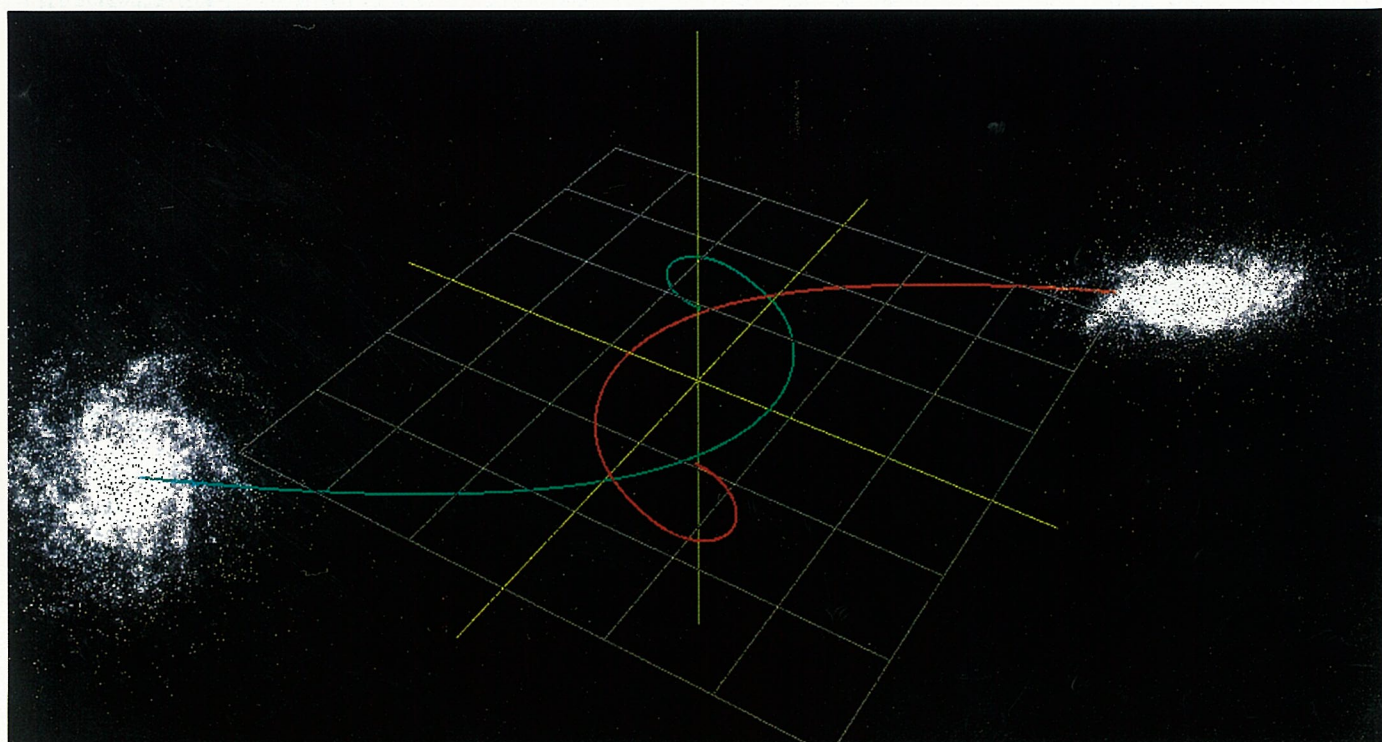


# 理研ニュース

No. 185 November 1996

理化学研究所

- 2 ● 研究最前線  
銀河とタンパク質をつなぐ  
スーパー・シミュレーション
- 6 ● SPOT NEWS  
放射光施設「SPring-8」  
線型加速器 1 GeVを達成
- 7 ● TOPICS  
若手研究員制度推進室が発足  
伊藤正男フロンティアシステム長  
文化勲章を受章  
国際フロンティア研究システム  
脳思考機能研究第II期スタート
- 8 ● 原酒  
地球の裏側へ



衝突する前のアンテナ銀河のシミュレーション（記事は2ページから）

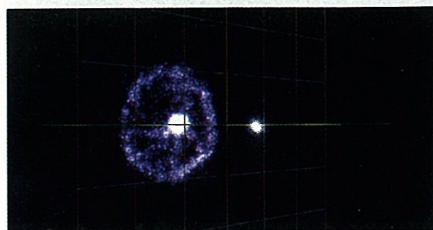
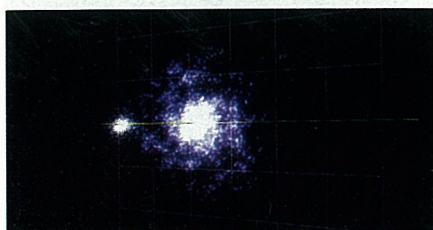


# 銀河とタンパク質をつなぐ スーパー・シミュレーション

土曜日の午後、東京北の丸公園の科学技術館のユニバース・コーナーを覗いてみよう。「さて、銀河どうしをぶつけてみたい人はいるかな。ハイその君、ぶつける角度はどんなのがいいかな？」と、満席の子どもたちを相手に銀河のお話おじさんを務めている戎崎俊一主任研究員に出会うだろう。

子どもたちが見つめるスクリーンには、銀河どうしがいろいろな角度で衝突し、車輪銀河やアンテナ銀河などの奇妙な構造ができていく様子が次々と映しだされる。しかしながら、この子どもたちが生まれたころには、こんな高度なシミュレーションがこんなにも簡単にできるようになるとは、誰も想像だにしていなかった。

シミュレーションを可能にしたのは、戎崎主任研究員たちが1989年にその1号機を開発した重力計算専用のスーパー・コンピュータ、「グレープ (GRAPE)」である。



車輪銀河シミュレーション (上がぶつかる前、下がぶつかったあと)

## 専用のコンピュータを作ろう

話は1988年の秋、東京大学教養学部の杉本大一郎教授のもとに届いた一通の手紙に遡る。差出人は国立天文台野辺山宇宙電波観測所の近田義廣氏で、夏に天文の若手研究者のために行った近田氏の講演のレジメが入っていた。

天体間に働く力を専用のコンピュータをつくって計算しようというのが講演の主旨であった。星の集団の進化を研究していた杉本教授は、このアイデアに強く引かれ、研究室での開発を決意した。そしてその実行隊長を務めたのが、当時は杉本研究室の助手であった戎崎主任研究員であった。「銀河などの星の集団の場合、ニュートンの運動方程式と万有引力の法則のみに従って動いており、まさにニュートンそのままの世界ですが、いざシミュレーションを行うとなると、これがたいへんです」と、戎崎主任研究員は開発の背景を説明する。

たとえばアンドロメダ銀河には星が1兆個ぐらいある。一つ一つの星は数学的な質点と考えればよいが、厳密に計算するとすると、一つの星とそれ以外の星(1兆マイナス1個の星)との間に働く力を計算して足し合わせなければならない。そしてこの計算を1兆個分行うのである。これは $3 \times 10^{25}$ 回の乗算や加算を行うことに相当する。

これを一般的なスーパーコンピュータで行うとすれば、その計算能力は1秒間に乗算や加算を $10^9$ 回(10億回)行う程度なので、 $3 \times 10^{16}$ 秒、じつに10億年の歳月がかかる。「実際には、1万個とかの粒子で代表させて計算しますが、それでも膨大な時間がかかります。そのため、銀河の研究は世界的にストップし

てしまった…。」

なぜ銀河は渦を巻いているのか?

円盤銀河や楕円銀河があるのはなぜか?といった問題が、中ぶらりんのまま留め置かれてしまったのだ。

## 20万円の手作りスーパーコンピュータ

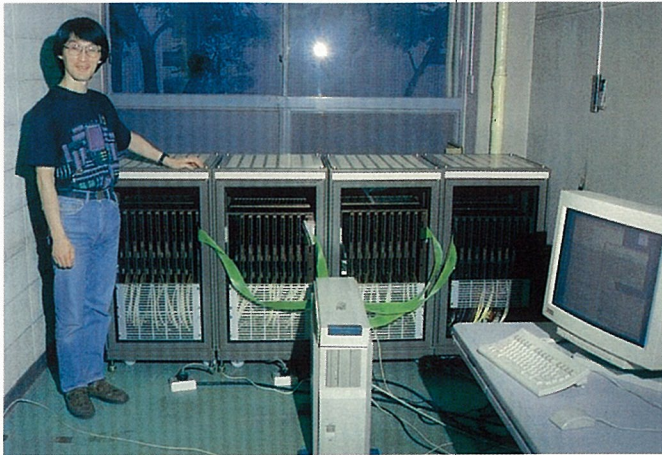
中ぶらりん状態を何とかしようと、専用コンピュータの開発に取り組んだ杉本研究室だが、結果的にはわずか半年、経費20万円で、180メガ・フロップス(1秒間に1.8億回の浮動小数演算を行う)というマシンを自分たちの手で作りあげてしまった。大きさは32センチ×43センチの基板1枚の本体からなるデスクトップ型である。「当時、日米構造会議で『100メガ・フロップス以上をスーパーコンピュータと定義し、国際入札を義務づける』という話になったので、フーンおれたちは20万でスーパーコンピュータをつくったのかと……。」

これがグレープ (GRAPE)の1号機グレープ-1で、その名はGRAvity PipEからきている。つまり重力をパイプライン方式で計算する、重力計算専用のマシンの意である。

パイプライン方式では、ベルトコンベヤーに載って運ばれてくる車に部品を順次取り付けていくのと同じように、次々と送られてくるデータに対して流れ作業的に演算を行っていく。

重力計算を行う場合、質点間の距離の2乗を算出し、その後いろいろな計算を行って、その質点どうしに働く力を求めて、これを積算する。この一連の演算処理をパイプライン方式で行うのであ





グレープ-4

る。「重力のように"計算過程は単純だが、計算回数がとてつもなく多い"というものには、パイプライン方式の専用マシンがぴったりなのです。」

その後グレープに対しては、LSI化や高精度化、並列化などが着々と進められ、2号機、3号機が開発されていった。そして昨年には1テラ・フロップス、つまり1秒間に1兆回の浮動小数点演算の可能なグレープ-4が完成している。

この間、演算速度の向上だけでなく、重力や正負のあるクーロン力を含め、その大きさが要素間の距離にのみ依存する力(中心力)ならば何でも計算できるような"汎用性のある専用性"も追究された。その結果、原子や分子の集団のふるまいを求める分子動力学シミュレータとしても使用できるようになったのである。

戎崎主任研究員はグレープ-4の完成直後に東大から理研に移ってきたが、現在進めているのは100テラ・フロップス



M87 楕円銀河

の専用コンピュータの開発。これを分子動力学のシミュレーターとして使い、タンパク質の構造の解明

を行なおうとしているのである。この天文屋からタンパク屋への大胆な変身については後でじっくり話を聞くことにしよう。

### グレープで楕円銀河の謎を解く

グレープのような道具を手にしたときに、"どのような研究成果があるのか"は、非常に興味深い。その一例として楕円銀河誕生のシナリオがある。

銀河には、我々の銀河系のような円盤銀河とラグビーボールのような形をした楕円銀河の2種類がある。円盤銀河では中心に近づくほど輝度が上がる。つまり、中心に近いほど星の密度が高い。一方、楕円銀河では中心に近づいてもある距離からは輝度がほぼ一定であることが観測されている。「これはなぜか? 楕円銀河の中心核には何があるのか?」は銀河研究者の長年の疑問であった。

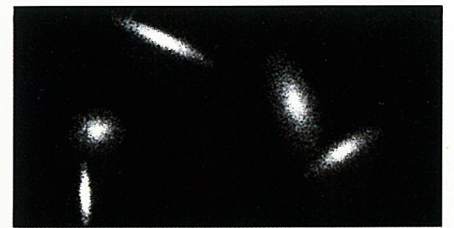
そして「円盤銀河どうしが衝突合体して楕円銀河ができる」という仮説が、それなりの根拠をもって語られていた。



M51 うずまき銀河

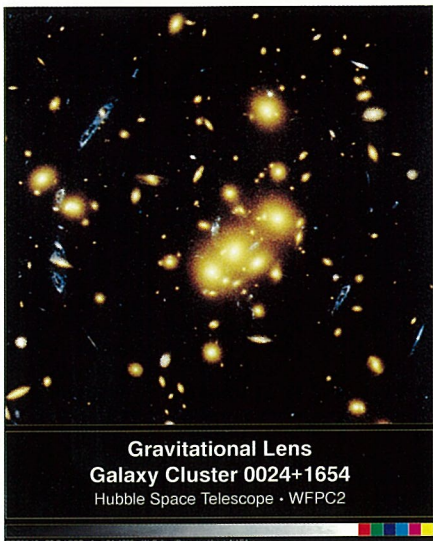
「そこでグレープ-1ができたときに高い中心密度を持ったモデル銀河を作って衝突させてみたのです。ところがどうやっても中心の星の集まりを壊せない…。」

あれこれと考えているうちに「銀河中心にはブラックホールがあるといわれているが、ブラックホールを中心にもつ銀河どうしを衝突させるとどうなるだろうか」という発想が浮かんだ。早速シミュレーションをしてみると、これが上手くいったのである。ブラックホールをもつ銀河どうしがぶつかって合体すると、重たいブラックホールは中心に向かって落ちて行き、互いの周りをくるくる回るブラックホールの連星を作る。そしてこれがカタパルト(射出機)となって周りの星をぼんぼん外側に飛ばしてしまい、中心核の星の密度を下げるというシナリオ



円盤銀河が衝突して楕円銀河になるシミュレーション





重力レンズ

が得られたのである。

このシナリオについての論文は3年ほど前にイギリスの権威ある学術誌 "nature" に採用された。「最初は『そんなバカな』という反応もけっこう多かったのですが、徐々に認められてきた。そして極め付けがこれです」と昨日アメリカから届いたばかりというプレプリントを戎崎主任研究員は示した。

ハッブル宇宙望遠鏡による銀河の観測結果を論じたプレプリントで、たくさんの銀河が集まっている "おとめ座" 銀河団にある銀河の観測から、戎崎主任研究員たちのシナリオにそった構造をもつ銀河が数多くみつかったのである。表紙に印刷された研究者たちの名前を指さしながら、「これで銀河屋の長老たちからもお墨付きをもらったことになります」とニコッと笑った。そして「われわれの成功は、高性能かつ手軽な専用機をもったゆえです。高性能でも手軽でなければ難しかったでしょうね」とその秘訣について話を進めた。

## シミュレーションの意識革命

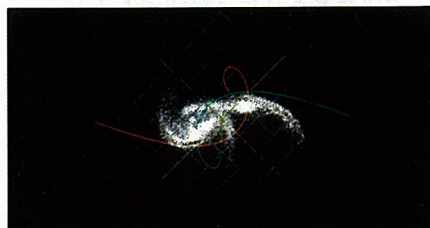
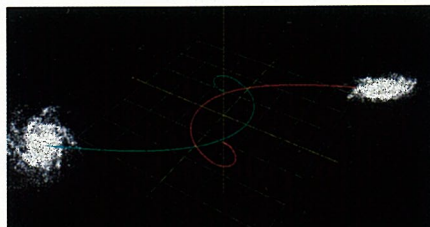
従来の汎用スーパーコンピュータを使っての天体シミュレーションの場合、料金もかなりかさむし、結果がでるまでにかなりの時間を要する。また、他の大勢の研究者との共同利用なので、思い

たったときに使えるというのものでもない。そのため、なるべく失敗しないようにと、シミュレーションから大胆な仮定を排除していくこととなった。

一方グレープ-1は、研究室の机の上に置かれた身近な専用機であり、何か思いついたらその場で試すことができた。その結果も半日もあれば出てくる。

結果が思わしくなければ、一人でじっくり考えていいし、皆で議論してもいい。いずれにしろ、対象となる問題を常に頭において、手軽にその軌道修正をはかることができるのである。「失敗してもいい、失敗してもすぐに簡単にやり直しがきくというのは、シミュレーション史上たいへんな意識改革です」と戎崎主任研究員。

グレープ-1がデスクトップの手軽なコンピュータとなり得た理由にはいろいろあるが、高速専用コンピュータ "グ



アンテナ銀河シミュレーション

レープ"と低速汎用の "ワークステーション" とをつなぎ、共同で計算を行うシステムにしたことも大きい。

恒星集団の計算には、単純な計算の膨大な繰り返しだけではなく、複雑な計算を必要とする部分もある。ただし、計算量は多くない。ここをワークステーションが受け持つようにしたのである。「実は、対象とする問題のどこまでを専用機でやり、どこからを汎用機にまかせるかがノウハウです。だからこそコンピュータの専門家ではなく、ユーザーの我々がトップを走ることができるのでしょね。」

最新のグレープ-4も専用と汎用の共同という設計思想を汲んでいるが、さすがにデスクトップの大きさには収まらず、一研究室一台といった感じだ。しかしハードが進歩すれば、いずれはこれもデスクトップになるのだろうか。

さて、2年後の完成を目指し開発が進められている100テラ・フロップスの専用機はどんなものになるのだろうか。

## 五感で感じるタンパク質

100テラ・フロップスの専用機は、前述のように分子動力学のシミュレーターとしてタンパク質の構造を探ることになっているが、扱うことのできる粒子数は100万個とスケールが大きい。「生体のタンパク質は、水の中に埋まってその中で機能を果たしている。ですからシミュレーションの100万個の粒子は90%以上タンパク質の周囲の水分子です。」

歴代グレープの思想を汲んで、もちろんこのシステムも汎用並列型スーパーコンピュータと結んで共同計算を行うことになっている。クーロン力とファン・デ





戎崎主任研究員

ル・ワールス力については専用機が、化学結合と位置の更新については汎用機が計算を行う。

また、タンパク質の一部が運動して他のタンパクなどと結合する様子を目の当たりにできるシステムとなる予定だ。さらにバーチャル・リアリティの技術と結びつけ、仮想タンパク質の中を探検するウォーク・スルーを実現したいと戎崎主任研究員は考えている。「研究者自身がシミュレーションに参加し、『ちょっとこの辺を引っ張ったらタンパク質の構造がどう変わるかな』とか言いながら引っ張って、その結果がリアルタイムで解るようなシステムを作りたい。結局、タンパク質のように複雑なものは、五感を全部使わないと理解できないのではないかと感じています」という戎崎主任研究員は、さらに「シミュレーションという手法は、従来の物理、化学、生物といった縦割りの研究領域を串刺しにするものです。だからこそ天文屋の私がタンパク屋になれるわけですが、逆にいえばこの手法を使ってはじめて各領域を共通の言葉で語れるようになるのではないかと思います。生命現象を物理の言葉で語る最初の扉を、是非とも私が開きたい」とタンパク屋宣言の意欲のほどを語る。

システムの開発状況は現在LSIの設計を行っているところで、来年にはその製作の運びになる予定だ。LSI製作など

ハードに関しては米国IBMのワトソン研究所のグループが担当する。昨年、世界チェスチャンピオンのゲイリー・カスパロフとの勝負で惜しくも破れたチェスのマシン「ディープ・ブルー」を開発したグループである。「その勝負をフィラデルフィアで見たのですが、そのうち将棋のシミュレーターも開発したいなあと思いましたね。」

シミュレーターの名前は既に考えてある。羽生に打ち勝つ「マングース」だ。

### バーチャル野茂とイチローの戦い

「マングース」だけでなく、戎崎主任研究員のシミュレーションの夢はどんどん広がっている。そのいくつかを最後に紹介しよう。

一つは行列演算専用のコンピュータの開発で、これ自体は夢というより現実の開発がはじまりつつある。戎崎主任研究員が考えているのは、これを使ってロウソクの炎のシミュレーションを行うことである。できれば仮想ロウソクのウォーク・スルーも組み合わせ、ファラデーの「ろうそく科学」(1861年)の第二弾となる「デジタル・キャンドル」の世界を子どもたちに味あわせてやりたいと考えている。

二つ目は、野球のカーブ、シュート、

フォークといった変化球のシミュレーションだ。どんな力を受けて曲がるのか、どんな渦ができて揺らぐのかを探っていくのである。

縫い目によるボール表面のでこぼこが重要になると予想され、非常に難しいシミュレーションになると考えられるが、現状の汎用スーパーコンピュータが流体力学計算に適した構造を持っていることを考えれば、ちょっとしたシステム上の工夫でのりきれるかもしれない。

最後がバーチャル野茂対イチローだ。「もう少しで、約100個の骨とそれを覆う筋肉とからできている人間の体を力学的には完全にシミュレーションで自在に表現できるようになるでしょう」と戎崎主任研究員。

そうなれば、球種のシミュレーションと組み合わせるバーチャル野茂、バーチャルイチローを登場させる日も近い。「こんな手法や技術を使ってトレーニングし、弱小高校野球チームを夏の甲子園へ送りこめれば最高ですね。」

このような研究によって、人体の複雑で精妙な運動能力の理解が進めば、高性能の義手や義足の開発が進むだろうし、人間そっくりの動きをする鉄腕アトムのようなロボットを作ることも夢では無くなるかもしれない。

とてつもない話のようでありながら、どこかに信憑性を感じるのは、今まさに加速しようとしているシミュレーション技術の確かな存在感のせいだろうか。

文責：総務部広報室

監修：計算科学研究室

主任研究員 戎崎俊一

取材・構成：由利伸子



## 放射光施設「SPring-8」 線型加速器 1 GeV を達成

理化学研究所と日本原子力研究所が、共同で建設を進めている、SPring-8の初段加速器である線型加速器の調整運転を開始したところ、所期性能である1 GeV（10億電子ボルト）の電子ビームの加速に成功しました。SPring-8は、両研究所が平成3年から、兵庫県播磨科学公園都市に建設を進めてきたものであり、この8月初めから線型加速器の調整運転を実施していました。線型加速器は全長140mあり、最終加速管まで電子ビームの加速を行い、所期の性能を有する電子ビームを得ました。11月からはこの電子ビームを第2段目の加速器であるシンクロトロンに輸送し、8 GeV（80億電子

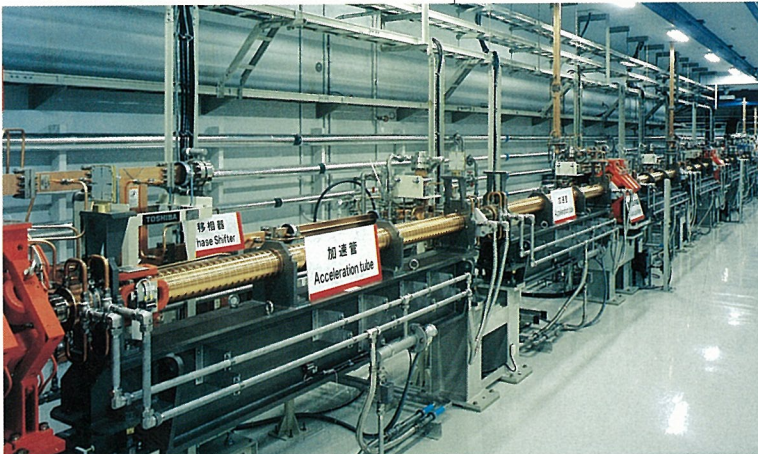
ボルト）まで加速する調整試験を開始します。その後、最終段の加速器である蓄積リングと放射光ビームラインの調整運転を行い、平成9年秋には共同利用施設として放射光利用研究を開始する予定です。

SPring-8は、ESRF（European Synchrotron Radiation Facility、欧州12カ国共同施設）及びAPS（Advanced Photon Source、米国）と並ぶ第三世代の大型放射光施設の一つで、その高輝度・高エネルギー放射光は、21世紀の科学技術の発展を担う優れた実験手段として、物理学、化学、生物学などの基礎科学から、ライフサイエンス、工学、情報・電子、

医療など、広範な研究分野への利用が期待されています。

また、(財)高輝度光科学研究センター（理事長 伊原義徳）は、平成9年10月から平成10年3月までの半年間の利用研究を対象として、平成8年10月から利用研究課題の募集を開始しました。今回は、ビームラインの性能評価に関連した利用研究課題を優先的に受け入れ、その実験結果をビームラインの調整・改良に活用する予定です。

なお、今回の応募締め切りは平成9年1月10日です。



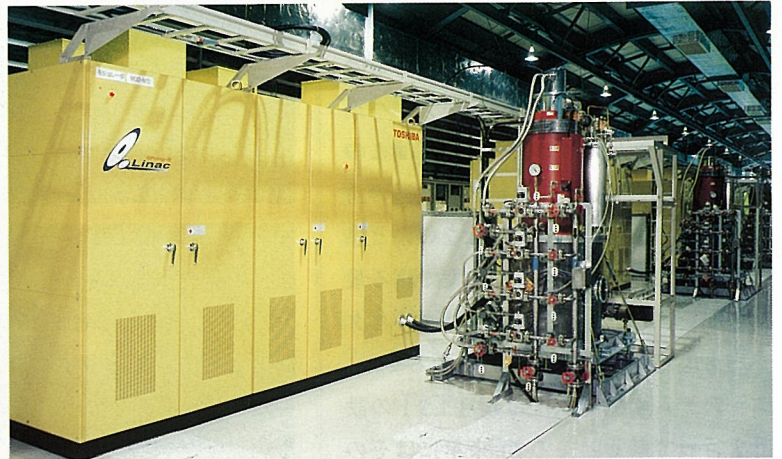
線型加速器 加速器管室



SPring-8 全景



線型加速器棟



クライストロンと電源装置



## 若手研究員制度推進室が発足

平成8年10月1日から、日本の大学院博士課程在籍者を対象とし、理研の研究者の指導を受けながら、一体となって研究を展開するジュニア・リサーチ・アソシエイト（J・R・A）制度が発足したのに伴い、新たに若手研究員制度推進室を設置しました。若手研究員制度推進室では、従来の基礎科学特別研究員制度・高度技術研究者育成制度に、新たに発足したジュニア・リサーチ・アソシエイト（J・R・A）制度を加え、日本における創造的・基礎的研究の充実を計るため、独自の若手研究者育成制度を推進していきます。

基礎科学特別研究員制度は、独創性に富んだ若手研究者に、自発的かつ主体的に研究できる場を提供する新しい制度として平成元年に創設されたもので、当初、基礎科学特別研究員25名、予算約1億円でスタートしましたが、今では165名の研究員と15億円を越える予算が認可されています。また、平成5年には高度の能力を有する技術研究者の育成を目的とする高度技術研究者育成制度がスタートしています。

なお、基礎科学特別研究員については毎年4月から6月上旬の期間、J・R・Aについては10月から11月下旬までの期間に、それぞれ公募を実施していますので詳細については、若手研究員制度推進室までお問い合わせ下さい。

基礎特研係：TEL:048（467）9268  
 wakate@postman.riken.go.jp  
 J・R・A係：TEL:048（467）9297  
 jra@postman.riken.go.jp  
 推進室共通 FAX:048（463）3687

## 伊藤正男フロンティアシステム長 文化勲章を受章



1996年度の文化勲章を伊藤正男フロンティアシステム長が、受章しました。

伊藤システム長は、小脳の神経回路の構造と機能の研究で、その運動学習の仕組みを解明し、複雑な脳機能の研究に貢献しました。

文化勲章の伝達式は「文化の日」の11月3日に皇居で行われました。

## 国際フロンティア研究システム 脳思考機能研究第Ⅱ期スタート

国際フロンティア研究システムの脳・神経科学研究のうち、昭和63年に新設された「脳機能研究」は、平成8年9月30日で第Ⅰ期を終了し、10月1日から、第Ⅱ期に移行しました。3つの研究チームは、それぞれ、脳統合機能研究チーム（旧：思考電流）、記憶学習機構研究チーム（旧：シナプス機構）、脳機能構造研究チーム（旧：アルゴリズム）と研究チーム名を変更し、新たなチームリーダーとともにスタートしました。

脳統合機能研究チーム（谷藤学チーム

リーダー）は、思考過程の中枢である大脳皮質連合野における概念の抽出機能とその操作の機能の解明を目指し、記憶学習機構研究チーム（伊藤正男チームリーダー）は、記憶学習機能の2種類（認知型、非認知型）のメカニズムと相互作用について解明を行います。また、脳機能構造研究チーム（端川勉チームリーダー）は思考機能を実現している脳の神経回路網の構造と機能の解明を目指します。



端川 勉チームリーダー



谷藤 学チームリーダー





# 地球の裏側へ

どこまでも遠くへ行ってみたい…そんな思いは誰しも持っていますが、なかなか実現できないものです。理研は夏期休暇は任意にとれるので、夏はそんな思いを現実に行ける絶好のチャンスです。さらに、近くにいる同僚が続々と海外へ行ってしまうと、居ても立ってもいられず、9月に南米のチリとアルゼンチンに行きました。

南米といえば、ペルーやブラジルのような国を思い浮かべるかもしれませんが、チリとアルゼンチンはヨーロッパに非常に近い雰囲気を持っています。しかし、観光対象として世界的にアピールできるものは、アルゼンチンはタンゴぐらいしかないし、チリにはモアイ像で有名なイースター島がありますが、チリの領土であるという印象が薄いため、実質的には何もないと言ってもよく、両国とも旅行先としては必ずしもおもしろい国ではありません。現地でも問われましたが「なぜ日本からわざわざここへ？」という問いには、今でも答えに窮してしまいます。だからこそ逆に観光化されていない魅力を持っています。また、一般的に南米は危険だと思われていますが、少なくともこれらの国はとても治安がよく、決して危険な雰囲気はありません。

両国ともほとんど地球の裏側にあるのでその道程も長く、まず成田からロスアンゼルスへ約10時間、ロスアンゼルスからマイアミへ約5時間、さらにマイアミからチリの首都サンチアゴへ約8時間、乗り継ぎなども含めると約30時間近くかけてやっと着くことができました。いつも私は現地へ着くまでは、また現地へ着いても特にどこへ行くということは、はっきり決めないので、今回もよく言えば気ままな、悪く言えば優柔不断で効率の悪い旅になりました。

先に述べたように、チリ本土には世界的な観光地はありませんが、すぐ東はアンデス山脈があり、南北に長い国のため砂漠、高山、温帯、冷帯、寒帯とバラエティーに富んだ気候区を持っているため、私が訪れた北部のアタカマ高地(砂漠、高山)や、南部のパタゴニア(冷帯、寒帯)など様々な大自然の素晴らしさを堪能できます。そういったすばらしい大自然と、あまり観光地化されていない



アタカマ砂漠の村サン・ペドロ・デ・アタカマの石造りの教会

自然の素晴らしさを堪能できます。そういったすばらしい大自然と、あまり観光地化されていない



筆者近影

町々の素朴さがチリの魅力です。

食べ物はチリ料理と呼ぶほどの個性的な料理はありませんが、長い海岸線を持っているので魚介類は豊富で、シーフード料理が名物となっています。

アルゼンチンは時間がなくて、結局は首都のブエノスアイレスへわずか1泊2日しただけでしたが、ここは街の雰囲気といい、歩いている人々のほとんどすべて白人系であることといい、ヨーロッパとさして変わらない所でした。両国ともスペイン語の世界で、英語はほとんど通じないし、また私もスペイン語を習ったことがないので、コミュニケーションをとるには苦勞しますが、無理して覚えるのでなく、旅を通じて少しずつ新しい言葉を覚えてゆくのは楽しいことです。今回も事前に学習することなく、今年1月に中米のグアテマラを旅したときに得たわずかな蓄積を頼りに出かけました。しかし、グアテマラでは最初こそ苦勞したものの後半はわずかな語学力で充分やってゆけたのに、今回は言葉がわからなくて苦勞する場面がどういうわけが多くあり、「やっぱり、しゃべれないとだめだな…」と



哀愁の港町バルバラインの夕暮れ

何度も気落ちしてしまいました。

最近TVでは、猿岩石という面白いコンビが、香港からヒッチハイクでロンドンまで到達するという冒険を達成し、話題になりましたが、彼らの旅のスタイルが冒険性に富んでいることよりも、(うまく表現できませんが…)彼らがただ行くべきところへ行き、見るべきものを見て、手に入れるべきものを手に入れて帰るのでなく、そういった“必然性”を超えて何か独自のものを得ている点にはとても感心させられます。それに比べると、私は“気まま”な旅はしていても、“必然性”を超越することはできません。それは必ずしも自由な旅とは言えないのかもしれませんが、“必然性”を超越した何か…それを得ることを目指して、今後もいろいろなところを旅したいものです。

総務部総務課 高林直樹

## 理研ニュース No.185 November 1996

発行日：平成8年11月15日

編集発行：理化学研究所総務部広報室

〒351-01 埼玉県和光市広沢2番1号

電話 (048) 467-9272 (ダイヤルイン)

制作協力：株式会社 スリーアイ パブリケーション