

運営に関わって

高田 昌樹

独立行政法人 理化学研究所 播磨研究所 放射光科学総合研究センター・副センター長
 高田構造科学研究室・主任研究員
 財団法人 高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門・部門長
 東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻・連携講座教授



たかた・まさき / 【学歴】1982年広島大学理学部物性学科卒業、1987年広島大学大学院理学研究科博士課程後期物性学専攻単位修得満期退学、1988年広島大学大学院理学研究科理学博士

【職歴】1987年に名古屋大学工学部応用物理学科助手、1997年に島根大学総合理工学部助教授、1999年に名古屋大学大学院工学研究科助教授、2003年に(財)高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門 I 主席研究員、2005年より(財)高輝度光科学研究センター (SPring-8/JASRI) 利用研究促進部門 部門長、2006年より(独)理化学研究所放射光科学総合研究センター主任研究員、2007年より東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻教授、2010年より(独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター副センター長

近年、世界各国では研究開発の強力な戦略ツールとして、放射光施設が次々と建設されています。一方、我が国には既に7つの放射光施設が存在し、日本は世界のなかでも類を見ない放射光大国と言えます。その放射光施設の一つである自然科学研究機構・分子科学研究所・極端紫外光研究施設 (UVSOR) の運営委員会委員に平成18年04月～22年03月の間、就任しました。UVSORは極紫外領域のエネルギーの放射光源を有し、その強力な光を使った全国共同研究を対象とする、特徴ある放射光施設です。これまで、分子科学研究所の附属施設として、我が国の、化学、物理、物質科学の基礎分野の研究を支えてきた研究所の運営に、何かお役に立つことができればと考え、委員をお引き受けしました。

私自身も、大型放射光施設 SPring-8 で、理化学研究所及び高輝度光科学研究センター (JASRI) に所属し、放射光を活用したサイエンス、「放射光科学」の研究を推進しています。そして、放射光の先端的利活用の開発と、大学の先生方や企業の研究者の方々の施設の共同利用支援に携わっています。この様な共同利用施設を運営していくうえで、放射光施設の先端性と、利用分野

の新規性を確保する事は極めて重要であり、共同利用実験の効率的な支援とともに両立させていく責務を負っています。SPring-8においては、理化学研究所の放射光科学総合研究センター (RIKEN SPring-8 Center) が、先端的利活用の先導研究開発を担い、それを基盤化したものを、JASRIが共用ビームラインに於いて一般ユーザーに利用支援するという役割分担がなされています。共用開始から10年を経過した今、トップアップ運転・低エミッタンス運転などの光源性能の革新から、SPring-8の光源性能を活かした計測技術の急速な進歩へとつながり、ユーザーコミュニティとその研究分野を、新たに開拓させていくことができました。しかし、UVSORは、分子科学研究所の附属施設という有利な面は持ちながらも、限られた予算の中で大学共同利用施設として責務を果たさなければならず、運営委員会での議論を通じて、その舵取りの難しさを実感いたしました。

言うまでもなく、施設の運営には、ユーザーコミュニティとの密接な協力関係の構築が必要不可欠です。しかしながら、研究施設に求められるものは、ユーザーの獲得ではなく、研究拠

点としての研究・開発の成果を挙げることです。多くの努力を要するユーザーの獲得は、研究成果を挙げる手段の一部であるとしか見なされません。よって、放射光科学の進歩をミッションとする者として、常に、国内外のサイエンス・コミュニティ全体を視野に入れ、施設の高度化を新規サイエンス・産業の開拓に位置づけながら、施設の先端性に相応しい成果を挙げるための発展的な運営に取り組んでいます。この基本的な考え方は、SPring-8では、XFEL (X線自由電子レーザー) 計画が推進されていく中で、施設の *demarcation* の概念が具体化される過程で、広く理解を得られるようになってきたのではないかと思います。UVSORも、近年進められてきた高度化が実を結び、FEL (自由電子レーザー) の開発への挑戦や、極紫外光源の特長を活かした様々な研究成果を創出したことを、運営委員として目の当たりにすることができました。今後は、新規分野からの若い研究スタッフの導入による人事の刷新等により、大学共同利用機関としてだけでなく、分子科学研究所の国際性をさらに高めるための強力な戦略的機関への飛躍を遂げられる事を期待しております。そのためにも、分

分子科学研究所の戦略／方針上重要な位置づけを確保して予算化することが重要であると思います。その中には、定常的な研究員・技術職員不足の解消、その対策としての外部との人事の還流や、業務のアウトソーシング、そして、

分子科学研究所や大学との運営面における連携強化の議論も必要と思われます。

今後のUVSORが直面するかもしれない運営の問題について考えた事を、私の身の回りで起こった様々な運営に関わる最近の事柄を思い浮かべながら、

本稿を書かせていただきました。今後のUVSORの国際的な研究拠点への、更なるステップアップを期待しております。

運営に関わって

木寺 詔紀

横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科・教授

きでら・あきのり／横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科教授。工学博士。1982年に京都大学工学研究科で工学博士を取得後、Cornell大学化学科 博士研究員、1986年京都工芸繊維大学工学部 助手、1988年蛋白質工学研究所 主任研究員、1996年京都大学理学研究科 助教授を経て、2001年より現職。2006年分子科学研究所 理論分子科学研究系 客員教授。2008年4月～2010年3月まで計算科学研究センター運営委員会委員。専門は生命計算科学。



昨年度まで、計算科学研究センターの運営委員を務めさせて頂いたときに感じたことを若干述べさせて頂きたいと思います。そこでの任務は当然のことながら、計算科学研究センターで行う分子科学計算の申請課題の評価でありますので、その過程で感じたことについてです。

最近の次世代スーパーコンピュータプロジェクトやTop500の話題にも端的に表れているように、ハードウェアとしての計算科学は、未だに広義のムーアの法則に従って進展し続けています。広義と言ったのは本来の意味である半導体の集積度の向上がそのまま計算機の高速化につながっていたものが、今では集積度の技術的飽和に伴い、並列化、GPU化などのハードウェアとそれに関わるメモリ、通信技術の進展が高速化を担っているところを指しています。近年の計算科学の進歩の実体を見れば、そのようなハードウェアの進展に主導され、計算機資源の規模に沿った進歩が見られると言って、その0次

近似的見方としては間違いのないところでしょう。その状況に基づいて言えば一般的には、いわゆる質の高い計算科学の研究には不可避免的にそこで用いる計算量も十分に大きいことが要求されることになっています。

私は、生体分子の古典分子動力学計算の分野にありますが、その分野では“heavy computation”への傾向には著しいものがあります。例えば、10年ほど前であれば数万原子系で高々全体で10 nsec程度の計算時間があれば、計算量として十分であるとされていました。ところが現在では、数十万原子系でも、最低で数100 nsecから1 μsecの計算時間が必要であるとされるようになってきています。それは、作業概念としての「平衡状態」（厳密な意味ではなく、計算可能な時間範囲で、初期構造近傍でダイナミクスが定常状態にあることを指しますから、その意味は時代によって徐々に変わってきています）に、より長時間の計算時間を要求するようになってきていることに対応

します。また非平衡現象では、その現象の多数回の観察を要求されることとなります。その意味で、シミュレーションで議論されるべき現象（生体分子であれば、生物機能をシミュレーションでどうとらえるかの問題に対応します）自体が変化しているといえます。ごく最近でいえば、我々がAnton shockと呼んでいるD. E. Shawの1msecを超えるシミュレーションの結果に、最も典型的にその傾向が現れています（Science 330, 341）。彼らの結果は、Antonという専用計算機によるもので、通常の我々が行っているシミュレーションの時間スケールを優に 10^3 超える時間スケールのものになっています。最近の実験生物学者との会話では、「もう1msecのシミュレーションができるのでしょうか」などという会話があり、困惑させられることがあります。

これは単なる一つの分野の状況であるばかりでなく、計算科学の避けられない流れであると思います。もちろん計

算機資源のみに依拠することは正しいことではありませんし、現実的にそれ以外の重要な課題は山ほどありますが、その流れの中に我々はいることも間違いがありません。さて、そこで分子研の状況に戻りましょう。申請の多くは、必ずしも“heavy”でない計算を行うという比較的modestなものが大半を占めます。“heavy”な計算をしたくても、共同利用システムの制約から、その計算の全体（試行錯誤の過程を含んで）のすべての行うだけの占有時間とデータ蓄積容量を期待することは困難だという現実があります。仮に、この計算機センターが日本における分子計算科学の中心であり続け、さらには世界的

なレベルでリードすることを考えるならば、現在の最高水準として要求される計算量を確保することと、また同時に多くの研究者のフォーラムであるというふたつの役割を適切に両立させる努力をする必要があると思います。その「適切に」ということばで申し上げたいことは、すでにある程度の準備が完了して、product runのみで成果を出すことのできる巨大資源を要求する少数の課題と、多数のより準備的なもしくは簡易な計算の課題を峻別して、前者により大きな重点を置く配分を行う必要があるということです。現在でも、施設利用Sという前者に対応する枠組みがありますが、私の希望はその枠組

のより一層の充実です。それに対して、小さな計算機資源を用いるものはすでに個人が購入し得る計算機のレベルで実施できるものも多く、それらへの全面的支援をこのセンターがするべき時代はすでに終わったのではないかと考えます。計算機資源を提供することばかりでなく、分子計算科学の中心としての立場から、分子計算研究者のフォーラムを充実させる役割をより積極的に果たすべきであるとも考えます。

以上のような感想を抱いた2年間でありましたが、幅広い分子計算科学についての研究内容を学ぶ機会でもありました。ここに感謝申し上げます。

関連学協会等の動き

特定領域研究「実在系の分子理論」を振り返って

榎 茂好 京都大学物質・細胞統合システム拠点・特任教授
分子科学研究所・短時間研究員

特定領域研究「実在系の分子理論」は2006年10月から始まり、2010年3月に終了致しました。この間、本特定領域研究の推進に当たり、分子科学関連の諸分野の皆様大変お世話になりましたことに心から御礼申し上げます。3年半の研究期間に約1年間近い準備期間と取りまとめを行った今年の4月から9月までを加えますと、合計5年間、この特定領域研究に携わっていたこととなります。振り返って見ますと、準備期間、特に、申請書の提出とヒアリングの準備を行っていた時期は緊張し、研究開始後約1-2年は気分が高揚していました。それに比べ、研究とりまとめを行った今年1月頃から9月までは、定年間際、定年直後ということもあり、

しんどいのみで、「特定領域研究はしんどい」と言うのが正直な印象です。それはさておき、分子研レターズに執筆の機会を与えて頂きましたので、この「実在系の分子理論」で私たちが何をしようとしていたのか、そして、何が達成され、理論化学・計算化学の将来はどのようなものになったのか、感想を交えて述べさせていただきます。

準備期間では総括班として参加して頂いた永瀬茂先生、加藤重樹先生、高塚和夫先生、田中秀樹先生と月1-2回程度、加藤研のゼミ室に集まり、議論を重ねました。この時期は、忙しかったのですが、総括班の皆さんとのdiscussionは非常に楽しく、良い思い出ばかりです。皆さんご多忙な方ばかり

りですのに、本当に良くご協力頂きました。亡くなってしまった加藤さんの口調とご意見を今も良く思い出します。電子状態理論、反応ダイナミクス、分子動力学法を方法論的な基盤とし、構造的・電子状態的に複雑で、かつ柔軟な、すなわち、変化しやすい分子および分子集団を研究対象とし、広い視野から本質にアプローチし、また、実験化学者との連携を重視しよう、と言う構想は比較的早い時期からまとまっていた。それをどう表現するか、と言う点に悩みました。「実在系の分子理論」という名称でまとめるに至ったのは、実験化学者とのdiscussionの賜物です。この名称は、以下に述べるように、理論化学・計算化学の使命を考えてみ