

文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」
HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

計算分子科学研究拠点(TCCI)活動報告

高塚 和夫 東京大学 大学院総合文化研究科 教授／分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 教授(兼任)

「京」を戦略的課題研究に利用するHPCI戦略分野2の戦略機関としての活動も2年目に入った。CMSIは、分子科学、物性科学、材料科学分野の理論計算科学に関する全国的な組織であり、適宜、情報交換し「京」の有効活用、分野振興のための公開シンポジウムや研究会を開催している。TCCIでは、今年度も以下のように分野振興のための活動を行っており、今後も継続していく所存である。

1) 計算分子科学と2020年に向けたサイエンスロードマップ

汎用計算機として世界最高速のスーパーコンピュータ「京」は、2012年9月28日に共用が開始されたばかりであるが、文部科学省では、次々世代スパコン開発を目指した「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」というプロジェクトを開始した。これは、昨年度、京に関係する有志で次々世代スパコン設計に向けてまとめた計算科学ロードマップ白書(サイエンスロードマップ)が評価され、文部科学省の正式調査研究として始まったものである。この調査研究にTCCIからも参加し、2020年頃までを見通した分子科学の将来像についてまとめを行っている。このまとめた結果をコミュニティの皆様にご披露すべく、日本化学会第93春季年会特別企画として「超巨大計算機時代の化学」を、3月25日(月)立命館大学びわこ・くさつキャンパスにて開催する。文部科学省では、本調査研究の結果に

基づき、次々世代のスーパーコンピュータの開発を開始する計画である。

2) 新・元素戦略プロジェクトへの支援

昨年度、その準備段階として、TCCIで研究会等を企画したが、今年度正式なプロジェクトとして公募が行われ、その結果、採択された機関で、今後10年に亘る研究が開始された。いずれの研究課題も、計算科学が欠かせないのであるため、CMSI/TCCIでは今後も支援を行っていく予定である。

3) TCCI研究会(全体シンポジウム)

10月9日、10日に、TCCIの全体シンポジウムである第3回研究会を岡崎コンファレンスセンターにて開催した。80名を超える研究者(民間研究者4名)が集まった。今年度は、TCCIに所属するCMSI研究員全員に講演をお願いし、若手の成長を確認するよい機会となった。また、上記、「HPCIシステムのあり方」やサイエンスロードマップについては、招待講演の他、全員で議論も行い、実り多い研究会となった。今後も、毎年1回は、公開の全体シンポジウムを開催していく予定なので、「京」に関心のある方々の参加を是非お願いしたい。

4) 実験化学との交流シンポジウム

11月16、17日に、昨年と同様、京大福井謙一記念研究センター(京都市)において、TCCIの関わる有機化学、物理解化学、生命科学について、実験サイ

ドから、計算科学への期待・要望等に関して情報交換を行う第2回目の交流シンポジウムを開催した。85名程度(5名が民間)の参加があった。今年も最先端の研究を推進されている実験研究者の方々にお集まり頂くことができ、有意義な議論を行うことができた。今後も毎年1回程度は公開シンポジウムを開催予定しており、実験研究者の方々には、継続して参加をお願いしたい。

5) 産学連携シンポジウム

1月24日に大阪大学中之島センター(大阪)において、企業における計算科学の利用と学術研究への期待、TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通じた産学連携を目的に、第2回産学連携シンポジウムを開催した。今年度は、京の産業利用に関する招待講演と併せて、卒業生4名に「大学の何が役に立ったか? 卒業生に聞く」と題して、講演をお願いした。今回の企画が、人材育成における産学のギャップを埋めることに少しでも役立てば幸いである。

6) 夏の学校、TCCIウインターカレッジなど

大学院生レベルの教育をかねて、夏の学校やTCCIウインターカレッジを企画した。夏の学校としては、第16回分子シミュレーション夏の学校を共催で企画協力した。第52回分子科学若手の会夏の学校についても、特別企画を中心に支援を行った。また、分子研

とTCCIの主催として、分子シミュレーションおよび量子化学分野のTCCIウィナーカレッジを、12月11日～14日および12月17、18日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。参加者はそれぞれ約90名、約50名であった。

7) 超並列化技術国際ワークショップ

米国の若手研究者を招聘し、超並列

計算に関する日米の最新状況に関して情報交換を行う国際ワークショップを1月28日に早稲田大学で開催した。今後も、年1回開催していくので、超並列計算に興味のある方はご参加頂きたい。

8) その他

CMSIは、分子科学、物性科学、材料科学分野の積極的な連携で、今後も

分野振興に努めていく。特にTCCIでは、産学連携について、学生のキャリアパス拡大に向けて、シンポジウムでの新規課題の発掘・相談、社会人の再教育の場の提供など、産業に対する一貫性のある対応システムの確立を目指していく。

インドとの国際連携に向けて

齊藤 真司 理論・計算分子科学研究領域 教授

11月20、21日に富永圭介教授（神戸大学）代表による日印共同セミナー「分子分光と顕微分光の最先端：基礎から物質および生物への応用」がハイデラバード大学（インド側代表はSamanta教授（Hyderabad大学））で開催された。セミナーでは、表題に関する研究、とくにタンパク質の構造変化、構造形成などを中心に、日本からは富永教授を始めとする8名（分子研からは、奥村准教授と私）、インドから13名による講演が行われた。

この日印共同セミナーは、富永教授がインドの研究者と連絡を取り推進された学振の課題で全て富永教授のご尽力によるものであり、分子研の事業ではない。しかし、現在、分子研では小杉研究総主幹のもと、従来の韓国との連携に加えイスラエル（Weizmann研究所）などとの国際連携を強化しようと動いているところであり、インドとの連携も模索している。そこで、インド各地から研究者が出席する今回の日印共同セミナーにおいて、分子研のグループの紹介とともに、国際連携の一環として考えられている外国人学生の受け入れ（IMS International

Internship Program（仮称））について、私の発表時間の最後にゲリラ的に紹介させていただいた。突然の紹介にも関わらず、Indian Association for the Cultivation of Science (IACS) のKankan Bhattacharyya教授からは、分子研の広範で深い研究はIACSにとっても有益である、と早速に対応して頂き、教授の属している物理化学科以外に有機化学科、無機化学科、生物化学科も含めたMOU締結等進めていこうということになった（ちなみに、IACSは、分子科学分野のみならず重要な分光学的解析手法の一つであるラマン散乱の発見者であるRaman博士が居られた研究所である）。

なお、ハイデラバードでの日印共同セミナーの後、バンガロールにしばらく滞在し、本年度客員教授として分子研に滞在されたBagchi教授（Indian Institute of Science, IISc）との共同研究等の続きを進めた

（IIScは先に紹介したラマンが研究所長を務めた研究所であるとともに、生体分子の二次構造の解析で欠かせないRamachandranプロットとして知られるRamachandran博士が居た研究所であり、この研究所も既に創立100年を越している）。

長倉先生を始めとする多くの先生方のご尽力のお蔭でインドにおける分子研の知名度は非常に高い。今後、IACSとの実質的な人的交流・共同研究が始まり、さらに、インドの他の研究機関とも連携が広がっていくことを期待します。



Indian Institute of Scienceの象徴的建物であるTower Building