

## ポスト京コンピュータに向けた取り組み

信定 克幸 分子科学研究所 准教授

20世紀中頃からの電子計算機（デジタルコンピュータ）の進展と共に、自然科学の研究領域において実験・観測や理論に基づく研究手段の他に、もう一つの強力な研究手段として数値計算科学的手法が急速にその地位を確立し始めた。特に、ここ最近のスーパーコンピュータと呼ばれる大規模な計算機を使えば、これまでは非現実的と思われていた極めて複雑な自然現象を、計算機の中で再現することも可能となり、数値計算科学的手法が自然科学の理解に大いに寄与する事例も多々見られるようになってきた。我が国は、以前から世界最先端のレベルでスーパーコンピュータの開発を行ってきた実績があり、2012年度初頭には神戸理研京コンピュータが世界最速のスペックを打ち立て、引き続き2012年秋には京コンピュータの一般共用が開始された。自然科学の深化に繋がる多くの成果がこの京コンピュータを使った研究から生まれると期待されており、実際、既にその成果が出始めている。その一方で、スーパーコンピュータ開発の世界はその競争が熾烈であり、既に京コンピュータの処理能力は米国や中国の最速マシンの後塵を拝している。上記したように数値計算科学的手法は、自然科学を理解するためには必要不可欠な手段として認められており、それ故に単なる処理能力のスペック値の競争の観点ではなく、数値計算科学の観点から真に新しいサイエンスを切り拓くために、京コンピュータの後継機を開発することが重要と考える機運が高まっている（現在の京コンピュータの演算能力

である10ペタフロップス、要するに計算速度が毎秒1京回の100倍速い1エクサフロップスの能力を有する後継機と言うことでエクサコンピュータと俗に呼ばれることもあるが、「エクサフロップス」ありきで後継機を確定しているわけではない。以下では、後継機コンピュータのことをポスト京コンピュータと呼ぶ事にする）。このような状況を踏まえ、サイエンスの観点からどのようなポスト京コンピュータを設計するべきなのか、その答えを出すために、生命科学、物質科学、気象・防災、ものづくり、素・核・宇宙論等の各自然科学分野の専門家が各分野の現状と問題点を踏まえつつ、以下の様なフィージビリティスタディを2012年～2013年度の2年間の計画で進めている。

2011年、HPCI（ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ）計画の推進にあたり国として今後のHPC研究開発に必要な事項等を検討するため、研究振興局長の諮問会議「HPCI計画推進委員会」のもとに「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」が設置され、以下の作業を行うことが決まった。

・今後の開発を担う若手を中心に、幅広い産学官の関係者による検討を開始する。

・「アプリケーション」、「コンピュータアーキテクチャ」、「コンパイラ・システムソフトウェア」の3つの作業部会が緊密に連携しながら検討を進めていく体制を立ち上げる。

これを受けて、アプリケーション作業部会とコンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会の二つの部会を発足し、それぞれの議論を踏まえ、二部会協同作業により複数の追求すべきHPCシステム（つまり上記したポスト京コンピュータ）と、これを開発していく体制案をとりまとめることとなった。アプリケーション作業部会は、5つの戦略分野関係者、大学・研究機関、企業で活躍している現役の研究者が中心となり、集中討議を何度も行った。また、コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会とのすり合わせのためのアプリケーション要求性能サブ作業部会を開催し、集中討議を行った。二つの作業部会の合同作業部会も開催し、作業部会での討議の結論として報告書をまとめるに至った。これらの数々の討議の中で、主にアプリケーション作業部会で議論された内容を踏まえて、今後の計算科学のあり方をサイエンスロードマップ白書としてまとめることとなった。

幅広い自然科学の研究領域において活躍している計算機科学の専門家と計算科学の専門家が強力な相互支援体制を作り、ポスト京コンピュータ開発に多大なる精力を傾けている。つい先日（本記事執筆2013年12月末）、ポスト京コンピュータ開発に関わる予算が閣議決定されたとの情報を得た。今後もこの勢いを増すためにも、多くの仲間と共に真に新しいサイエンスを切り拓く事を目標に、計算機科学の進展に寄与したいと考えている。

# 強光子場科学研究懇談会の紹介

山内 薫 東京大学大学院理学系研究科 教授

強光子場科学研究懇談会 (Japan Intense Light Field Science Society: JILS) <http://www.jils.jp/> は 2003年10月17日に設立され、昨年、10周年を迎えたばかりの比較的新しい学会である。ご存知のように、強光子場科学は、物理学、化学、レーザー工学にまたがる学際分野として、そのフロンティアが現在急速に拡大しており、この分野の研究対象は、「光」そのもの、その光に伴って起こる現象、また、その現象のさらなる応用など多岐にわたっている。そのため、強光子場科学分野の発展にとって、異分野の研究者の交流は不可欠であるとともに、光学材料開発、先端レーザー光源開発、先端計測技術開発に携わる産業界の技術者との交流は、日本におけるこれからの産学の共同研究・共同開発のために大切である。このような背景をふまえ、「強光子場科学やその分野に関心のある大学や公的機関の研究者、企業・産業界の研究者または技術者が、自由な雰囲気のもとに議論を行うことができる場を提供する」という理念の下に設立されたのが、強光子場科学研究懇談会である。

現在の正会員数は約80名と小規模であるが、(株) オプティマ、カンタムエレクトロニクス(株)、コヒレント・ジャパン(株)、スペクトラ・フィジックス(株)、タレスレーザー(株)、(株) 東京インストルメンツ、(株) 東芝 研究開発センター、(株) 日本レーザー、(株) 日本ローパー、浜松ホトニクス(株)、(株) 日立製作所 中央研

究所、(株) ルクスレイ (50音順) の12社の賛助会員が会の運営を力強く支えてくださっている。

定期的な活動としては、年に3回の懇談会、そして、10月の総会がある。懇談会は、1月、4月、7月に開催され、懇談会では、毎回、2~3名の講師の先生をお招きし、講演をいただくとともに、開催場所の研究所や研究室の見学を行っている。JILSは会計年度が、10月から翌年の9月までとなっており、10月の総会では、その前の期の決算報告と、その期(10月以降)の予算を審議し、承認している。また総会終了後に、講演会を開催し、1名~2名の講師の方に講演をお願いしている。これらの懇談会や総会は、会員のみが参加する会合であるが、パシフィコ横浜で毎年4月に開催される懇談会では、非会員の一般の方にも参加費をお支払いいただいた上、御参加いただいている。また、これらの定例の懇談会、総会にて行われた講演内容については、その講演を録音の上、テープ起こしをして、JILS Newsletter 誌としてウェブ上で刊行している。

JILSでは、このような定例の活動とは別に、出版事業を通じ、研究分野の振興に資する活動している。ウェブサイトにて刊行されている JILS Newsletter 誌の内容を取りまとめて、「強光子場科学の最前線1」(2005年刊行)、「強光子場科学の最前線2」(2007年刊行)を出版している。また、わが国の光科学分野で活躍する230名を

超える方々にご執筆いただいた解説を取りまとめた「光科学研究の最前線」(2005年刊行)は、第19期日本学術会議において、声明として「新分野の創成に資する光科学研究の強化とその方策について」が議決(2005年)されるにあたり大きな力となった。JILSでは、さらにその続編である「光科学研究の最前線2」(2009年刊行)を出版し、光科学分野の振興に貢献している。また、東京大学大学院理学系研究科にて開講されている産学連携教育プログラム「先端レーザー科学教育研究コンソーシアム」と連携し、実験実習を中心とするその教育プログラムの成果を教科書の形で、「先端光科学入門」(2010年刊行)、「先端光科学入門2」(2011年刊行)として出版している。

一方で、国際的な視野で強光子場科学の振興に寄与することもJILSの重要な活動である。JILSでは、毎年主に海外にて開催される International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science (<http://www.isuils.jp>) を東京大学大学院理学系研究科付属「超高速強光子場科学研究センター」と連携して支援している。昨年10月には、第12回がスペインの Salamanca にて開催され、本年は、インドの Jodhpur にて第13回が本年10月に開催される予定である。さらに、この会議の招待講演者が寄稿した総説を集めた総説誌 Progress in Ultrafast Intense Laser Science を Springer 社の Chemical Physics のサブシリーズとして毎年1

巻のペースで刊行している。現在までに、10巻が出版されており、強光子場科学分野の研究者のためのガイドラインとなる総説シリーズとして国際的に知られるようになった。

また、中国の上海の研究者と東京の研究者が中心となって、毎年、上海と東京で交互に開催されている Shanghai-Tokyo Advanced Research Symposium on Ultrafast Intense (通称 STAR meeting) も、JILSの支援を受けて開催されているものである。その他、2011年7月に北海道で開催された The 12th International Conference on Multiphoton Processes (ICOMP12) と The 3rd International Conference on Attosecond Physics (ATTO3)、そして、2012年11月に開催された The

7th Asian Symposium on Intense Laser Science (ASILS7) も JILSが支援し、開催されたものである。さらに、JILSは本年7月に沖縄で開催される The 19th Ultrafast Phenomena 2014 を東京大学とともに主催することとなっている。JILSでは、これらの国際的な学会の開催や支援を通じ、超高速現象の科学や強光子場科学の先端研究分野において、国際的な視点から研究交流を支援している。

フェムト秒科学の次はアト秒科学の時代がくると予測されていた。アト秒パルスの発生は、今や現実のものとなったが、これは光の場の強度を強め、高次高調波を効率よく発生させる技術があつて初めて可能となった。このことは、アト秒パルスの発生やアト秒科学

が強光子場科学の研究展開の一つと位置づけられることを示している。また、フェムト秒パルスによるレーザー誘起フィラメントの研究も、新しい物質の合成の場として関心が持たれ、新しい展開が期待されている。JILSでは、このように次々と生まれ、そして広がっている基礎研究と技術開発のフロンティアに注目し、その活動を展開してきた。今後、このダイナミックに発展する学際的な分野に関心を持つ方が更に増え、そして、その方々が、JILSにご入会され、産学の枠を超えた視野から懇談会での議論に参加していただきたいと願っている。

## 関連学協会等との連携

# 新学術領域研究「柔らかな分子系」(平成25～29年度)について

田原 太平 理化学研究所 主任研究員・領域代表

今年度から新学術領域研究「理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学(略称:柔らかな分子系)」(領域番号2503、平成25～29年度)を開始しました。この研究課題は、広い意味での分子科学そのものをテーマとするものです。また、領域代表を務める私自身は助教授として分子研に7年間在籍していましたし、分子研の卒業生である藤井正明さん(東工大)、水谷泰久さん(阪大)、森田明弘さん(東北大)や、現役の分子研教授の村橋哲郎さんが計画班のメンバーとして参加していただいているなど、分子研に直接的・間接的に関係が深い新学術領域研究です。今回小杉さんからお話があり、こ

の新学術領域の立ち上げの背景や我々が目指すものなどについて少しご紹介させていただくことになりました。

21世紀に入ったばかりの頃、分子科学では分野に対する危機感や閉塞感が強く意識され、将来についての議論がたいへん盛んに行われました。分子研でも今後の分子科学を議論する研究会が開催されたことを記憶しています。当時私は分子研の助教授から理研の主任研究員へ異動する頃で自身の次の研究の方向性を考える時期でもあったため、ずいぶん真面目にこの問題を考え、議論にも参加しました。なかなか気鬱な議論が多かったのですが、その中で私が強く感じたことは、我々は一旦「分

子の科学」と言うものを広く定義し直し、狭い枠から飛び出して新しい挑戦を始めるべきではないか、ということでした。素粒子物理などの一部を除く自然科学のほとんどは、分子の振舞いによって理解できる現象を取り扱っています。ですから、分子について最も真面目に考え、その視点に立脚した研究を行っている我々が、古い枠を外して自由な挑戦を始めればその前には未開の領域が広がるはずだ、と思うようになりました。そしてその広大な未開地を自由に進もうとする一種の楽天的な活力、それこそが我々に最も必要とされている力だと考えるようになりました。基礎研究の役目は常に新しい

可能性を追求することですので、これは我々に常に要求されている当たり前の事を再確認しただけの事なのですが、精緻な思考で分子科学の研究を進めている者が同時に楽天的に barbarian のような気分を持つというのは、実はそれほど簡単なことではありません。それに気がついていざいぶんと目の前が開けたような気分になりました。

以前、分子研レターズの第62号に寄稿させていただく機会があり、「分子研に期待する」というタイトルで上のような思いに立って分子研への希望を書きました。しかし、人に期待するばかりで自分で何もしないのはズルです。また、北川禎三先生がスモールサイエンスにおいても全国的な研究ネットワークを作ることが重要だということを感じ、強調整されてきたのを聞いていたこともあって、自分たちでも何かをしなければいけないと強く思うようになりました。基礎研究における挑戦を行うために最も大事なことは、Scientific に新しく重要な問題を設定することです。そこで、ちょうど特定領域研究「高次系分子科学」の領域代表を終えて一息ついていた藤井正明さんと相談し、北尾彰朗さん（東大）、水谷泰久さん（阪大）、神取秀樹さん（名工大）に声を掛け、5人で何度も集まって、我々はこれから何をすべきかという事を真摯に議論しました。藤井さんの特定領域研究では、計測分野の異なる分野（気相、凝縮相、生体関連）の統合を行いました。ですので、次にやるべきことは、計測と理論、さらに機能を創る研究者との間の垣根を取り払うことだと私は思っていました。そして皆の議論によって到達した考えが、分子の視点に立脚した複雑分子系の研究を行おうという方向性です。

物質は単一の分子から細胞に至る階層構造を成しますが、この中で現在の化学のフロンティアは複雑系の機能の

解明と創出にあると言えます。生体分子系に代表される高い機能を有する複雑系の本質は、大きい内部自由度を持ち、系が状況に応じて柔軟に変化して最適な機能を発現する、という点にあります。我々はこのような特質をもつ複雑分子系を「柔らかな分子系」と定義し、この「柔らかな分子系」の機能の理解と利用が現在の物質科学の最も重要な問題の一つだという考えに至りました。そして、その理解と制御に向けて、分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算科学を統合した研究を行いたいと考えました。

「柔らかな分子系」の研究は、実は多体問題である複雑な現実系をどのように分子の立場で取り扱うかという問題に他なりません。その為には、例えばフェムト秒での局所的な刺激がどのようにミリ秒～秒の分子応答を引き起こすのか、あるいは数個の原子団の量子状態の変化がいかに巨大分子の機能発現につながるのかを解明しなければなりません。つまり、これまでに無い広い時間・空間スケールを俯瞰する新しい総合的な視点に立脚した研究が必要です。また、現象の観測や理解だけでは駄目で、それらに基づいて新しい機能を生み出し、利用することが必須です。このような総合的な研究はまさに言うは易く行うは難し、一つの研究グループではもちろんのこと、一方からのアプローチでは到底達成することはできません。したがって必然的に複雑で高機能な「柔らかな分子系」を包括的に研究する新しい研究領域の創成が必要です。

以上のような考えに基づいて、生体分子、超分子、分子集合体、界面等に代表される「柔らかな分子系」とその要素過程に対して、理論計算、先端計測、機能創成の3つを融合した複雑系に対する新しい「分子の科学」のための学

術領域の創成を提案しました。具体的には、以下の3つの研究グループを設け、理論計算、先端計測、機能創成が三つ巴になって「柔らかな分子系の科学」を推進するというものです。

(1) 解析班（北尾彰朗班長）：分子系が柔らかさを活かして機能を発現する機構を、超高速計算機の開発を背景にした革新的な分子理論による理解と予測によって明らかにする。

(2) 計測班（水谷泰久班長）：柔らかな分子系のもつ多様な準安定状態とダイナミクスを時間分解分光や単一分子計測などの最先端計測によって観測・解明する。また柔らかさに基づく現象の観測のための新しい手法を開発する。

(3) 創成班（神取秀樹班長）：合成化学・遺伝子工学を駆使して、超分子やタンパク質などの柔らかさを有する分子系の新規な機能を創成する。

領域代表の私、3人の班長、事務局の藤井正明さんの5人が総括班となり、この考えに共鳴してくれた森田明弘さん（東北大）、林重彦さん（京大）、高橋聡さん（東北大）、村橋哲郎さん（分子研）、中西尚志さん（物材機構）の参加を得て行った申請は幸いにも採択され、新しい新学術領域研究をスタートできることになりました。これからさらに約30人の方々が公募班員として参加してくれることになっていますが、メンバーの一人一人がおのおの時代を切り拓く気概に燃えて研究が推進できる、そんな自由闊達な新学術領域にしたいと思っています。

この新学術領域研究の志は高く、理論・計算科学、先端計測、物質創成というこれまで異なる分野として発展してきた研究領域を統合・融合し、我が国の学術研究に新しい潮流を創らんとするものです。一番大事なものは“人”ですから、この理念を実現するためには異なる分野で活躍する優れた研究者

に集っていただき、その間に相互理解に基づく信頼関係を構築してもらうことが大切だと思っています。本領域の推進で高い研究成果を上げなければならぬのはもちろんですが、それだけ

でなく5年後の終了時に次へつながら新しい種が多く生まれていることが重要だと考えています。基礎研究では何にも増して個人の視点、価値観、美意識が本質的に大切ですので、多くの異

なる個性がぶつかる学術研究を本気でを行い、将来を拓く新しい知の創造を皆で行っていきたいと考えています。

## 関連学協会等との連携

# 新学術領域研究「動的秩序と機能」(平成25～29年度)について

加藤 晃一 分子科学研究所／岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授・領域代表

私たち人間を含めた生命体は、多種多様な分子素子から構成されており、生命活動はこれら分子集団の秩序だった振る舞いとして捉えることができます。前世紀の末期に勃興したゲノムサイエンスに端を発するオミクスアプローチの進展により、生命体を構成する分子素子に関する情報が急速かつ網羅的に明らかにされてきました。例えば、タンパク質の3次元構造のデータが爆発的な勢いで蓄積されていることは周知の事実です。しかしながら、これらの分子素子が、ダイナミックな相互作用を通じて自己組織化し、高次機能を発現するための秩序構造を形成する仕組みについては、これまで現象論的な記述に止まっており、分子科学・物理化学の観点に立脚したアプローチは驚くほど乏しいのが実情でした。私たちは、このような課題を分子科学の根本的な問題として認識し、平成25年度より新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(略称：動的秩序と機能)の活動を開始しました。

分子の自己組織化は、化学の分野では、低分子の集積によるナノ構造体の創出を目指した超分子化学の問題として取り扱われてきました。すなわち、

巧みにデザインされた低分子が自発的に集積する性質を利用して、一定の空間秩序をもったナノ構造体を作り、元々の要素ではもち得なかった機能を生み出すことを目指した研究が見事に展開されてきています。しかしながら言うまでもなく、生命分子の自己組織化は非生体系の場合に比べて遥かに複雑です。

生命分子システムの特徴は、構成要素が複雑かつ柔軟であること、そしてそれらが弱い相互作用を通じて集積して、独自の非対称性と運動性を有する巨大な集合体を形成することが特質です。さらに重要なことは、生命分子は単に集合して一定の構造体を作るだけでなく、いったん組みあがった構造体が自律的に変容していき、極端な場合は解体していくという時間発展のプロセスがシステムの中にプログラムされていることです。このようにダイナミックな分子の集合と離散のプロセスを通じて、例えば神経系の高次機能に関わる細胞の形態変化は発現しています。こうした離合集散する生命分子集団による動的秩序形成のメカニズムを解明することは、生命の本質的な理解につながるはずですが、また、そのことを通じて、人工超分子系に生命分子の特質

を賦与する手掛かりが得られるものと期待されます。そもそも、分子集団がいかなるプロセスで自己組織化されるのかという問題は、生体分子に限らず、非生体系の超分子化学においても未開拓な研究領域です。こうしたプロセスの詳細を探求することを通じて得られる知見は、生命システムの秩序形成の理解の基盤になることも期待されます。

このような考えのもと、本領域では、「分子が自律的に集合する物理化学的メカニズムはいかなるものか?」、「分子の離散過程はどのようにプログラムされているのか?」、「人工系で分子の動的秩序を精密制御する指導原理は何か?」という課題に取り組んでいます。そのために、生命分子科学と超分子化学に加えて実験物理科学および理論科学と計算科学、さらに生体分子工学と細胞生物学の第一線の研究者が一丸となって、研究を推進しています。具体的には、生命分子システムにおける「動的秩序の探査」(佐藤啓文班長)、「動的秩序の創生」(平岡秀一班長)、「動的秩序の展開」(班長・加藤)という3つの項目を研究の柱として設定しました。こうした活動を通じて、生命分子システムの秩序形成原理を統合的に理解するとともに、そのデザインルールを取

り入れた人工システムの構築が進展するものと期待しています。このようにして得られた知見に基づいて、人工的な生命システムを創生するための指導原理を導き出すことも、本新学術領域の大きな目標の1つです。

当然のことながら、私たちは研究成果を広く領域内外に発信するとともに、これまで異分野とみなされてきた研究領域の連携推進を目指した公開シンポジウムやワークショップの開催にも力を注いでいます。今年1月に京都で開催した第2回公開国際シンポジウムでは、5名の外国人講師（それぞれ専門は細胞生物学、生物物理学、計算科学、超分子化学、分子分光学）も交え、専門の研究分野を縦横に跨いだ議論が白熱しました。さらに、86件のポスター発表では大学院生を含む若手研究者からも多数の発表があり、普段の学会・研究会では触れることがない多彩な分野の研究者との交流に、会場は大変な賑わいとなりました。また、国際的な研究連携のネットワークの強化と若手研究者の育成のために、アジア連携分子研研究会 “Sixth Korea-Japan Seminars on



Biomolecular Science: Experiments and Simulation” ならびに岡崎 統合バイオサイエンスセンター／総研大統合生命教育プログラム サマースクール2013 “Bioorganization” を共催させていただきました。こうしたイベントでは、若い世代の方々はもちろん、国内外で活躍されている研究者とも新たな視点で向き合う有益な機会を得ることができ、私たち領域メンバーも大変刺激を受けています。今後、第3回国際シンポジウム（2014年冬に予定）や、各種関連学会でのワークショップ、若手の会の開催等を企画しています。多くの方にご参加いただきましたら幸甚に存じます。本領域の研究成果や活動予定は、ホームページ (<http://seimei.ims.ac.jp>) でもご案内し

ていますので、ぜひご覧下さい。

本稿が皆様のお手元に届く頃には公募研究グループも新たに加わり、本領域にさらなる広がりがもたらされているものと思います。多様なバックグラウンドの研究者が明確な問題意識を共有して英知を結集することにより、生命分子の動的秩序形成の理解に向けた強固な分野横断的研究体制を構築しつつあります。このように、これまで異なるフィールドで活躍してきた科学者の学際的な連携と議論を可能とする「知の梁山泊」を構築することが領域代表としてのつとめであると考えています。

皆様のご支援を賜りますよう、どうぞよろしくお願い申し上げます。