

July 2013

NO. 8

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

特集：計算物質科学の「見える化」

「見える化」へ向けて

CMSIのネット配信講義

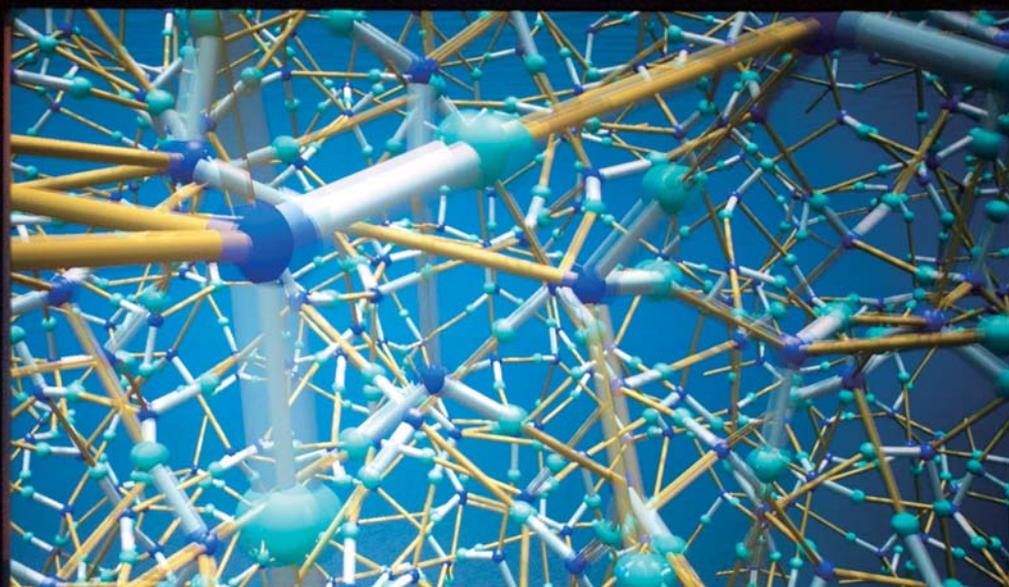
MateriApps

物質科学シミュレーションのポータルサイト

インタビュー

ERmodの開発者・松林伸幸／桜庭 俊

「見える化」へ向けて



「見える化」シンポジウムのシアターイベント。新しいエネルギー源として期待されているメタンハイドレート分解過程のシミュレーション3D映像と、琴の演奏とのコラボレーションによって、幻想的な世界が描きだされました。

次世代の電子デバイスや薬剤、エネルギー変換物質の開発など、CMSIのすすめる物質科学の研究は、社会からも大いに期待されています。一方で、物性を決めている電子や分子は目に見えず、それらの振る舞いを大規模計算で明らかにしようとする計算物質科学は「わかりにくい」と敬遠されがちです。どのように伝えれば、期待を興味に変えることができるのか？ CMSIと豊橋技術科学大学(TUT)との共催で2013年3月に開催された第1回「見える化」シンポジウムでの議論や提案を踏まえ、計算物質科学の「見える化」の道を探ります。

CMSIが力を入れている 「人の見える化」

科学の「見える化」は「広報」の一環と考えることができます。一般社会への発信が謳われることは当然ですが、CMSIではそのほかにも重視している対象があります。研究の入り口や出口に位置する理論家、実験家、他の分野の研究者、企業、そして人材の入り口や出口に位置する学部学生や中高校生、企業や研究所の採用担当者などです。

広報活動で「何を」見せるかという、まず第一には計算物質科学の成果です。それらは通常、論文や講演、特許として発表されますが、一般社会や中高校生向けには、研究成果だけではなく、計算物質科学の面白さ

や、研究者の思い、どんなことに興味をもって、なぜその研究を行っているかを伝える必要があるでしょう。また、CMSIで開発されたアプリケーションソフトウェア、あるいは並列化や最適化の過程で蓄積されてきた経験や情報もCMSIの重要な資産です。これを公開して分野の内外に普及させることも広報の役割になります。最後に、CMSI内で研究・開発に携わっている若手研究員など、「人」そのものの広報活動がキャリアパスの創出や分野振興のために不可欠です。

CMSIは現在、さまざまな活動に力を入れています。第1は、「拠点研究員」という制度を設けたことです (Torrent No.3 特集)。CMSIは、全国14の拠点をはじめ、さまざまな機関が参加するネットワーク型のコミュニティです。このような組織では、各所で蓄積される経験や



「可視化とシナリオで科学を面白く伝える」というテーマで講演された伊藤智義さん。

情報、知識を集約して分野の共有財産とし、それを分野内に普及させていく機能が必要になります。これをミッションとするのが拠点研究員です。大学院の学生や若手研究員のための教育活動についても、配信講義など新しい取り組みを開始しています (本特集PART2)。

第2は、この広報誌のTorrentです。Torrentでは、CMSIの研究成果、アプリケーション開発、教育活動などの大きなテーマを特集してきました。これらの記事には、若手の研究者やアプリケーションの開発者、教員、学生などが、執筆やインタビューを通して登場することで、研究成果だけでなく「人の見える化」も進めています。Torrentのコンセプトは、まず手

に取ってもらうことです。そのために紙媒体にして、表紙のデザインをカラフルで明るくしました。電子や分子のイメージがとかく冷たくなるためです。



横山広美さんは「見える化は決め手になるか～分野外からみた計算物質科学の強みは?」というテーマで講演された。

アプリケーションの見える化もすすめています。アプリケーションの開発はこれまで研究として評価されないという側面があり、そのために開発者の顔も見えていませんでした。CMSIでは、アプリケーションを公開すると同時に、開発者も積極的に紹介していきます。さらに、利用者である理論家、実験家、企業の人たちをつないでコミュニティを形成し、たがいに意見交換ができる仕組み「MateriApps」を整備しています (本特集PART3)。

「正しく伝える」と「わかる」のか?

「見える化」シンポジウムでは、招待講演者から多くの提案がありました。

伊藤智義さん (千葉大学大学院工学研究科教授) はホログラフィを使った3D映像の研究者です。人間の視覚は、静止画の画質には厳しくて粗さが気になりますが、動画には寛容で、コンテンツの面白さがあればいいことを説明し、動画による見える化を試みてはどうかと提案しました。しかし、可視化は一般向けには確かに効果的な手法ですが、専門家に対しては逆のこともあると指摘しています。わからないことを探究するのが科学の本質であり、見えないものほど探究心をそそられることがあるからです。

横山広美さん (東京大学大学院理学系研

究科広報室副室長) は、「感動とは何か」を能の世阿弥の言葉「秘すれば花」を引用して紹介しました。さらに、「わかる」とはどのようなことかを整理して、何をわかってほしいと願って情報発信するか、情報発信をする研究者の側が設計する必要性を説明しました。多くの人にわかってもらいたいことは、全体像なのか、位置づけなのか、空間関係なのか、あるいは仕組みなのかを、時と場合によって選択することによって、伝える内容も絞られ、「なるほど」と納得してもらえというわけです。

「理解と感覚」という表題で講演を行った植松秀樹さん (NHK名古屋放送局ディレク



「理解と感覚」というテーマで講演された植松秀樹さん。

ター) は、感覚的にわかってもらうことをモットーにしています。そのためには、難しいことをやさしくするデフォルメが必要です。その例として、NHKハイビジョン特集『素数の魔力に囚われた人びと～リーマン予想・天才たちの150年の闘い』を紹介しました。難解な数学の世界をすべてわかってもらうのは不可能です。この番組の序盤では、数学者のオイラーが、雨が降っても風が吹いても素数の階段をひたすら昇っていきます。この階段は自然数の中に素数がどのくらい分布しているか (素数定理) を表した基本的なグラフをなぞらえたもので、オイラーが手作業で10万までの素数をすべて数えた苦労や情熱、そして素数の不規則な性質が伝わるのではないかと考えて取り入れた映像表現です。植松さんたちの思惑通り、このシーンは番組のキーイメージとして定着し、視聴者は素数のイメージをつかむことができました。デフォルメは単

に難しいことをやさしくするだけでなく、やさしいことに深みをあたえ、深いことを面白くすることにも役立ちます。デフォルメは「見える化」の大きな戦略になるのです。

科学を面白く伝えるには

招待講演者全員が口をそろえて強調しているのは、科学のロマンや夢、面白さを伝えようということなのです。

科学の成果はいったん世に出てしまうと当たり前になってしまいますが、それが達成されるまでの歴史があります。それには熱い人間ドラマがあるはずです。また、伊藤さんもホログラフィを例にとり、量子力学を拓いたマックス・プランクから、電子顕微鏡の進歩に関わった人たち、そして電子線ホログラフィを研究した外村彰に至るほぼ1世紀にわたる人物史をひも解きました。

科学番組を制作している植松さんにとって、面白くすることはいわば生命線です。少

しでもわからなかったり、難しかったりしたら、視聴者に見てもらえません。研究者への取材を重ねて、映像イメージを練り、物語を紡いでいきます。先ほどの素数の番組制作では、「先生、素数って、なぜそんなに大事なのですか?」と質問したところ、予想していた難しい答えではなく、「素数は身の回りのどこにでも存在する。見えないだけだ」と言われ、意表を突かれました。そこから、素数を砂漠で走らせたり、月の表面に投影するというシーンができたわけですが、このように研究者にとっては当たり前のことであっても、一般の人には不思議なことがたくさんあると指摘。CMSIの研究者に向けて、「自分の研究を身の回りのものにととえてみてください。そして、それを周囲の人に話してみてもリアクションをみてほしい」と提案しました。

研究成果を身近なものと感じてもらうには、「受信者の視点で語る事が大切」と、パネラーとして参加した辛木哲夫さん(理研AICS広報国際室長)。研究者は発信者として語りがちですが、一般の人は、自分の生活とどう関

わるのかを知りたいからです。

また、科学のロマンが伝わりにくいのは、日本の研究者が自分の研究を自慢しないからだ、と、植松さんは指摘します。外国の数学者からは、「素数は神の暗号だ」「これが解ければ人類は一步前進するのだ」といったインパクトのある発言が飛び出してくるそうです。

次のステップに向けて

昨今、研究者が自身の言葉で、自分の研究を語ることが求められるようになってきました。それには、まず研究者自身の意識改革が必要です。研究の情熱を人に伝えてわかってもらえることが面白いと認識することが重要であり、自分自身で見える化の方法を考えていかなければなりません。CMSIは今後、「見える化」シンポジウムでなされた提案をもとに、さまざまな活動を展開していきます。その成果は、第2回以降の「見える化」シンポジウムでも紹介していく予定です。

part 2

特集 | 計算物質科学の「見える化」

CMSIのネット配信講義

下司 雅章 げし まさあき

大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター 特任准教授



CMSI人材育成事業が今年度から本格始動しました。大阪大学を配信元として「計算科学技術特論A」を、教育拠点大学をはじめとする10カ所にテレビ会議システムを利用して配信しています。本講義は録画し、CMSIのホームページでも公開されています。平成26年度は「計算科学特論B」を実施する予定です。大阪大学では大学院の単位が認定されます。

大阪大学での講義風景。左のディスプレイに、配信先の各拠点が映しだされている。



CMSI神戸拠点での聴講

CMSI教育拠点



これまで計算科学の研究者の育成は、全国に散らばった個々の研究室に依存しており、数値計算の技術はそれぞれの研究の必要に応じて必要なことだけを各自で勉強して習得してきた場合がほとんどだと思います。しかし、計算機はかつてのベクトル計算機から超並列タイプに主流が移り、ハードの構成も複雑になってきています。これを熟知して十分に性能が出るようにプログラミングをすることは、一研究室や一個人の努力のみではかなり大変な状況になってきています。かつては、「まずシリアルで走るものをつくって速度が問題になってきたら並列化する」と考えられていたようですが、今では開発するソフトウェアが大規模で長時間の計算になることが最初からわかっているならば、最初から並列アルゴリズムを考えた上で開発を始めないといけないとされています。つまり、開発を始める段階で、並列化などのHigh Performance Computing (HPC)の知識をもっている必要があります。世界的に有名な計算科学ソフトウェアはほとんどが欧米のもので、これと戦えるものをつくるということは、もはや開発を行っている研究室が個別にできるものではなく、日本全体で若手を育成していくことを目標にして、共通のカリキュラムを用意して取り組む必要があると思われます。

CMSIで育成すべき人材は全国に散ら

ばっていますので、テレビ会議システムを用いて同時に講義を提供するのが効率的です。これによって、教員が忙しくてゼロから学生を教え込めない状況でも、最低限の知識はネット配信され、各教員はそれぞれの研究室のテーマに合わせて付け加えて指導することで、負担を軽減することができます。

今後の計算科学に必要な人材は、ソフトウェア開発ができる人材と、ソフトウェアを使って研究を進める人材(ユーザー)の2つに大別できます。前者は計算科学の学術的進展に欠かせない人材であり、サイエンスの能力のみならず数値解析やアーキテクチャーの知識をもち、それらの専門家と連携できる能力も必

要です。後者は今後、実験家がこれまでよりいっそう増え、計算科学が実験ツール並みに利用されていくことによって増えていくと予想されます。前者のカリキュラムでは、各分野に共通する技術や知識は共通科目として提供し、それぞれの手法に特化した技術については専門科目として提供します(図1)。ユーザー養成においては、それぞれの手法の基礎理論の概略や種々の方法について講義し、応用事例を紹介します(図2)。そして、もっとも大事な講義は、実習を行い、実際に使えるように訓練することです。このように、開発者養成とユーザー養成のそれぞれに合ったカリキュラムを策定して、コミュニティ全体で育成する体制を整えていく必要があります。

人材育成は、ハードとしてのスパコンをつくることと両輪の関係にあります。京コンピュータの次のエクサフロップス級のスパコンの検討が始まった今、その稼働時には即座に対応できる人材を、今からそこに焦点を当てて育成していかなければなりません。また、優秀な人材を確保することも不可欠なことです。10年後に活躍すべき世代に対する啓蒙活動も最重要課題の1つです。本講義は、大阪大学で社会人や大学院生の教育として10年前から実施されてきたノウハウの下に実施されていますが、この方式は今後の大学院教育におけるモデルケースとなると考えます。

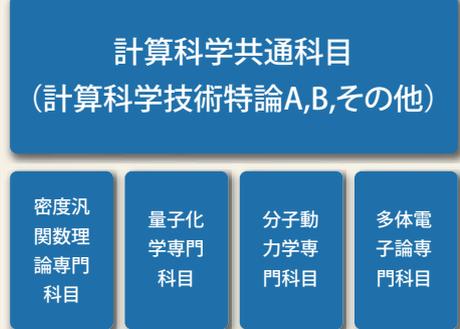


図1. 開発者養成カリキュラム



図2. ユーザー養成カリキュラム

MateriApps 物質科学シミュレーションのポータルサイト

五十嵐 亮 いがらし りょう

東京大学物性研究所 CMSI物性科学拠点研究員

京コンピュータのような最先端のスーパーコンピュータを利用して次世代の物質科学研究を進めていくには、計算機の演算性能の進化だけでは不十分です。物質や現象を記述する方程式を効率的に「解く」ための手法、すなわち「アルゴリズム」の発展もまた重要な役割を果たしています。最先端の物質科学シミュレーションの研究現場では、日々新しいアルゴリズムが提案されており、また、その応用が活発に議論されています。

一方で、コンピュータの並列化と大規模化にともない、ソフトウェアは複雑化しており、ソフトウェア開発における最適化、高度化、メンテナンスのコストが増大しています。また、ソフトウェアを公開し、積極的な利用を推進するには、ドキュメントの整備や動作サポートなど、多大な手間が必要となります。そのため、ソフトウェアの公開に積極的な開発者はまだまだ少数派です。こうしたことから、高性能・高精度な最新のアルゴリズムを実装したソフトウェアは数多く開発されているにもかかわらず、未公開であったり、ドキュメントが不十分だったりして、実験家や企業研究

者などの利用者にその存在が伝わっていません。その結果、アルゴリズムの発展やソフトウェアそのもの、あるいは開発者自身が十分に評価されているとはいえません。現状では、情報が豊富な、主として海外製の公開ソフトウェア・商用ソフトウェアの利用者が多数を占めています。

CMSIでは、ポータルサイトMateriAppsを通じて、物質科学シミュレーションソフトウェアそのものだけでなく、開発者の「見える化」を推進します。具体的には、サイト上でソフトウェアの魅力、将来性、応用性について、開発者自身の生の声を伝えます。また、国内外で開発された物質科学シミュレーションソフトウェアの機能や特徴を紹介。公開ソフトウェアの開発者に、充実したマニュアルやチュートリアルを作成などを支援し、利用者が気軽に試すことのできる環

境を提供します。

さらに、利用者の「やりたいこと」「知りたいこと」に対し、計算手法、対象となる物質、興味のある現象・物理量などについて、多元的に検索できるようにします。そして、ソフトウェアごとにフォーラムを用意することで、利用者と開発者の間のコミュニケーションをはかり、情報を共有したり、意見の交換を行ったりできる場を育てていきます。

今後の物質科学シミュレーションの発展に



は、計算機の演算性能の進化やアルゴリズムの進歩だけでなく、コミュニティコード(分野全体で開発し利用するアプリケーションソフトウェア)を育てていくことが不可欠です。物質科学分野では、これまで個人や小さなグループ内での開発が主流でしたが、コミュニティの拡大にともない、ソースコード管理システムなどの共同開発環境(GitHubなど)の導入が必要になります。

MateriAppsでは、ソフトウェア開発へのGitHub導入、ドキュメントの作成やソフトウェア講習会の開催などを支援していきます。開発者と利用者間で情報の共有をはかり、公開ソフトウェアのコミュニティ形成に結びつけることで、ソフトウェア公開を志す開発者をサ

ポートします。さらには、同様の機能を持つ類似のアプリケーションの入出力形式の共通化や統合、シミュレーション結果の可視化・動画

拠点研究員のプロフィール



五十嵐 亮 いがらしりょう

物性科学拠点研究員 東京大学物性研究所

東京大学大学院で物性物理を専攻。博士(理学)を取得後、日本原子力研究開発機構で並列DMRG法のシミュレーションに従事。

応募の動機

自ら「京」などでの大規模計算に向けたオープンソース・アプリケーションの開発と研究を進める一方で、アプリケーションの公開を推進するMateriAppsの運営に携わることで、計算物質科学の発展に貢献していきたいと思いました。

ミッション/役割

CMSIの計算資源の管理、MateriAppsの運営、公開アプリケーションの開発・研究を通じて、物質科学シミュレーションの普及・発展に貢献していきます。

化など、利用者の視点に立った情報を提供して、利用者と開発者の双方にとって役立つコミュニティの創出に努めていきます。

ERmodを活用した 高分子機能膜設計に向けて

茂本 勇 しげもと いさむ

東レ株式会社
先端材料研究所 主任研究員

東レでは、地球環境問題に先端技術で貢献するグリーンイノベーション事業を全社プロジェクトとして展開しています。本プロジェクトでは、次世代のエネルギー源として期待される燃料電池用の高分子電解質膜や、乾燥地域における水資源確保の手段として注目される海水淡水化用の逆浸透膜など、地球環境問題の緩和・解決には欠かせない先端素材として高分子膜が大きな期待を集めています。そのため私たち計算化学グループは、高度な選択的透過性を備えた高分子膜の設計を目標に、分子シミュレーションによる物質透過性解析技術の開発と応用に取り組んでいます。

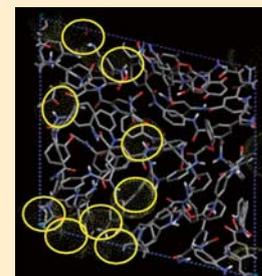
物質の透過性を決める要因には、拡散性と溶解性の2つがあります。前者について

は分子動力学計算で拡散係数を求め、後者については溶解自由エネルギーを計算するというのが、私たちが最初に考えたアプローチでした。ところが、自由エネルギーは分子シミュレーションにおいて最も計算負荷の高い物理量の1つであり、高分子に対する低分子の溶解自由エネルギーを現実的な時間と手間で算出できる方法はありませんでした。

そのような問題意識を持っていた2007年、ある講演会に、松林先生と私が偶然同時にゲストとして招かれたことがあり、エネルギー表示法について講演いただいたことをきっかけに、共同研究をお願いすることにしました。オリジナルのプログラムは高分子のような巨大分子への適用は想定されていませんでしたので、高分子と低分子との相互作用エネルギーの計算方法やエネルギー汎関数の改良など、松林先生のご指導をいただいて研究を進めた結果、現実的な計算時間と精度で溶解自由エネルギー

の計算が可能な技術を構築できました。昨年末には、J.Chem.Phys.に松林先生と共著の論文が掲載されています。また、現在では高分子電解質や分離膜について本技術を用いた成果が徐々に始まっており、社内でも高く評価されています。

このように、私たちは幸運にもERmodにたどりついたわけですが、企業研究者が汎用ソフトでは不可能な最先端のシミュレーションを行いたいと考えたとき、企業のニーズにマッチするソフトを探し当てることは容易ではありません。そのため、MateriAppsが整備されつつあることは、今後の産学のマッチングを進めるうえでとても有益だと思います。特にチュートリアルと論文紹介が充実していると、実際の研究にどのように役立てていくかがイメージしやすくなるので、とても助かります。



逆浸透膜の分子モデルと膜中の自由体積分布

ERmodの開発者・松林さんと桜庭さん



松林さん(前列左)と桜庭さん(前列右)からERmodの説明を受ける
米澤さん(後列右)と水口朋子さん(p.16のキーワードを執筆)。

話し手：

松林伸幸 まつばやし のぶゆき
京都大学化学研究所 准教授

桜庭 俊 さくらば しゅん
日本原子力開発機構 博士研究員

聞き手：

米澤進吾 よねざわ しんご
京都大学理学研究科 助教

私たちは身の回りの物質のさまざまな機能を利用している。例えば、おむつに使われる吸水性高分子には水分子を吸着したり離したりする機能があり、電池の正極や負極には電子を取り込んだり離したりする機能がある。物質の機能を1つの枠組みで計算し、「未知の機能」を予測することができないだろうか? こうした課題に取り組むアプリケーションERmod(イーアールモッド)を紹介する。

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/ermod>

に聞く

「溶ける・混ざる」化学から アプローチする物質の機能

ERmodの生みの親である松林さんのアイデアは、「溶ける・混ざる」という概念を拡張すれば、物質の機能を統一的に理解できるのではないかと、いうものである。例えば、吸水性高分子の例では、水分子を「溶質」、それらが取り込まれる環境である高分子を「溶媒」ととらえ、「水分子が高分子に取り込まれる」現象を「溶質(水分子)が溶媒(高分子)に「溶ける」と考える。同様に、電子が取り込まれる化学反応(還元反応)では「電子が分子に「溶ける」と考える。これらの考え方は、単なる言い換えではない。溶液の分子レベルの描像と「溶ける・混ざる」現象とをつなぐ「溶液理論」を適用して、個々の粒子の動きを追いかけるだけでは難しい計算を高速にできる、という非常に大きなメリットを生む。このような大胆な発想の転換から生まれたのがERmodである。

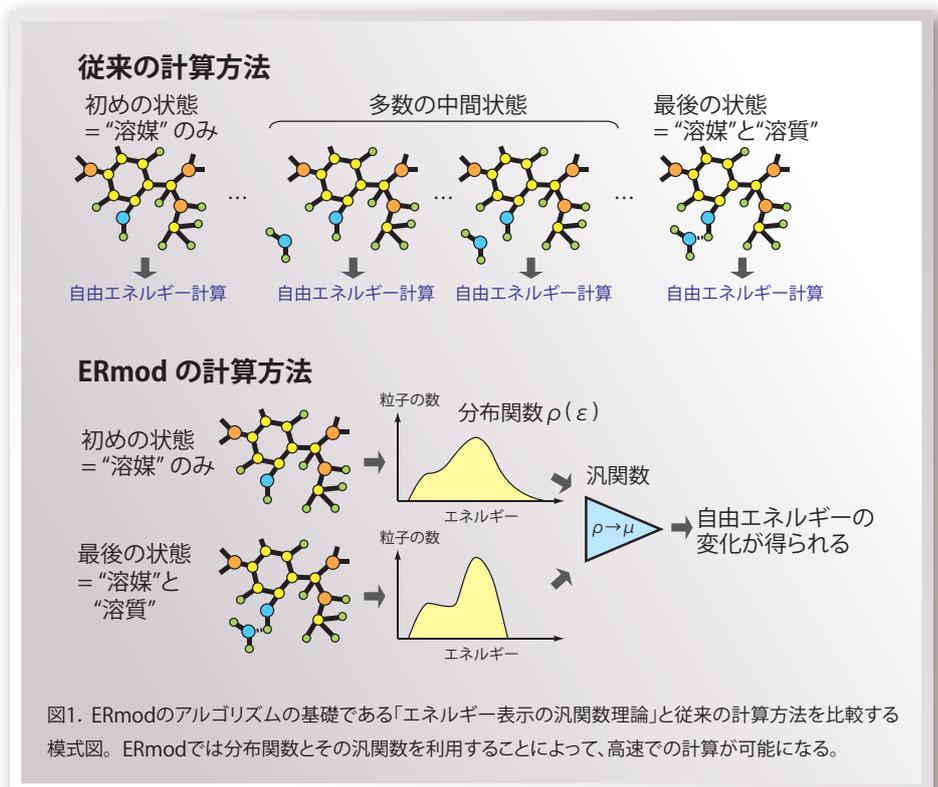
ERmodの誕生

実は、松林さんは、もともとは液体を研究する実験化学者であった。「実験と計算を組み合わせると安全かつ効率的に研究を進めたい」。そう考えた松林さんは、分子動力学(MD)法を用いたシミュレーションに取り組み始めた。MD法とは、原子や分子1つ1つの動きを時間で追っていく計算手法である。ところが、実験に役立つ結果が、なかなか得られない。実験を再現し、さらには予測できるような計算手法をつくりたい、そんな思いがERmodの原点であった。

実験と計算を比較するためには「自由エネルギー」という量を計算するのが王道である。自由エネルギーとは、分子や原子の集団の全体としての安定性の指標である。この自由エネルギーが重要なのは、この値が集団とし

てのさまざまな変化、例えば物質の溶解や化学変化、の起こり具合を決めるからである。しかし、MD法だけから自由エネルギーを計算しようとすると非常に時間がかかる。これは、図1の上段に示すように、変化の起こる前の状態(始状態)と変化が完全に終わった後の状態(終状態)だけで計算すればよいのではなく、中間の多数の状態についても計算が必要なためである。そこで松林さんが着目したのが、系の分子レベル情報から自由エネルギーを構成できる「溶液理論」である。溶液理論によると、あるパラメータに関する分子のヒストグラム(分布関数と呼ばれる)を入力すると自由エネルギーが求められる「関数」(これは関数を入力とする関数なので「汎関数」と呼ばれる)をつくることができる。つまり、始めと終わりの状態でMD法からヒストグラムを計算し、それを適切な汎関数に放り込めば自由エネルギーの変化がわかるので、各中間状態での計算をすっ飛ばし、短時間で自由エネルギーが計算できるはずである(図1下段)。

次の問題は、何についてのヒストグラム(分布関数)を使えばいいのかという問題である。分布関数として初めに考えつくのは、位置情報に関する分布関数であろう。しかし、膨大な位置情報(N 個の分子に対して、最も単純な場合でも $3N$ 個のパラメータがある!)のうちどういった分布関数を使えばいいのかは自明ではない。悩んでいた松林さんはある日、位置情報ではなく分子間の相互作用エネルギーについての分布関数を使う方法を思いついた。「眠りから覚めたときにふとアイデアが頭に浮かび、後は式を書き下すだけでよかった」と、そのエキサイティングな瞬間を語ってくれた。さらに、このエネルギー分布関数を使えば、不均一な系や分子内自由度のある系なども扱えるなど、いくつものメリットがあることもわかった。この「コロンブスの卵」的な発想は驚きをもって迎えられたようで、さる高名な先生の「これほんまにお前がやったんか」という驚きのコメントが松林さんの記憶に強く残っている。



このアイデアを実際にプログラムにしたのがERmodである。2000年代の終わりころまでには、ERmodはさまざまなMD計算ソフトにモジュールとして組み込まれて使われるようになった。ちなみに、ERmodという名前はEnergy Representation(エネルギー表示)の頭文字ERとモジュールを意味するmodを組み合わせて生まれたもので、モジュール時代の名残を残している。

独立のソフトウェアへ発展

ERmodの重大な転機は桜庭さんが開発に加わったことによって訪れた。桜庭さん



松林伸幸 まつばやし のぶゆき

ラトガース大学でPh.Dを取得した後、京都大学の化学研究所へ。現在は同研究所の准教授を務める。もともとは超臨界水の実験研究を行っていたが、理論研究へ重心を移した。ERmodの基になっているエネルギー表示の汎関数理論の定式化に関しては、文部科学大臣表彰若手科学者賞をはじめとして、多数の受賞歴がある。愛娘の幼稚園や小学校での仕事を研究室にたくさん飾っている、良きパパでもある。



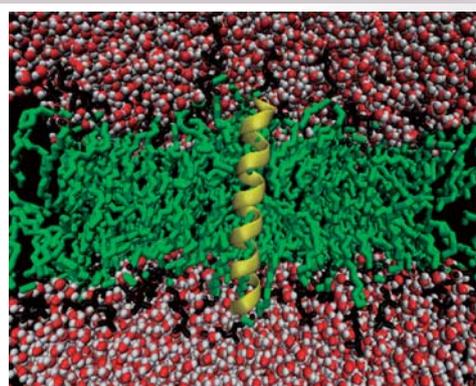
は、かつてITベンチャーで働いていたこともあるソフトウェア開発者であり、生体高分子の計算に取り組んできた理論化学者でもある。「近年の計算機やMD計算法の急激な多様化を考えると、MDソフトのモジュールとしてERmodを続けていくのは難しくなってい

くのではないか」。こう感じた桜庭さんは、モジュールから脱皮して独立のソフトウェアとする大改革に取り組んだ。まず、もともとはFortranで書かれていたERmodであったが、独立のソフトとして多くのMDソフトと連携ができるように、CやPythonを併用して外部プログラムとの連携機能の強化が図られた。もちろん、核となる計算部分にも並列化などの改良が加えられ、実に1000倍もの高速化が実現した。また、ドキュメントを充実させたり、エラーメッセージを整備したり、さまざまな環境で簡単に実行できるようにするなど、利用者の利便性を図るための裏方的な仕事にも多くの努力を払った。さらにユーザーの裾野を広げるため、プログラムをソースコードも含めて完全にWebに公開した。今では世界中からダウンロードされて使われている。

「こちらの提案を松林先生がほとんど受け入れてくれて、逆に心配になるくらいだった」

桜庭 俊 さくらば しゅん

東京大学大学院で情報生命科学博士を取得。タンパク質のシミュレーションに関する研究を行ってきた。また、東京大学在学中に同期生の設立したベンチャーに参加し、コンパイラ開発に携わったこともあるくらいにプログラミングが得意。現在は日本原子力研究開発機構で博士研究員として研究を進めながら、ERmodの開発も積極的に主導している。



脂質膜でのタンパク質の大規模運動

フリッパーフロップ回転

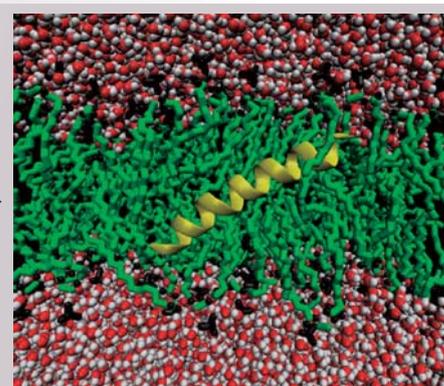


図2. ERmodの応用例。脂質膜でのタンパク質の運動の経路解析。この例以外にも、さまざまな系へ応用されている。

と桜庭さん。松林さんも、「共同研究ではまず相手を100パーセント信じるところから始めることにしている」と語る。二人の信頼関係がERmodのさらなる飛躍を成功させた原動力となったのだと感じられた。

ERmodの「選択と集中」の効果

ERmodの特徴をひと言でいうと、「選択と集中」だと思う。実空間の情報はある意味で捨ててしまって、実験に重要な自由エネルギーの高速算出に注力する。ここには「実験に役に立つプログラムでありたい」という松林さんの初期からの開発哲学が反映されている。また、分布関数の計算にMD計算を利用するのも特徴である。分布関数の計算も独自に行って誤差が収束するまで反復するというやり方も当然ありえるのだが、ERmodではそこは既存のMD計算プログラムに投げつけてしまって、自由エネルギー計算の高機能化に集中している。重要なのは、それでも構わないという背景がきちんとある点だ。つまり、変分原理という原理によって、MD計算の誤差が自由エネルギーに反映されにくい仕組みに自然となっているのである。

ERmodの「選択と集中」の効果は、実際

の成果に如実に表れている。例えば、溶質が溶媒に溶ける前後の自由エネルギーの変化を計算すると、通常の厳密法に比べて数十分の一の時間で、厳密計算と比べても遜色のない確度で計算できる。今では、例えば東レとの共同研究(7ページの記事を参照)で吸水ポリマーの設計に使われているし、図2に示すタンパク質の運動解析などさまざまな応用例で大きな成果が上がっている。

裏方作業の評価が大きな課題に

桜庭さんは、「日本の学術アプリケーションがあまり世界的に有名にならないのにはドキュメントが整備されていないという問題が大きい」と語る。また、「エラーメッセージの整備は、ユーザーのためだけでなく、長い目で見れば開発者の負担軽減につながる」と、プロらしい視点も見せてくれた。しかし、これらの作業に対する評価方法は確立されていない。これが問題だと、松林さんも桜庭さんも揃って口にしていて、

私自身も実験に使うプログラムを開発しているので共感できるのだが、プログラムを説明するドキュメントを整備したり、エラー

メッセージを充実させたりするのは非常に面倒だ。にもかかわらず評価対象にされにくい。実験系でたとえると、実験室の棚の整理や廃棄物の処理などと似ている。こういった裏方的作業を、研究者の業務の一環として正しく評価し、「まじめな人が馬鹿をみる」ことがないようにするにはどうしたらいいのか？ 学術アプリケーションの開発に限らず、あらゆる研究分野において重要な課題になっていると感じる。

ERmodの未来

ERmodは今後どのように発展していくのであろうか。まずは、大型計算機での利用拡大が目標になる。例えば、「京」で使うための方法はWebに完全に紹介されている。また将来的には、大型計算機に初めからインストールしてもらえるようにプログラムを整備していく。実現すれば、理論化学に詳しくないユーザーへも裾野が広がり、生物や電池といったより広範なシステムへの応用につながるだろう。

一方、理論面の進歩もさらなるERmodの進化には不可欠である。例えば、状態の時間変化の情報を計算できれば、ある分子の会合状態の寿命がわかったり、電気伝導度が計算できたりと、より応用範囲が広がる。さらに、より大きな対象の計算を目指し、「粗視化」のテクニックを組み込めないかと松林さんは考えている。これは、例えば100個のモノマーからなるポリマーを考えたときに、モノマー10個の塊が10個あるとして計算を高速化する手法である。これらの進歩によって、さらにERmodの応用範囲は広がっていくにちがいない。

松林さんのひらめきと桜庭さんのソフトウェア開発手腕のハーモニーで進歩してきたERmodの、さらなる発展に期待したい。

◆インタビュー後記

米澤進吾 よねざわ しんご

私は超伝導の実験研究をしており、理論化学に関しては素人である。今回のインタビューでは、お二人の非常に丁寧な説明でとてもよく内容が理解できただけでなく、アツいお話で盛り上がりあっという間に予定の時間をオーバーしてしまった。おおらかな印象の松林さんと、まじめな感じの桜庭さんのコンビはとてもじっくりしていて、いいチームなのだという雰囲気が伝わってきた。



3

卒業生を訪ねて

多和田倫子 たわだ みちこ

武田薬品工業株式会社
医薬研究本部 化学研究所

東京大学大学院総合文化研究科で物理化学と量子化学を専攻し、化学反応過程における電子の動力学を記述する理論計算手法を研究。修士号を取得後、武田薬品工業に入社。



計算化学アプローチで 創薬の最前線を走る

産業界で活躍する計算物質科学の「卒業生を訪ねて」第3回は、武田薬品工業で創薬に取り組む多和田倫子さんを、CMSI拠点研究員の米原丈博さんが訪問。大学院での研究、創薬の仕事について経緯、創薬における計算機の役割などをお聞きしました。



米原丈博 よねはら たけひろ

東京大学総合文化研究科
CMSI分子科学拠点研究員

人に役立つ製品をつくる 仕事を志して

米原 創薬の仕事を選ばれた動機をお聞かせください。

多和田 大学では、有機化学、物理化学、無

機化学、生物化学と化学全般を学んだのですが、その中で生命の機構を物理の基本原則を用いて説明することに興味をもちました。大学院では理論計算手法の開発に取り組み、その過程で人の役に立つ製品を生み出す仕事をしたいと思うようになりました。大学院での研究を生かせる仕事を探していて、創薬の世界を知り、今の研究所に入りました。

米原 薬の開発というのはどのように進められるものなのでしょうか。

多和田 まず、疾患発生の鍵となるターゲットタンパク質(創薬ターゲット)を定めます。ターゲットタンパク質にはいろいろなものがあり、疾患の原因に関わっている場合は、その機能を阻害あるいは増強することで疾患の治療が可能になります。次に、ターゲットタンパク質と結合する化合物を膨大な化合物ライブラリの中

から見つけだします。これが薬剤候補の起源となる「シード化合物」です。

このシード化合物を基にして、ターゲットタンパク質とより強固に結合するように構造を変換していきます。これを「リード化合物の最適化」と言います。そして、薬効や安定性を評価して薬剤として望ましい化合物を選別し、工業化するための研究に進みます。

米原 多和田さんはどこを担当されているのですか。

多和田 私は計算化学グループに所属しており、主な業務は、シード、リード化合物の発見と、リード化合物の最適化です。前者については、実験によるスクリーニングと計算によるバーチャルスクリーニングの両方が行われていて、私たちはバーチャルスクリーニングを担当しています。後者の化合物最適化については、ターゲットタンパク質の立体構造やリード化合物の情報を基に、十分な結合活性をもつ化合物をデザインしたり結合活性を予測したりします。

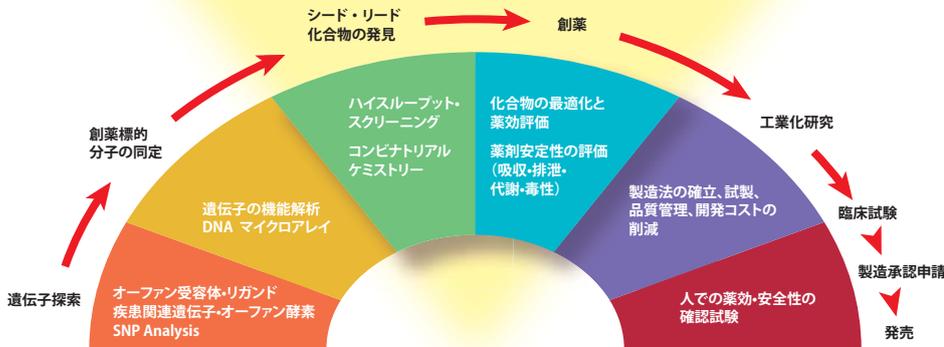
創薬における計算化学の貢献

米原 バーチャルスクリーニングを行うときの計算の規模はどのくらいですか。

多和田 主に計算は社内に保有するクラスターPCで行いますが、数週間ぐらい計算機を回します。

創薬の流れと計算化学の役割

計算化学

 バーチャルスクリーニング
 化合物のデザインと結合活性予測


米原 検索する化合物数は?

多和田 ケースにもよりますが、数十万から数百万です。そこから、数十に絞り込み、実験部門にバトンタッチします。

米原 化合物を検討するときには、どのようなデータを見ているのですか。

多和田 例えば、リード化合物とターゲットが離れている状態とドッキングした状態との間のエネルギー差から相互作用の安定性を調べます。モデル精度に限界があるため、スコアと活性は必ずしも対応しません。そこで、さまざまな工夫をしています。

米原 結合特性を調べる上で、エネルギー評価に比べ、原理的にはより詳細な結合過程に関する情報を得ることができるアプローチ、例えば、時間に沿って分子の挙動を追跡する動力学計算等に頼る必要は特にない、と考えてよろしいでしょうか。

多和田 そんなことはありません。計算機パワーに限界があるため、通常は使っていないだけです。

われわれのグループでは、動力学計算を使ったスクリーニングが可能になる時代に備え、技術を蓄え、準備を進めています。

米原 多和田さんは計算化学グループの中堅とうかがっていますが、入社された当時と今では計算機環境も大きく変化したのでしょうか。

多和田 大規模な計算が可能になっただけではありません。大きな変化は、タンパク質の構

造に関する高精度のデータが得られるようになったことで、それに基づいた計算によって信頼性の高い結果が得られるようになりました。

米原 タンパク質構造の情報が実際の開発に活かされた例は?

多和田 弊社の海外の研究所によるものですが、糖尿病治療薬であるDPP-4阻害薬*1は、タンパク質構造の情報を基にした化合物最適化によって、早期の実用化に成功しました。

米原 創薬の現場で望まれる計算ツールは?

多和田 タンパク質と結合しやすいかどうかを自由エネルギー評価に基づき予測するツールや、設計した化合物の安定性を見積もるツール、体内への吸収率について調べるツールがあるとよいと思います。また、望ましくない副作用を予測するため、他のタンパク質への影響を調べるソフトがあればいいですね。CMSIの研究に期待しています。

企業の研究者に求められる資質

米原 開発に携わった薬剤が製品化されたことは?

多和田 薬の実用化を経験できる機会は、研究員が生涯勤めている間に多くとも1、2回程度です。創薬から製品化に至るまでは通常10年以上の期間が必要です。私自身、開発した薬が実用化されたという経験はまだないですが、自分の研究結果が他の人の開発工程に役立ち感謝されることは嬉しく、励みになります。

それが私にとってのやりがいといえると思います。

米原 工作上、さまざまな知識が必要になると思われますが。

多和田 創薬の知識は研究所に入って一から身につけました。開発現場で特に必要となるのは、専門知識に加え、それを臨機応変に活用する能力です。計算化学を含め、広範囲にわたる化学の知識が要求されますが、必要に応じ学ぶのは大学でも企業でも同じですね。

米原 創薬の過程で得られた基礎知見を同業他社の人と共有する機会はありますか?

多和田 学会等を通じて交流しています。アカデミック系では、日本生物物理学会、薬学会、企業系ではメディシナルケミストリーシンポジウム等があり、またソフトウェアのユーザー会を通じても可能です。一般的な開発手法も話題に上がります。

米原 企業の研究活動を志す人に、企業と大学との違いをひとこと教えてください。

多和田 私自身は大学時代、研究成果がもたらす影響をあまり考えませんでした。しかし企業の研究所では、自分の仕事や研究が周りの人に大きな影響を及ぼします。それを考えると、割り当てられた仕事の優先順位付けに関しても慎重になります。また、企業では、人の役に立ちたいとか、皆で1つの目標に向かってプロジェクトを進めたいという思いが良い仕事に結びついているように感じます。ですから、一緒に仕事をしてくれる人に自然と感謝できるような人は企業に向いていると思います。

米原 集団でのモノづくりの原点を示していただいた気がします。今後のご活躍を期待しています。

(2013年5月27日 武田薬品工業湘南研究所にて)

*1 DPP-4阻害薬：糖尿病は分泌インスリン量の低下、もしくはインスリン自体が十分に機能できず、慢性的な高血糖状態に陥る代謝性疾患。DPP(ジペプチジルペプチターゼ)-4は、インスリンの分泌を促すインクレチンと呼ばれるホルモンの分解酵素であり、この阻害薬はDPP-4を選択的に阻害できる。



CMSIの拠点 材料科学拠点



東北大学金属材料研究所

寺田 弥生 てらだ やよい

東北大学金属材料研究所 准教授

Torrentでは、今回からCMSIの各拠点とスーパーコンピュータセンターを紹介していきます。第1回目は材料科学拠点と金属材料研究所に設置されているスーパーコンピューティングシステムの運用ならびに維持管理などを担っている計算材料学センター。CMSI教員の寺田弥生さんがナビゲーターを務めます。

歴史ある金属材料研究所に 設置された拠点

私たちの「CMSI材料科学拠点」(Computational Materials Research Initiative: 略称CMRI)は、東北大学金属材料研究所(以下「金研」)内に設置されています。金研は今からほぼ100年前の1916年、東北帝国大学臨時理化学研究所第二部として発足し、KS磁石鋼を発明した本多光太郎が初代所長を務めたことでよく知られています。金属を中心にした数々の研究成果をあげてきましたが、現在では広範な物質・材料の基礎から応用までの研究を行い、社会に役立つ新たな材料の創出をめざしています。

金研では、1993年にスーパーコンピュータを導入し1994年より運用を開始して、実験・理論に加え第三の研究手法ともいわれるコンピュータを利用した大規模なシミュレーションや数値計算によっても材料科学の研究拠点として活発な活動を行ってきました。2010年に発足したCMSIでは、2011年金研にCMRIが設置され、計算材料科学にかかわる分野

振興や、研究の推進、人材育成などを担うこととなりました。また、昨年4月に更新したばかりの金研・計算材料学センターのスーパーコンピュータの資源の20%をCMSI枠として提供し、昨年11月より他拠点からも相互利用ができるようになりました。

私(寺田)は本年1月にCMRI人材育成・教育担当のCMSI教員として任用されました。4月には、毛利哲夫CMRI拠点長が計算材料学センター長に着任。計算材料科学の拠点としての体制が整いつつあります。

「利用者の声を受け止め、 スーパーコンピュータの利便性 向上に努めています」

CMRIの多様な活動の一翼を支えているのがスーパーコンピュータの運用業務にあたる「技術職員」の皆さんです。今回は、計算材料学センターで13年間、プログラムやジョブ実行の相談などユーザー対応にあたってきた五十嵐伸昭さんに、当センターの紹介と業務に対するやりがいなどを語っていただきました。



五十嵐 伸昭
いがらし のぶあき

会津大学でコンピュータシステム学を専攻して修士取得。東北大学内のいくつかの部署を見学し、2001年

2月にスーパーコンピュータが更新予定だったこちらの職場を選びました。今年度からはスパコンシステムの取りまとめ役を務めるようになり、責任を感じています。

「計算材料学センターは共同利用センターで、年間利用者数は100名を超えています。昨年度は、そのうちの36名が海外からの利用者と国際色豊かです。

当センターでは、利用者の多様なリクエストに応えるため、フリーソフトウェアも含めて多数のアプリケーションを提供しています。要望があれば、フリーソフトウェアのインストール支援も行ったり、きめ細かな対応をしていることが特徴です。それがスーパーコンピュータの利便性向上につながります。また、日々進化するスーパーコ

コンピュータの数年ごとの更新によって常に最先端に挑戦できることに、やりがいを感じています。

昨年度から利用が開始されたCMSI枠の利用者は、独自に開発したコードでの大規模計算が多いため、多ノードを使用するキューを増やすなどして利用しやすいようにしました。金研のスーパーコンピュータで研究成果を出していただくことがなによりですので、積極的な意見や要望をお寄せください。海外の利用者は、もっと気楽にメールなどで質問してこられます。利用者の声によって、より利便性のよいスーパーコンピューティングシステムをつくることができると考えています」。

計算材料学センターでは、五十嵐さんを含めて計5名の技術職員と常駐SE2名がスーパーコンピュータの運用にあたっています。私が担当する人材育成・教育の面でも、技術職員の皆さんの力が欠かせません。計算材料学の研究者や技術者が京やその次の世代のスーパーコンピュータにも対応できるようにするためには、工学や理学などの専門知識だけでなく、計算機科学の知識が不可欠です。そのための教育には、技術職員の皆さんが蓄積してきた経験や知識に助けられることも多いからです。

このように技術職員の皆さんに支えられ、

CMRIの活動を行っています。CMRIではこれからも、技術職員、研究者、次世代の人材育成・教育にあたる教員がそれぞれの役割をしっかりと果たし、またコミュニケーションを図ることによって、より充実した活動を展開していきたいと思っています。



CMRIと計算材料学センターのスタッフ。後列左より佐藤和弘さん(技術職員)、大滝大河さん(技術職員)、水関博志准教授(兼)、五十嵐伸昭さん(技術職員)、丹野航太さん(技術職員)、加藤 頭枝さん、前列左より毛利哲夫拠点長、一関京子さん(技術職員)と、寺田弥生(兼)、門脇 希さん。写真の背景は金属博物館から寄贈された(株)日本製鋼所において作製された1969年当時世界最大の400トンのMn-Mo-Niの低合金鋼インゴット断面試料。

CMSIカレンダー

詳細は CMSI ホームページ <http://cms-initiative.jp> をご覧ください。

●平成25年度 CMRI(東北大学計算材料科学研究拠点)研究会(特別支援課題に関する研究会)

日程：2013年7月30日
場所：東北大学金属材料研究所

●第1部会 夏の学校2013「エネルギー課題を考えるサマースクール」

日程：2013年8月12日～16日
場所：ホテル樹林(蔵王)

●The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference

日程：2013年8月21日～22日
場所：東北大学片平キャンパス
※22日：特別支援課題に関する研究会

●第17回 分子シミュレーション夏の学校

日程：2013年9月2日～4日
場所：湯沢ニューオータニ(新潟県)

●第23回CMD[®]ワークショップ

日程：2013年9月2日～6日
場所：大阪大学基礎工学研究科

●TCCI 第4回研究会

日程：2013年9月10日～11日
場所：自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター

●CMSI International Workshops

日程：2013年10月16日～18日
(場所) (計算科学研究機構)
2013年10月17日～19日
(東京大学本郷キャンパス、名古屋大学)

●CMSI International Symposium 2013 超並列計算が拓く新しい物質科学

日程：2013年10月21日～22日
場所：東京大学伊藤国際学術研究センター

●TCCIウインターカレッジ(分子シミュレーション)

日程：2013年10月23日～25日
場所：自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター

●TCCI第3回実験化学との交流シンポジウム

日程：2013年11月5日～6日
場所：京大福井謙一記念研究センター

●第4回 CMSI 研究会

日程：2013年12月11日～13日
場所：東京大学物性研究所



毛利拠点長兼 センター長からのメッセージ

本年4月1日に計算材料学センター長として金研に着任しました。これからは当センターとCMSI材料科学拠点の両方の活動に本腰を入れて取り組み、計算材料学の発展のために頑張りたいと思います。

前任の大学では周囲は学生ばかりでしたが、今の私の周囲は教職員のみです。大人の世界に来了感があります。若い技術職員がこれまで指導してきた学生や院生と年齢が違わないことを考えると、同じ若人でも環境によって随分しっかりするものだと感心しています。センターも拠点も教職員一同、全員意気軒昂です。多くの方々に是非パソコンを利用していただき、同時にCMRIの活動にご協力をいただければ幸いです。

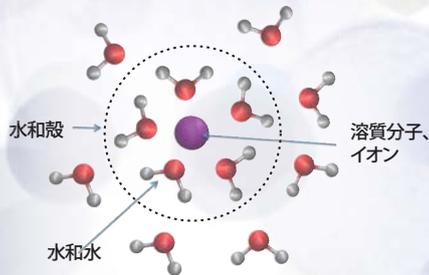


図1. 水和の模式図。溶質分子は周囲の水分子を引きつけて水和殻を形成する。溶質から遠く離れた位置にある水分子は自由に動き回るのに対して、水和水は溶質分子を囲んだまま、溶質とともに運動する。

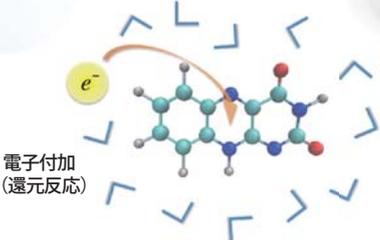


図2. 水中の酸化体に電子が付加する様子。このとき、水と酸化体を合わせて(混合)溶媒と見なし、電子を溶媒と見なすことで、還元反応を溶媒和の観点からとらえることが可能である。

水和(溶媒和)

本号で紹介したアプリケーションERmodのキーワードは「水和(溶媒和)」です。その現象には大きな意味が込められています。

水和とは?

物質が水に溶けると、溶ける物質(溶質分子)は周囲の水分子を引きつけて、1つの分子集団をつくり、安定化します。これを「水和」といいます。「ものがよく溶ける」というのは、「よく水和する」ことを意味しているのです。水和が起こると、溶質分子の性質が変化します。また、溶質のまわりの水分子も、溶質が存在しないとき(あるいは、溶質から遠く離れた水分子)と比べて、反応性や安定性が変化します。水和の現象は、タンパク質の機能発現など、いろいろな場面で重要な役割を果たしています。

溶質分子が溶ける対象は、水だけではありません。一般に、液体のような分子集合系(溶媒)に、他の物質(溶質)が溶けると、溶質-溶媒間の相互作用によって、溶質・溶媒双方の性質に変化が起こります。これを「溶媒和」といい、特に溶媒が水の場合を水和と呼んでいるのです。

溶媒和の概念を広げて

溶媒和の概念は、いわゆる「溶ける」現象以外にも広げて考えることができます。例えば、水+生体膜からなる不均一な混合系を溶媒と見なし、タンパク質を溶質と見なすことで、タンパク質の膜への結合を、溶媒和の視点からとらえることができます。あるいは、還元反応において、付加する電子を溶質、電子を受け取る物質と周辺の媒質を合わせて溶媒と見なし、溶媒和の概念を導入することが可能です。

このように、「溶媒和」というキーワードで、溶解・結合・吸収などに関連したさまざまな現象を統一的に理解することができる、と期待されます。協力：水口朋子(京都大学)

Torrent No.8 July 2013

- 2 | 特集：計算物質科学の「見える化」
- PART1 「見える化」へ向けて
- 4 | PART2 CMSIのネット配信講義
- 下司雅章
- 6 | PART3
- MateriApps
- 物質科学シミュレーションのポータルサイト
- 五十嵐 亮

- 7 | ERmodを活用した
- 高分子機能膜設計に向けて
- 茂本 勇
- 8 | アプリケーションの最前線から 第6回
- ERmodの開発者・
- 松林さんと桜庭さんに聞く
- 松林伸幸/桜庭 俊×米澤進吾
- 12 | 卒業生を訪ねて 第3回
- 計算化学アプローチで創薬の最前線进行
- 多和田倫子×米原文博

- 14 | CMSIの拠点 第1回
- 材料科学拠点：
- 東北大学金属材料研究所
- 寺田弥生
- 15 | CMSIカレンダー
- 16 | 水和(溶媒和)

表紙：となりの泡、そのとなりの泡、もうひとつとなりの泡、……。小さな泡が集まり大きな泡が生まれていく。CMSIのネットワークの中でも、数えきれない小さなアイデアが触れ合い、大きなサイエンスに発展しています。

計算物質科学イニシアティブ広報誌 Torrent No.8, July 2013

© Computational Materials Science Initiative, 2013 All rights reserved
 CMSI(計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム(SPIRE)」分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 <http://cms-initiative.jp> ISSN 2185-7091

制作協力：サイテック・コミュニケーションズ デザイン：高田事務所



Computational Materials Science Initiative