

## 運営に関わって

## 江幡 孝之

広島大学大学院理学研究科化学専攻・教授

えばた・たかゆき／理学博士。1981年東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻博士課程修了後、東北大学理学部化学科助手。1984年から2年間米国スタンフォード大学化学科博士研究員。1993年東北大学理学部化学科助教授、1996年同大学大学院理学研究科化学専攻助教授。2004年広島大学大学院理学研究科化学専攻教授現在に至る。2008年4月～2012年3月まで分子科学研究所運営会議委員、人事選考部会委員。専門は物理化学・レーザー分子分光。



広島大学に教授として赴任して5年目の平成20年から平成24年の4年間、分子研の運営会議委員を務めさせていただきました。当初依頼があったときには、理学研究科の副研究科長も務めていたので両立が難しいと思い躊躇したのですが、中村所長の熱心なお誘いもあり微力ながら引き受けさせていただくことにしました。分子研にはこれまで共同研究や岡崎コンファレンスをはじめとする数々のシンポジウムでたくさんお世話になってきました。運営会議委員として協力させていただくのも当たり前のことでしょう。

分子研では、運営会議委員と人事選考部会の委員を務めました。平成16年に国立大学が法人化され、中期目標の作成や達成度の評価等、私達のおかれた状況は毎年厳しくなっていますが、中でも定常的な人員削減により研究グループ体制の維持が困難な状況であることはどの国立大学においても深刻な問題です。分子研はまだそれほど定員削減の問題は深刻ではないかもしれませんが、将来を決定することになる人事選考は重要なミッションであり、在任期間のなかで教授、准教授、助教人事、そして所長人事に真剣に取り組ませていただきました。分子研の人事はなかなか大変な作業で、多忙な委員間の日程調整の難しさや、候補者の論文の査読、面接はなかなか勉強になりました。

運営会議は通常平日開催ですが、人

事選考部会は、土日に開催されます。人事選考部会は研究棟2階会議室で開催されますが、多くの方が言われるように、昔は共同研究や研究集会で分子研を訪れると、「平日でも土日でも研究棟の1階には顔なじみの分子研研究者の誰かと必ず顔を合わせたものであるが、現在では土日はひっそりしており人と会う機会が少なくなった」というのは私も同意見です。このような分子研の活気の低下が言われて久しいですが、その一つに岡崎コンファレンスセンターの存在があるのではないのでしょうか。自分を例に挙げますと、コンファレンスセンターができてから、東岡崎の駅から分子研に立ち寄ることなく直接コンファレンスセンターに行きシンポジウムに出席し、終了後に直接帰ることが多くなりました。このように、私達が分子研のそばまで来ておきながら分子研に寄る機会が少なくなったことも、分子研の活気低迷の一因ではないのでしょうか。分子研の研究者にとっても、コンファレンスセンターでシンポジウムが開催される現在では、距離的な面でふらっと覗いてみることもできず、出席する意欲や精神的余裕が減ってきている感じがしないではありません。研究棟2階の会議室は狭いですが、もっと研究会に活用したらいかげんでしょうか。

分子研が現在の状況を打開し、世界の分子科学研究の拠点として今後どの

ように展開していくかについては、これまで多くの意見が述べられており、分子研スタッフも十分に考えておられるはずなので、私が今更付け加えることはしません。ただ、現在の研究グループの規模について再考が必要ではないでしょうか。分子研は、大別して教授が率いる研究グループと准教授が率いるグループから構成されます。内部でのプロモーションを原則禁止していることもあり、准教授はこれまで分子研ですばらしい研究成果を挙げて大学や他の研究機関に教授として赴任してきました。分子研はこれまで優れた教授陣を他教育研究機関に輩出してきたと言えます。一方、教授が率いるグループはどうでしょうか。現在、分子研は比較的若い教授を採用しています。彼らは約20年間の長期的なスパンで分子科学を世界的にリードし、分子研を世界拠点にする責務を持っています。冒頭でも述べたように、法人化以降の定常的な人員削減で研究者数が減少し、さらに助手から助教というポジションへの移行に伴い助教が独立して研究を進めることが出来るようになり、私達教授の負担は著しく増えました。また、低い博士後期課程学生の定員充足率により今や我々の研究を支えているのは、博士前期課程学生であると言っても過言ではないでしょう。予算の潤沢な研究グループは博士研究員を雇うことは出来るでしょうが、彼らも自分の将来

を見据えるとそれほど長く博士研究員を続けることは出来ません。特に分子研は博士後前期課程学生が少なく、今後とも増やすことは難しいと推察します。マンパワーは絶対条件です。そこで、他の運営会議委員も分子研レターズで提案されていましたが、分子研は大学

等では作ることの出来ない大きな研究グループをつくるべきです。研究グループの総数すなわち教授の数を減らし優秀な複数スタッフによるサポート体制を備えた大きな研究グループを作れば、魅力的な教授ポジションですし卓越した教授候補者が現れるはずです。折し

もこの1、2年で教授陣の大幅な若返りを迎えています。このチャンスを逃すことはありません。是非、大峯所長にはこの英断を下していただきたいと思

## 運営に関わって

# 吉田 朋子

名古屋大学エコトピア科学研究所・准教授

よしだ・ともこ／(学歴) 1991年京都大学工学部石油化学科卒業、1996年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士後期課程単位取得退学、1996年京都大学大学院工学研究科工学博士。(職歴) 1996年日本学術振興会特別研究員、その後、名古屋大学工学部助手・名古屋大学大学院工学研究科助教授を経て現職。



2008年4月から2012年3月の4年間、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)の運営委員会委員を務めさせていただきました。何とか任期を終了することができましたが、運営委員の一人として何らかのご助力ができたかどうかはこころもとありません。実は、UVSORは私にとって放射光分光研究を始めた思い出深い場所であります。京都大学在学中の修士1年時に、固体触媒のX線吸収スペクトル(XAFS)を測定するべく恩師と学生3名でUVSORを訪れましたが、初めての測定であったにも関わらず、学生に測定手順を一通り簡単に教えた後、恩師はさっさと立ち去ってしまいました。残された学生達は施設内の教官や技官の方々に心苦しいほどサポートして頂きながらどうにか測定をしているうちに、測定原理・技術だけでなく、専門書からは得られないノウハウまで叩き込んで頂いたことを鮮明に覚えています。施設の方々には多大なご迷惑をお掛けしましたが、世

界最高水準の研究環境とスタッフに恵まれて私の放射光分光研究はスタートしたのであり、恩師の荒療治とも言える最高の教育に今も感謝しています。

このようにUVSORは、当時から現在まで一貫して、大学共同利用研究機関として我々研究者に最高の支援を行っていることは間違いなく、施設内の先生方もユーザーコミュニティとの密接な協力関係を構築すると共に、積極的に国内外から共同研究者や学生を受け入れ、研究を展開しておられます。しかしその一方で、施設内の先生方は、分子科学研究の拠点として多くの事業やプロジェクトの推進を抱えておられるばかりでなく、所内外の関連した委員会への出席などに日々忙殺されていると伺いました。私が学生時代にUVSORを訪れた時に感じた「教官も技官も学生も同じ釜の飯を食う」ような、世間から離れて研究に没頭できた時間が少しずつ失われてきているような気がします。また、人手が少ないために、所内にある多くの実験装置が

十分に利用されていない状況も寂しく残念であります。これらの解決策として、プロジェクト推進に関わる専門の教員や、定常的な研究員・技術職員の充実と分業、UVSORと大学との運営面における連携をどれだけ図ってゆくかが今後重要になるのではないかと思います。

UVSOR運営委員会では、共同利用研究機関の拠点だからこそ実現可能なユニークな研究内容を期待する分、申請書に書かれた提案内容に迫力がなく、マンネリになっている印象を持ちました。これはユーザーである私自身も反省しなければならない点でした。現在、審査委員会では、申請書の採択・不採択だけでなく、採択課題の中でも特に優先度の高い優れた提案からS・A・B・C・Dと5段階のランク付けを行い、評価が低い課題には具体的な評価が提案代表者に届くなど年々厳密になっています。しかし、優れた研究提案をすることによって競争の中からチームタイムを勝ち取るという気概までには、ま

だまだ至っておりません。これは、新規ユーザーグループや海外研究者の参入などユーザーの多少の入れ替わりはあるものの、旧来のユーザーにはマシンタイムが取れなくなるという危機感をあたえる程ではなく、一種の安心感や慣れがあるためのような気がいたします。更に、ビームラインによっては、経験豊富なユーザーグループで常に配分ビームタイムが埋まってしまい、一見、新規ユーザーが参入する余地がないような所もあります。また、現状では、申請課題が有効である1年間では到底終わらない数年間の準備・調整期間が必要な課題はなかなか提案できません。このような現状に対して、例えば、新規ユーザーを対象として実験支援を行うテストビームタイム(研究課題)や長期利用が可能な課題申請を別枠で設けるなどをして、新規のユーザーや課題の開拓の試みも今後必要ではないで

しょうか? また贅沢な話かもしれませんが、UVSORでの実験の幅を更に拡げるためにはビームライン末端の各種実験設備(分光器・検出器・加熱冷却装置 etc.)の更なる充実も必要ではないでしょうか? これら設備の充実には、ユーザー同士の連携による情報交換や資金獲得もさることながら、最先端実験機器・設備に偏らない国や分子研からUVSORへの強力な財政的サポートがやはり必要だと思えます。

その他、運営委員会では、近年進められてきたUVSOR高度化と今後の展望計画を目の当たりにする機会に恵まれました。光源性能の革新によるトップアップ運転の実現や自由電子レーザーの開発に加え、極端紫外光源の特徴を活かした世界最先端の分光実験計画などが着々と進められています。運営委員には大学教員だけでなくUVSOR以外の放射光施設代表者が含

まれているため、UVSORの将来計画について具体的な技術情報提供があり、建設的に議論が進められてゆくことを大変頼もしく拝見いたしました。その一方で、世界各国において次々と放射光施設が建設されている中、UVSORの独自性を活かした特徴的な研究が今後益々問われることを知り、身の引き締まる思いをいたしました。このようなUVSORで展開する特徴的な研究には、長期で研究の方向性を決定できる教員の配置が必要であると思えます。今年4月から運営委員ではなくなりましたが、私にとってUVSORは研究の出発点であり、学生時代から現在までお世話になっている大切な放射光施設です。微力ではありますが、運営に関わった経験を活かし、これからも一人のユーザーとしてUVSORの発展に貢献できたら幸いです。

## 運営に関わって

### 北尾 彰朗

東京大学分子細胞生物学研究所・准教授

きたお・あきお / (学歴) 1989年京都大学理学部学士試験合格、1991年同大学院理学研究科化学専攻修士課程修了、1993年同博士後期課程中途退学、1994年京都大学博士(理学)。(職歴) 1993年京都大学理学部化学科助手、2002年日本原子力研究所計算科学技術推進センター研究員、2003年東京大学分子細胞生物学研究所助教授、2007年同准教授。スカッシュというスポーツで弾性体の軌道が壁面や床面で変化する過程を検証しています。ヒューマンエラーのため、なかなか頭の中のシミュレーション通りにいきません。

微力ながら2010年4月から2012年3月まで計算科学研究センター運営委員を務めた。センターには大学院生時代から長年お世話になっており、その運営に関わらせて頂いたことは貴重な経験であった。センターが厳正かつ研究者のニーズに柔軟に対応しうるよう運営されていることに感銘を受け、また運営に関わってこられた方々への感謝

の念を新たにした。一つだけ気になったのは、「量子化学」と「その他」で同じ数の審査委員で審査体制が構成されている点である。より広い分野をカバーする「その他」の審査委員がすべての課題をカバーしきれているのか、やや不安を覚えた。

計算機はその誕生以来、常に急速に進歩している。私は2002年に日本

原子力研究所のスーパーコンピュータPrimePower(1331GFlops)を使う機会を得た。主にこの計算機を3年間使うことで約240万原子からなる細菌べん毛繊維の分子動力学計算を行うことができた。8年後の2010年に発売されたGPGPU Tesla C2050/C2070の性能は、1030GFlops(単精度)・515GFlops(倍精度)であり、個人



で使うなら当時のPrimePowerとCPUスペックで遜色がない。院生が試したところ、430万原子までなら、既存のMDプログラムをそのまま用いるだけでPrimePowerと同程度の時間で分子動力学計算が実行できる。この例で見られるような急速な変化の中で、将来の計算機の動向やユーザーのニーズを予測しながら効率的な運営を行うことは容易ではなく、センターの方々には頭が下がる思いである。

センターの今後を考えるうえで、まずこれまでのセンター利用状況の変化と現状を分析してみたい。図はセンターレポート (No.11) の23, 24ページのデータの一部をプロットしたものである。プロジェクト数・利用者数(機構外)・利用者数(合計)は1978年から順調に増加を続け、1991, 1992年頃に最初のピークをむかえる。その後2003年頃に一旦極小に達するが、その後再び増加基調にある。さらに、手元の資料によると、近年MO計算においては圧倒的にGAUSSIANが使われている。MD計算と比較して、CPU時間に対するジョブ件数が圧倒的に多いことから、MO計算の実行時間は短く比較的並列性の低い計算が多いと予測される。逆に、MD計算は並列性が高

いと言える。またMD計算では、メジャーなAMBER、NAMD、GROMACSだけでなく、各研究室で開発されたコードもかなり使われている。

このセンターでは、比較的少数の利用者がかなり大規模な計算を行っている。ここ数年、センターの運営は大規模超並列計算をサポートする体制が試みられており、これが成果を挙げつつある。一方、手元に資料がある2008年度以降に関しては、センターのプロジェクトの約半数がCPU時間・ディスク容量が標準値の施設利用Aである。施設利用Aの利用者数はそれ以外の利用者の3分の1程度であることから、施設利用Aの利用者は、主に比較的小さい研究グループや研究室の一部のメンバーが計算を行っている研究グループからなると予測される。

最後にセンターの利用について意見を述べたい。「京」コンピュータではCPU間的高速通信機器に投資した故に、CPU間の通信を軽減したレプリカ交換法や我々が開発している完全に独立に実行した多数のシミュレーション結果を統合するような手法は適さないとの意見がある。高速通信が可能な計算機で低並列の計算が多数流れることは非効率だと考えるなら、今後センターで

は例えば、CPU能力は同程度で、通信が高速で超並列計算向きの計算機とともに通信能力を落とした計算機を分けて運用することを考えてもよいのではないだろうか。後者では、通信機器にかかるコストをより多くのCPU数に割り当てればよい。そこでは比較的並列度の低い多数のジョブや通信の少ない超並列計算が可能であり、決して少数ではない小口利用者の計算にも適している。ただし、近年問題になっている電力使用量の問題は残る。

ハイエンドは広い裾野に支えられる。GPCPUマシンが50万で買えるのだから、小口の計算は研究室でやればよいというのも1つの考えではある。しかし、利用者の中には、50万円の予算は使うのは容易ではない、あるいは計算機を使いたいが計算機利用環境を自前で整えるのは技術的に敷居が高いという研究者も少なくないと思う。ハイエンドの計算は今後しばらく「京」や専用計算機で行われると思うので、今後も計算科学研究センターにはミドルレンジから裾野までを支えていただけたらと考える。そのためには、これまでも増して効率的な運営方針を出していく必要があるのかもしれない。

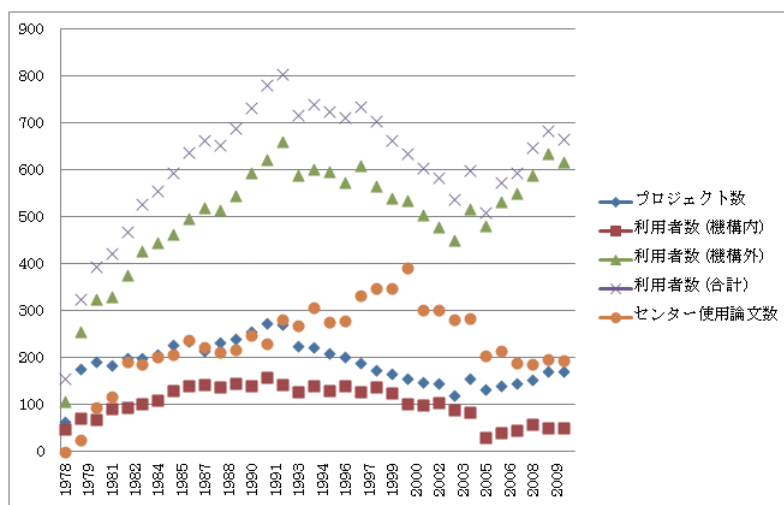


図 センター利用状況