

研究中核拠点としての共用施設「ペタセンター」 — 個人的な観点からの期待像 —

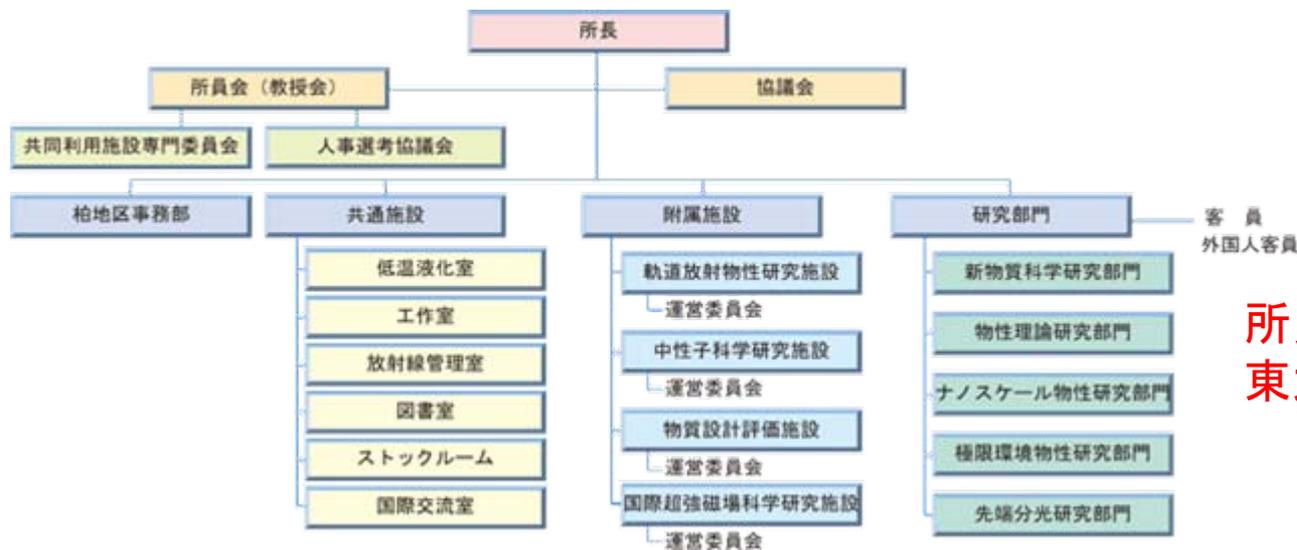
福山秀敏
東京理科大学
2008.3.12

「共同利用と共に」

- 1970 東大理学系研究科・物理・物性理論
- 1970－1977 東北大理助手・助教授
- 1977－1992 物性研究所 助教授・教授
(東京大学附置全国共同利用研究所)
- 1992－1999 東大・理
- 1999－2003 東大物性研究所
- 2003－2006 東北大・金属材料研究所・国際物質材料センター
- ～～
- 1999－2003 物性研究所 所長
- 2001－2002 文部科学省所轄ならびに国立大学附置研究所長会議 議長
- 2002－2005 国際純粋応用物理学連合(IUPAP) Vice president
- 2004－2005 JASRI(SPring-8)諮問委員会 委員長
- 2005－2007 JASRI(SPring-8)選考委員会 委員長
- 2006－ J-PARC国際諮問委員会

東京大学物性研究所

- * コミュニティの要望による「学術会議勧告」に基づき設置(1957)
- * 研究所としての独自の研究教育活動(東京大学のメンバーとして大学院教育に関与)
- * 同時に「共同利用研究所」として全国の研究者に開かれている。(たとえば、人事委員会の半分以上が外部メンバー)



所員(教授・助教授)
東大研究科構成員

- * 物性研究所は、東京大学の附置研究所であると同時に、全国物性科学研究者のための共同利用研究所でもある。研究所の運営は、教授及び准教授から構成される所員会の議決を経て所長が行うが、同時に共同利用施設の運営については、東京大学の内外からほぼ同数の委員により組織された物性研究所協議会が所長の諮問に応じて意見を述べ、外部研究者の要望を伝達する機能を果たしている。更に所員会の下部組織として物性研内外の委員よりなる共同利用施設専門委員会が設けられ、共同利用、施設利用、研究会などの実行計画を審議している。
- * 物性研究所の研究体制は5研究部門、4研究施設、客員部門、外国人客員部門よりなる。このうち軌道放射物性研究施設に関しては茨城県つくば市の高エネルギー加速器研究機構内に施設分室が置かれており、中性子科学研究施設の実験装置は茨城県東海村の日本原子力研究所内にある研究用原子炉に設置されている。また所内研究者や共同利用者が共通に利用できる施設として低温液化室、工作室、放射線管理室、図書室、国際交流室などが置かれている。
- * 本研究所の教授、准教授、助教の人事はすべて公募され、物性研内外ほぼ同数の委員よりなる人事選考協議会の議決を経て所員会で決定される。なお、一部の職には任期がついている。

大型放射光施設(SPring-8)

大型放射光施設(SPring-8)は、兵庫県南西部(西播磨)の自然環境に恵まれた播磨科学公園都市にあります。[日本原子力研究所\(JAERI\)](#)【現 [独立行政法人日本原子力研究開発機構\(JAEA\)](#)】と[理化学研究所\(RIKEN\)](#)が共同で建設をしました。

平成9年に供用が開始された後は、財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI)が管理運営をしています。



- 組織図と所在地
- 財団法人高輝度光科学研究センター
- 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都1丁目1番1号
電話 0791-58-0950、FAX 0791-58-0955
- [組織図](#)
- [独立行政法人理化学研究所 播磨研究所](#)
- 〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都1丁目1番1号
電話 0791-58-0808、FAX 0791-58-0800

SPring-8のビームライン

- **BL22XU** JAEA 量子構造物性
(日本原子力研究開発機構)
- **BL23SU** JAEA 重元素科学
(日本原子力研究開発機構)
- **BL24XU** 兵庫県ID (兵庫県)

- ★ **BL25SU** 軟X線固体分光
- ◆ **BL26B1** 理研 構造ゲノム I
- ◆ **BL26B2** 理研 構造ゲノム II

- ★ **BL27SU** 軟X線光化学
- ★ **BL28B2** 白色X線回折
- ◆ **BL29XU** 理研 物理科学 I

- ◇ **BL32XU** 理研 ターゲットタンク
- **BL32B2** 創薬産業
(蛋白質構造解析コンソーシアム)

- **BL33XU** 豊田
(豊田中央研究所)
- **BL33LEP** レーザー電子光
(大阪大学核物理研究センター)

- ★ **BL35XU** 高分解能非弾性散乱
- ★ **BL37XU** 分光分析
- ★ **BL38B1** 構造生物学 III

- **BL38B2** 加速器診断
- ★ **BL39XU** 磁性材料
- ★ **BL40XU** 高フラックス

- ★ **BL40B2** 構造生物学 II
- ★ **BL41XU** 構造生物学 I
- ★ **BL43 IR** 赤外物性

- **BL44XU** 生体超分子複合体構造解析
(大阪大学蛋白質研究所)
- ◆ **BL44B2** 理研 構造生物学 II
- ◆ **BL45XU** 理研 構造生物学 I

- ★ **BL46XU** 産業利用 III
- ★ **BL47XU** 光電子分光・マイクロCT

区分	ビームライン本数				合計
	共用	専用	理研	加速器診断	
稼動中	26	14	7	2	49
調整・建設中	0	3	1	0	4
合計	26	17	8	2	53

- 医学・イメージング I **BL20B2** ★
- 医学・イメージング II **BL20XU** ★
- 産業利用 I **BL19B2** ★

- 理研 物理科学 II **BL19LXU** ◆
- 理研 物理科学 III **BL17SU** ◆
- 産業界専用BM **BL16B2** ●
(産業用専用BL共同体)

- 産業界専用ID **BL16XU** ●
(産業用専用BL共同体)
- 広エネルギー帯域先端材料解析 **BL15XU** ●
(物質・材料研究機構)

- 産業利用 II **BL14B2** ★
- JAEA 物質科学 **BL14B1** ●
(日本原子力研究開発機構)

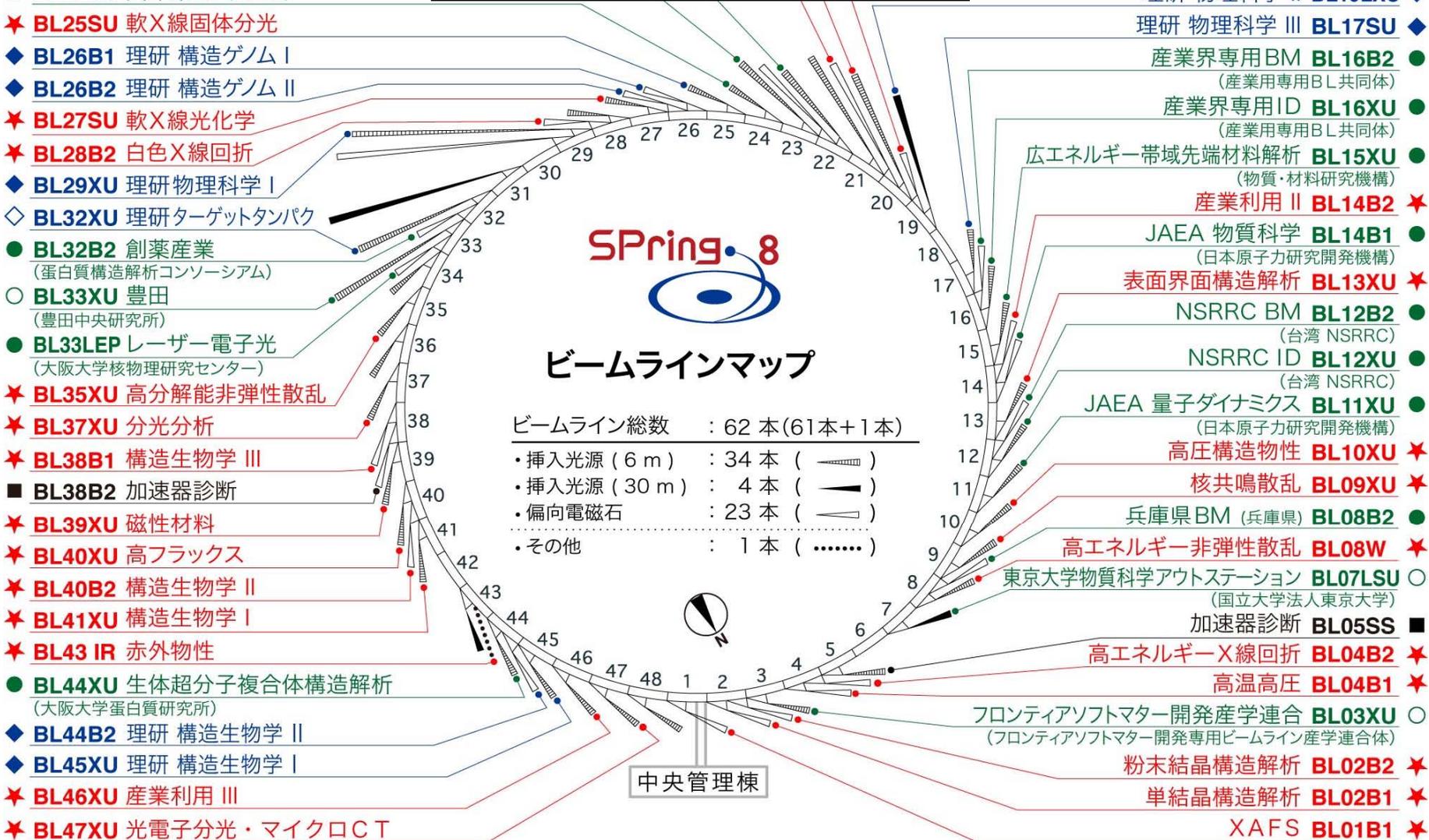
- 表面界面構造解析 **BL13XU** ★
- NSRRC BM **BL12B2** ●
(台湾 NSRRC)
- NSRRC ID **BL12XU** ●
(台湾 NSRRC)

- JAEA 量子ダイナミクス **BL11XU** ●
(日本原子力研究開発機構)
- 高圧構造物性 **BL10XU** ★
- 核共鳴散乱 **BL09XU** ★

- 兵庫県BM (兵庫県) **BL08B2** ●
- 高エネルギー非弾性散乱 **BL08W** ★
- 東京大学物質科学アウトステーション **BL07LSU** ○
(国立大学法人東京大学)

- 加速器診断 **BL05SS** ■
- 高エネルギーX線回折 **BL04B2** ★
- 高温高圧 **BL04B1** ★

- フロンティアソフトマター開発産学連合 **BL03XU** ○
(フロンティアソフトマター開発専用ビームライン産学連合体)
- 粉末結晶構造解析 **BL02B2** ★
- 単結晶構造解析 **BL02B1** ★
- XAFS **BL01B1** ★

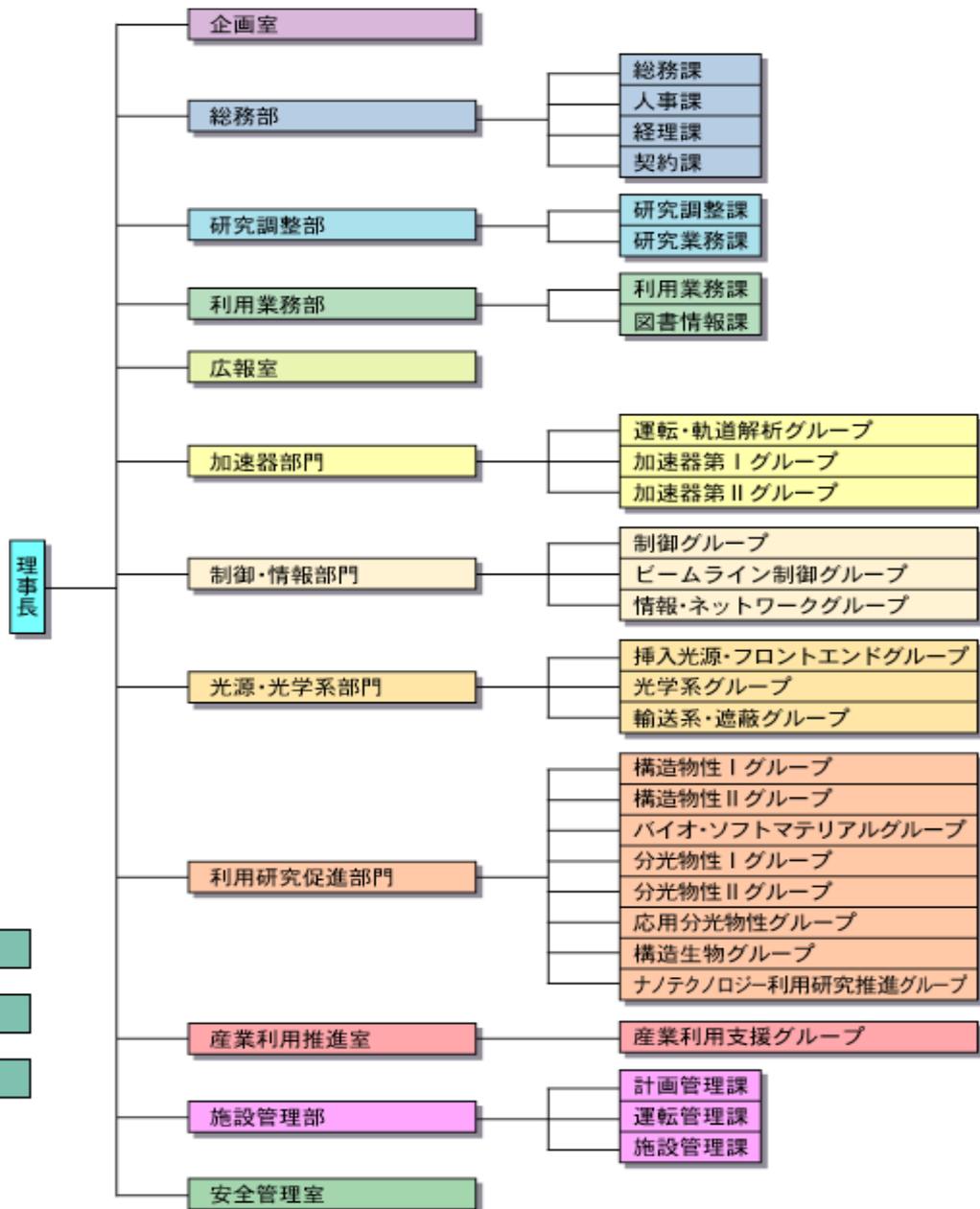


ビームライン総数 : 62本(61本+1本)

- ・挿入光源 (6 m) : 34本 ()
- ・挿入光源 (30 m) : 4本 ()
- ・偏向電磁石 : 23本 ()
- ・その他 : 1本 ()

中央管理棟

財団法人 高輝度光科学研究センター (JASRI) 組織図



理研播磨研究所



特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づくSPring-8運営体制

「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の目的

先端大型研究施設の共用を促進するための措置を講ずることにより、研究等の基盤の強化を図ると共に、研究等に係る機関及び研究者等の相互の間の交流による研究者等の多様な知識の融合等を図り、もって科学技術の振興に寄与することを目的とする。

国(政府)

特定先端大型研究施設の共用の促進に関する基本的な方針

交付金

※利用促進業務を行う登録施設
利用機関を選定して交付

独立行政法人 理化学研究所
施設を研究者の共用に供する等の業務

(財)高輝度光科学研究センター(JASRI)

登録施設利用促進機関 登録

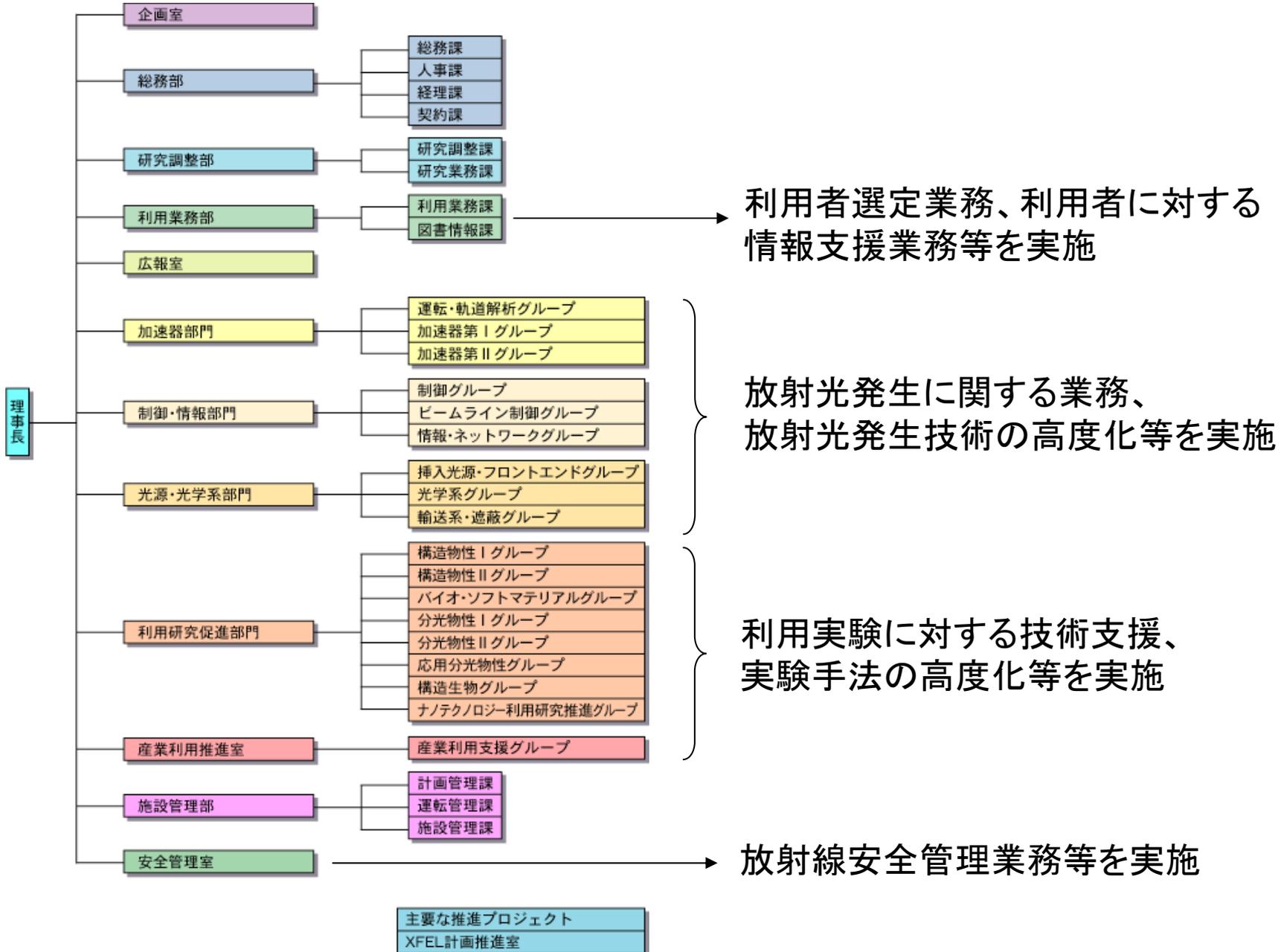
- ・利用者選定業務(施設利用研究を行う者の選定等)
↳ 選定委員会の意見を聴取
- ・利用支援業務(情報提供、相談その他の援助)
- ・調査分析
- ・啓発活動、試験研究 等[法定外]
- ・共用施設の維持管理、運転[法定外]

※

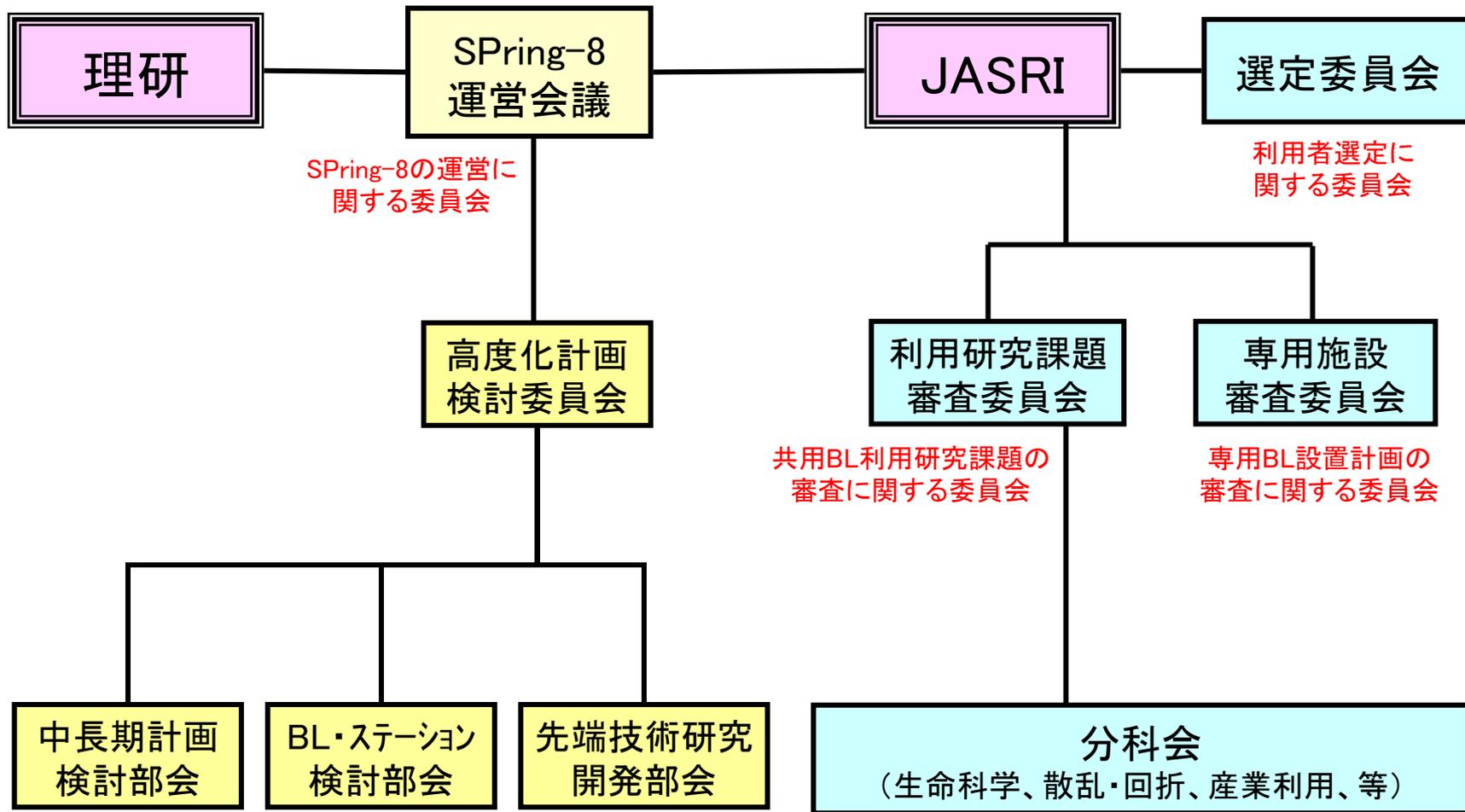
委託
(一般競争入札)

※ 文部科学大臣は登録機関に対し、理化学研究所が行うものとされた業務のうち、利用促進業務(利用者選定業務及び利用支援業務)を行わせることができる。

JASRIの組織と主な業務



理化学研究所とJASRIの連携体制(主な委員会等)



J-PARC

設置者: KEK & JAEA

共同で「J-PARCセンター」を設置

国際的な共用

* 「高エネルギー、ニュートリノ」基礎科学

* 「中性子、中間子」物質科学・生物科学および

「産業利用」

設立趣意書

計算機が目覚ましい進展と、種々の革新的なアルゴリズムの開発により、計算機シミュレーションによって扱える対象は飛躍的な広がりを見せている。実際、物質科学においては、計算機の活用が広範な分野の基礎研究および応用研究の主要な地位を占めるようになってきている。2006年度よりスタートした次世代スーパーコンピュータプロジェクトは、このような計算機シミュレーションの可能性を更に拡張するものと期待されている。こうした状況を反映して、科学、工学の多くの学会や研究会に、計算機シミュレーションを共通テーマとする分科会、あるいはまたそれを主目的とした研究会組織が設立され、さらにいくつかのファンディング機構による計算科学のプロジェクトも進められている。

今般の次世代スーパーコンピュータプロジェクトというall Japan で対応するべきプロジェクトの発足を契機として、これらの種々の活動間の情報交流を促進し、次世代スーパーコンピュータの有効活用と、研究の飛躍的発展を図るために有志が集まり、計算物質科学連絡会議を設立することとなった。(幹事会メンバーについては添付リストを参照。)

この計算物質科学連絡会議の役割は次のように要約される:

計算物質科学コミュニティーの窓口として、次世代スーパーコンピュータプロジェクトを視野に入れ計算物質科学の研究・教育活動に関する全国的な情報および意見交換の場を提供する。

具体的活動としては;

- ① 年に数回の幹事会を開催し、情報交流を図るとともに、共通の課題について議論する。必要に応じて、関係のコミュニティー、組織、行政に対しての提言を行う。共通の課題としては、具体的な研究推進計画、計算機資源の将来計画、人材育成計画などが想定される。
- ② 定期的に、計算物質科学のシンポジウムを開催する。
- ③ 具体的な作業の支援のため、事務局を設置する。(当面は、事務局を北陸先端科学技術大学院大学に置く。)

計算物質科学連絡会議へのご意見や提言は、ホームページ開設までは以下のメールアドレスに送付していただきたい。kbr@jaist.ac.jp(アドレス見取得)

連絡会議幹事会第7回会合メモ

日時:2008年2月20日 16:00 – 18:30

場所:北陸先端大 東京サテライトキャンパス

出席者:福山秀敏、佐藤三久、中津健之、平尾公彦、中辻博、常次宏一、毛利哲夫、
中村振一郎、高田章、三浦謙一、加藤千幸、小倉昌子(赤井の代理)、寺倉清之
関根仁博(オブザーバ)

議題

1. 「次世代スーパーコンピュータ作業部会」の報告(福山)
2. 理研における最近の状況(中津)
4. 各コミュニティからの報告(産業応用協議会、分子科学、物性科学、計算材料科学、高等研フォーラム、
プラズマ核融合グループ)

配布資料

- (1)「次世代スーパーコンピュータ作業部会」資料
- (2)「次世代スーパーコンピュータを中核とする研究教育拠点の形成について」(理研:中津健之)

議論の内容

1. 「次世代スーパーコンピュータ作業部会(作業部会と略称)」の報告

これまでに作業部会は2度開催された。

第1回:平成19年12月26日

第2回:平成20年2月14日

第1回の会合では、作業部会のミッションの概要が説明された。ミッションの項目だけを挙げる。

次世代スーパーコンピュータの利活用のあり方。

次世代スーパーコンピュータを活用した研究開発の推進について

共用の基本的考え方及び利用促進について

スーパーコンピュータに係る全国ネットワークの形成・活用

教育及び人材育成

理解増進

なお、配布資料その他については下記のURLを参照のこと。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/shiryo/029/08012313.htm#top

幹事メンバーリスト(2007年8月現在)

赤井久純 大阪大学 大学院理学研究科
岡崎 進 自然科学研究機構 分子科学研究所
加藤千幸 東京大学 生産技術研究所
香山正憲 産業技術総合研究所 関西センター
○榊 茂好 京都大学 大学院工学研究科
佐藤三久 筑波大学 計算科学研究センター
高田 章 旭硝子(株) 中央研究所
田中 功 京都大学 工学研究科
常次宏一 東京大学 物性研究所
常行真司 東京大学 大学院理学系研究科
○寺倉清之 北陸先端科学技術大学院大学 先端融合領域研究院
○土井正男 東京大学 大学院工学系研究科
中井浩巳 早稲田大学 先進理工学部
中津健之 理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
○中辻 博 量子化学研究協会
中村振一郎 三菱化学科学技術研究センター 基盤技術研究所
計算科学室長、三菱化学フェロー
○平尾公彦 東京大学 大学院工学系研究科
平田文男 自然科学研究機構 分子科学研究所
◎福山秀敏 東京理科大学 理学部応用物理学科
前川禎通 東北大学 金属材料研究所
三浦謙一 国立情報学研究所 アーキテクチャ科学研究系 教授
三間罔興 大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター センター長
毛利哲夫 北海道大学 大学院工学研究科
山下晃一 東京大学 大学院工学系研究科
吉田 博 大阪大学 産業科学研究所

○印:世話人◎印:世話人代表

[文部科学省](#)

[理化学研究所](#)

[次世代スーパーコンピュータ開発実施本部](#)

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト:

[次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発](#)

[次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発](#)

[科研費特定領域研究](#)

[次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発](#)

[科研費特定領域研究](#)

[実在系の分子理論](#)

[科学技術振興機構](#)

[戦略的創造研究推進事業](#)

[シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築](#)

CRESTプログラム、さきがけプログラムの混合型領域。

研究総括: 土居 範久

[マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション](#)

研究総括: 矢川 元基

[ナノテクノロジー分野別バーチャルラボ](#)

[国際高等研究所フォーラム](#)

「多階層連結コンピューティング」

[計算材料ワーキンググループ](#)

[スーパーコンピューティング技術産業応用協議会](#)

[革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発](#)

[計算物性科学WG](#)

[分子科学会](#)

[分子シミュレーション研究会](#)

[ナノ学会](#)

[日本化学会 理論化学研究会](#)

[日本化学会 情報化学部会](#)

[日本コンピュータ化学会](#)

[日本材料学会 分子動力学部門委員会](#)

[CACフォーラム\(Computer Aided Chemistry Forum\)](#)

[近畿化学協会 コンピュータ化学部会](#)

[企業研究会](#)

[新化学発展協会](#)

[APATCC \(Asia-Pacific-Association of Theoretical & Computational Chemists\)](#)

[日本シミュレーション学会](#)

[地球シミュレータセンター](#)

[国立情報学研究所](#)

[量子化学研究協会](#)

[理論・計算分子科学コミュニティ懇談会](#)

1. 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト:
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 (リーダー: 平田文男)
次世代エネルギー
次世代ナノ生体物質
次世代ナノ情報・材料
2. 科研費特定領域研究
次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発 (代表: 赤井久純)
3. 科研費特定領域研究
実在系の分子理論 (代表: 榊茂好)
4. JST CREST, さきがけ
シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築
CRESTプログラム、さきがけプログラムの混合型領域。
研究総括: 土居 範久
マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション
研究総括: 矢川 元基
ナノ・バーチャルラボ シミュレーション関連研究
5. 先端科学分野におけるITBL技術普及・利用動向調査
日本原子力研究開発機構 委託事業 (大阪科学技術センター)
6. 計算材料科学コミュニティー(これから形成すべきもの)
7. スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
平成18年4月現在で156機関が参加
8. 戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発

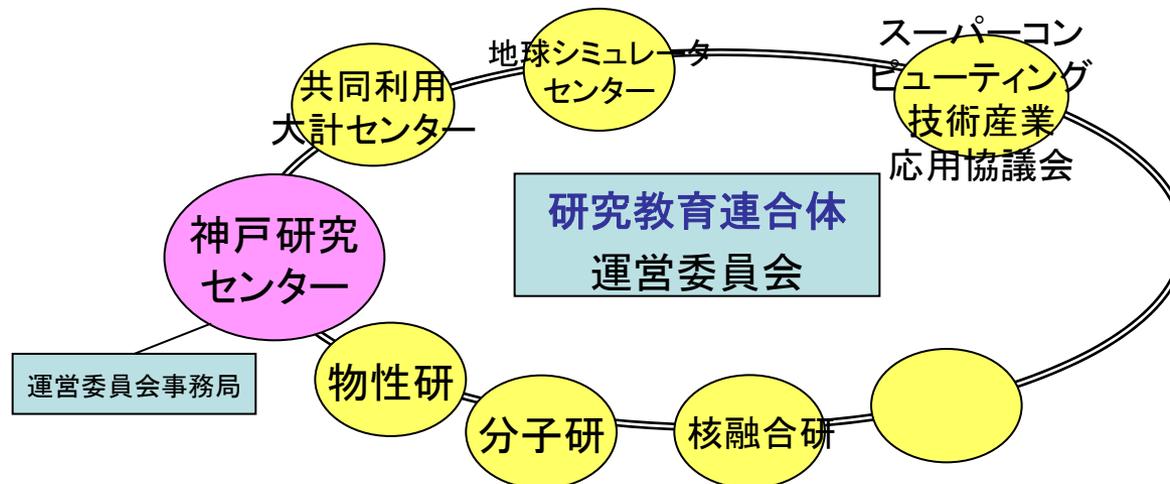
拠点形成に関する考え方

計算科学は将来の科学・技術を牽引するとともに、地球的規模の困難な課題の解決にも重要な貢献をすると期待されている。次世代スパコンプロジェクトはこうした期待を実現し、計算科学の更なる発展をもたらすものである。

ここに記す、拠点形成の考えは、上記のような次世代スパコンプロジェクトの役割を最大限引き出すことを目的とする立場からの提案である。従って、現時点での共用法のしぼりなどは敢えて考慮に入れていない。

研究教育連合体

集中と分散： 神戸研究センターを集中部分として、ネットワークで結ばれたAll Japanの分野拠点や情報基盤センターなどを分散とする。それら全体を有機的に機能させるために、研究教育連合体を設置する。その運営委員会の事務局を神戸研究センターに置く。



運営委員会： 第2層の各拠点（分野拠点、情報基盤センターなど）の代表者も参画する。

研究教育連合体の役割

- ① 世界最高レベルの計算科学 / 計算機科学研究の推進
- ② 計算科学・計算機科学の人材育成と教育
- ③ 計算科学コミュニティの強化、コミュニティの意見集約
- ④ 第1層(次世代スパコン)と第2層(共同利用・研究分野固有スパコンセンター)との連携の促進
- ⑤ 神戸研究センターの運営
- ⑥ 国際共同研究の推進
- ⑦ 計算科学全体の将来計画・企画(次々世代のスパコン構想など)に対する提言
- ⑧ 研究教育推進費の獲得と配分: 科研費、JSTプロジェクト、振興調整費等の中に計算科学の枠を作ることなどにより実現することが考えられる。

神戸研究センター(仮称)

位置づけ: 計算科学研究機構の中核的な研究センター

先端的研究開発:

- 計算科学・計算機科学・情報工学の連携
- 新アルゴリズムの開発
- 基盤的数値計算ライブラリーの開発
- 次々世代スパコンの研究・開発

} こうした活動に基づく高度のユーザサポート

融合交流の促進:

- 分野間交流、産学連携、国際協力

産学連携の促進のためには、SPring8にならってコーディネータを配置。後述の「研究支援データベース」を活用して、課題解決のための適切な手法、ソフトウェア、人材の提示を行う。課題解決の実際的な支援活動は、第2層における資源や人材を活用して行うことを前提とする。

データベース作製とデータ管理:

- 研究支援のため、ソフトウェアと人材に関する「研究支援データベース」の構築と管理
- 大規模計算の出力のアーカイブにより、他の研究者がそれを用いた解析を可能にする。これにより大規模計算の価値の向上を図る。(この活動は、第2層の分野拠点の担当とする可能性あり。)

知財管理:

- 産学連携の促進のためにも必須

教育・人材育成:

- 分野横断的教育のための集中的スクーリング

理解増進:

- 研究集会、広報等の企画立案

研究教育連合体運営委員会事務局

神戸研究センター(仮称)

位置づけ: 計算科学研究機構の中核的な研究センター
本センターの存在がなければ成り立たないような活動を行う。

