

長谷川 淳也 北海道大学触媒科学研究所 教授

おかげさまで



はせがわじゅんや

1993年 京都大学工学部合成化学科卒業
 1995年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻修士課程修了
 1998年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程修了
 1997年 日本学術振興会特別研究員
 1999年 ルンド大学理論化学科博士研究員
 1999年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻助教
 2008年 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻講師
 2011年 京都大学福井謙一記念研究センター准教授
 2012年 北海道大学触媒化学研究センター教授
 2015年 北海道大学触媒科学研究所教授

最近、表情が明るいですねと言って頂くことができました。令和3年度をもって所属する北海道大学触媒科学研究所の所長を退任し、肩の荷を下ろして晴れやかな気分だったからでしょうか。小さな研究所とは言え、附置研究所、共同利用・共同研究拠点としての機能を維持し、向上するためには自身の想像を超える労力と精神力が必要でした。パフォーマンスの悪いシングルCPUは4年間の耐用期間が近づき、そろそろ限界をむかえつつありました。計算科学研究センターの計算機もそろそろ更新時期をむかえるとのことで、こちらもご苦労さまでしたと感情移入しています。

さて、分子科学研究所、計算科学研究センターの大型計算機とのかかわりを振り返りますと、修士課程の学生であった頃、S820からSX-3へのリプレイスがなされた頃に遡ります。当時、中辻研究室で開発されていたSAC-CIプログラムを使って、より大規模な分子系に精度の高い励起状態計算を展開する研究を進めていました。S820の

コアメモリは数百メガバイトでしたので、SAC-CIプログラムが使用するメモリを低減するためのアルゴリズム開発に取り組んでいました。SX-3へのリプレイスによって、主記憶が2ギガバイトにまで拡張されたときの驚きを鮮明に覚えています。今となってはノートPCでも当然装備されているくらい、むしろ小さいくらいの主記憶の容量でしたが、応用できる対象がポルフィリンにまで広がりました。計算機の発展のおかげさまですが、当時ab initio励起状態計算で最大規模の計算であった長嶋雲兵先生のCI計算を超えたと、素直に嬉しく感じたことが思い出されます。

また、当時は並列処理の黎明期でもありました。青柳睦先生が分子研にいらっしゃった頃ですが、計算機センターで開催された研究会でお会いした折の会話で、数百並列計算を目指して分子軌道計算プログラムを開発していると伺いました。ワクワクする高揚感を感じたことをよく覚えています。当時の中辻研究室ではプログラム開発

のための外部資金に採択され、光通信で接続された5機のIBM-RS6000が導入されました。Parallel Virtual Machineという並列計算用のソフトウェアを使ってデータ通信することが可能になりました。マニュアルに掲載されていたサンプルを使用して、子機から親機に向けた「Hello」というメッセージが返ってきたときは、素朴に感動しました。今から思えば「長谷川のおもちゃ」と呼ばれる程、図々しく使わせてもらいましたが、不遜にも当時の中辻研究室の先生方にはお礼を申し上げていなかったことに恥じ入るばかりです。他方で、プログラム開発があまり評価を受けない時代でもありました。柏木浩先生が当時、プログラム開発は学位授与に相応する価値があると主張されていたことに痛く同感していました。Parallel Virtual Machineで動的に負荷分散して積分変換するプログラムを開発してポルフィリン類の計算を行い、意気揚々と分子科学討論会に乗り込んだのですが、ポスター発表では閑古鳥でした。しかしながら、開

発したプログラムでクロロフィル二量体のSAC-CI計算までこぎつけることができたのは（そして学位を取れたのは）、先端的な研究環境に加えて、時代を先駆ける風を届けて頂いた分子研の先生方のおかげでした。

指導的な立場になってからは、量子化学スクールや分子シミュレーションスクールなど分子研が提供している教育面でのアクティビティを活用させて頂いています。大学院での教育は対象とする学生層、あるいは他授業との接続性を考えて、授業内容を調整せざるをえない部分がありますが、分子研から提供される教育機会は、大学院講義の水準あるいは研究室でカバーできる領域を超えて提供されるものであり、計算科学を専門とする学生にとっても有益です。また、学生から新たなソフトウェアを試してみたいという声が上がった時は、まずは分子研の計算機センターで試してみるようにアドバイスしています。それが可能であるソフトウェアライブラリーは世界的に見渡しても極めて秀逸な水準にあり、しかも無償で利用できることは研究者あるいは教育者として非常にありがたい存在です。こちらも分子研のおかげで学生の高度な研修が実現しています。

このように振り返ってみますと、私は学生時代から現在に至るまで分子研の研究者、大型計算機、教育イベントから有形、無形の力添えを得て計算科学者、研究室主宰者としての研究者人生を歩ませて頂き、まさに大学共同利用機関としての分子研の機能を活用させて頂いたことがよく分かりました。

そして、現在は、附置研究所に生業を得て、文部科学省が認定する共同利用・共同研究拠点の運営にも携わっています。大学共同利用機関である分子研とは提供するサービスの規模と水準はかなり違いますが、「大学の枠を越えて全国の当該分野の研究者の共同利用に供する」という目的には共通する部分があります。私が所属する北海道大学触媒科学研究所では昨年度までは触媒科学研究拠点として、今年度からは触媒科学計測共同研究拠点として共同利用・共同研究拠点事業に参画しています。触媒拠点では、共同研究を通して触媒研究に関する知識、情報、技術を提供し、研究者コミュニティの研究に寄与すること、国内外の研究者の招へいやシンポジウムの開催を通して国内外の研究者交流を促し頭脳循環に寄与すること、海外の主要研究拠点において国際シンポジウムを開催し、国内における優れた研究成果を情報発信することなどの活動を実施しており、触媒学会をはじめとする研究者コミュニティに寄り添った拠点活動が特徴です。

ところで、拠点活動の主担当としての責任は、予想をはるかに超えています。第三期中期計画期間から、拠点の評価が絶対評価から相対評価に変わったためです。すなわち、前回の評価でA評価を受け、同様の水準で拠点活動を実施したとしても、油断すれば次の評価ではB評価になりうるということです。従って、ある一定数の拠点がB評価やC評価を受けることとなります。拠点の評価が落ちれば、評価結果が学内で独り歩きして、研究所のアクティビティが低落したものと誤解を

受けかねません。当然ながら、担当者は必死になります。「過剰なサービスは不要である。日々の研究に励みなさい。」という拠点評価コメントを夢で見ることがあります。

それにしても附置研究所や大学共同利用機関における研究者は、研究が最大のミッションであることは論を待たないでしょう。拠点活動に研究者が疲弊するようでは本末転倒です。拠点となる研究機関に優れた研究成果があがってこそ共同研究への動機と駆動力になり、拠点事業を成功させる原点になるものと思います。そのような研究活動への高揚感、研究者の魅力、研究成果を発信する研究機関のキラキラ感は、次代を担う学生や若手研究者が研究者を志す動機へとつながらないでしょうか。私が研究者としての進路を歩んできた背景には、出身研究室はもちろんですが、分子研や近隣の研究者の影響が大きかったと振り返っています。勝算があったわけでもない向こう見ずなだけだった若輩を夢中にし続ける魅力があったということでしょうか。

計算科学研究センターの大型計算機の更新には、毎回、関係者の方々の甚大な労力を伴っていると伺っています。末尾ながら、関係各位のご尽力に思いをはせ、心から感謝申し上げます。年度が明けて、管理業務の電子メールの数は減衰し、研究者としての時間と感情が少しずつ回復してきました。次は、どのような計算機が入るのかなというトキメキを感じ、ユーザの一人として楽しみにしております。