

計算機シミュレーションによる 研究を振り返って(その3)

岡本 祐幸(おかもと ゆうこう)

名古屋大学
情報基盤センター 大規模計算支援環境研究部門
国際本部 グローバル・エンゲージメントセンター
e-mail: okamoto@cc.nagoya-u.ac.jp

URL: <https://yuko-okamoto.github.io/homepage/index.shtml>

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

1995年4月に私は奈良女から岡崎国立共同研究機構(現自然科学研究機構)分子科学研究所(分子研)の助教授に転任しました(総合研究大学院大学助教授を併任)。分子科学研究所は教授と助教授が独立で、PIとして自由に研究ができました。また、助手を1名つけてくれました。



最初の理論研究系の陣容は以下の通りでした。

理論第一研究部門: 岩田末廣(教授)、岡本祐幸(助教授)

理論第二研究部門: 中村宏樹(教授、研究主幹)、谷村吉隆(助教授)

理論第四研究部門: 平田文男(教授)、米満賢治(助教授)

岡本研の歴代助手:

Ulrich H. E. Hansmann (1996年5月—1998年2月)

杉田有治(1998年9月—2002年3月)

奥村久士(2002年10月—2006年3月)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

まず、分子研時代の岡本グループのメンバーの集合写真を紹介しましょう。



Academic Year 1996



Academic Year 1997

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)



Academic Years 1998↑ & 2003↓



Academic Years 2000↑ & 2004↓



7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

私は分子研に着任するにあたって、以下のことを目標としました。

- (1) これまでは、素粒子論屋が片手間で蛋白質のシミュレーションに参入してきたが、これからは、この分野の本流(計算化学)に入っていく。
分子研は計算化学のメッカなので、分子研にいるだけで、この分野の多くの人と交流できるが、**海外の計算化学屋と知り合いになる**必要がある。
- (2) 計算化学として認められるには、これまで水溶液に大胆に近似を適用していたが、これからは**原子分子の詳細を考慮する水分子を導入**する必要がある。
 - * **平田文男**さんと**木下正弘**さん(京大)との共同研究(RISMとモンテカルロ法の合体)
 - * 水分子(TIP3P)をあらわに**分子動力学シミュレーション**に取り入れる。
- (3) これまでやってきたモンテカルロシミュレーションに加え、**分子動力学シミュレーション**を実行できるようになる必要がある(**杉田**助手、**奥村**助手)。
- (4) マルチカノニカル法は強力だが、それを実行するには熟練が必要。
誰でも使える拡張アンサンブル法を開発する必要がある。

分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

212th ACS National Meeting at Orlando, Florida,
August 25-29, 1996

初めてアメリカの計算化学者と知り合いました。出席したシンポジウムで発表していた、論文でのみ名前を知っていた **Deve**

Thirumalai (当時 University of Maryland、後に University of Texas at Austin) と

John Straub (Boston University) を誘い、

Hansmann と4人でランチを食べたのです。



Hansmann



(名大の岡本の居室にて、右から **Straub**、**Thirumalari**、岡本; 2014年1月17日)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

214th ACS National Meeting at Las Vegas, Nevada,
September 7-11, 1997

このACS Meetingには同じ分子研の**平田文男**さんが招待講演に招かれていたので、私はポスター発表をすることにしました。**平田**さんが有名なアメリカの計算化学者と一緒にランチに行くのについて行き、私を紹介してくれました。この時、知り合ったのが、**Ron Levy**、**Bernard Brooks**、**Charles Brooks, III**などなどです。

翌日の私のポスターには誰も来ませんでした。が、**Charlie Brooks**が私の前を通ったので、呼び止めて、私のポスターの説明を聞いてもらいました。



平田文男教授



Charles L. Brooks, III

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

214th ACS National Meeting at Las Vegas, Nevada,
September 7-11, 1997

Charlieは私のポスターの内容に、初めから終わりまで、徹底的に批判しました。

Charlie: *I don't believe your results because the force field you used is no good. You should include explicit water molecules, and so on and so on.*

私は、昨日初めて会ったばかりなのに、失礼な人だなあと思いました。

ところが、私の説明が終わった時に、**Charlie**がニコツと笑って、「私はまだ日本に行ったことがないので、機会があれば招待してね。」と言ったので、思わず笑ってしまい、仲良くなりました。



Charlie Brooks

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

その機会はすぐにやってきました。確か、その年度の終わりに(予算が余ったのか)、**伊藤光男**分子研所長が、海外から研究者を1人、約1週間招待する追加予算を配分してくれることになったので、私は手を挙げました。**伊藤**所長は言いました。

伊藤所長: *海外の大御所を招ぶより、同年代の若い人を招びなさい。そうすれば、長い間研究の交流ができるから。*

私は**Charlie**は同い年だし、招待を頼まれていたので、迷わず、彼を招待しました。



Charlie Brooks

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

一度分子研に来てから、Charlie Brooksは何度も再訪しました。ある時、驚かしてやろうと思って、岡本グループがいつも忘年会などの宴会に使っていた和食店「阿妻」のオーナーシェフの浜島正文・弘美ご夫妻と相談して、「阿妻」でフグ尽しの料理でBrooksの歓迎会を開きました。Charlieはフグは危険だから家族から食べないようにと言われていたので、自分は食べないと抵抗しました。料理が運ばれてきて、我々研究室のメンバーは皆食べ始めましたが、Charlieは食べません。フグ以外は何もないので、彼はビールを飲むだけでした。その後、約20分経った頃、彼はチラッと腕時計を見ました。そして、誰も倒れていないのを確認してから、猛然と食べ始めたので、皆で大笑いしました。残念ながらその時の写真が見つかりませんでした。次のスライドで「阿妻」での写真を何枚かお見せします。



Charlie Brooks

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

* 「阿妻」での宴会風景

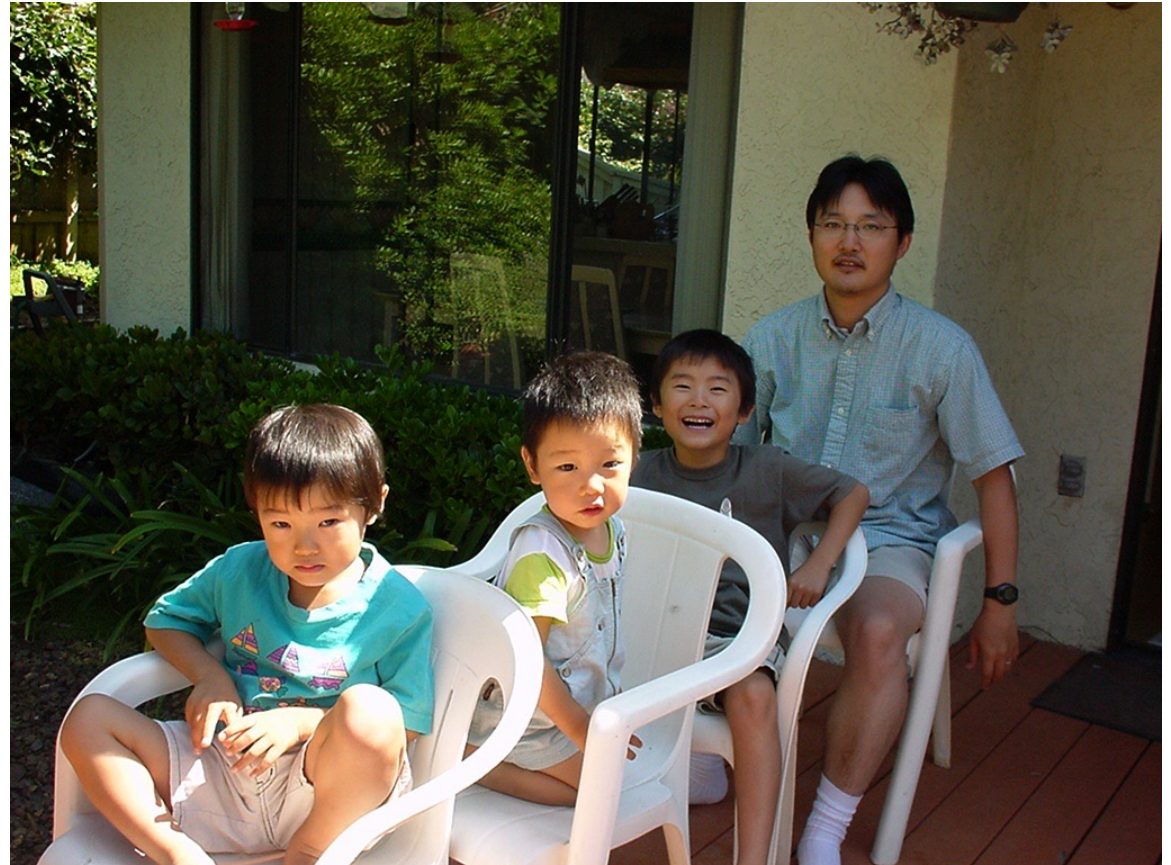


7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

2001年8月、米国カリフォルニア州San Diegoの隣のLa JollaのScripps研究所のCharlie Brooks教授を訪問しました(私は2週間、杉田有治さんは3週間)。



Charlie Brooks



Charlieの家で、杉田有治氏と杉田・岡本両家の息子達

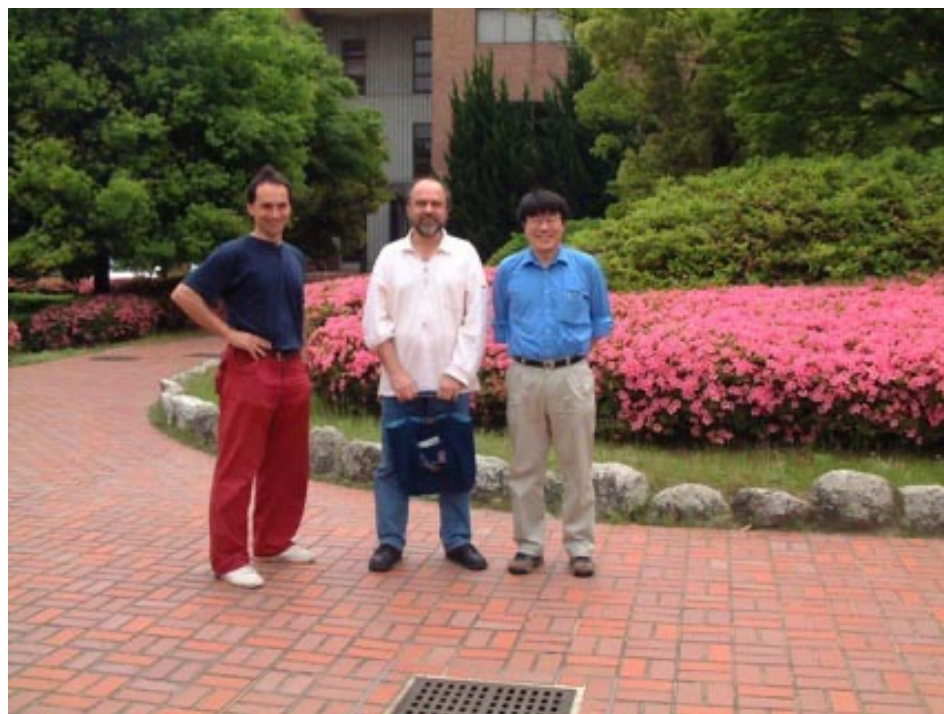
7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

最初のCharlie Brooksに続いて分子研時代の岡本グループを訪問した海外の研究者達の例

[2000年5月-8月]

Yasuyuki Ishikawa

(U. Puerto Rico)



From left:

[2002年5月] **Giovanni La Penna**
(ICCOM, Italy),

[2002年4月-6月] **Bernd A. Berg**
(Florida State U., USA)



[2003年11月など]

John Straub (Boston U., USA)

4. Generalized-Ensemble Algorithms (拡張アンサンブル法) (MUCA, ST, and REM)

Generalized-Ensemble Algorithm (拡張アンサンブル法)

* **Generic Term (総称) for Simulation Methods that Greatly Enhance**

Conformational Sampling [e.g., **Multicanonical Algorithm, Wang-Landau, Simulated Tempering, Replica-Exchange Method**, etc.]

* **Based on Non-Boltzmann Weight Factor (非ボルツマン因子に基づく)**

Realize random walks (酔歩) in potential energy space and/or any other physical quantities (物理量) (OR their conjugate parameters (共役パラメータ))

* **Histogram Reweighting Techniques (ヒストグラム再重法)**

Can obtain thermodynamic quantities for a wide range of temperature from a single simulation run by reweighting

REVIEWS: U.H.E. Hansmann & Y.O., *Curr. Opin. Struct. Biol.* **9**, 177 (1999);

A. Mitsutake, Y. Sugita, & Y.O., *Biopolymers* **60**, 96 (2001);

H. Okumura, S.G. Itoh, & Y.O., in *Practical Aspects of Computational Chemistry II: An Overview of the Last Two Decades and Current Trends*,

J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.) (Springer, Dordrecht, 2012) pp. 69-101;

A. Mitsutake, Y. Mori, and Y.O., in *Biomolecular Simulations: Methods and Protocols*, L. Monticelli and E. Salonen (eds.) (Humana Press, New York, 2012) pp. 153-195;

岡本祐幸、「拡張アンサンブル法」、古橋武・笹井理生 編、*計算科学講座 第9巻*

「超多自由度系の最適化」第2章(共立出版, 2013) pp. 119-241;

Y.O., in *Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions*, M. Terazima, M. Kataoka, R. Ueoka, & Y.O. (eds.) (Springer, Tokyo, 2016) pp. 183-204;

Y.O., *Biophysics and Physicobiology* **16**, 344-366 (2019).

Multicanonical Algorithm (MUCA) (マルチカノニカル法)

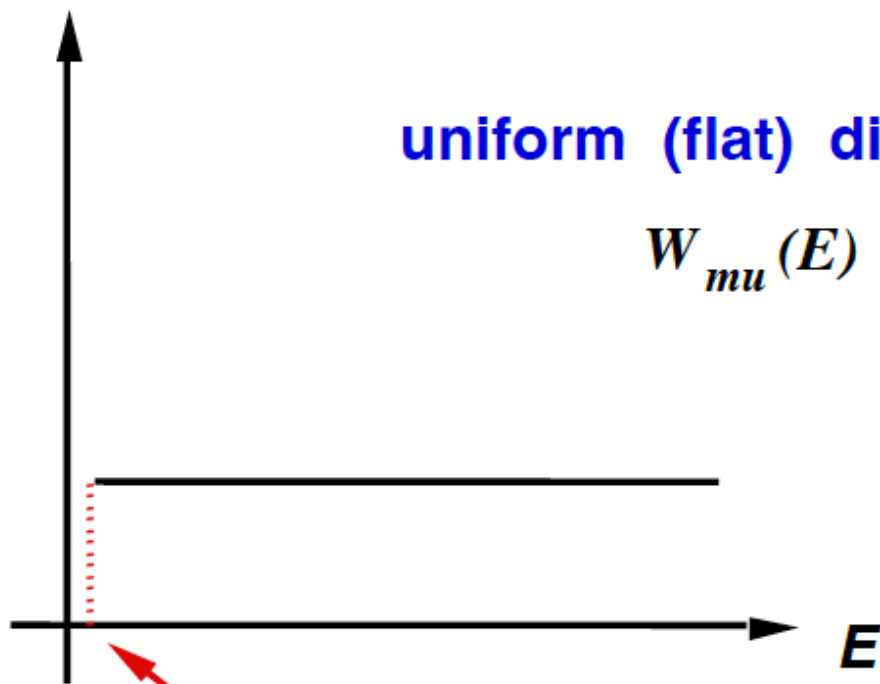
B. Berg & T. Neuhaus, *Phys. Lett.* **B267**, 249 (1991).

B. Berg & T. Neuhaus, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 9 (1992).

$$P_{mu}(E) = n(E)W_{mu}(E) = \text{const}$$

uniform (flat) distribution in energy

$$W_{mu}(E) = n(E)^{-1}$$



E_{min}

Random Walk in Energy Space

It is also referred to as Entropic Sampling:

J. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 211 (1993); *ibid.* **71**, 2353 (E) (1993).

Canonical Ensemble

MC version:

$$W_B(x; T) = e^{-\beta E(x)}$$

$$w(x \rightarrow x') = \min \left(1, \frac{W_B(E'; T)}{W_B(E; T)} \right) = \min (1, \exp(-\beta \Delta E))$$

Multicanonical Ensemble

MC version:

$$W_{\text{mu}}(E) = \frac{1}{n(E)}$$

$$w(x \rightarrow x') = \min \left(1, \frac{W_{\text{mu}}(E')}{W_{\text{mu}}(E)} \right) = \min \left(1, \frac{n(E)}{n(E')} \right)$$

Generalized-Ensemble Algorithms have been developed in MC algorithms

Canonical Ensemble

MD version:

$$\left\{ \begin{array}{l} m\ddot{\mathbf{q}}_i = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}_i} - \frac{\dot{s}}{s} m\dot{\mathbf{q}}_i = \mathbf{f}_i - \frac{\dot{s}}{s} m\dot{\mathbf{q}}_i \\ Q\ddot{s} = s \left[\sum_i m\dot{\mathbf{q}}_i^2 - 3Nk_B T \right] + Q \frac{\dot{s}^2}{s} \end{array} \right. \quad W_B(x; T) = e^{-\beta E(x)}$$

Multicanonical Ensemble

MD version:

$$W_{mu}(E) = \frac{1}{n(E)} = \exp(-\beta_0 E_{mu}(E))$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m\ddot{\mathbf{q}}_i = -\frac{\partial E_{mu}}{\partial \mathbf{q}_i} - \frac{\dot{s}}{s} m\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial E_{mu}}{\partial E} \mathbf{f}_i - \frac{\dot{s}}{s} m\dot{\mathbf{q}}_i \\ Q\ddot{s} = s \left[\sum_i m\dot{\mathbf{q}}_i^2 - 3Nk_B T_0 \right] + Q \frac{\dot{s}^2}{s} \end{array} \right.$$

U. Hansmann, Y.O. & F. Eisenmenger, *Chem. Phys. Lett.* **259**, 321 (1996);
N. Nakajima, H. Nakamura & A. Kidera, *J. Phys. Chem. B* **101**, 817 (1997).

MULTICANONICAL ALGORITHM

B. Berg & T. Neuhaus, *Phys. Lett.* **B267**, 249 (1991).

B. Berg & T. Neuhaus, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 9 (1992).

Step 1: Iterations of Short Preliminary Runs to
Determine the Multicanonical Weight Factor $W_{mu}(E)$

Step 2: **One** Long Production Run

Step 3: Analyze the Data to Obtain:

- * Global-Minimum Energy Configuration
- * Thermodynamic Quantities for Desired Temperatures
(by Ferrenberg-Swendsen **Single-Histogram
Reweighting Techniques (単ヒストグラム再重法)**)

$$P_C(E; T) \propto P_{mu}(E) \frac{W_B(E; T)}{W_{mu}(E)}$$

MULTICANONICAL ALGORITHM

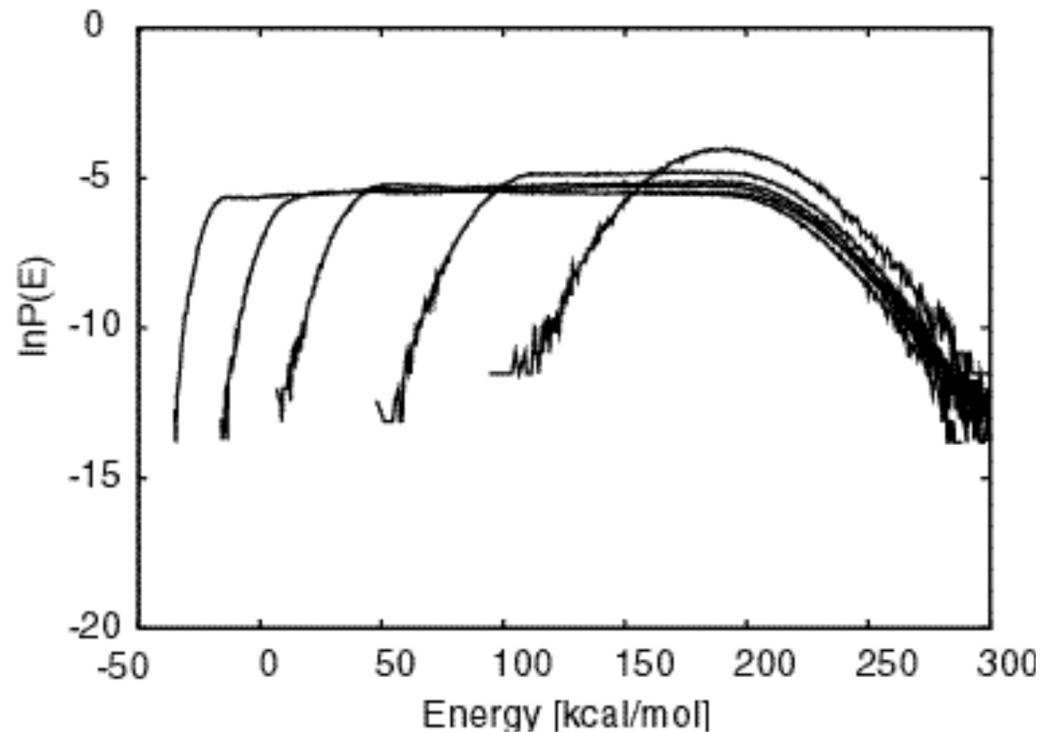
Step 1: Determination of Multicanonical Weight Factor
 $W_{mu}(E)$

$$W(E) = \ln n(E) = \beta_0 E + \ln P_c(E, \beta_0)$$

$$W^{i+1}(E) = W^i(E) + \ln P_{mc}^i(E)$$

This step becomes non-trivial as the system becomes complex.

Wang-Landau method is particularly useful in this step:



F. Wang & D. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001);
Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

Single-Histogram Reweighting Techniques (単ヒストグラム再重法)

A. Ferrenberg & R. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_E A(E) P_C(E; T)}{\sum_E P_C(E; T)} = \frac{\sum_E A(E) n(E) e^{-\beta E}}{\sum_E n(E) e^{-\beta E}}$$

Here, the density of states $n(E)$ is obtained from the histogram of the energy distribution $N_{mu}(E)$ that was obtained from the **production run of the multicanonical simulation**:

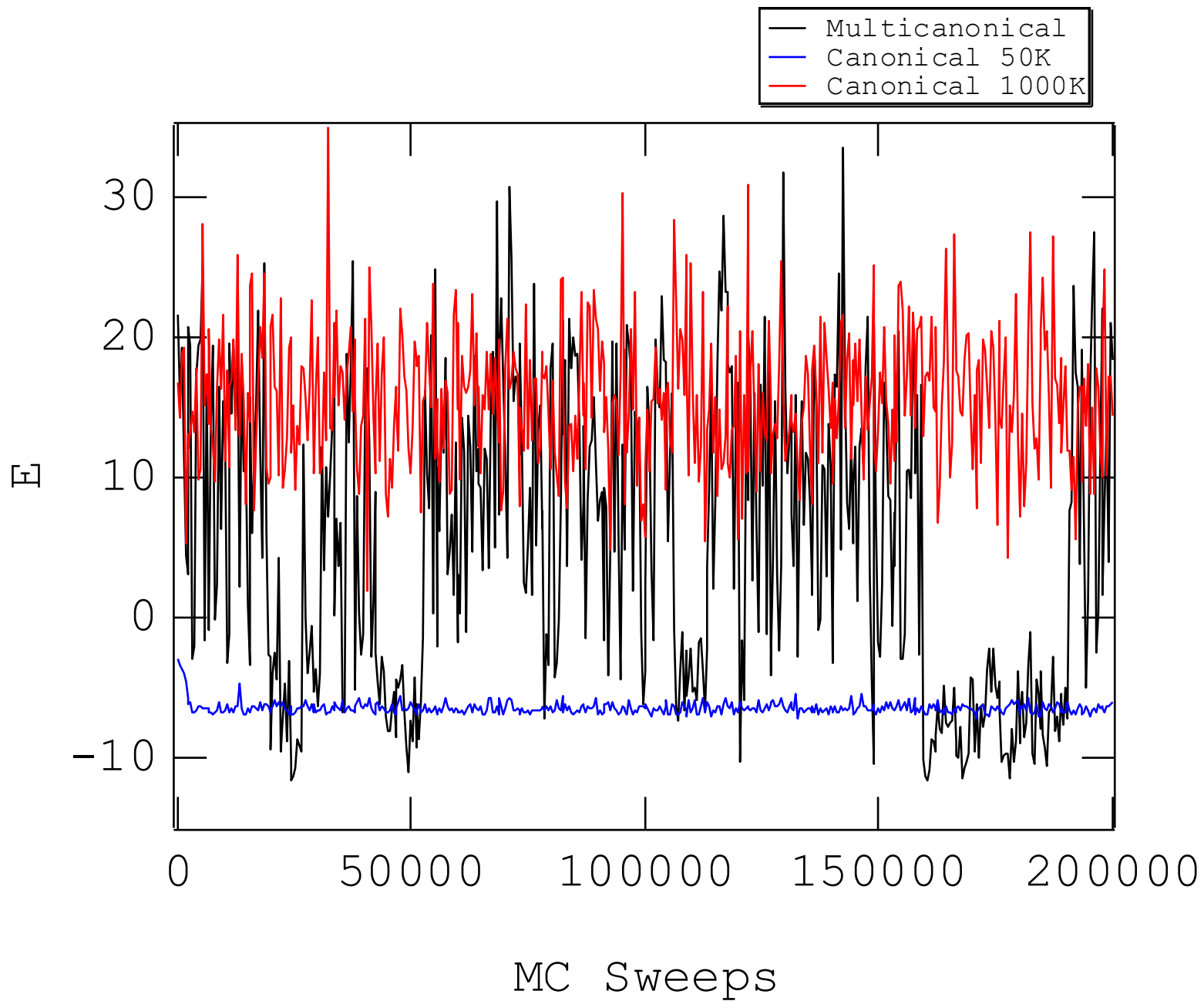
$$n(E) = \frac{N_{mu}(E)}{W_{mu}(E)}, \quad \text{where} \quad N_{mu}(E) = n(E) W_{mu}(E) .$$

Single-Histogram Reweighting Techniques (単ヒストグラム再重法)

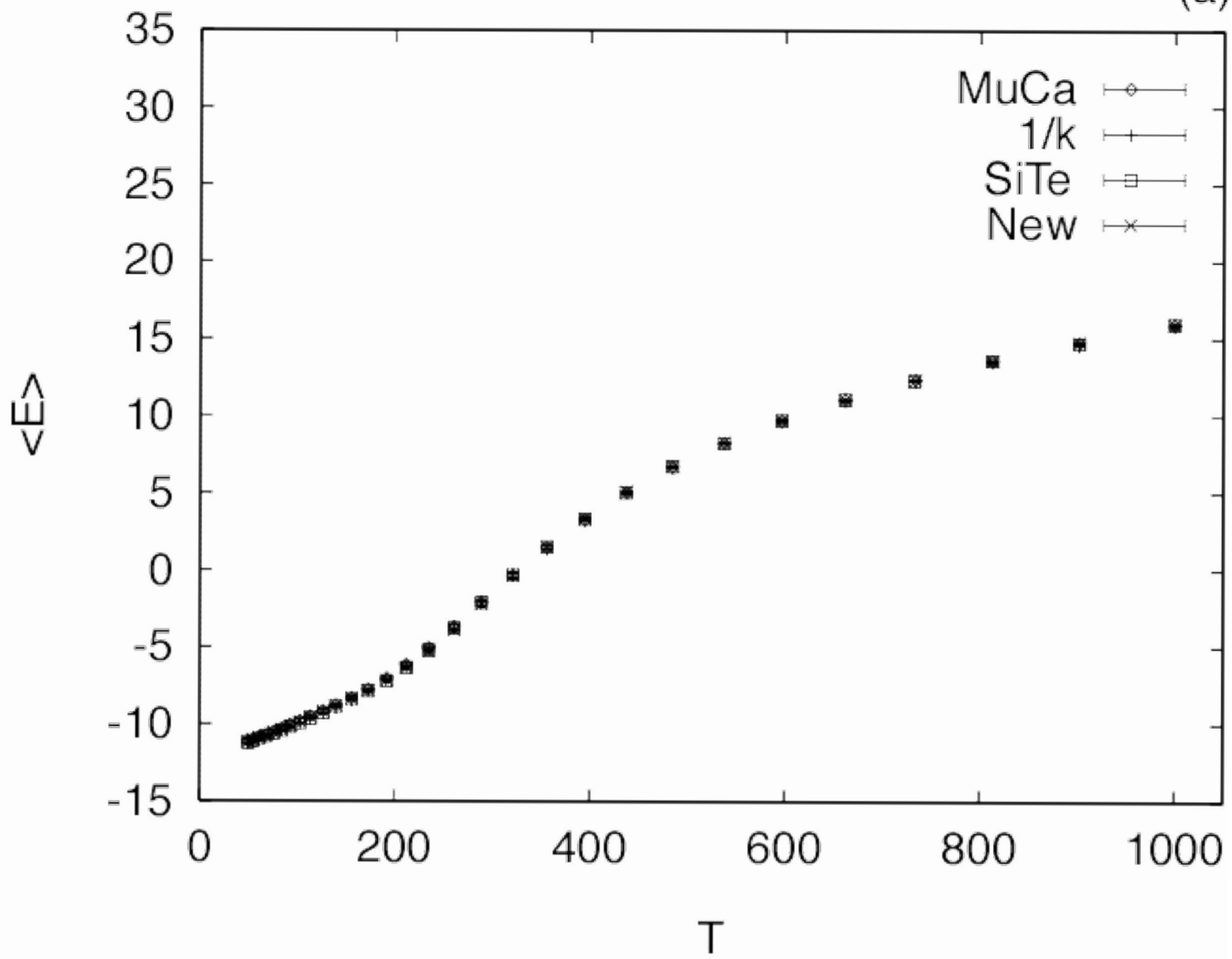
A. Mitsutake, Y. Sugita & Y.O., *J. Chem. Phys.* **118**, 6664 (2003).

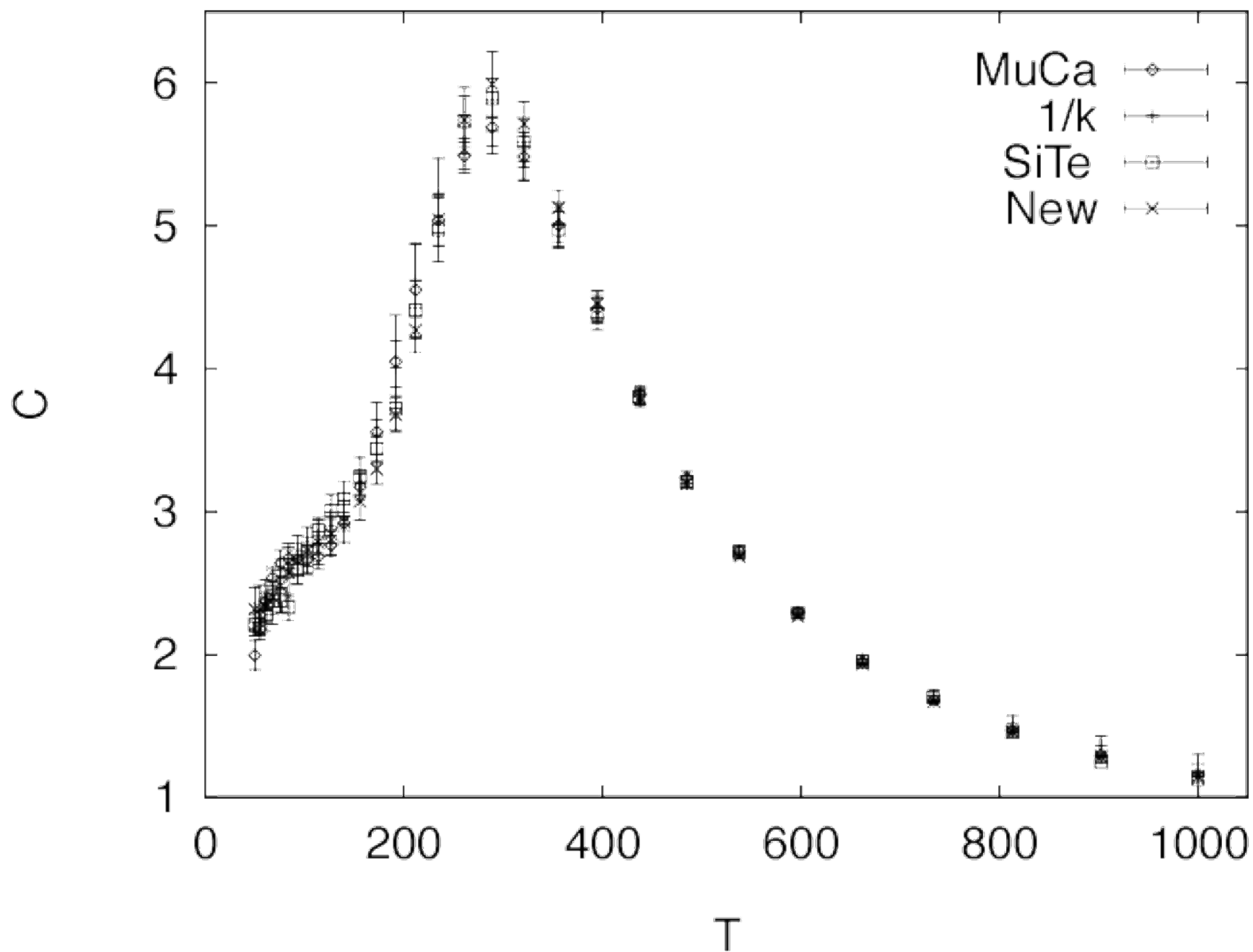
When the physical quantity A cannot be written as a function of E , we use the following equation:

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_{x_k} A(x_k) W_{mu}^{-1}(E(x_k)) \exp(-\beta E(x_k))}{\sum_{x_k} W_{mu}^{-1}(E(x_k)) \exp(-\beta E(x_k))}$$



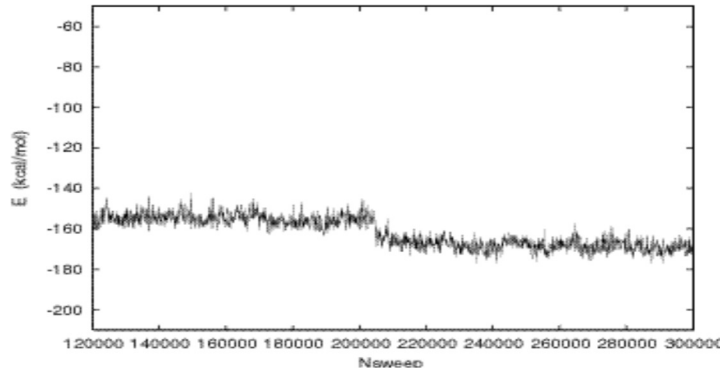
(a)



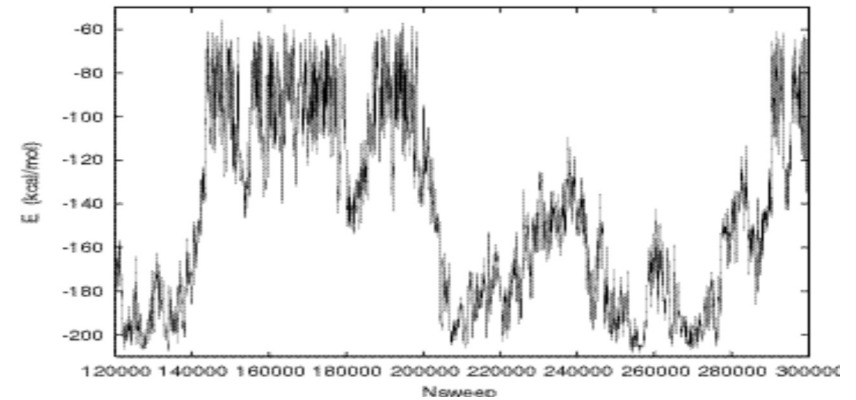


17個のアミノ酸からなるペプチド

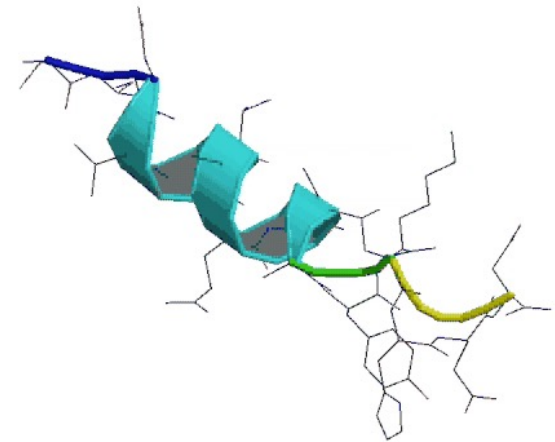
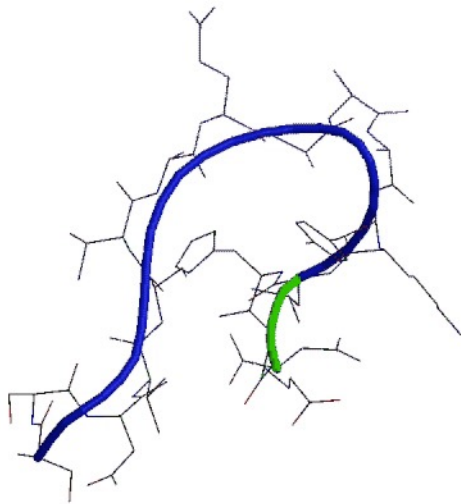
Simulation and movie by A. Mitsutake



Canonical MC: $T = 200$ K



Multicanonical MC



Simulated Tempering (ST) (焼き戻し法)

A.P. Lyubartsev, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **96**, 1776 (1992).

E. Marinari and G. Parisi, *Europhys. Lett.* **19**, 451 (1992).

Temperature becomes a dynamical variable: Sample temperature uniformly

$$W_{ST}(E; T) = \exp(-\beta E + a(T))$$

$$P_{ST}(T) = \int dE n(E) \exp(-\beta E + a(T)) = \text{const}$$

Random Walk in Temperature Space

→ Random Walk in Energy Space

Discretize Temperature:

$$W_{ST}(E; T_m) = \exp(-\beta_m E + a_m)$$

$$T_m \quad (m = 1, \dots, M)$$

$$\exp(-a_m) \propto \int dE n(E) \exp(-\beta_m E)$$

a_m : Dimensionless Helmholtz free energy at temperature T_m

a_m is determined by iteration of short ST runs

This weight determining process can be very tedious and time-consuming.

A. Irback & F. Potthast, *J. Chem. Phys.* **103**, 10298 (1995).

U. Hansmann & Y.O., *J. Comput. Chem.* **18**, 920 (1997).

Metropolis Criterion (メトロポリス判定)

$$w(x_j \rightarrow x_k) = \begin{cases} 1 & , \text{ if } P_{\text{eq}}(x_k) \geq P_{\text{eq}}(x_j) \\ \frac{P_{\text{eq}}(x_k)}{P_{\text{eq}}(x_j)} & , \text{ if } P_{\text{eq}}(x_k) < P_{\text{eq}}(x_j) \end{cases}$$
$$= \min \left(1, \frac{P_{\text{eq}}(x_k)}{P_{\text{eq}}(x_j)} \right)$$

N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller & E. Teller,
J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

Simulated Tempering (ST) (焼き戻し法)

A.P. Lyubartsev, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **96**, 1776 (1992).

E. Marinari and G. Parisi, *Europhys. Lett.* **19**, 451 (1992).

1. Simulated Tempering

Step 1: Canonical MC/MD Simulation at a Fixed Temperature

Step 2: **Temperatures** is Updated to a Neighboring Value

a la Metropolis

$$w(T_m \rightarrow T_{m\pm 1}) = \min \left(1, \frac{W_{\text{ST}}(E; T_{m\pm 1})}{W_{\text{ST}}(E; T_m)} \right) = \min (1, \exp(-\Delta))$$

$$\Delta = (\beta_{m\pm 1} - \beta_m) E - (a_{m\pm 1} - a_m)$$

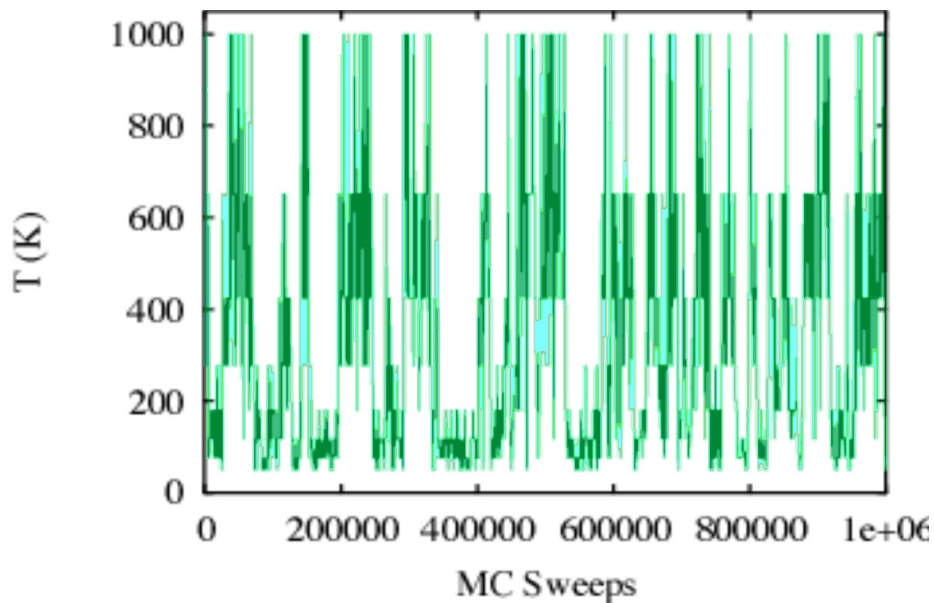
Repeat These 2 Steps

2. Canonical Distribution at Any **Temperature**

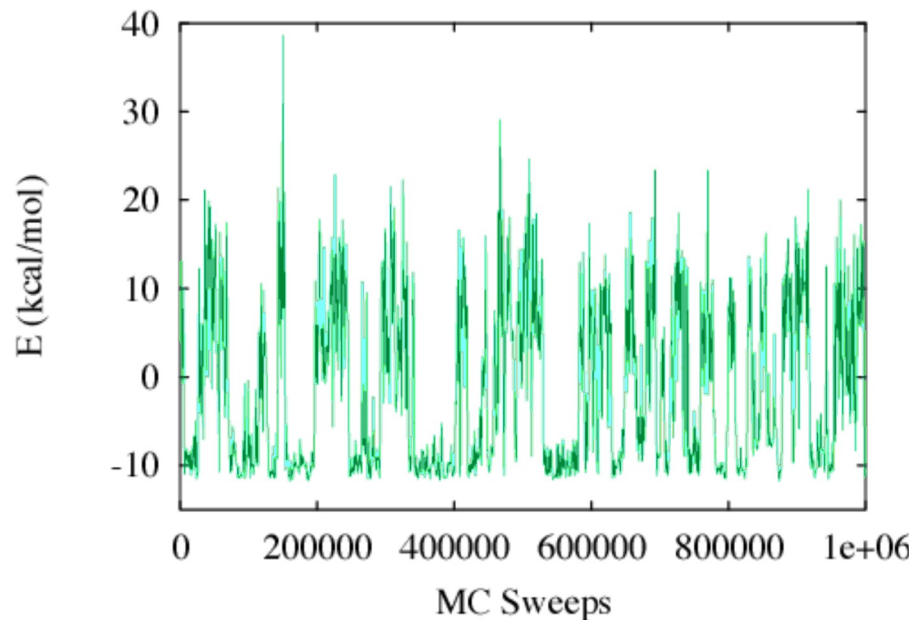
by **Multiple Histogram Reweighting Techniques (WHAM)**

Simulated Tempering (ST) (焼き戻し法)

Time Series of Temperature



Time Series of Potential Energy



(Cf. Global Minimum: -12.2 kcal/mol)

Random Walk in Temperature

Random Walk in Energy

A. Mitsutake & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **332**, 131 (2000).

Expectation Values of a Physical Quantity A at Temperatures

$$T_m \quad (m = 1, \dots, M)$$

$$\langle A \rangle_{T_m} = \frac{1}{n_m} \sum_{k=1}^{n_m} A(x_m(k))$$

where n_m are the total number of samples obtained at T_m .

Multiple-Histogram Reweighting Techniques (Weighted Histogram Analysis Method: WHAM) (多ヒストグラム再重法)

A. Ferrenberg & R. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989); S. Kumar, D. Bouzida, R. Swendsen, P. Kollman & J. Rosenberg, *J. Comput. Chem.* **13**, 1011 (1992).

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_E A(E) n(E) e^{-\beta E}}{\sum_E n(E) e^{-\beta E}}$$

Given M set of histograms $N_m(E)$, which were obtained at T_m , the following WHAM equations are solved iteratively for density of states $n(E)$ and dimensionless Helmholtz free energy f_m : (n_m are the total number of samples obtained at T_m)

$$n(E) = \frac{\sum_{m=1}^M N_m(E)}{\sum_{m=1}^M n_m e^{f_m - \beta_m E}}, \text{ where } e^{-f_m} = \sum_E n(E) e^{-\beta_m E}.$$

Multiple-Histogram Reweighting Techniques (Weighted Histogram Analysis Method: WHAM) (多ヒストグラム再重法)

A. Mitsutake, Y. Sugita & Y.O., *J. Chem. Phys.* **118**, 6664 (2003).

When the physical quantity A cannot be written as a function of E , we first obtain the dimensionless Helmholtz free energy f_m ($m = 1, \dots, M$) by solving the WHAM equations. We then use the following equation:

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{n_m} A(x_m(k)) \frac{1}{\sum_{\ell=1}^M n_\ell \exp [f_\ell - \beta_\ell E(x_m(k))]} \exp [-\beta E(x_m(k))]}{\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{n_m} \frac{1}{\sum_{\ell=1}^M n_\ell \exp [f_\ell - \beta_\ell E(x_m(k))]} \exp [-\beta E(x_m(k))]}$$

Replica-Exchange Method (REM) (レプリカ交換法)

(also referred to as **Parallel Tempering**)

MC: K. Hukushima & K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604 (1996).

MD: Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).

1. System

M **Non-Interacting Replicas** of the Original System at M Different **Temperatures**

2. Replica-Exchange

Step 1: Independent Canonical Simulations Performed for Each **Replica**

Step 2: A Pair of **Replicas** (i and j) Corresponding to Neighboring

Temperatures (T_m and T_n) (i.e., $n=m+1$) are Exchanged *a la* **Metropolis**

$$w \left(x_m^{[i]} \mid x_n^{[j]} \right) = \min \left(1, \frac{W_{\text{REM}}(X')}{W_{\text{REM}}(X)} \right) = \min (1, \exp (-\Delta))$$

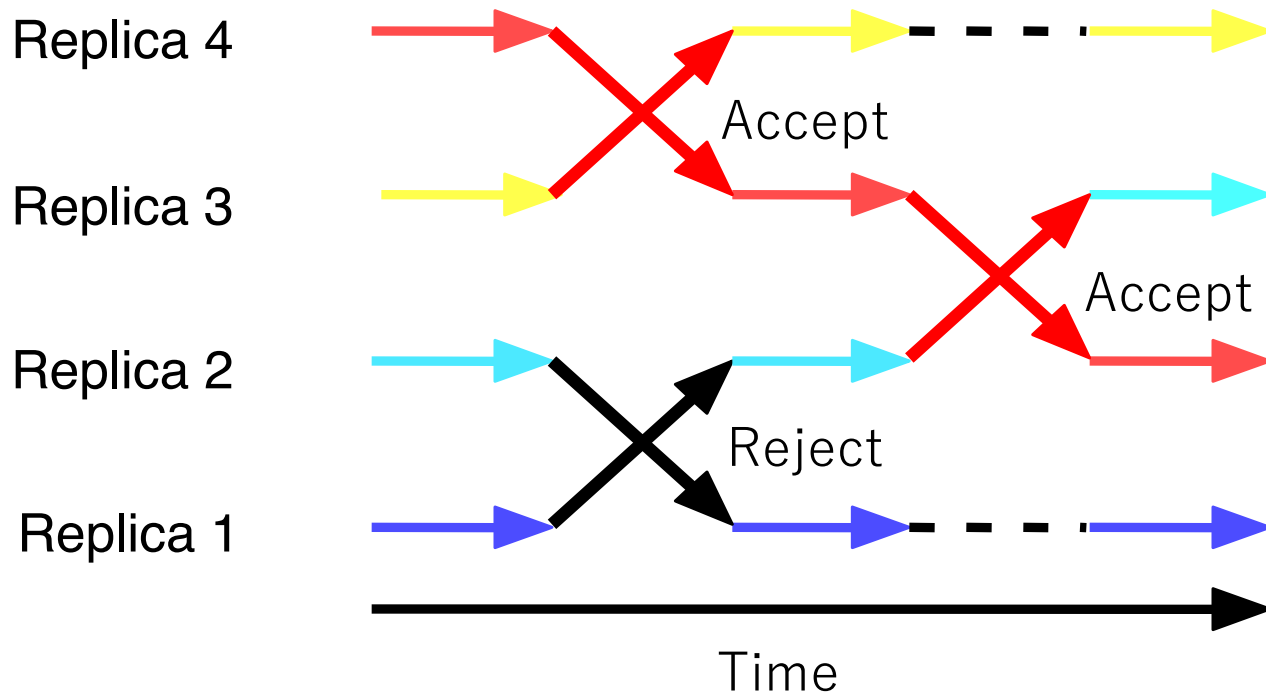
$$\Delta = (\beta_m - \beta_n) \left(E \left(q^{[j]} \right) - E \left(q^{[i]} \right) \right)$$

Repeat These 2 Steps

3. Canonical Distribution at Any **Temperature**

by **Multiple Histogram Reweighting Techniques (WHAM)**

Replica-Exchange Method (レプリカ交換法)



Particularly Suitable for Parallel Computers

Replica-Exchange MD (REMD)

(レプリカ交換分子動力学法)

Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).

1. Probability Distribution of the Generalized Ensemble

$$W_{REM}(\{X\}) = \exp\left\{-\sum_{m=1}^M \beta_m H(q^{i(m)}, p^{i(m)})\right\}, \text{ where } H(q, p) = K(p) + E(q)$$

2. Exchange a pair of replicas i and j at T_m and T_n , respectively

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_m^{[j]'} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]'})_m, \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_n^{[i]'} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]'})_n, \end{cases}$$

3. Detailed Balance Condition

$$W_{REM}(\{X\})w(X \rightarrow X') = W_{REM}(\{X'\})w(X' \rightarrow X)$$

4. Velocity Scaling

$$p^{i(n)} \equiv \sqrt{\frac{\beta_m}{\beta_n}} p^{i(m)}, p^{j(m)} \equiv \sqrt{\frac{\beta_n}{\beta_m}} p^{j(n)}$$

5. Transition Probability

$$w(X \rightarrow X') = \begin{cases} 1 & \text{for } \Delta < 0 \\ \exp(-\Delta) & \text{for } \Delta > 0 \end{cases}, \text{ where } \Delta = (\beta_n - \beta_m)(E(q^{(i)}) - E(q^{(j)}))$$

Metropolis Criterion (メトロポリス判定)

$$w(x_j \rightarrow x_k) = \begin{cases} 1 & , \text{ if } P_{\text{eq}}(x_k) \geq P_{\text{eq}}(x_j) \\ \frac{P_{\text{eq}}(x_k)}{P_{\text{eq}}(x_j)} & , \text{ if } P_{\text{eq}}(x_k) < P_{\text{eq}}(x_j) \end{cases}$$
$$= \min \left(1, \frac{P_{\text{eq}}(x_k)}{P_{\text{eq}}(x_j)} \right)$$

N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller & E. Teller,
J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

Metropolis Criterion for Replica Exchange

Suppose we exchange replicas i and j which are at temperatures T_m and T_n , respectively:

$$X = \left\{ \dots, x_m^{[i]}, \dots, x_n^{[j]}, \dots \right\} \rightarrow X' = \left\{ \dots, x_m^{[j]'}, \dots, x_n^{[i]'}, \dots \right\}.$$

where

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_m^{[j]'} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]'})_m, \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_n^{[i]'} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]'})_n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} p^{[i]'} \equiv \sqrt{\frac{T_n}{T_m}} p^{[i]}, \\ p^{[j]'} \equiv \sqrt{\frac{T_m}{T_n}} p^{[j]}, \end{cases}$$

Cf.

$$K(p) = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m_k}$$

Metropolis Criterion for Replica Exchange

$$w(X \rightarrow X') \equiv w\left(x_m^{[i]} \mid x_n^{[j]}\right) = \min\left(1, \frac{W_{\text{REM}}(X')}{W_{\text{REM}}(X)}\right) = \min(1, \exp(-\Delta))$$

where

$$\frac{W_{\text{REM}}(X')}{W_{\text{REM}}(X)}$$

$$= \exp\left\{-\beta_m \left[K(p^{[j]'}) + E(q^{[j]})\right] - \beta_n \left[K(p^{[i]'}) + E(q^{[i]})\right] + \beta_m \left[K(p^{[i]}) + E(q^{[i]})\right] + \beta_n \left[K(p^{[j]}) + E(q^{[j]})\right]\right\},$$

$$= \exp\left\{-\beta_m \frac{T_m}{T_n} K(p^{[j]}) - \beta_n \frac{T_n}{T_m} K(p^{[i]}) + \beta_m K(p^{[i]}) + \beta_n K(p^{[j]}) - \beta_m \left[E(q^{[j]}) - E(q^{[i]})\right] - \beta_n \left[E(q^{[i]}) - E(q^{[j]})\right]\right\}.$$

$$\Delta = \beta_m \left(E(q^{[j]}) - E(q^{[i]})\right) - \beta_n \left(E(q^{[j]}) - E(q^{[i]})\right),$$

$$= (\beta_m - \beta_n) \left(E(q^{[j]}) - E(q^{[i]})\right).$$

Expectation Values of a Physical Quantity A at Temperatures

$$T_m \quad (m = 1, \dots, M)$$

$$\langle A \rangle_{T_m} = \frac{1}{n_m} \sum_{k=1}^{n_m} A(x_m(k))$$

where n_m are the total number of samples obtained at T_m .

Multiple-Histogram Reweighting Techniques (Weighted Histogram Analysis Method: WHAM) (多ヒストグラム最重法)

A. Ferrenberg & R. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989); S. Kumar, D. Bouzida, R. Swendsen, P. Kollman & J. Rosenberg, *J. Comput. Chem.* **13**, 1011 (1992).

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_E A(E) n(E) e^{-\beta E}}{\sum_E n(E) e^{-\beta E}}$$

Given M set of histograms $N_m(E)$, which were obtained at T_m , the following WHAM equations are solved iteratively for density of states $n(E)$ and dimensionless Helmholtz free energy f_m : (n_m are the total number of samples obtained at T_m)

$$n(E) = \frac{\sum_{m=1}^M N_m(E)}{\sum_{m=1}^M n_m e^{f_m - \beta_m E}}, \text{ where } e^{-f_m} = \sum_E n(E) e^{-\beta_m E}.$$

Multiple-Histogram Reweighting Techniques (Weighted Histogram Analysis Method: WHAM) (多ヒストグラム最重法)

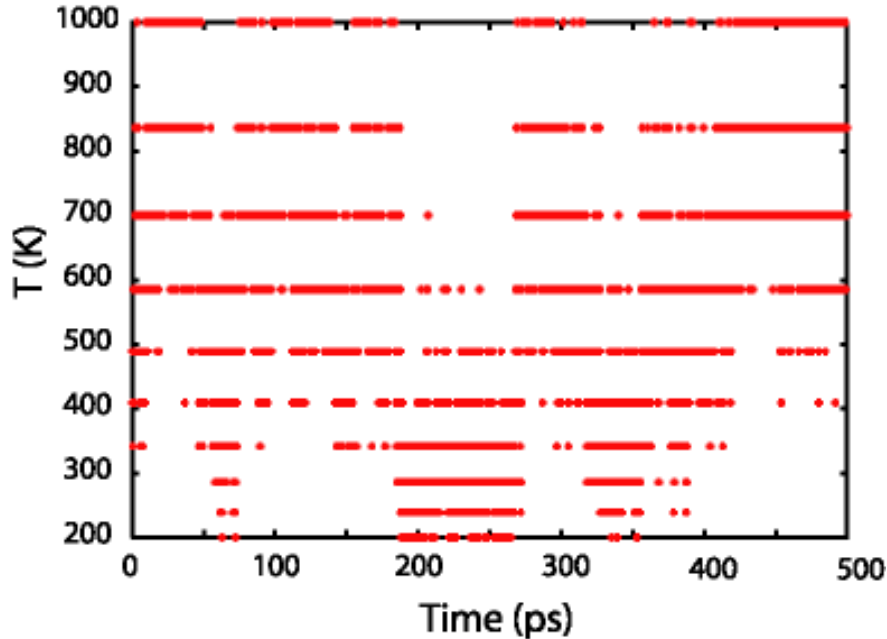
A. Mitsutake, Y. Sugita & Y.O., *J. Chem. Phys.* **118**, 6664 (2003).

When the physical quantity A cannot be written as a function of E , we first obtain the dimensionless Helmholtz free energy f_m ($m = 1, \dots, M$) by solving the WHAM equations. We then use the following equation:

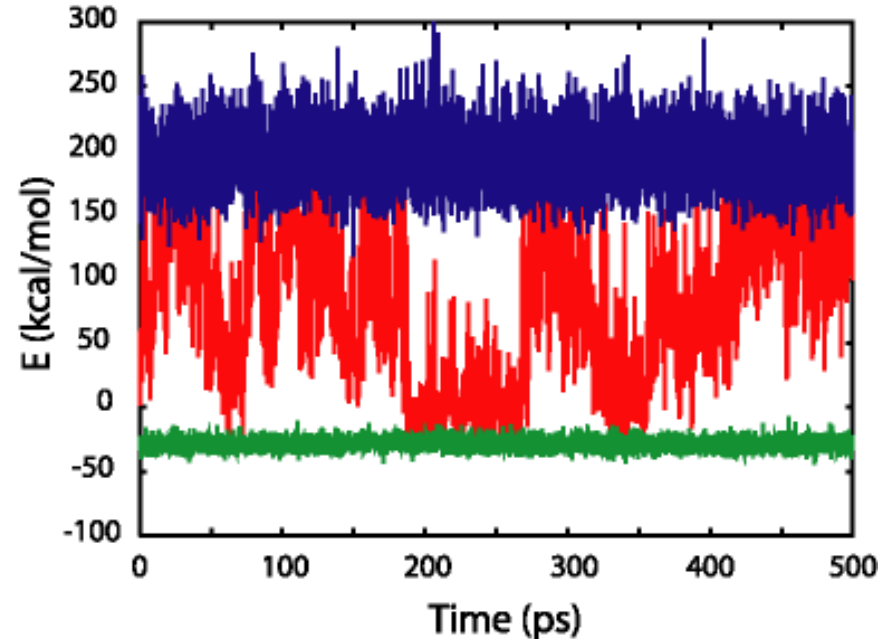
$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{n_m} A(x_m(k)) \frac{1}{\sum_{\ell=1}^M n_\ell \exp [f_\ell - \beta_\ell E(x_m(k))]} \exp [-\beta E(x_m(k))]}{\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{n_m} \frac{1}{\sum_{\ell=1}^M n_\ell \exp [f_\ell - \beta_\ell E(x_m(k))]} \exp [-\beta E(x_m(k))]}$$

Replica-Exchange MD Simulation

Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).



Random walk in
temperature space

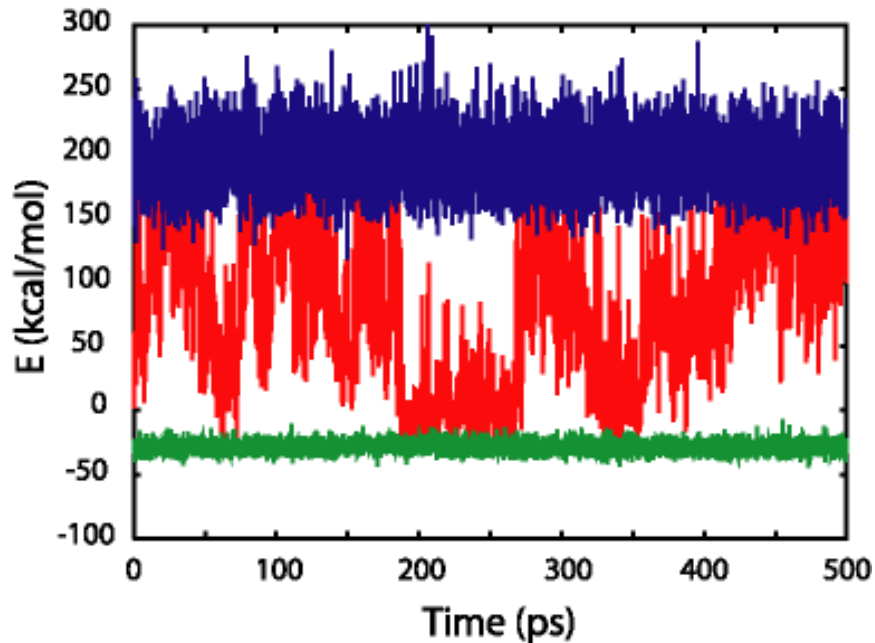


Random walk in
potential energy space

(Met-Enkephalin in Gas, AMBER94)

Replica-Exchange MD Simulation

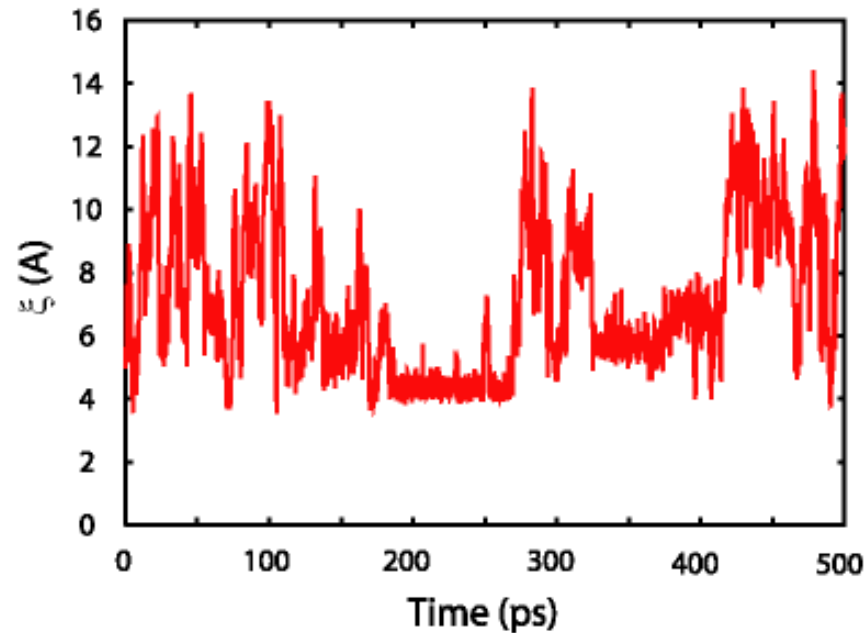
Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).



Random walk in
potential energy space



End-to-end distance



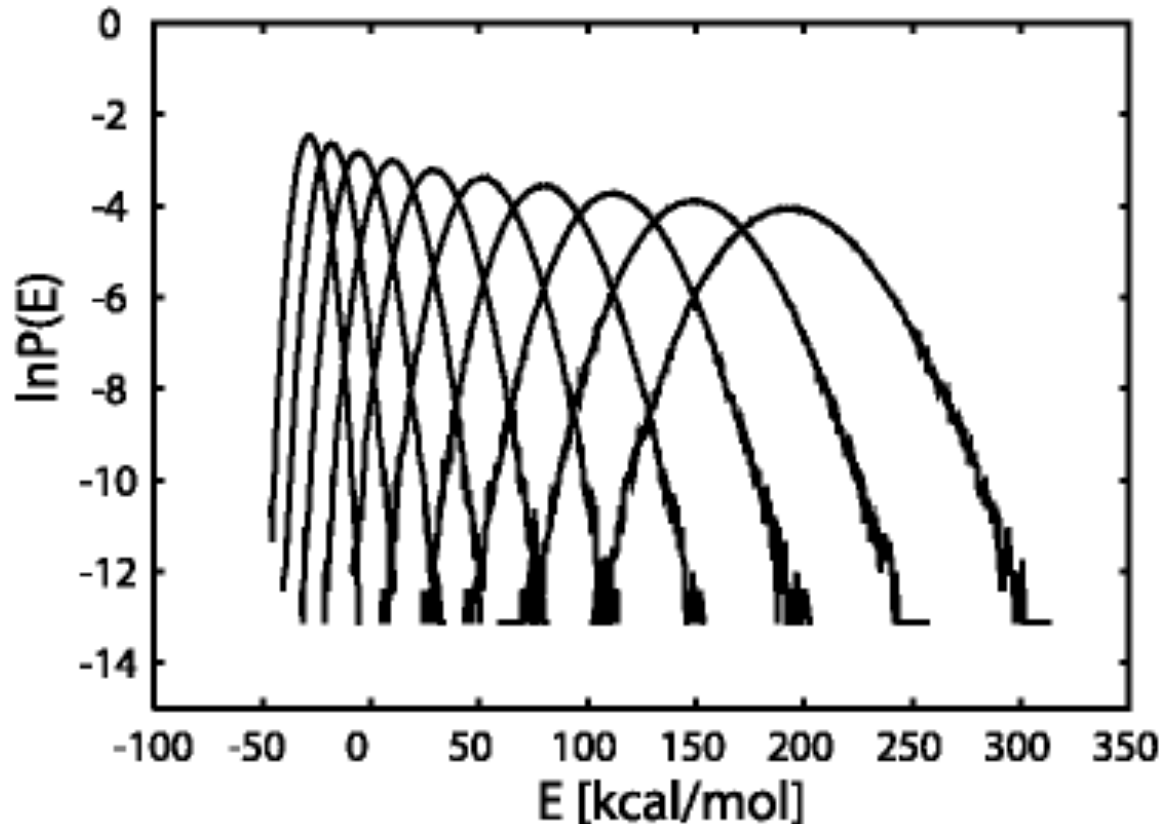
Random walk in
conformational space

(Met-Enkephalin in Gas, AMBER94)

Replica-Exchange MD Simulation

Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).

Criterion for successful replica-exchange simulation

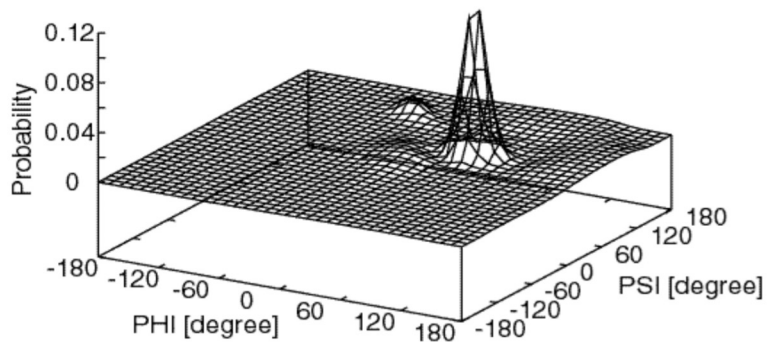


Sufficient overlap in pairs of adjacent canonical potential energy distributions

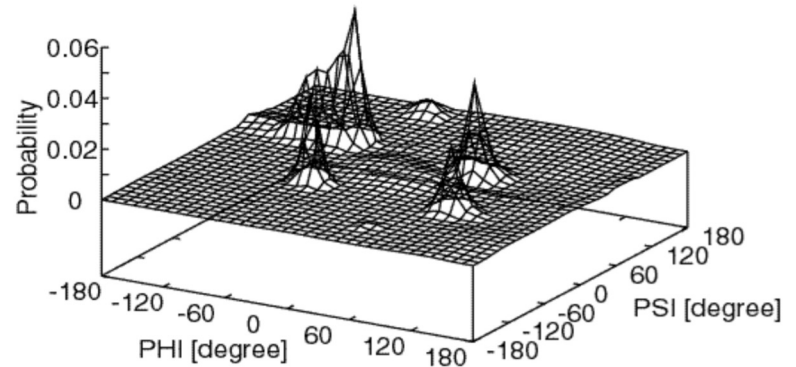
Met-Enkephalin in Gas Phase

Y. Sugita & Y.O., *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).

Distributions of dihedral angles (φ, ψ) of Gly-2 at $T = 200$ K



Canonical Simulation



Replica-Exchange Simulation

研究内容の話は後に回します。

ここまでは、研究内容とそれ以外の話の両方を時系列に従って紹介してきましたが、発表時間の残りが短くなってきましたので、研究以外のお話を先にして、残りの時間で研究の話をしたしたいと思います。研究内容については、今年(2022年)3月14日(月)に日本生物物理学会のサブグループ「生体分子シミュレーション・モデリング」の第2回研究会で、「**拡張アンサンブル法による生体分子シミュレーションによる研究を振り返って**」というタイトルで講演させて頂き、その動画が既に以下のYoutubeサイト

招待講演 岡本祐幸先生(2022/3/14)

https://www.youtube.com/watch?v=qmPxJG_gT10

にアップロードされているからです。

今回、もし時間切れとなり、研究内容を十分お話しできませんでしたら、このYoutube動画をご覧頂けると幸いです。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

平成 10 年度開始未来開拓学術研究推進事業研究プロジェクト
理工領域「計算科学」研究推進委員会

未来開拓学術研究推進事業

(1998-2003)

5年間の大きな予算を取りました。最初に8千万円×5=4億円でやるように言われましたが、最初の2年間は1億円ずつと多めに申請したら認められていました。しかし、2年目の終わりの1月半ばに、全体の予算が急に減らされたので、3年目以降の私の予算を約3千万円ずつ減らすと言われました。理由はこれまで私は当初言われた額を上まって使っていたからです。これには本当に困ってしまいました。予算の大半を占める博士研究員をこの時期に一人も首にすることはできないと強く思いました。私の顔は赤くなり、明らかに血圧が上がっていました。そして、夜就寝する時に、寝ている間に心臓発作でも起きるのではないかと心配しました。

Development of Simulation Algorithms for the First-Principles
Prediction of Three-Dimensional Structures of Proteins
第一原理からのタンパク質の立体構造予測
シミュレーション法の開発



プロジェクトリーダー 岡本 祐幸
崎国立共同研究機構
分子科学研究所 助教授



1. 研究の目的

タンパク質分子の立体構造とその生化学的機能の間には密接な関係があります。よって、タンパク質の立体構造の研究は、その機能発現の仕組みを解明することを目指しており、究極的には新薬品や特定の機能を持った人工タンパク質の開発ばかりでなく、狂牛病やアルツハイマー病等のタンパク質の誤った折り畳みに起因する病理の発現機構の解明へと直接つながっています。

タンパク質の立体構造がそのアミノ酸配列の情報のみで決まっていることは広く信じられていますが、未だにその情報のみを使ったシミュレーションによる立体構造予測(第一原理からの立体構造予測)に完全に成功した例はありません。問題の困難の要因は2つあると考えられます。1つはタンパク質の系の自由度が膨大であることです。タンパク質の自然の立体構造は自由エネルギーの最小状態に対応しますが、系にエネルギー極小状態が無数に存在するために、従来のシミュレーション法ではそれらの近傍に留まってしまっ、構造予測が絶望的に難しくなるのです。もう1つの要因は溶媒を含めた系のエネルギー関数の精度の問題です。エネルギー関数が間違っていれば、正しい立体構造予測ができないのは自明でしょう。タンパク質は生体内で水やイオンを含む溶液中に存在しますが、溶媒である水は、最も複雑な液体の1つです。また、タンパク質のような大きい系の電子状態の計算は大変困難な問題です。

本研究の目的は以上の2つの困難点を克服することにより、第一原理からのタンパク質の立体構造予測に、原子レベルの詳細を取り入れた計算機シミュレーションによって成功することです。



7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

未来開拓学術研究推進事業(1998-2003)

分子研所長を初め、いろいろな人に資金援助をお願いしましたが、皆、急に頼まれてもそれほど多額のお金は用意できないと断られました。追い詰められた私に救いの手を差し伸べて下さったのが、日立的松岡秀幸さんでした。本来の契約を変更して、日立からリースしていた計算機を半分返してレンタル料を半分にしようと提案してくれたのです。日立の上司への提案は不思議な程スムーズに認められたそうですが、何と、情報部門の重役がたまたまグルー基金の私の先輩だったのです(森内康浩さん)。私の苦しみは1ヶ月余りで済みました。

平成12年度に大幅に減らされた予算ですが、中間評価の結果が良くて、約3千万円の増額を受け、最終的には、5億509万円を頂きました。

プロジェクト・リーダー名	研究経費	総額 505,090千円
岡本祐幸 岡崎国立共同研究機構・分子科学研究所・助教授	内訳	
	平成10年度	103,291千円
	平成11年度	109,447千円
	平成12年度	65,400千円
	平成13年度	127,952千円
	平成14年度	99,000千円

こんなに高額な予算に見合うだけの成果を挙げたかどうかですが、私の一つの回答は、少なくともこの研究期間に発表した論文の被引用数が非常に多く、我々がこの予算で開発したシミュレーション手法が世界中で広く使われているということです。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

未来開拓学術研究推進事業 (1998-2003)

中間評価の結果、約3千万円の増額を受け、結局、全予算は、5億509万円でした。



Yuko OKAMOTO (岡本祐幸)

フォロー

Department of Physics, Nagoya University

確認したメール アドレス: cc.nagoya-u.ac.jp - ホームページ

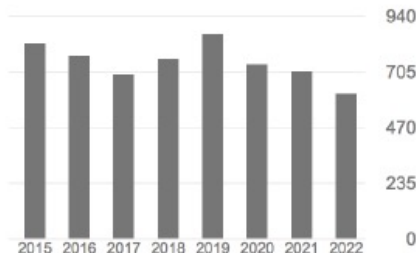
Computational Physics Computational Chemistry Biophysics Molecular Simulation

Google Scholar (2022年11月8日)

タイトル	引用先	年
<input type="checkbox"/> Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding Y Sugita, Y Okamoto Chemical physics letters 314 (1-2), 141-151	4634	1999
<input type="checkbox"/> Generalized-ensemble algorithms for molecular simulations of biopolymers A Mitsutake, Y Sugita, Y Okamoto Peptide Science: Original Research on Biomolecules 60 (2), 96-123	962	2001
<input type="checkbox"/> Multidimensional replica-exchange method for free-energy calculations Y Sugita, A Kitao, Y Okamoto The Journal of Chemical Physics 113 (15), 6042-6051	916	2000
<input type="checkbox"/> Nonextensive statistical mechanics and its applications S Abe, Y Okamoto Springer Science & Business Media	605	2001
<input type="checkbox"/> Prediction of peptide conformation by multicanonical algorithm: New approach to the multiple-minima problem UHE Hansmann, Y Okamoto Journal of computational chemistry 14 (11), 1333-1338	476	1993
<input type="checkbox"/> Generalized-ensemble algorithms: enhanced sampling techniques for Monte Carlo and molecular dynamics simulations Y Okamoto Journal of Molecular Graphics and Modelling 22 (5), 425-439	378	2004
<input type="checkbox"/> New Monte Carlo algorithms for protein folding UHE Hansmann, Y Okamoto Current opinion in structural biology 9 (2), 177-183	369	1999
<input type="checkbox"/> Replica-exchange multicanonical algorithm and multicanonical replica-exchange method for simulating systems with rough energy landscape Y Sugita, Y Okamoto Chemical Physics Letters 329 (3-4), 261-270	366	2000

引用先 [すべて表示](#)

	すべて	2017 年以來
引用	16877	4381
h 指標	54	22
i10 指標	142	53



オープン アクセス [すべて表示](#)

1 件の論文 [10 件の論文](#)

利用不可 [利用可能](#)

助成機関の要件に基づく

共著者 [編集](#)

共著者なし

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

2000年の春のある日、理論研究系のラウンジでコーヒーを飲んで休んでいた時に、**中村宏樹**理論研究系研究主幹(当時)がコーヒーテーブルにいつも置いてくれていた**学術月報**の3月号を開いてみました。その中で私の目に止まったのが、以下の論文です。

根岸正光、孫媛、山下泰弘、西澤正巳、柿沼澄男、「我が国の大学の論文数と引用数—ISI 引用統計データベースによる統計調査」、学術月報 53, 258 (2000).

そこでは、日本の研究機関を**総論文数**でランク付けして表にしていました。その表には、**引用度**を論文一報当たりの平均被引用数で定義し、その数値を別の列に入れてくれました。

昭和41年8月8日 第三種郵便物認可 平成12年3月15日発行 (毎月1回15日発行) 学術月報 第53巻第3号 通巻第664号

ISSN0387-2440

学術月報

Japanese Scientific Monthly
Vol. 53 No. 3 通巻第 664 号

巻頭言：日仏学術交流を終えて——中 嶋 嶺 雄

特集：高度プロセス

総論—高度プロセス—新世紀にむけた物質科学の潮流—野 依 良 治

環境調和型触媒プロセス——村 橋 俊 一

未来型不斉反応プロセス

—触媒的不斉炭素—炭素結合生成反応——林 民 夫

整合的有機合成プロセス：グリーンケミストリーへの挑戦——大 寺 純 蔵

高選択的有機合成プロセス——今 本 恒 雄

原子クラスターの特異な振舞いと材料設計——森 博 太郎

新炭素物質創製プロセス—21世紀に広がる新炭素ナノ物質—

——篠 原 久 典

コンバージョンプロセスと材料——山 本 嘉 則

ヘテロ原子の特性を活用する有機高機能物質の創製と合成法の開拓：

有機合成反応の効率化——中 井 武

官能基化C₆₀の創製と新機能開発

—サッカーボール分子をどのように使いこなすか—

——西 郷 和 彦

高度に組織化された分子集合とその機能——柴 崎 正 勝

未来開拓学術研究推進事業に参加して

化学の新たな展開を目指して——池 田 宏 春

スカンジウム：フラーレン研究における魔法の金属——王

特別寄稿：我が国の大学の論文数と引用数

—ISI引用統計データベースによる統計調査—

——根岸正光、孫 媛、山下泰弘、西澤正巳、柿沼澄男

先端研究みてある記：超高エネルギーガンマ線で宇宙を探る

—東京大学宇宙線研究所のカンガルー計画— 菊 池 健 生

師を語る：自らの美学に殉じた小林凡郎先生——宇 井 理 生

散歩道：民族大移動と大学改革——北 澤 宏 一



2000

3

日本学術振興会

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

私が思ったのは、**総論文数**はその研究機関の研究者の数に強く依存するのに対し、**引用度**の方はそれに依存しないので、むしろ、**引用度**の方でランク付けをすべきだということです。そして、そうしてみたら、なんと、分子研の所属する**岡崎国立共同研究機構**が**物理学**と**化学**の分野で**全国1位**であることが分かりました。また、**岡崎機構**の他の2つの研究所(基礎生物学研究所と生理学研究所)が関係する**生物学・生化学**、**神経科学**、**植物学・動物学**の3分野においても、**岡崎機構**が**全国1位**にランクされることが分かりました。

表4 個別分野における機関別論文数と引用度

Chemistry		Computer Science		Engineering		Geoscience	
大学名	論文数 引用度	大学名	論文数 引用度	大学名	論文数 引用度	大学名	論文数 引用度
京都大学	9,679 10.6	京都大学	314 3.5	京都大学	4,028 4.6	京都大学	1,875 8.2
大阪大学	8,990 10.2	京都大学	305 2.6	京都大学	2,686 5.0	京都大学	908 6.9
東京工業大学	8,265 9.4	京都大学	256 5.2	東京工業大学	2,667 5.1	名古屋大学	727 6.6
東北大学	7,713 9.3	東京工業大学	254 2.3	東北大学	2,599 4.1	東北大学	555 6.7
九州大学	6,538 8.4	東北大学	200 2.9	大阪大学	2,538 4.8	北海道大学	450 5.4
北海道大学	5,517 8.6	慶應義塾大学	161 0.9	名古屋大学	2,095 3.8	九州大学	343 4.6
名古屋大学	4,568 8.4	電気通信大学	160 1.7	九州大学	1,986 4.3	筑波大学	281 5.5
岡山大学	4,423 10.0	広島大学	106 2.9	北海道大学	1,353 4.9	岡山大学	271 14.1
広島大学	2,446 8.1	名古屋大学	101 1.3	新エネルギー物理	1,030 4.9	東京工業大学	244 5.9
岡崎国立共同研究	2,334 15.1	九州大学	93 1.8	広島大学	927 4.5	神戸大学	208 8.0
東京理科大学	2,312 6.3	北海道大学	86 1.8	筑波大学	760 3.7	宇宙科学研究所	189 6.9
筑波大学	2,130 7.3	筑波大学	85 1.5	慶應義塾大学	721 3.1	国立極地研究所	164 5.5
岡山大学	1,787 6.7	豊橋技術科学大学	76 2.5	大阪府立大学	661 4.0	岡山大学	137 6.8
千葉大学	1,726 6.9	早稲田大学	75 3.6	岡山大学	655 4.0	愛媛大学	110 8.0
慶應義塾大学	1,713 7.6	群馬大学	65 2.2	静岡大学	574 2.7	千葉大学	107 8.7
大阪府立大学	1,659 7.6	九州工業大学	62 0.9	名古屋工業大学	573 3.3	金沢大学	105 9.6
早稲田大学	1,514 9.2	徳島大学	48 3.9	東京理科大学	557 1.7	東海大学	103 4.6
大阪府立大学	1,399 7.7	名古屋工業大学	46 1.3	神戸大学	516 2.7	東京国立大学	96 5.6
静岡大学	1,388 5.8	会津大学	45 0.5	豊橋技術科学大学	509 5.2	大阪大学	90 6.4
名古屋工業大学	1,347 5.5	山口大学	44 2.5	京都府立大学	453 3.7	岡山大学	79 7.4
名古屋工業大学	1,305 4.9	神戸大学	42 3.3	早稲田大学	448 3.6	電気通信大学	78 3.4
東京農工大学	1,257 7.0	横浜国立大学	42 2.6	横浜国立大学	442 2.8	静岡大学	77 9.4
熊本大学	1,242 5.8	奈良先端科学技術	40 0.3	千葉大学	423 5.1	鳥取大学	74 4.3
京都工芸繊維大学	1,204 6.3	静岡大学	39 1.2	日本大学	384 2.6	大阪府立大学	71 4.4
群馬大学	1,182 6.4	千葉大学	36 0.9	千葉大学	383 2.6	山口大学	70 5.1
東京都立大学	1,127 8.2	法政大学	36 3.0	電気通信大学	378 1.9	日本大学	63 2.7
東京理科大学	1,119 8.6	茨城大学	34 2.2	九州工業大学	371 2.4	茨城大学	59 4.8
横浜国立大学	1,056 7.3	大阪府立大学	33 0.8	金沢大学	364 3.3	高知大学	58 5.6
信州大学	1,041 4.6	東京理科大学	32 0.3	群馬大学	334 2.3	信州大学	52 3.1
山口大学	1,041 6.3	大阪電気通信大学	31 4.9	徳島大学	334 1.7	山形大学	52 7.3
Mathematics		Physics		Agricultural Sciences		Biology & Biochemistry	
名古屋大学	489 4.7	東京大学	13,005 10.5	東京大学	1,669 7.0	東京大学	8,091 16.6
京都大学	488 5.0	大阪大学	9,610 8.0	京都大学	1,588 7.2	京都大学	6,184 18.8
筑波大学	418 3.7	大阪大学	8,142 7.6	九州大学	1,550 4.0	大阪大学	5,153 15.6
東京工業大学	390 3.3	京都大学	7,624 8.7	名古屋大学	963 6.1	九州大学	3,700 16.3
九州大学	343 4.4	東京工業大学	5,513 7.7	東北大学	911 5.5	名古屋大学	3,159 12.2
北海道大学	329 3.2	名古屋大学	4,806 7.2	北海道大学	834 5.9	北海道大学	2,928 14.7
東北大学	307 3.3	筑波大学	3,460 8.7	広島大学	572 6.1	東北大学	2,562 11.2
広島大学	299 3.2	九州大学	3,170 6.8	大阪府立大学	485 5.7	広島大学	1,966 8.2
大阪大学	292 4.0	北海道大学	3,123 5.8	東京農工大学	469 4.0	筑波大学	1,727 15.9
東京国立大学	284 3.4	広島大学	3,031 7.6	筑波大学	449 5.0	神戸大学	1,413 31.9
早稲田大学	252 2.8	新エネルギー物理	2,326 9.8	静岡大学	385 4.7	徳島大学	1,333 14.9
東京理科大学	154 3.1	早稲田大学	1,270 5.7	岡山大学	379 4.6	千葉大学	1,267 12.2
慶應義塾大学	138 3.2	慶應義塾大学	1,266 5.4	岐阜大学	348 6.2	東京工業大学	1,234 11.8
新潟大学	128 3.4	東京理科大学	1,176 4.2	大阪府立大学	319 6.9	岡山大学	1,196 10.3
千葉大学	121 2.5	東京理科大学	1,133 6.7	近畿大学	299 4.3	群馬大学	1,059 12.8
大阪府立大学	109 2.0	大阪府立大学	1,111 6.0	鹿児島大学	274 7.4	群馬大学	1,000 13.6
大阪府立大学	107 2.5	神戸大学	1,031 7.6	千葉大学	268 4.6	東京医科大学	950 13.6
金沢大学	82 1.9	新潟大学	1,023 7.7	お茶の水女子大学	254 3.9	岐阜大学	949 10.5
神戸大学	82 2.6	名古屋工業大学	1,022 5.2	山口大学	250 9.1	金沢大学	886 11.1
岡山大学	81 2.0	岡山大学	1,007 5.9	日本大学	245 4.1	新潟大学	873 13.5
岡山大学	80 1.3	金沢大学	886 6.6	千葉大学	241 3.2	大阪府立大学	868 9.3
名古屋工業大学	75 2.0	静岡大学	883 5.5	東京工業大学	240 7.5	慶應義塾大学	837 24.5
山形大学	75 1.4	岡崎国立共同研究	853 11.1	徳島大学	236 5.0	岡崎国立共同研究	810 39.6
日本大学	72 3.7	千葉大学	853 4.1	香川大学	230 3.0	信州大学	794 10.6
静岡大学	71 3.0	日本大学	783 4.5	大阪府立大学	228 4.2	大阪府立大学	789 7.1
山口大学	70 1.4	大阪府立大学	768 5.7	大阪大学	222 7.9	帝京大学	785 12.8
大阪府立大学	66 2.4	電気通信大学	768 8.7	信州大学	222 4.1	北里大学	778 11.2
中央大学	66 8.0	横浜国立大学	710 5.2	東京理科大学	211 7.3	長崎大学	763 12.2
統計数理研究所	65 8.2	長岡技術科学大学	689 5.6	愛媛大学	202 5.8	自治医科大学	721 17.1
茨城大学	63 1.7	東京農工大学	680 6.9	新潟大学	193 3.5	山口大学	702 9.7

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

私はすぐに簡単な報告書をまとめて、伊藤光男岡崎機構長(当時)に渡しました。すると、伊藤先生はすぐに記者会見を開いて、いくつかの新聞報道を得たばかりか、文科省にもこの文書を持って行かれました。そのためかどうかは証明できませんが、その年か翌年の補正予算では大きな額が岡崎機構に配分されたと記憶しています。また、私は編集委員会から依頼されて、「分子研レターズ」や「分子研レポート」に関連記事を書きました。以下が、分子研レポート2001の私の記事の最後の部分です。

最後に、現在分子研でも実施されていないが、研究活動を更に活発にするために、分子研方式にもう一つ追加するとしたら、

(e) 全ての教官に6年に一度、サバティカルイヤーを取る権利を与える

が考えられる。これは欧米の大学では当然のように古くから実施されてきたことであるが、我が国の研究機関で採用しているところは極めて少ない。サバティカルリープの効用については、以下の22歳のモーツァルトが父親宛に書いた手紙を引用すれば十分と考える。「旅をしない人間は(少なくとも芸術や学問にたずさわる者は)みじめな人間です! そして大司教が、2年に1度旅をすることを許してくれないなら、僕はどうしても契約を受諾するわけに行かないと、確言します。」⁸⁾マンネリ化からの脱出、新しい同業者との出会い、新しい情報源の開発等のために(すなわち、創造力を維持するために)、天才モーツァルトでさえ、時々環境を変える必要があったのである。況や非天才の研究者をや。

(分子基礎理論第一研究部門 岡本祐幸 記)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

この記事では、私は調子に乗って、依頼された引用度によるランキングばかりでなく、なぜ、分子研が研究で全国一位になれたのか、これからどうしたらその地位を保てるのかについて、「**分子研方式**」* というものを定義して、持論をぶち上げて熱く語りました。そうしたら、**薬師久弥**編集委員長が私の部屋にやってきたので、引用度によるランキング以外の部分は削除するようにと言われるのかと思ったら、そうではなく、以下のように言いました。

薬師: 分子研レポートは研究所の名前で発行するものなので、普通、各記事には著者名を書かないのですが、あなたの記事は必ずしも分子研のメンバーの総意とは言えないので、文末にあなたの氏名を入れて文責を明記させて頂きました。

*「分子研方式」については、例えば、以下の記事がある。

岡本祐幸、*分子研レポート2001*, pp. 62-66 (2002).

岡本祐幸、*分子研レターズ***81**, 2-4 (2020).

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

私は更に、東京出張の時に、上述の**学術月報**の論文の主著者で国立情報学研究所の教授である、**根岸正光**さんを訪問して、研究者の人数によらない、**引用度**に基づくランク付けをすべきだと主張しました。私のような統計学の素人が専門家に言っても、無視されるのが関の山と思いましたが、なんと、**根岸**教授は、私の主張に耳を傾けてくれたのです。そして、**根岸**教授は、朝日新聞出版が発行している「**大学ランキング**」という雑誌に「**大学ランキング2002**」から記事を依頼されるようになりましたが、私が会いに行く前に記事を書かれた2002版では、**総論文数**でランク付けしたのに対し、「**大学ランキング2003**」以降は、私の主張に従い、**引用度**でランク付けしてくれるようになりました。



7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

「大学ランキング2003」の根岸教授の記事

23 ISI・論文引用度指数ランキング

論文の引用度から 分野別の研究勢力を測る



NEGISHI Masamitsu
根岸正光

国立情報学研究所教授

学術論文と引用索引データベース

—大学や研究所での研究の結果は、図書や雑誌論文に発表されます。自然科学系では図書よりも学会誌などの雑誌論文のほうが研究発表のための主力メディアになっています。研究の成果をいち早く公表するのに適しているからです。このような「学術論文」では、その研究内容に関係する、すでに発表された自分や他の研究者の論文を「引用」しながら、今回の研究が従来にない新しい内容になっていることを説明する必要があります。これらの「引用論文」は、わかりやすいように論文の最後にまとめて記載されます(引用文献リスト)。

米国のISIという会社は、世界の主な学術雑誌(ほとんど英文誌)を集めて、そこに掲載されている論文の、著者、所属機関(大学など)、標題、研究分野区分(これらを書誌的データという)、それに引用文献リストを入力したデータベースを作成しています(引用索引データベース)。

これを検索すると、引用した論文と引用された論文の間をたぐうようにして、関連する論文を能率的に引き出すことができます。またこのデータベースを集計処理すると、各論文が引用された回数も算出できます。一般に、重要な論文はその後の研究に大きな影響を与えるので、引用回数が多くなります。そこで、引用回数は、その研究者の仕事の評価する指標のひとつと考えられています(研究評価)。

わたしたちは、ISIが作成したNCR(National Citation Report)というデータベースの日本対象版(NCRJ)を使って、日本の大学、研究機関からの論文の出方やそれらに対する引用回数を調査しています。今回は、NCRJの1990~1999年までの10年間の論文について調査した結果を紹介いたします。

同じ大学でも名称に ばらつきがあり集計に困難さも

大学別統計——NCRJ 1981~1999年には、106万件の論文に関して、その引用回数が集計、記録されています。今回の調査では、1990~1999年の論文60万件(解説展望論文は除外)を対象として調査しました。このうち大学・大学共同利用機関の論文は48万3千件、企業関係は9万9,000件、その他公立の研究所や病院(私立を含む)、大学病院は大学に算入)の分が13万7,000件ほどでした。合計が60万件を超えるのは、この3区分の間での共著の論文も多いからです。

大学別の集計をするには、所属機関のデータを対象にコンピューターで集計すれば簡単にできるはずですが、実際にはこれが大変です。それは、大学名が常に正しく記入されているとは限らないからで、たとえば東京大学は、正式にはUniversity of Tokyoなのに、Tokyo Universityという記述法もよく使われます。データベースには、

RANKING

ISIデータベース

大学・機関別の論文引用度指数(国内1990~1999年)

総合(1~70位)

大学・機関	論文数	引用回数	大学・機関	論文数	引用回数
1 岡崎国立共同研究機構	3,618	197	33 愛知医科大	918	104
2 国立遺伝学研究所	889	160	37 広島大	11,271	102
3 高エネルギー加速器研究機構	3,342	153	愛媛大	3,767	102
4 自治医科大	2,772	151	豊橋技術科学大	1,944	102
5 山梨医科大	1,281	149	福井医科大	1,453	102
6 東京大	47,321	135	福島県立医科大	1,213	102
7 京都大	35,267	133	関西学院大	834	102
8 大阪大	30,583	127	43 北海道大	18,241	101
順天堂大	2,537	127	千葉大	7,663	101
10 名城大	1,311	126	新潟大	6,160	101
11 宇宙科学研究所	1,598	123	昭和和	2,748	101
12 総合研究大学院大	1,046	120	47 帝京大	3,101	100
13 姫路工業大	2,111	119	山梨大	1,499	100
14 東京医科歯科大	5,046	118	49 慶應義塾大	8,359	99
15 藤田保健衛生大	1,568	117	大阪市立大	5,251	99
16 富崎医科大	1,462	117	名古屋市立大	3,176	99
17 名古屋大	20,176	116	防衛医科大学校	1,465	99
18 神戸大	6,550	114	岐阜薬科大	1,222	99
19 金沢大	6,630	113	奈良先端科学技術大学院大	762	99
熊本大	6,102	113	55 金沢医科大	762	98
兵庫医科大	1,403	113	56 星薬科大	997	97
22 東京工業大	16,471	111	57 電気通信大	2,153	96
23 東京女子医科大	3,004	110	摂南大	727	96
東北大	27,327	109	59 早稲田大	4,102	94
筑波大	11,656	109	横浜国立大	2,343	94
東京都立大	3,503	109	大阪薬科大	754	94
札幌医科大	2,364	109	62 京都府立医科大	2,863	93
26 関西医科大	1,901	108	長岡技術科学大	1,671	93
滋賀医科大	1,892	108	福山大	732	93
30 九州大	21,498	107	65 東京理科大	5,391	92
三重大	3,732	107	信州大	5,023	92
浜松医科大	2,202	107	久留米大	2,200	92
33 東京薬科大	1,837	104	東京慈恵会医科大	1,896	92
京都薬科大	1,459	104	69 横浜市立大	2,952	91
国立天文台	1,436	104	70 埼玉医科大	1,376	90

◎—大学共同利用機関を含む。ISI NCR for Japan (1981-1999) による根岸らの調査結果

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

引用度によるランク付けで研究者数への依存性は排除できたのですが、もう一つ解決しなければならない問題がありました。分野によって、引用の仕方の「文化」が違うので、分野の違いの影響を総合ランキングでどのように扱えば良いかという問題です。私は、[分子研レポート2004](#)に寄稿した記事 (pp. 86-89 (2005)) で、[偏差値](#)を使えば良いと提唱しました。

この総合引用度指数に基づいた総合ランキングを表6に示す。⁷⁾ここでも、岡崎国立共同研究機構が全ての分野を総合して、全国第一位であることが確認できる。しかし、この表を詳しく検討してみると、総合引用度指数が完全には分野に非依存ではなく、生物・医学系の大学が上位にランクされていることが分かる。これは、式(1)から示唆されるように、式(4)の総合引用度指数に分野別引用度 $X_{a,i}$ のばらつき(標準偏差)の大きい分野の上位研究機関の寄与が大きく効いてくるためだと思われる。(そして、生物・医学系の引用度のばらつきが他の分野に比べて大きいと推察できる。絶対値が大きいからである。)よって、分野に依存しない総合引用度指数としては、式(4)の代わりに、以下の量を使った方が良いと考える。

$$G_i = \sum_{a=1}^{N_f} \rho_{a,i} J_{a,i} \quad (6)$$

ここで、 $J_{a,i}$ は以下で定義される。

$$J_{a,i} = 10 \times \frac{X_{a,i} - \bar{X}_a'}{\sigma_a} + 50 \quad (7)$$

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{1}{N_a} \sum_{i=1}^{N_a} (X_{a,i} - \bar{X}_a')^2} \quad (8)$$

$$\bar{X}_a' = \frac{1}{N_a} \sum_{i=1}^{N_a} X_{a,i} \quad (9)$$

また、 N_a は分野 a の論文を出している研究機関の総数である。

すなわち、偏差値のアイデアを導入するのである。完璧ではないかも知れないが、専門家に一考をお願いしたい。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

分子研の論文の被引用数について

そして、この記事も根岸教授の所へ持って行きました。根岸教授はこのアイデアも採用してくれて、**大学ランキング2007**からは偏差値に基づく総合ランキングをしてくれるようになりました。また、2006年の**情報知識学会**でそのランキングの手法を発表し、その論文の末尾に私に対する謝辞を書いて下さいました。その発表論文の冒頭と末尾を以下に掲げます。

ISIデータベースにおける発表論文数、被引用回数に基づく
「大学ランキング」作成の方法と問題点

Formulating methods of university rankings by publication and citation statistics
in ISI's citation databases, and some related problems

根岸正光（国立情報学研究所）

この大学ランキングの作成方法について、名古屋大学大学院理学研究科物理学教室の岡本祐幸教授には、分子科学研究所在職の当時から有益な助言を頂いてきており、既述、偏差値導入の件もその一端である。記してここに感謝したい。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

岡崎国立共同研究機構生協の設立

分子科学研究所の環境はとても良かったのですが、一つだけ、書籍部を持つ生協がないことを不便に思いました。普段の会話から、周りの人にも同意見の人が結構いたのですが、誰もこの研究所に生協を作れるとは思っていませんでした。ある飲み会で、私の研究室のIMSフェロー(博士研究員)の西川武志さん(現Focus)が「岡崎機構に書籍部のある生協を作りたい。」と言ったのです。私は、「博士研究員のような短期の職を持ちながら、そんな研究と関係ないことをやっていて大丈夫か？」とすぐには賛成しませんでした。隣にいた、理論研究系の平田文男教授が、「それは素晴らしい。ぜひ作りましょう。」と言ったので、一気に盛り上がり、私も「次の職のことに自分で責任を持てるならやって良い。」と答えました。その後すぐ、平田教授が発起人代表になり、機構全体に運動が広がりました。そして、西川氏が「生協の作り方」を調べてきて、入念に計画をたて(例えば、赤字になり易いので、食堂はやらない、など)、2年近くかけて2001年3月に開店を実現してしまった次第です。それには、名大生協からの多大な援助がありました(例えば、初代店長の野村林太郎さんも名大生協から来て下さいました)。西川氏の滅私奉公的献身には驚きました。何分、彼は開店の翌月には、産総研に転任したのですから。勿論、私達も研究室を上げて発起人(杉田、長島、西川、光武、岡本)や監事(西川、岡本)となって、応援しました。

平田文男、分子研レターズ45, 25 (2002);岡本祐幸、分子研レターズ52, 26 (2005).

7. 分子科学研究所 (1995-2005) 岡崎国立共同研究機構生協の設立

https://www.univcoop-tokai.jp/ninsok-coop/nus/webapp/data_file_im/html_file/岡崎生協20年のあゆみ.pdf

設立発起人

代表	平田 文男						
発起人	青柳 睦	大隅 良典	岡本 祐幸	小幡 邦彦	加藤 清則	児玉 顕一	
	坂谷 智也	定藤 規弘	杉田 有治	高橋 卓也	坪内 雅明	長島 剛宏	
	永山 國昭	西川 武志	服部 宏之	光武 亜代理	武藤 哲司	諸橋 憲一郎	
	和田 春美	渡邊 栄治	渡邊 正勝	渡辺 芳人			

年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
理事長・代表理事	小幡 邦彦	小幡 邦彦	大隅 良典	大隅 良典
専務理事	諸橋 憲一郎	諸橋 憲一郎	野村 林太郎	野村 林太郎

年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
理事	大隅 良典	大隅 良典	加藤 清則	諸橋 憲一郎
	加藤 清則	加藤 清則	定藤 規弘	永山 國昭
	永山 國昭	永山 國昭	永山 國昭	定藤 規弘
	平田 文男	平田 文男	坂谷 智也	秋田 紫子
	野村 林太郎	定藤 規弘	岡本 裕巳	平田 文男
		團田 秀久	諸橋 憲一郎	岡本 裕巳
		坂谷 智也	團田 秀久	加藤 清則
		野村 林太郎	平田 文男	團田 秀久
監事	西川 武志	西川 武志	岡本 祐幸	岡本 祐幸
	岡本 祐幸	岡本 祐幸	矢野 隆行	矢野 隆行
			森 将浩	森 将浩
			吉国 通庸	吉国 通庸
			横井 益男	柳野 友栄



書棚に本が並ぶ生協店舗。左から:店員の林由美さん、店長の野村林太郎さん、店員の是川裕子さん(2002年1月4日)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

私は奈良女で十分鍛えられていたので、分子研に来てからすぐに、理論研究系の(教員や博士研究員や大学院生などからなる)ソフトボールチームに参加しました。私が着任した頃は、分子研全体でも、ソフトボールはそれ程盛んではありませんでした。**伊藤光男** 所長や**中村宏樹** 理論研究系主幹教授(後に分子研所長)などは、以下のように言って、スポーツを薦めていました。

良い研究は健全な心身と良いチームワークから生まれる。

1年目に、我々理論チーム(私が**プレアデス**と命名しました)は春の分子研大会では4位でしたが、7人の(骨折を含む)負傷者を出してしまいました。私は、これは練習を十分にやらなかったからだと思いました。それで翌年からは大会の1ヶ月ぐらい前から週に3回ぐらい、昼休みや夕方に練習をするようにしたら、怪我人はほとんど出なくなりました。また、理論から複数チームを出すように参加者を増やしました。すると、練習試合ができるようになりました。私の分子研時代の最後の大会では、理論から3チーム(**プレアデス**、**ジュピター**、**シリウス**)が出場しました。優勝回数も増えて、皆が熱心になりました。そして、教授会の時に、**平田文男** 教授や**米満賢治** 助教授らの近くに座って、チームの守備や打順案をこっそり見てもらったりしていました。

次のスライドに我々の成績をまとめます。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

我が理論研究系チームの結果

1995年度 第16回分子科学研究所創立記念杯: 理論プレミアデスは4位

1. 理論プレミアデス:13 - 計算機センター:6
2. 理論プレミアデス:3 - UVSOR:20
3. 理論プレミアデス:7 - 錯体化学:13 (3位決定戦)

1996年度 第17回分子科学研究所創立記念杯: 理論プレミアデスは準優勝、理論多国籍軍は1回戦負け

1. 理論プレミアデス:7 - 分子集合:3
2. 理論多国籍軍:3 - 錯体化学:10
3. 理論プレミアデス:8 - UVSOR-I:7
4. 理論プレミアデス:7 - 錯体化学:5 (準決勝)
5. 理論プレミアデス:- UVSOR-II: (決勝) ピッチャー顔面強襲ヒットを受け病院へ、試合放棄負け

1997年度 第18回分子科学研究所創立記念杯: 理論プレミアデスは優勝、理論ジュピターは1回戦負け

1. 理論プレミアデス:12 - 分子集合:7
2. 理論ジュピター:11 - 錯体化学:12
3. 理論プレミアデス:7 - 相関領域:4 (準決勝)
4. 理論プレミアデス:19 - 分子構造:4 (決勝)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

1997年度 第17回岡崎国立共同研究機構職員杯: 理論プレアデスは優勝、理論ジュピターは準優勝 (参加チーム数は20)

Cf. 理論ジュピターは準決勝で13点差を逆転して、16-15でサヨナラ勝ちし、決勝へ進む。

1998年度 分子科学研究所創立記念杯: 雨天中止

1998年度 第18回岡崎国立共同研究機構職員杯: 雨天および基生研のアジ化ナトリウム事件で中止

Cf. 基生研のある研究室主催の非公式大会に招待され、理論プレアデスが優勝。

1999年度 分子科学研究所創立記念杯: 理論プレアデスが優勝

Cf. 2000年以降はこの大会は開催されず。

よって、優勝カップは理論研究系のラウンジに置かれたままになっている。

1999年度 第19回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが優勝

2000年度 第20回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが準優勝

2001年度 第21回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが優勝

2002年度 第22回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが準優勝 (得失点差で)

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

2003年度 第23回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが優勝、理論ジュピターは予選リーグ敗退

Cf. 準決勝の1回の守備で、ノーアウト、ランナー満塁でトリプルプレイを達成。

まず、センターフライでワンアウト。3塁ランナーがタッチアップしてホームに突っ込むが、センターからレーザービームの返球が直接キャッチャーに返り、タッチアウトでツーアウト。キャッチャーがショートにボールを送っている間に、3塁に進んでいた2塁ランナーがホームに突っ込むが、ショートからボールがキャッチャーに返り、タッチアウト。

2004年度 第24回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが3位

Cf. 理論ジュピター、理論シリウスとともに理論研究系から合計3チーム出場。



理論研究系3チームの全体写真

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

1997年度 第18回分子科学研究所創立記念杯: 理論プレアデスは優勝、理論ジュピターは1回戦負け

1. 理論プレアデス:12 - 分子集合:7
2. 理論ジュピター:11 - 錯体化学:12
3. 理論プレアデス:7 - 相関領域:4 (準決勝)
4. 理論プレアデス:19 - 分子構造:4 (決勝)



伊藤光男分子研所長から優勝カップを受け取る岡本



7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

ソフトボール

1997年度 第17回岡崎国立共同研究機構職員杯: 理論プレアデスは優勝、理論ジュピターは準優勝 (参加チーム数は20)

Cf. 理論ジュピターは準決勝で13点差を逆転して、16-15でサヨナラ勝ちし、決勝へ進む。

1997年10月18日に開催。**理論プレアデス**は春の分子研大会に続いて優勝。
理論ジュピターは準決勝で、1イニングに13点差を逆転しての奇跡の逆転勝ち。
これ程気楽な決勝戦(どちらが勝っても理論が優勝)は後にも先にもなかった。



理論プレアデス



理論ジュピター

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005) ソフトボール

2003年度 第23回岡崎国立共同研究機構職員杯:理論プレアデスが優勝、理論ジュピターは予選リーグ敗退

Cf. 準決勝の1回の守備で、ノーアウト、ランナー満塁でトリプルプレイを達成。

トリプルプレイを達成した準決勝では5-0で勝ったが、決勝は27-1で勝利したので、準決勝が事実上の決勝だったと言える。予選の2試合で頑張りすぎて(13-7と16-0で勝利)、皆疲れていた。1回の守備では、ノーアウト満塁でセンターの川島雪生氏のところに浅いフライが上がり、ワンアウト。3塁ランナーがタッチアップしたが、川島氏のレーザービームの返球がキャッチャーの平田文男氏にダイレクトで届き、タッチアウトで2アウト。1塁から2塁に行っていたランナーが3塁を伺ったので、平田氏がショート西野正理氏にボールを投げたら、2塁から3塁へ行っていたランナーがホームに突っ込んだのでボールがバックホームされた。3塁ランナーがキャッチャーの平田氏に体当たりしたので軽量の平田氏は吹っ飛んだが、その時、ランナーが平田氏のミットを蹴り上げた。平田氏はそれでもボールを落とさなかったので、タッチアウトでトリプルプレイが達成された。ファーストを守っていた私はその乱暴なプレイにカッとなり、「ラフプレイ、ラフプレイ、ラフプレイ」と叫びながら、ホームベースの所まで駆け寄って、審判にそのランナーの退場を要求した。私は「あんなに激しく体当たりしたばかりか、ボールを落とすためにミットを蹴るなんて、ひどいじゃないか。退場にして欲しい。」と言った。審判は第3チームの選手であり、大学院生か博士研究員に見えた。彼は、「ううっ。私にはそこまではできません。。。」と、退場を決断できなかった。そこで少し審判と私の間で押し問答があったが、両チームの睨み合いが少し続いた。私はふと自チームのベンチの方をみたら、柔道2段の奥村久士氏が立ち上がって、今にもこちらに突っ込んできそうだった。それで、乱闘になったらまずいと思い、私は退場要求を取り下げて、試合は再開されたが、脳内にアドレナリンが大量に分泌されたらしく、その後は、疲れがなくなりシャキツとして、5-0で勝利できた。



理論プレアデス



理論ジュピター

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

邪馬台国

奈良女時代に共同研究者の帝塚山大学の**重本和泰**さんに面白いよと薦められたのが、**古田武彦**の「失われた九州王朝」(朝日文庫)(または、「『邪馬台国』はなかった」だった?)でした。早速買って読んでみたら、その論理的な説得力のある内容に感動しました。分子研に来てから、ある時、**平田文男**さんにこの本を薦めたら、**平田**さんもすっかり**古田**ファンになってしまいました。それから数年間は、以下のようなことが起こるようになりました。学会や研究会などの懇親会で、初対面の化学者に会うと、次のような会話が次々と繰り返されました。

岡本: 分子研の**岡本祐幸**と申します。宜しく願います。

初対面の方: ああ、**岡本**さんですか。**平田**さんから聞きました。**邪馬台国**の話は面白いですね。

古田武彦は**邪馬台国**は九州の**博多近辺**にあったと主張します。その論理は以下の通りです。**邪馬台国**が近畿地方にあったとする根拠は、九州だとすると**邪馬台国**は遥か南の海上になってしまう。それで、**邪馬台国**に来た魏の使いが方角を東と書くべき所を間違っ南と書いてしまったとすれば、**邪馬台国**は近畿にあったと言える。しかし、**古田武彦**が示したのは、魏志倭人伝で使われている1里が多くの人が当然と思っていた長里(約435メートル)ではなく、(その約6分の1の?)、**短里(約75メートル)**だったということ、魏志に2都市間の距離が何里と書かれていて、その2都市が現在の中国のどの位置にあるのか分かっている例を幾つも選び出してきて、1里が何メートルであるかを特定して、魏志では**短里**を使っていたと結論づけました。**短里**だと魏志倭人伝の話はほとんど全て九州内の話になります。そして、倭国の神武天皇が九州から奈良に移って、日本国を建てたという訳です。白村江の戦いまでは同じ「先祖」を持つ両国が併立していたが、白村江の戦いで倭国が唐・新羅連合軍に敗れ、弱体化したので日本国に併合されたという説です。

7. 分子科学研究所 助教授 (1995-2005)

邪馬台国

平田さんは定年後、「古田史学の会」に入り、そこで古代史に関する論文を発表したりしているようです。ところで、私が奈良女にいた頃、福来さんに邪馬台国は九州にあったと思うと言ったら、「旧唐書」を本棚から持ってきて、そこには倭国伝と日本国伝の2つが並べて書かれているのを見せてくれました。彼も邪馬台国(倭国)は九州にあり、日本国は近畿にあったというような意見でした。

私は最近、(古田武彦さんの影響をかなり受けたと思われる、しかし、邪馬台国は博多ではなく糸島にあったとしている)生野真好という人の、「卑弥呼は天照大神だった」という説に興味を持っています。(これまでも、同様のことを言っている人が何人かいるらしいですが。。。)生野さんは神武天皇が九州を出たのが紀元前ではなく、紀元後294年頃であると主張しています。

私が天文学者にやって欲しいことは、皆既日食が卑弥呼の時代に邪馬台国のあった北九州を通ったということを証明できないかということです。すなわち、天岩戸伝説を科学的に「説明」出来ないかということです。過去にそれを調べた天文学者の論文を読んだことがあります、しかし北九州を通ったという結果ではありませんでした。しかし、天文学が更に進歩すれば、過去の皆既日食の通った軌跡と時刻の特定の精度が上がって、卑弥呼の頃に北九州を通ったという結果が出るのではないかと期待しています。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

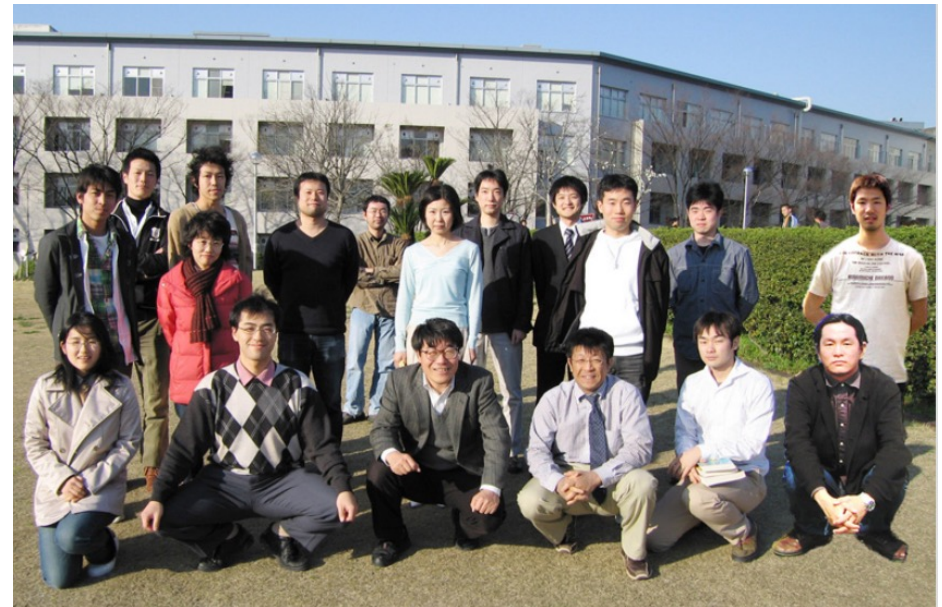
2005年4月に私は分子研から名古屋大学の教授に転任しました。



TB研(理論生物化学物理研究室)のメンバー達



Academic Year 2005



Academic Year 2006

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022) TB研のメンバー達



Academic Years 2007↑ & 2009↓



Academic Years 2008↑ & 2010↓



8. 名古屋大学 教授 (2005-2022) TB研のメンバー達



Academic Years 2011↑ & 2013↓



Academic Years 2012↑ & 2014↓

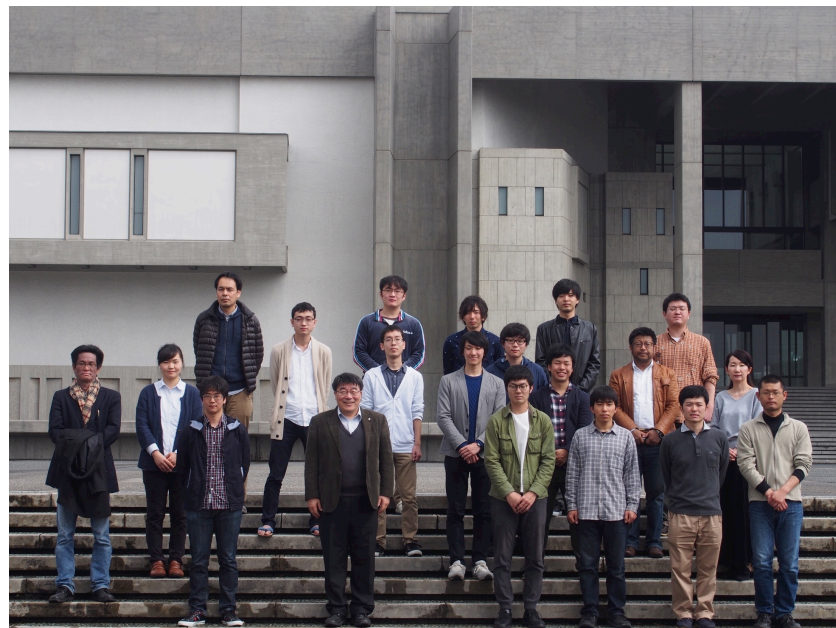


8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

TB研のメンバー達



Academic Years 2015↑ & 2017↓



Academic Years 2016↑ & 2018↓



8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)



Academic Years 2019↑ & 2021↓

TB研のメンバー達



Academic Year 2020↑



8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(1) 中野藤生さんと糟谷忠雄さん

名大に着任してすぐの頃、同じ物理学教室のS研の上羽牧夫さんが私に言いました。

上羽: S研のOBの中野藤生さんは、電気伝導度の「久保公式」を最初に発見した人です。

よって、「中野・久保公式」と呼ぶべきです。ちょうど、「物性研究」の5月号に名工大の磯部雅晴さんが編集したインタビュー記事

木村初男、服部真澄、山下護、杉山勝, 物性研究 84, 157 (2005).

が出ています。

私はこの記事を読んで感動し、何とか中野さんを顕彰したいと思いました。そして、推薦権のある名大の前受賞者に中野さんを中日文化賞へ推薦してもらいました。何回か挑戦しましたが、残念ながら駄目でした。それで、私は次に、ちょうど編集委員だったので、名大理学部の広報誌「理Philosophia」の巻頭の「時を語るもの」に記事を書けることを編集委員会で提案しました。しかし、この記事の対象者は学士院賞以上の受賞者だけだと編集委員長のA研の福井康雄教授に言われました。私は、中野さんは無冠かも知れないけれど、「中野・久保公式」はノーベル賞級の仕事です、と主張しました。諦めずに繰り返し提案していたら、数年後に編集委員長の福井さんが以下のように言ってくれました。

福井: 岡本さんの熱意は分かりました、特例として認めましょう。

そして、編集委員会で認められ、次のスライドの記事となりました。ちなみに、今は、

「時を語るもの」に載る人の基準は、中日文化賞以上となっているそうです。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

理Philosophia 19, 2 (2010).

<https://www.sci.nagoya-u.ac.jp/publication/files/pdf/19.pdf>

(1) 中野藤生さんと 糟谷忠雄さん

時を語るもの

中野藤生博士——電気伝導度の「中野・久保公式」の発見

中野藤生博士は、1955年1月に33歳で大阪大学助手から物理学教授として名古屋大学教養部に着任した。在任してまもなく、同僚の実験家栗川泰二の依頼で成んだ久保亮五¹⁾と宮田和久²⁾の電気伝導度の論文からヒントを得て、新しい電気伝導理論を考えつゝ、『物性論研究』84号に「ひとつの電気伝導計算法」を発表した。電流の流れる導体は熱的に非平衡状態であり、電気伝導度をミクロな立場から計算する従来の方法は何段階もの論理の連鎖で組み立てられる複雑なものだった。中野が提出したのは板計力学的に厳密で極めて簡明な公式だったから、金属や半導体の電子輸送現象の研究が盛んだった時期でもあり、たちまち研究者に受け入れられ、引き続く活発な研究をよびおこした。直後の1955年6月に米名したフاینマン³⁾博士も非常に興味を示し、中野に自分の考えた同様な公式のメモを預けた。

その後、久保亮五を中心とした日本の研究者たちによる研究が、非平衡系統計力学の視形応答理論とよばれる有名な公式系に集大成された。その先駆となった電気伝導の公式も次第に「久保公式」とよばれて、不運にも中野の名は忘れられてしまう。しかし、近年の研究で、この公式の第一発見者である中野の名字が再評価され、この公式は「中野・久保公式」とよばれることが多くなってきている。

以後中野は、理学部物理、工学部応用物理の教授を歴任し、統計物理学の基礎的分野で多くの成果を上げたが、その研究姿勢や学生との真摯な接触から、指導生は大きな影響を受けた。教養部での指導生だった益川敏夫もその一人である。1989年の若年退官後も、物形応答理論の基礎研究を続けたが、益川がノーベル物理学賞受賞の報告に訪れた4ヵ月後、2009年8月に中野は86歳で永眠した。
(名古屋大学名誉教授 木村初男)



中野藤生 (1922-2009)
元名古屋大学教授・理学部・工学部教授



ひとつの電気伝導計算法
中野藤生 著
1955年4月20日発行





物性論研究



◎写真の説明
左ページは『物性論研究』84号(1955年5月発行)に掲載された中野博士の論文、物理学部教務の副部長時代を物語る。『物性論研究』には、中野の論文に就いて3年間に変更を要する論文が15編も掲載されるほど、当時の物性研究者の活発な研究活動に大きな役割を果たした。上は『物性論研究』表紙。左ページは中野の創設的論文誌、J. Mod. Phys. B 7(1994) 2597に掲載されたフاینマンの著述。右の図は、益川がノーベル物理学賞受賞を報告するための中野博士宅を訪ねた時の様子を描いたもの。中央が中野博士、右が益川。それぞれノーベル賞の賞状とメダルを手にしている。左上が知り合いの研究者で中野博士と顔を見合っていた早稲田浩二氏。

- 1 久保亮五 (1922-2002)
元東京大学理学部教授
- 2 宮田和久 (1929-2004)
元京都大学理学部教授
- 3 正フاینマン (1919-1988)
アメリカの物理学者、ノーベル物理学賞 (1962年) 受賞。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(1) 中野藤生さんと糟谷忠雄さん

私は、更にS研の教員達に、**中野**さんのインタビューを提案しました。それを聞きつけた、M研の**佐藤憲昭**さんが、同じ時期にS研にいた**RKKY理論**で有名な**糟谷忠雄**さんも一緒にインタビューをしたらどうかと提案され、2人のインタビューが実現しました。そして、そのインタビュー記事が以下の理学同窓会報に掲載されました。

名大理学同窓会報 **21, 5** (2014).

https://www.dousou.sci.nagoya-u.ac.jp/activity/newsletter/pdf/21_05-09.pdf

糟谷ー中野インタビュー (2006年6月21日)



(前列左から) N: 中野藤生 (元S研)、K: 糟谷忠雄 (S研OB)、(後列左から) U: 上羽牧夫、O: 岡本祐幸、紺谷浩、S: 鈴木順三、H: 平島大、土射津昌久、S2: 佐藤憲昭、D: 出口和彦

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(2) 物理学教室の歴史を彩った人々

私は名大に着任してすぐの頃、学部の講義で「君達は素粒子論の坂田昌一教授、宇宙物理の早川幸男教授、生物物理の大澤文夫教授を知っていますか？」と聞きましたら、ほとんどの学生が知らないことが分かり、ショックを受けました。自分の大学の偉人を知らないのはまずいと思い、私は自分自身あまり知らなかった名大の物理学教室の歴史を勉強し、「物理学教室の歴史を彩った人々」というホームページを名大の物理の学生のために作りました。

日本語版 <https://www.phys.nagoya-u.ac.jp/study/history.html>

英語版 <https://www.phys.nagoya-u.ac.jp/en/study/history.html>

ナノサイエンスの上田良二教授とノーベル賞の小林誠・益川敏英両氏を加えて、とりあえず、6人を紹介しました。そして、毎年のように少しずつ紹介する名大の先人の数を増やし、現在では、39名の物理屋を紹介しています。

■物理学教室の歴史を彩った人々

本物理学教室の起源は1939年4月に名古屋帝國大学が我が国の9番目の帝国大学として発足した時に遡ります。最初は1940年4月に理工学部としてスタートしましたが、1942年4月に理学部と工学部に分かれしました。理学部は数学科、物理学科、化学科、生物学科の4学科からなりました。物理学科は最初3講座から始まりました。一つの講座は、完全講座の場合、教授1、助教授1、助手2の合計4人の教員からなりましたが、本来、教授が講座の運営を取り仕切る制度です。物理学科の講座数は1942年10月には4に、また、1943年11月には5に増えまし

このような本教室の充実ぶりは、一朝一夕で達成されたものではありません。それは、多くの先人達の何十年にも及ぶ尽力の結実であると言えるでしょう。ここでは、それら先人のうちの何人かを紹介しましょう。

* 坂田昌一

湯川中間子論を確立するのに決定的となった「2中間子論」の提唱[1]、くりこみ理論の先駆けとなった「C中間子論」の提唱[2]、くりこみ可能性の判定条件[3]、更には、クォーク模型の先駆けとなった「坂田模型」[4]やニュートリノ振動を予見した「牧・中川・坂田行列」の提唱[5]など、湯川秀樹、朝永振一郎と共に三重鎮として日本の素粒子論をリードした。[理 philosophia No. 2, p. 2] [理 philosophia No. 30, p. 4]
[坂田記念史料室]

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(3) サバティカル制度の導入 (with飯嶋徹、杉山直、佐藤憲昭の3氏)

名大着任と同時に私が努力したことのもう一つは、サバティカル制度を導入することです。私は全分野をカバーするために、素粒子物理、宇宙物理、物性物理の飯嶋(N研)、杉山(At研、現C研)、佐藤(M研)の3氏を誘ってワーキンググループを立ち上げました。そして、3年かかって、サバティカルに関する物理学教室内規と理学部内規を作ることに成功しました。平成20年度から物理学科で利用されています。最初は反対も多かったのになぜ可能であったのかは、まず、国立大学の法人化後、会議などが増えて、研究に専念できる時間が極端に減っているのです、このままでは駄目になってしまうという危機感が教員全体にあったことです。次に、「どこにも行かずに、自分の研究室に籠り、会議や講義から解放されて、学生達と研究に専念するサバティカルの取り方もある。」ということをお申しましたら、賛成が一気に4分の3まで増えたことです。そして、最後に、実は、法人化と同時に名大にサバティカル制度の全学規則が既に作られていたことを、ワーキンググループの活動開始後1年ぐらいたってから、芝井広教授(Uir研)がそっと教えてくれたことです(理学部では誰もこの制度を利用していなかったのは知りませんでした)。全学規則があることが分かれば、後は、むしろ早く教室内規を作らないと、不在中の負担を研究グループ内でカバーできる大きな研究グループのメンバーだけがサバティカルを取れるという不公平なことが起こると指摘して、全て解決しました。私達が作った物理学教室内規は、教室のどのメンバーでも気兼ねなくサバティカルを取れるように、その人の不在中の講義などの負担は教室全体で面倒をみるということをお前文で強調しています。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(4) 大学院一般入試日程の変更

私は、名大着任の年か翌年に、他の大学の大学院入試日程を調べて、物理学教室の大学院入試委員会で、東大と入試日程をずらすべきだと主張しました。(京大と北大を除く)名大を含む多くの大学が東大と日程をぶつけているので、東大を受験する全国の学生が名大を自動的に受験できなくなっていたからです。特に、**在東京の有力私立大学の優秀な学生が多くの場合東大を受験するので、名大を受験しない(できない)のが普通でした。**入試日程を変えるだけで、名大を受験可能な学生の母数が大幅に増えるということです。最初は、東大に名大の優秀な学生を取られてしまうから日程変更は危険だという反対意見が多かったのですが、提案から3年ぐらいたった時、**杉山直**教授が、「そろそろ岡本さんの提案を真剣に考えても良い時が来ているのでは。」と言ってくれ、賛成が一気に増えて、私の提案が認められました。私自身、数年後に慶応大の卒業生を大学院生として受け入れ、博士号を取らせたことがあります。そして、現在も物理学教室のこの方針は続いています。ちなみに、去年の旧帝大の大学院入試日程を調べてみたら、ほとんどの大学が東大と日程がぶつからないようにしていたので、時代は変わったと思いました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(5) Google Scholar

Boston UniversityのJohn Straub教授が2014年に4ヶ月間、学振の予算を獲得して、私の研究室を訪問しました。ある時、雑談していたら、彼が「Boston University化学科の主任をしていた時に、優秀な大学院生を集めるためには、我々がどんな研究をしていて、それがどれくらい評価されているのかを明らかにする必要があると主張したんだ。そして、学科のホームページの教員名簿で、各教員のGoogle Scholarの個人プロフィールへのリンクを張ることを提案したら、一部抵抗があったけど、最終的には、約30人中1人を除いて全員賛同してくれたんだ。」と言いました。ここで、まず、私はGoogle Scholarを知っていましたが、その個人プロフィールというものは知りませんでした。Johnによると、Web of Scienceなどは、同姓同名や似た名前の人の業績を区別するのは難しいが、Google Scholarの個人プロフィールは各研究者が自分の論文だけをリストアップするので、正確な論文リストと被引用数情報が得られる訳です。私はすぐに、名大物理でも同じことをやるべきだと思い、広報委員だった時に、ホームページの教員名簿のレイアウトを設計するとともに、皆にGoogle Scholarの個人プロフィールへのリンクを張るように提案しました。毎年のようにお願いしてきましたが、どうしてもやってくれない人がいて、全教員約90名中約70名の教員がこのリンクを張ってくれているのに留まっています。

<https://www.phys.nagoya-u.ac.jp/about/faculty.html>

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(5) Google Scholar

まずは、私自身のGoogle Scholar個人プロフィールを用意してみて、思わぬ発見がありました。自分がコーネル大学の大学院生だった時に、Minor(副専門)の指導教員で加速器科学の研究者であるRichard Tolman教授に夏休みのアルバイトとして雇ってもらい、複素誤差関数の数値解を計算するプログラムの開発をしたことがあるのですが、その時に私がまとめた「論文／報告書」をコーネル大学の加速器センターの紀要にTolman先生が投稿してくれていて、それが現在12回引用されていることが判ったのです。実は、この研究は、数学科のWolfgang Fuchs先生が「この変数領域とこの変数領域は2種類のPade近似、それ以外の変数領域は漸近式でやれば良い。」と言ってくれたことに忠実に従っただけだったことを思い出しました。今から思えば、謝辞の所で以下のように感謝を述べるだけでなく、

We would like to thank Professor W. Fuchs in Mathematics Department of Cornell University for various useful discussions.

Fuchs先生を共著者に加えておくべきでした(確か、辞退されたようにも思えてきました)。

Y. Okamoto and R. Tolman, “Rational approximation of the complex error function and the electric field of a two-dimensional Gaussian charge distribution,” *Cornell Electron Storage Ring Report*, CBN 80-13, Sept. (1980).

<https://scholar.google.com/scholar?cluster=9784284747416291258&hl=en&oi=scholar>

J. Talman, Y. Okamoto, and R. Talman, arXiv:2306.08095 (2023).

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(5) Google Scholar

Google Scholarと言えば、元University of Pennsylvaniaの教授で、現在はTemple UniversityのCollege of Science and Technologyの学部長をしているMichael Klein先生の言葉を思い出します。Klein教授は、水のTIP3Pなどの模型の提唱者であるとともに、多くの分子シミュレーション手法を発明した、私の分野の大御所中の大御所です。ある時、私は台湾のAcademia Sinica という国立研究機構の物理学研究所の外部評価委員を務めることを依頼されて、台北まで数日間行ったことがあります。素粒子物理、宇宙物理、物性物理、生物物理等を担当する4人で物理学研究所を評価しましたが、私はソフトマター物理・化学物理・生物物理の分野を担当しました。ちなみに、評価委員長は、素粒子物理の担当で、カリフォルニア工科大学のBarry Barish教授でした(2017年ノーベル物理学賞)。Klein先生も来ていましたが、彼は、個別の研究所ではなく、その上に立って、複数の理系の研究所の評価をする立場でした。また、別の時、ある国際会議で会った時に、私が「サバティカルでケンブリッジ大学を訪問することになりました。」と言ったら、「誰があなたのホストですか？」と聞いたので、「Chris Dobsonです。」と答えたら、「Dobsonは今絶頂期で良い選択だね。もう一人有名な誰々などは最近論文があまり出なくなっているからね。」と言いました。常に、世界中の研究者を評価しているような人です。更に、別の時にKleinさんは言いました。

Klein: 私は研究者を評価する時は、Google Scholar個人プロフィールを使っています。これさえあれば、簡単に評価できるけど、その設定をしていない人の評価は本当に困ってしまうね。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(5) Google Scholar

最近、大学の世界ランキングを発表する評価機関で有名なものが数社ありますが、これらの機関では、多くの場合、その評価基準に「Reputation(評判)」という主観に依存する項目を含みます。なぜかという、そうしないで、客観的な数値だけで評価すると、世間であまり知られていないような大学が上位に入ってしまう可能性があるからです。Reputationを評価基準に入れておけば、ハーバードやケンブリッジとかの超有名大学が上位に来るから、世間の評判とあまりずれないので、安心だからです。Klein先生によると、これらに抵抗して、客観的基準だけでランク付けをしようとする評価機関もあり、たとえば、Google Scholarの個人プロフィールから得られる総被引用数だけでランク付けするような所もあるそうです。Klein先生は、Temple Universityの学部長になってから、数年間で、Templeのこのランクを大幅に上げたと言いました。そして、次のように言いました。

Klein: 君もこの評価での名古屋大学の世界ランキングを上げようと思うなら、多くの名大のメンバーにGoogle Scholar個人プロフィールの設定をするように説得すべきだね。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(5) Google Scholar

私は、Google Scholar Citationsに基づく名大の世界ランクを上げるには、全教員にGoogle Scholarの個人プロフィールの設定をしてもらうのが重要だが、まずは、名大のノーベル賞受賞者にそれをやらせてもらえば、名大の総被引用数が一気に増えるだろうと思いました。そして、ノーベル化学賞の野依良治さん、ノーベル物理学賞の小林誠さんと益川敏英さんと天野浩さんに面会し、協力をお願いしました。すると、4人とも名大のためになるのなら喜んで協力しますと快諾してくれました。それで、これらの方々に、Google Scholar個人プロフィールの作成は私が協力しますと言いました。ただし、現役教授の天野先生だけは、私の協力なしで、面談中に私の説明を聞きながら、5分ぐらいでGoogle Scholarの個人プロフィールを作ってしまったので、驚きました。予想通り、これらの方々の被引用数は、名大の教員の中でトップクラスの数値なので、名大の世界ランキングに大いに貢献してくれています。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)











研究以外で名古屋で
やったこと

(5) Google Scholar

名古屋大学のGoogle Scholar
被引用数の最多順位

1位から10位までの研究者

閲覧：2022年3月

Google Scholar		プロフィールを検索	検索	プロフィール	マイライブラリ
名古屋大学 詳細					
	Makoto Tomoto Nagoya University 確認したメールアドレス: hepl.phys.nagoya-u.ac.jp Particle physics High energy physics	引用元 257705			
	Kazama Shingo Nagoya University 確認したメールアドレス: isee.nagoya-u.ac.jp	引用元 170726			
	Ryoji NOYORI Nagoya University (名古屋大学) 確認したメールアドレス: chem3.chem.nagoya-u.ac.jp asymmetric synthesis catalysis organic chemistry organic synthesis organometallic chemistry	引用元 83530			
	Kenji Inami Nagoya university, graduate school of Science, Accosiate professor 確認したメールアドレス: hepl.phys.nagoya-u.ac.jp Particle physics	引用元 54357			
	Hiroshi AMANO (天野 浩) Nagoya University (名古屋大学) 確認したメールアドレス: nuee.nagoya-u.ac.jp Semiconductor devices Opto electronics Power devices High frequency devices photocathode	引用元 51456			
	Shin'ichi NOJIRI Nagoya University/KMI Professor 確認したメールアドレス: gravity.phys.nagoya-u.ac.jp particle cosmology quantum field theory theoretical physics quantum gravity modified gravity	引用元 50795			
	Shinya Toyokuni Nagoya University Graduate School of Medicine 確認したメールアドレス: med.nagoya-u.ac.jp oxidative stress ferroptosis cancer prevention nanomaterials plasma medicine	引用元 44977			
	Takashi Takahashi President, Aichi Cancer Center; Professor Emeritus, Nagoya University 確認したメールアドレス: med.nagoya-u.ac.jp Cancer Research	引用元 43305			
	Junji Hisano Nagoya University 確認したメールアドレス: eken.phys.nagoya-u.ac.jp particle physics	引用元 35996			
	Hitoshi Sakakibara Nagoya University 確認したメールアドレス: agr.nagoya-u.ac.jp Plant Science Phytohormones Nitrogen Nutrition	引用元 35977			

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋で
やったこと

(5) Google Scholar

名古屋大学のGoogle Scholar
被引用数の最多順位

31位から40位までの研究者

閲覧：2022年3月

The screenshot shows a Google Scholar search for '名古屋大学' (Nagoya University). The results list 10 professors with their citation counts and research interests. The citation counts range from 15445 to 17650.

Professor Name	Citation Count	Research Interests
Kengo Sudo	17650	
Fumio Oosawa	17124	Biophysics, Molecular Biology, Chemical Physics, Softmatter Physics
Hiroshi Kiyama	17106	Neuroanatomy, Neuroscience
Yuko OKAMOTO (岡本祐幸)	16889	Computational Physics, Computational Chemistry, Biophysics, Molecular Simulation
Kensaku Mori	15983	Medical Imaging, Image Processing, Computer Vision, Computer Graphics
Takaki Miyata	15956	Brain development, Morphogenesis, Developmental Biology
Shinji Naganawa 長縄慎二	15789	Magnetic Resonance Imaging, Neuroscience, Head and neck radiology, Inner ear imaging
Ichiro Terasaki	15522	Condensed matter physics
Ryotaro Matsuda	15459	Metal organic framework
Shu-ichiro Inutsuka	15445	Astrophysics, Astronomy, Physics

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(6) 大澤文夫さん

名大に着任して1、2年後だったと思いますが、私は生物物理の偉人の**大澤文夫**名誉教授に会いました。名大で開催された研究会に出ておられましたので、お茶の時間に「**垣谷俊昭**教授の後任です」と自己紹介して、昔の名大物理学教室の話などを伺いました。ということは、**大澤**さんは84、5歳だったということです。話が弾んで約30分間話をしました。私の第一印象は、失礼かも知れませんが、お年なのに頭脳がすごく明晰だという事でした。特に、昔のことをよく覚えていらっしゃると思いました。その後、J研の**神山勉**教授が編集長を務めていた名大理学同窓会報の企画で**大澤**さんにインタビューをすることになった時に、**大澤**さんがインタビューアーとして指名されたのが私でした。弟子でも何でもない私で良いのかと躊躇しましたが、**大澤**さんの指名ということですので引き受け、2009年4月25日に約4時間に渡りインタビューしました。

名大理学同窓会報 No. 12, 「大澤文夫名誉教授に聞く」, pp. 6-10 (2009).

https://www.dousou.sci.nagoya-u.ac.jp/activity/newsletter/pdf/12_06-10.pdf

実は、私は**大澤**さんの名前は知っていたものの、具体的な研究成果は詳しくは知りませんでしたので、このインタビューで多くを学ぶことができました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(6) 大澤文夫さん

まず、1954年に発表された朝倉・大澤理論に関する *Journal of Chemical Physics* の論文 (S. Asakura and F. Oosawa, *J. Chem. Phys.* **22**, 1255 (1954)) が最初の25年ぐらいいは誰にも見向きもされなかったのに、突然引用され出し、その後、爆発的な引用が続いていることに驚きました。そして、思い至ったのが、2014年が朝倉・大澤理論60周年に当たるということです。それで、R研の宮崎州正さんに声を掛けて、2人で、国際会議“Nagoya Symposium on Depletion Forces: Celebrating the 60th Anniversary of the Asakura-Oosawa Theory”を名大で開催しました。



John Straub (Boston U.)

Bernard Brooks (NIH)

Nagoya Symposium on Depletion Forces: Celebrating the 60th Anniversary of the Asakura-Oosawa Theory

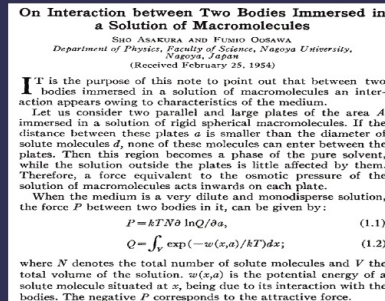
Date : March 14 - 15, 2014

Place : Noyori Conference Hall and Sakata & Hirata Hall
Nagoya University, Japan

(<http://www.nagoya-u.ac.jp/access-map/higashiyama/congre.html>)

Sponsored by

- JSPS Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas "Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions"
- Integrative Graduate Education and Research Program in Green Natural Sciences



Fumio Oosawa (left) and Sho Asakura (right) at Building A, School of Science, Nagoya University (March 12, 1963)

Invited Speakers (to be confirmed)

Fumio OOSAWA
Sho ASAKURA

Ryo AKIYAMA (Kyushu University, Japan)
Bernard BROOKS (NIH, USA)
Masao DOI (Beihang University, China)
Daan FRENKEL (University of Cambridge, UK)
Masahiro KINOSHITA (Kyoto University, Japan)
Werner KRAUTH (ENS, France)
Christos LIKOS (University of Vienna, Austria)
John STRAUB (Boston University, USA)
Remco TUINIER (Utrecht University, The Netherlands)

Organizers

Kunimasa MIYAZAKI (Nagoya University: miyazaki@r.phys.nagoya-u.ac.jp)
Yuko OKAMOTO (Nagoya University: okamoto@phys.nagoya-u.ac.jp)

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(6) 大澤文夫さん

合計約100名の参加者を得ましたが、91歳の**大澤氏**の2時間余りに及ぶ講演も大好評で、感動的な国際会議となりました。



名大理学同窓会報 No. 21, 「朝倉・大澤理論60周年記念シンポジウム」, p. 11 (2014).

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Koho/dosokai-21b.pdf>

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」Newsletter Vol. 9, 「国際会議開催報告」, pp. 4-8 (2014).

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Koho/DOIFnewsletter-9.pdf>

ちなみに、**大澤さん**が亡くなった時に、*Journal of Chemical Physics*の編集者を務めている**John Straub**さんがSpecial Topics “Depletion Forces and Asakura-Oosawa Theory”という特集を組んでくれたので、私は、**大澤文夫さん**になり代わって、この国際会議における**大澤さん**の講演の録音テープを起こして、投稿しました。

F. Oosawa, “The history of the birth of the Asakura–Oosawa theory,” *Journal of Chemical Physics* **155**, 084104 (2021).

私にとっても初めての経験でしたが、亡くなった人の名前で論文を投稿する時は、その遺族(ここでは、息子さんの一人)から許可を得る必要があることが分かりました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(6) 大澤文夫さん

更には、最初のインタビュー以来、頻繁にお会いするようになり、その度に録音させて頂いていたので、それらのインタビューを元に、物理学会誌の「歴史の小径」欄に「大澤文夫の生涯と物理」というタイトルで、大澤さんの短い伝記を書きました。

岡本祐幸、*日本物理学会誌* 第76巻12月号, pp. 803-806 (2021).

https://www.jstage.jst.go.jp/article/butsuri/76/12/76_803/_pdf

これは、私が名大坂田記念史料室長と日本物理学会物理学史資料委員会委員であった時に、名大博物館で企画展「名大物理学教室の礎を築いたパイオニア」を2020年11月17-28日に開催して、坂田昌一、早川幸男、上田良二、大澤文夫の4氏の業績を紹介した企画の一環として、日本物理学会誌に書いたもので、坂田さんの記事は西谷正さん、早川さんの記事は早川尚男さん、上田さんの記事は田中信夫さん、大澤さんの記事は私が担当しました。

また、大澤さんの弟子の一人の前田雄一郎さんが編集した追悼文集にも、「晩年の大澤文夫さん」というタイトルで寄稿しました。

岡本祐幸、*追悼文集「回想の大沢文夫：学問と人となり」*内 (2020).

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Koho/oosawa-obituary.pdf>

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジとの交換留学

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Koho/dousoukai-31b.pdf>

https://www.jstage.jst.go.jp/article/mssj/15/2/15_133/_pdf

私は2011年度に1年間のサバティカルを取り、4月からの3ヶ月間は、イタリア国フィレンツェの郊外のセストフィオレンティーノにある国立研究所 Institute for Chemistry of Organo Metallic Compounds に、7月からの6ヶ月間は、イギリス国ロンドンの北100キロ弱の距離にある University of Cambridge に、そして、最後の3ヶ月間は、フランス国パリ市内の国立研究所 Institute of Physical Chemical Biology に滞在しました。特に、ケンブリッジ大学の **St John's College** の訪問は、私に強い印象と興奮を与えました。**St John's College** は1511年創立で、ケンブリッジにある31のカレッジの中でも、名門の誉れが高く、関係者からは、量子力学を創ったノーベル物理学賞受賞者の **Paul Dirac** やノーベル化学賞を2回受賞した **Frederick Sanger** など、12人のノーベル賞受賞者を輩出しています。私のホストは蛋白質折り畳みの実験で有名な **Christopher Dobson** 教授で、当時、**St John's College** の学長 (Master) も務めていました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジとの交換留学

以下に私が撮ったセント・ジョンズ・カレッジの写真の幾つかを掲載します。

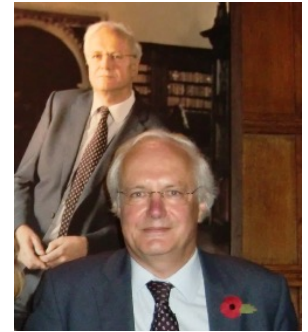


8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジとの交換留学

私はこの滞在で、素晴らしい研究成果を多く生み出してきたセント・ジョンズ・カレッジの学問的雰囲気・土壌に強く感動しました。そして、このカレッジを名大生達にも見せてあげたいと思うようになりました。私は、その後も、共同研究で、数日間ずつ再訪問してきましたが、2013年12月の訪問時に、**Christopher Dobson** 学長に、両大学の学生が相互訪問できるような交換留学を始めたいと提案しました。すると、「ぜひそうしよう。現在、ケンブリッジでは、日本人の留学生をほとんど見ない。英国と日本は長い歴史と伝統を大切にしている価値観を共有するので、もっと交流すべきだ。お互い、優秀な学生を送ろう。」と言ってくれて、学長が最初に認めてくれたので、簡単に交換留学の同意ができました。詳細は、セント・ジョンズ・カレッジの学生部長の**Matthias Dörrzapf** 先生と私で決めました。毎年3月に6名の名大生がケンブリッジ大を2週間訪問し、7月に6名のケンブリッジ生が名大を2週間訪問しています。この経緯については、以下の名大理学同窓会報の記事を参照して頂けると幸いです。



Christopher M. Dobson 学長



Matthias Dörrzapf 学生部長

岡本祐幸、*名大理学同窓会報* 31, 7 (2019).

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Koho/dousoukai-31b.pdf>

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジのRoger Griffin先生

セント・ジョンズ・カレッジの教員(Fellow)で仲良くなった人が何人かいますが、その中でも一番印象深い方に天文学者のRoger Griffin教授がいました。この方は光電効果を使って、視線速度(radial velocity)を求める装置を開発した人です。

R. F. Griffin, *The Astrophysical Journal* **148**, 465-476 (1967).

THE ASTROPHYSICAL JOURNAL, Vol. 148, May 1967



Roger F. Griffin 教授

A PHOTOELECTRIC RADIAL-VELOCITY SPECTROMETER

R. F. GRIFFIN

The Observatories, Madingley Road, Cambridge, England

Received August 30, 1966

ABSTRACT

This paper discusses the principles of measuring radial velocities directly with a photoelectric spectrometer and describes an experimental instrument for use in such measurements. Possible sources of systematic error are discussed, and reasons are given for supposing them to be capable of producing errors only of the order of 0.1 km/sec. Observations of bright late-type stars confirm the freedom of the method from appreciable systematic errors. They demonstrate that the standard deviation of one photoelectric measurement of the velocity of a 5-mag star is about 1 km/sec, practically the same as that of an *a*-quality velocity in the *General Catalogue of Stellar Radial Velocities*. Using a 36-inch telescope, one can determine velocities of stars at least as faint as $m_v = 9$ at a rate of 6-8 per hour.

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジのRoger Griffin先生

先生は、この装置を使って、多くの連星の観測を行いました。驚くべきことに、シリーズとして同じタイトルの論文出版を44年間続けた人で、2ヶ月ごとに年に6回発行される *The Observatory* という雑誌に毎号続けて論文を発表してきました。調べた結果、以下のことが分かりました。

最初の論文が1975年2月号の Paper 1で、最後の論文が2019年6月号の Paper 265でした。連続出版は、1977年8月号の Paper 14 から2019年2月号の Paper 264までの251論文で、42年間続きました。

THE OBSERVATORY

Vol. 139

2019 FEBRUARY

No. 1268

SPECTROSCOPIC BINARY ORBITS
FROM PHOTOELECTRIC RADIAL VELOCITIES

PAPER 264: HD 174123

By R. F. Griffin
Cambridge Observatories

HD 174123 is shown to be a double-lined spectroscopic binary system consisting of practically equal components of near-solar type, in a low-eccentricity orbit with a period of 13 years and an inclination of about 60° .

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(7) ケンブリッジ大学セント・ジョンズ・カレッジのRoger Griffin先生

私はこの驚異的な業績を何とか顕彰しようと思い、Guinness World Recordsに以下のタイトルで昨年末に申請しました。

Longest series of articles and longest consecutive publication in an academic journal

しかし、残念ながら、以下の不採択メールが届きました。

----- Forwarded Message -----

Subject: Guinness World Records - Application Update

Date: 8 Apr 2022 10:34:59 +0100

Dear Yuko Okamoto

Thank you for sending us the details of your proposed record attempt for 'Longest series of articles and longest consecutive publication in an academic journal'.

Unfortunately, **after thoroughly reviewing your application** with members of our research team, we are afraid to say that **we cannot accept your proposal as a Guinness World Records title.**

Kind regards,

Records Management Team

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(8) 物理学教室の2専攻の統合 (with佐藤憲昭氏)

名大大学院理学研究科の物理学教室には2つの専攻(素粒子宇宙物理学専攻と物質理学専攻(物理系))がありましたが、大学院入試は一緒にやっていますし、学部教育も一緒にやっています。私が問題だと思っていたのは、学部は一つの教育組織であり、また、大学院入試も同じなのに、専攻によって大学院教育の予算を持っていたり持っていなかったりすると、援助がもらえる学生ともらえない学生が出て、不公平感を与えてしまっていて良くないということです。M研の佐藤憲昭教授も同様の考えでした。それで2人で協力して、2専攻の統合を物理学教室に提案しました。しかし、物理学教室内では、人事に関する歴史的な経緯もあり、統合に慎重な意見も多かったのです。それを我々2人で教室内の人々を説得し、人事に関してはこれまで通りとすることを条件に2専攻の統合案を物理学教室で成立させました。この案を理学研究科に提出した所、それによって、物質理学専攻のサイズが小さくなってしまいう物質理学専攻(化学系)など、必ずしも他の専攻が賛成してくれた訳ではありませんでした。そこで、元理学研究科長の杉山直教授が、理学研究科の全専攻を統合するという案を出して、それが認められて、寺崎一郎新理学研究科長の下、今年度から理学研究科は一専攻体制となりました。佐藤さんと私の当初の目的も達成された訳です。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(9) 生協理事長として

私は2015年度から2018年度までの4年間、名大生協の理事長を務めました。経緯は以下の通りです。ある日、物理の元F研で生協の副理事長の星野香さんと専務理事の柴山実さんが私の居室へやってきて、星野さんが言いました。

星野: 岡本さん、あなたは名大愛が強いから生協の理事長になってくれませんか？
それで引き受けました。私は在任期間中に大したことは何もできませんでした。赤字が続いたので、提案したのは、予算を多く持っている教員や大学の執行部に生協で物を購入することをお願いすることです。専務理事の白取義之さんをお願いしたら、以下で始まるチラシを用意してくれました。

名古屋大学消費生活協同組合の事業のご紹介と公費利用結集のお願い

名古屋大学消費生活協同組合
理事長 岡本 祐幸
専務理事 白取 義之

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(9) 生協理事長として 七大戦で名大チームを応援しよう

もう一つ、私が生協理事長としてやったことは、名大が七大戦の主幹校になった2016/2017年に、せっかく名大内や近くで試合が行われるので、大応援団を送り込もうと、試合の場所とスケジュールを調べて、生協の食堂や売店のある建物の中の目立つ所に、右のような案内を掲示したことです。

名大体育会のアナウンスには試合日しか書かれていなかったもので、私が個別に運動部に問い合わせ、試合時間を調べたのでした。しかし、学生も教職員も皆さん忙しいらしく、残念ながら、あまり応援に来てくれず、私の苦労も報われませんでした。

今年の七大戦は名大が主幹校をつとめています。皆で名大チームの試合を応援して、14年ぶりの総合優勝を勝ち取りましょう。

以下に、部活のホームページなどから調べて、こちらで把握している、近日中に開催される試合の日程を書きますが、予定は急に変わることもありますので、正確な情報及び詳細は名古屋大学体育会の Twitter (@n_u_a_a; https://twitter.com/n_u_a_a) をご参照ください。多くの方の応援を期待します。

競技名	競技日程
*ラクロス (女子)	7/15～7/17
	7/15 (土) 10:30 ~ 11:30, vs. 京大
	17:00 ~ 18:00, vs. 九大
	7/16 (日) 10:40 ~ 11:40, vs. 東大



第56回七大戦マスコット
ナゴすけ

競技会場
名大山の上グラウンド

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(10) 伊藤光男分子研元所長の絵画について

分子研元所長の伊藤光男先生は水彩画をやっていました。私は2003年に久保亮五氏関係の講演会に招待された時、受付で久保氏の画文集が売られていたので購入しました。それは、久保氏の受勲を記念して出版されたものでした。私は、絵だけでなく文章がある画文集の素晴らしさに感動し、伊藤先生も将来受勲された時にぜひ画文集を出版したいと思いました。そして、2004年に瑞寶重光章を受章されたので、伊藤先生にこの提案をしたら、ご快諾頂き、画文集「思い出すまま その2」が出版されました。印刷は、分子研時代によく利用していた岡崎市のブラザー印刷株式会社にお問い合わせしました。岡田光司専務取締役には特別な配慮を頂きました。私は提案者ではありますが、確か、出版費用は全額伊藤先生がご自分で支払われたと記憶しています(確かではありませんが、受勲の祝賀会 <https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Ito/ito-prize-04.pdf>

の記念品代からも一部を支払ったのかも知れません)。

また、私は伊藤先生が40年間に渡り描いてきた3千枚の絵が将来どうなるのかを心配していました。そして、ある時2人で飲んだ時に、伊藤先生に、「信州を旅行していると森の中に小さな美術館を見かけることがよくあります。私達分子研関係者や東北大伊藤研のOBの方々から寄付を募って伊藤美術館を信州に建てたらどうかと思います。」と言いましたら、「費用は自分で出すから前向きに考えたい。」とおっしゃいました。私は念のために、分子研時代の私の博士研究員だった西川武志氏(現計算科学振興財団 FOCUS)に電話をして相談しました(彼は世情に明るいので)。西川氏が言うには、「美術館を建てることは可能でしょうが、それを長く維持しようとするれば、大変なお金がかかり、不可能です。むしろ、既存の美術館に伊藤先生の絵を寄贈して常設展を開いてもらうのが賢明です。そして、それを頼むべき美術館は分子研のすぐ近くにあり、分子研とも縁のある葵丘の他は考えられません。」と言いました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(10) 伊藤光男分子研元所長の絵画について

https://www.ims.ac.jp/publications/letters75/75_12.pdf

https://www.ims.ac.jp/publications/letters81/81_4.pdf

それで、急遽伊藤美術館建設の話はやめにして、私が(アポなしで)葵丘を訪問して、館長の小原淳氏にお願いしたところ、「伊藤先生には分子研所長時代にお世話になりました。検討させてください。」とのことでした。それから3ヶ月ぐらい何も連絡がなかったのですが、結局、承認しますというメールが届いて、2016年11月27日から葵丘での常設展が始まりました。3か月ごとに、6枚ずつの絵を展示してきました。新型コロナウイルスの感染拡大でこの3年程は絵の差し替えも滞っていますが、現在第17回展が進行中です。

なお、伊藤先生の画集「つれづれに」(シリーズ11冊)や画文集「思い出すまま」(2冊)などの絵は私のホームページの中の「伊藤光男画伯 画集・画文集」でも見ることができます。

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/Ito/index.html>



8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(11) CCP2023の日本招致と日本物理学会の計算物理領域の立ち上げに向けて

私は2018年夏にカリフォルニア大学デーヴィス校で開催された**計算物理学**の国際会議 **Conference on Computational Physics (CCP2018)** で招待講演を依頼されました。**計算物理 (Computational Physics)** は、計算機を道具とした研究を全て含むので、物理学の全分野をカバーするユニークな研究分野です。すなわち、それぞれ、自分の個別分野で研究活動をしている人が、更に、**計算物理** で追加で活動する訳で、大変なので、CCPへの参加が少ない状態でした。日本からは私以外は参加登録がないので日本で宣伝して欲しいと、暫くしてから主催者からメールが届きました。それで、私の知っているメーリングリストに案内を流して参加を呼び掛けたら、最終的には日本からの参加者が約30名に増えました。しかし、**CCP2018** に参加してみて、**計算物理** の分野での日本の存在感が極めて希薄だと痛感しました。私はこれは、日本物理学会に「**計算物理領域**」がないからだと考えました。**国際純粋・応用物理学連合 (IUPAP)** にも、**米国物理学会** にも、**欧州物理学会** にも**計算物理「領域」** が存在しますが、日本にはありません。それで、私は、P研の**渡邊智彦**さんに日本物理学会に**計算物理領域**を作りたいという私の考えを言って、協力を求めました。

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(11) CCP2023の日本招致と日本物理学会の計算物理領域の立ち上げに向けて

私達がまずやったことは、2019年春の日本物理学会年次大会で、「**計算物理インフォーマルミーティング**」とその直前のシンポジウム「**計算物理学への誘い**」を企画したことです。シンポジウムのプログラムは、以下の通りでした。

1. はじめに(岡本祐幸:名大理)
2. 計算素粒子物理学の挑戦(青木慎也:京大基研)
3. 計算核物理の展望(大塚孝治:理研)
4. 天体活動と宇宙進化の大規模数値シミュレーション(松元亮治:千葉大理)
5. 高温から低温に至る原子と光の物理と計算(渡辺信一:電通大物工)
6. 物質と材料の計算科学(常行真司:東大理)
7. 追跡と逃避:個から集団(大平徹:名大多元)
8. 雲乱流の計算科学(後藤俊幸:名工大工)
9. おわりに(渡邊智彦:名大理)

このシンポジウムには約130名の聴講者があり、多くの質問が出るなど、大成功でした。更に、その直後に同じ会場で開催したインフォーマルミーティングで、私は「**計算物理領域**」設立の必要性を訴え、まずは、そのためのホームページとメーリングリストを立ち上げることを提案し、認められました。また、**CCP2025**を日本に招致してはどうかと提案しました。これは、継続審議となりました。なお、一つ目については、後日、この2つのミーティングに参加した、**藤堂眞治**さん(東大理)が以下のものを作ってくれました。

計算物理領域準備会HP: <https://sites.google.com/view/compphys-jp/>

計算物理メーリングリスト: [COMPPHYS-JP](https://mail.compphys.jp/)

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

(11) CCP2023の日本招致と日本物理学会の計算物理領域の立ち上げに向けて

2021年春の日本物理学会年次大会の「**計算物理インフォーマルミーティング**」では、まず、**Association of Asia Pacific Physical Societies (AAPPS)**に「計算物理領域」を設立する動きが出ているので、日本からも是非協力して欲しいと、AAPPS会長の**横山順一氏**(東大)の説明があり、協力することが決まりました。次に、**CCP2012**(神戸)以来の**CCP**の日本招致を目指すかどうかを議論しました。次のアジアでの開催は**CCP2023**と**CCP2026**ですが、韓国とシンガポールが以前から熱心に動いているという情報が入っていたので、私は、それらの国に遠慮して、**CCP2023**は諦めて、**CCP2026**を招致したらと言いましたが、「世界のスーパーコンピューター**富岳**が稼働を始めたのだから、**今でしょ**」という意見が出て、結局、**CCP2023**の日本招致を目指すことになりました。これを受けて私がまずやったことは、**CCP2023招致準備委員会**を立ち上げ、日本中の**計算物理**に関わる研究者に参加を呼び掛けました。幸い、合計72名の幅広い分野の研究者が参加してくれました。具体的には、以下の分野の人々です。 1. Computer Science, Quantum Computer, and Machine Learning、2. Elementary Particle Physics and Lattice Gauge Theory、3. Hadron Physics、4. Theoretical Nuclear Physics、5. Astronomy and Astrophysics、6. Atomic and Molecular Physics、7. Plasma Physics、8. Magnetism、9. Semiconductors、10. Molecular Solid、11. Strongly Correlated Electrons、

8. 名古屋大学 教授 (2005-2022)

研究以外で名古屋でやったこと

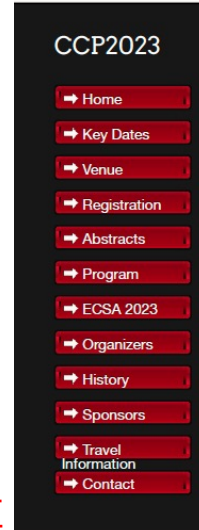
(11) CCP2023の日本招致と日本物理学会の 計算物理領域の立ち上げに向けて

- 12. Surface Science、13. Condensed Matter Theory、
- 14. Statistical Physics、15. Fluid Mechanics、
- 16. Applied Mathematics、17. Social Physics、
- 18. Softmatter Physics、19. Chemical Physics、
- 20. Biophysics

私は、2021年6月下旬の締切までにProposalを書くとともに、8月のCCP2021に日本から多くの人に参加してくれるよう、皆にお願いしました。その会期中にIUPAP C20(計算物理)委員会の会議が開かれ、その場でヒアリングがあり、CCP2023の開催国が決まる予定だったからです。幸い、84件もの発表が日本からあったので、私のヒアリングの発表に大きな援護射撃となりました。結局、韓国と日本の2カ国だけが申請をして、投票の結果、7対3の得票差でCCP2023の日本開催が決定されました。

現在、CCP2023の準備に取り組んでいますが、同時に日本物理学会に「計算物理領域」を設立するための活動も継続しています。

<https://ccp2023.jp>



Supercomputer Fugaku at RIKEN R-CCS in Kobe (© RIKEN)

CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics

- Date: August 4 (Fri) - 8 (Tue), 2023
- Venue: Kobe International Conference Center, Kobe Port Island, Kobe, Japan

CCP2023 is the 34th in a series of meetings of scientists working in the domain of Computational Physics. The Conference on Computational Physics (CCP) is held every year under the auspices of the C20 Commission for Computational Physics of the International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP). The conference includes a broad range of computational scientists with common interests in communicating and engaging with their computation-oriented colleagues to exchange information and develop future collaborations. We plan to hold CCP2023 in a hybrid way, namely, on-site and on-line (using an Internet conference system).



Kobe in the twilight (© Kobe Tourism Bureau)

若者に贈る言葉

- (1) 楽観主義
- (2) 野心

若者に贈る言葉(1)

楽観主義

利根川:「確かに科学の世界というのは、記憶力がひじょうによくていわゆる学業成績がトップで大秀才であれば、優秀な科学者になれるかと言えば、私の観察ではかならずしもそうではないですね。もちろん、ある程度はできないとだめですけどね。(中略)」

池田:「つまりいわば楽観的な人のほうが向いているということ
なんですか。」

利根川:「そう。私はいつも言うんだけど、科学者になるための重要な条件の一つは、楽観的であるということです。がんばって研究していれば、いつかは大きな発見ができるぞと思い込んで、自分の心理をコントロールできるっていうことはひじょうに重要で、これは受験で成績がいいという能力とはあまり関係がないんですね。」

天才を作る六つの条件(その3)

東嶋:「年齢を重ねたからこそ得られる力があるわけですね。少し元気が出てきました。」

藤原:「その『元気が出る』というのが、創造力には不可欠なんですよ。野心、知識、執着心ときて、**第四の条件**は、『**楽観的であること**』です。」

東嶋:「数学者も**楽観的**でないと大きな仕事ができないんですか。」

藤原:「**楽観的**でないと、とてもじゃないけれど、大きな問題に取り組み続けることはできません。(中略)悲観的な人は、最初から難しい問題には取り組まない。(中略)これまで誰も解けなかった問題を攻略するには、何らかの僥倖が必要です。大発見、大発明には『ツキ』の要素が多分にある。(中略)しかし、こうした幸運には、何度失敗しても愚直に山道に分け入っていく**楽観的**な人間でないと出くわすことができないんですね。」

from 岡本祐幸 “Coffee Break”

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/cfbk/coffee-break.pdf>

天才を作る六つの条件(その4)

藤原:「**楽観的**であることには、もうひとつ強みがあります。**楽観的**じゃないと、脳の力は全開にならないんですね。(中略)数学者だって新しい問題を前にすると、一瞬ひるむんですよ。そこで萎縮したり、不安になったりしてしまうと、実力の半分しか出せない。『イツツ・ソー・イージー(ああ、こりゃ簡単だ)』と自分に気合をかけることではじめて、脳が全開するんです。」

東嶋:「しかし**楽観的**かどうかは、もって生まれた性格にもよるのでは。」

藤原:「いや、そうではないと思います。**楽観**は育てることができる。そして、その方法はひとつしかありません。**褒める**ことです。(中略)教師の仕事は究極的には二つしかなくて、ひとつは機を捉えて生徒を**褒める**こと、もうひとつはその言葉に説得力があるような存在になることでしょう。」

藤原正彦「天才を作る六つの条件とは」文芸春秋2008年5月号 p. 136

日本人は褒め方が足りない！

若者に贈る言葉(2)

実は、私はもう一つ、
「野心」の重要性を強調したいと思います。

日本人は野心が足りない！

from 岡本祐幸 “Coffee Break”

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/cfbk/coffee-break.pdf>

天才を作る六つの条件

藤原:「素晴らしい数学的発見をしたり、これまでにない技術を発明したり、あるいは一般の企業でも新規事業にのりだしたりする場合には、すべて未知の問題と取り組むことになりますね。そのときに必要な知的な力は、ひとつではありません。まず第一に『野心』。これはすべての出発点です。どんなに頭がいい人がどんなに真面目に勉強していても、野心がなかったら何も生み出せない。(中略)日本で『野心』というと貶し言葉ですが、英語ではクラーク博士が唱えた『ボーイズ・ビー・アンビシャス』の『アンビシャス』は褒め言葉。野心のない者には何も成し遂げられない、という大前提がある。世界中の誰も解いていないあの難問を自分が解いてやろう、という意欲が大事なんです。」

藤原正彦「天才を作る六つの条件とは」文芸春秋2008年5月号 p. 136

若者に贈る言葉

from 岡本祐幸 “Coffee Break”

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/cfbk/coffee-break.pdf>

そして、「野心」を現実化するために、冒険心が必要です。いくら大きな夢を心に描いても、それを実現するために、思い切って一歩前に進む**勇気**と**冒険心**がなければ夢は夢のままで留まってしまいうからです。札幌農学校のクラーク博士の

「Boys, be ambitious!(少年よ、大志を抱け)」という有名な言葉を借りて、

「Boys and girls, be **ambitious** and **adventurous!**
(少年よ少女よ、**大志**を抱け、そして、**冒険心**を持て)」
という言葉을最後に皆さんに贈りたいと思います。

定年を迎えた今の心境

from 岡本祐幸 “Coffee Break”

<https://yuko-okamoto.github.io/homepage/cfbk/coffee-break.pdf>

- 「今まで、人は生まれて、仕事をして、死んでいく、という経過が、一つの完成した作品のように見えていたのが、そうではなく、無数の可能性の中途半端な実現の束が、人の一生なのではないか、と思われてきたのだった。ほとんどの人間の人生が中断なのではないのか。」

S. Nakamura, “RAI, Sanyo and His Time (I),” (Chuko Bunko), p.2.

中村真一郎「頼山陽とその時代(上)」(中公文庫)p. 2

Boys easily get old before their study is completed.

少年老い易く、学成り難し