他大学から学生を獲得するのではなく、アジアの優秀な学生を確保できるような魅力ある大学院にならなければいけないと切に思う。設置意義に多少反するかもしれないが、分子研のように最先端の研究をおこなっている機関、ひいては総研大も海外、特に東アジアから優秀な人材を確保、育成する機関としての一翼を担うべきである。日本における英語教育の遅れが海外からの有能な人材の確保を妨げているような気がしてならない。