

JCPE から SCCJ へ

千葉工大経営情報 田辺 和俊

1. JCPE

日本化学プログラム交換機構(JCPE)は1989年に設立された。その設立趣意書には以下のように記されている。近年コンピュータ支援ドラッグデザインをはじめとして計算機化学的手法の化学研究への応用が産業界、学会をとわず急速に普及し、化学研究における思考方法の変革をもたらしつつある。これにともなって計算機化学関連のプログラムに対する需要が増大し、今後もふえ続ける見込みである。しかしこの分野における基本的なプログラムがすべて国外で作られたためもあり、わが国のユーザーはプログラムの入手を欧米のプログラム提供機関に完全に依存している。その結果として種々の不便が生じており、国内に米国のQCPEのようなプログラム交換機構の設立を望む声が強し。そこでQCPEをモデルとしてこのたび少数の計算機化学者のボランティア活動を基盤とする日本化学プログラム交換機構(JCPE)を発足させることにした。

この組織の主目的であるプログラム交換については、プログラムの登録123本、頒布総計2万本以上に達した。しかし最近ではインターネットの進歩により個人レベルでのプログラムの流通が容易になり、プログラム交換という当初の主目的は達成した。また計算化学の振興のために、雑誌(JCPE Newsletter および JCPE Journal)やマニュアルの出版、シンポジウム・討論会、セミナー・講習会の開催を行った。会員数は延べ個人2120名、企業359社(団体)、36社(賛助)に達した。

JCPEはこれらの活動により国内の計算化学分野の活性化に貢献してきた。しかし最近では当初のプログラム交換という目的よりもむしろこれらの活動が主目的になり、機構の名称がそぐわなくなってきた。そこでJCPEでは今後のあり方を審議した結果、JCPEは発展的に学会に脱皮することが望ましいとの結論に達した。しかし最近の経済情勢の悪化によりどの学会も会員数が激減し、健全な経営に苦闘している。またこの分野は研究者がそれほど多くないにもかかわらず関連する学会が乱立し、討論会発表やセミナー参加者や投稿論文を奪い合う事態となっている。そこで関連学会の大同団結を最終目標に、可能な学会から合併をすすめていくことにした。そこでJCPEは2001年12月31日をもって解散し、化学ソフトウェア学会と合併し、新学会「日本コンピュータ化学会(Society of Computer Chemistry, Japan)」として2002年1月1日から発足することになった。

2. コンピュータの進歩

コンピュータの進歩は計り知れない。回線電話が5千万台を達成するのに100年かかったが、携帯電話は10年で到達した。一昨年10月のシドニーオリンピックの公式ホームページ(<http://www.olympics.com>)は1日のアクセス数の世界新記録6億8千万件を記録し、開催期間中の総アクセス数は60億件以上であった。

この情報技術を支えるコンピュータも猛烈な速度で進展している。コンピュータの速度の進展についてはインテルのゴードン・ムーア会長が発見した「マイクロプロセッサは18ヶ月で2倍のトランジスタを集積す

る」という「ムーアの法則」がある。事実、世界最高クラスのコンピュータの演算速度は毎年約 2 倍近く伸びている(<http://www.top500.org>)。したがって、2010 年にはペタ(10^{15})フロップスのコンピュータが登場し、1990 年代のスパコンと同程度のパソコンがオフィスに現れる。さらに、2020 年にはエクサ(10^{18})フロップスのコンピュータの登場が期待されるが、現在の半導体素子ではそれが限界で、その先は別の素子に頼らざるを得ない。

3. コンピュータ化学の未来

このコンピュータの進歩に支えられて、21 世紀における化学はどこまで進展するだろうか。この未来予測についての調査報告によれば、課題として大規模計算(高分子などのメゾ系、溶液内反応など)をあげている。高機能の材料を設計するためには、原子・分子レベルのシミュレーション手法を用いて材料を構成するマクロな系について機能を予測することが必要になる。しかし現状のコンピュータの性能ではマクロな系のシミュレーションは不可能であるため、ミクロとマクロをブラックボックスに繋ぐ構造 - 活性相関や構造 - 物性相関の方法が新薬や新材料の開発に重用されている。またミクロとマクロを繋ぐマルチスケールモデリングが現在の研究課題の 1 つであり、土井プロジェクトで開発が進められているシ・ムレスズーミングもこれに該当する。

しかしコンピュータの演算速度が現在の年率 2 倍のまま未来も向上し続くと仮定すると、2050 年には 2^{50} 倍、すなわち 10^{16} 倍の高速化が見込まれる。そうなる则現在は 10^8 原子の分子動力学シミュレーションが可能なので、50 年後には 10^{24} 原子、つまり現実系のシミュレーションが可能になるかもしれない。そうなれば、無駄な実験が削減され、ナノテクノロジーやグリーンサステナブルケミストリの研究が効率的に行われるようになるであろう。

しかし、その頃でも課題は残っていると思われる。1 つは化学物質の薬理活性や毒性の予測に不可欠な生体内反応のシミュレーションである。情報技術と並んでバイオ技術も 21 世紀の重要課題であり、現在、ゲノム解析などに多大な資金が投入されているが、生体が解明つくされるのはいつになるかは予測できない。現在、日本では地球シミュレータの開発が進められているが、21 世紀の課題は生体シミュレータである。事実、ポストゲノムの課題の 1 つとして米国では「システム生物学」「インシリコバイオロジー」「バーチャル細胞学」などのアプローチが提案され、計画の立案が始まっている。

もう 1 つの課題は材料設計や反応設計などの最適解探索における数学的爆発問題である。これらの設計では 2 千万種類を越える化学物質の組み合わせの中から最適解を探索しなければならないが、この種の数学的爆発問題は有名な「巡回セールスマン問題(TSP)」など種々あり、これらの問題の解決はコンピュータの進歩でも追いつかない。しかし、材料開発や有機合成の専門家は直感と経験によりこの難問を解決してきた。チェスの世界名人をうち破るコンピュータが登場する時代であるが、人間の頭脳をもつコンピュータの開発はまだ至難である。以前から人工知能の、最近では脳型コンピュータの研究が行われているが、化学エキスパートシステムの開発も 21 世紀の課題である。