

大規模計算科学部門

Large-Scale Computational Science Division

1 部門スタッフ

教授 菊池誠

略歴: 1986年3月 東北大学大学院理学研究科物理学専攻後期課程修了、1987年2月 大阪大学理学部物理学科助手、1993年8月 同助教授(改組により、現在、大阪大学大学院理学研究科)、2000年4月より、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算科学部門教授。日本物理学会、日本応用数理学会各会員。理学博士。



((C) 水玉螢之丞)

助教授 時田恵一郎

略歴: 1994年3月 東京大学大学院理学研究科相関理化学専攻博士課程修了、1994年4月 大阪大学理学部物理学科助手、2000年4月より、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算科学部門助教授。日本物理学会、日本数理生物学会、日本生態学会、日本進化学会、個体群生態学会各会員。理学博士。



2 教育および教育支援業績

本年度は以下の学内の講義を担当した

- (1) 共通教育・専門基礎科目
力学Ⅰ (時田)
- (2) 共通教育・情報処理教育科目
計算機シミュレーション入門(菊池)
サイバーサイエンスの世界(分担、時田)

- (3) 共通教育・基礎セミナー

楽器を作ろう・・・音の科学入門(分担、菊池)
サイエンス・フィクション(菊池)

- (4) 理学部専門科目

力学Ⅰ(物理学科、菊池)
力学Ⅰ演義(物理学科、菊池)
統計物理学Ⅲ(物理学科、時田)
物理学特別研究(物理学科、分担、菊池・時田)

- (5) 大学院理学研究科科目

多体問題セミナーⅡ(物理学専攻、菊池・時田)

- (6) 大学院生命機能研究科科目

基礎数学Ⅰ(分担、時田)

3 研究概要

本部門の研究分野をひとことでまとめると**学際計算物理学**である。統計力学や非線形動力学の理論を基礎とし、計算機シミュレーションなどの計算物理学的手法を用いて、物理学と生物学や工学との学際領域の研究に取り組んでいる。現在の主な研究テーマはタンパク質の折り畳みと分子モーターの運動機構解明、大規模生態系の進化と安定性、ウィルス動態の数理、ニューラルネットワーク、高速道路交通流などである。また、計算科学の分野では計算手法の開発も重要な課題である。我々の部門では、特にモンテカルロシミュレーションの拡張(拡張アンサンブル法)について精力的に研究を行っている。

4 研究成果

4.1 タンパク質の機能とゆらぎ

従来のいわゆるタンパク質フォールディング研究では、天然状態(あるいは基底状態)のみを問題とし、主として天然構造予測に重点が置かれてきた。しかし、近年、エネルギーランドスケープ理論あるいはいわゆるファネル描像が大きな成功を収め、タンパク質の自由エネルギー構造全体が折れたたみに対して最適化されているという認識が広がりつつある。すなわち、タンパク質では天然構造のみならず、そこに至るための自由エネルギー構造全体が進化的に形成されてきたものとするのである。

また、タンパク質は“熱力学的安定構造”だけではなく“機能発現”をも実現するように進化してきたも

のであるが、ファネル理論の考え方を敷衍するなら、機能もまた端的に自由エネルギーの大域的構造に反映しているはずと我々は考える。特に、アロステリック酵素や生体分子モーターなど、機能発現に大きな構造変化を伴うタンパク質では、その構造変化は「部分的 unfolding-and-folding」によって実現され、そのための自由エネルギー構造までが進化によって作り上げられていると考えるのは自然である。

我々は、タンパク質の構造空間で見た自由エネルギー景観の特徴を調べることによって、タンパク質の機能発現メカニズムに迫ろうとしている。主たる研究手法は、格子模型やバネ・ビーズ模型など粗視化されたモデルに基づく計算機シミュレーションである。なお、格子模型の熱平衡状態計算については、我々が統計数理研究所・伊庭幸人助教授と協力して開発した Multi-Self-Overlap Ensemble (MSOE) Monte Carlo 法が現時点で世界最強の計算手法であり、この手法の利点を生かした計算を行なっている。

4.1.1 分子モータータンパクの構造揺らぎとヌクレオチド解離

代表的な生体分子モーターであるアクチン・ミオシン系やキネシン・微小管系は ATP 解離によって解放される自由エネルギーを運動に変換する。この際に生じるモータータンパクの構造変化がヌクレオチドの結合・解離とどのように関係するかを議論するため、Go-like モデルを拡張して、結合状態と解離状態のふたつの構造を安定および準安定構造として埋め込んだ新たな粗視化モデルを導入し、構造ゆらぎの計算を行っている。2006 年度は、ミオシンについては、コンバーターの方によってヌクレオチド解離率が変化するといういわゆる「ストレインセンサー」に相当する機能が実現していることを見出した。また、キネシンについては通常の Go-like モデルで KIF1 を扱い、ヌクレオチド状態によって、 α 4 ヘリックスのゆらぎが大幅に異なることを見出した。後者は、ヘリックスのゆらぎがヌクレオチドによって制御され、それが微小管との結合の強さを変えることを示唆している。

また、キネシンが運動する際の“レール”である微小管を構成するチューブリンについても、同様の計算を行ない、構造ゆらぎを記述する自由エネルギーランドスケープを得た。もっとも特徴的なのは、キネシン結合部位が大きく揺らぐことである。これは、キネシンの結合に際してチューブリンの部分的 folding が積極的な役割を果たす可能性を示唆している。つまり、微小管は単なるレールではなく、キネシンと協同的に働いて (部分的 folding によって)、モーターとして機能しているのではないかと考えられる。

以上の結果の一部は論文として投稿中である。

4.1.2 粗視化タンパクモデルの粗視化

Go-like モデルを対象として、粗視化タンパクモデルをさらに粗視化する研究を行った。結果として、自由エネルギーランドスケープの大域的な構造が、アミノ酸を間引いて数を減らした粗視化によっても失われないことを見出した。特に RNaseH を用いた計算では、折れ畳み中間状態を含む自由エネルギーランドスケープであっても、定性的には同じものが得られることが示された。つまり、巨大なタンパクの自由エネルギーランドスケープを議論するために、アミノ酸を間引いたモデルを使ってよいということになり、これは計算量の観点からも重要な結果と言える。実際にこの手法を SecA に応用し、アミノ酸数を現実の 1/7 に減らしたモデルで、実験と一致する結果を得た。この計算結果の特筆すべき点として、「アロステリー」を実現する自由エネルギーランドスケープを得たことが挙げられる。これらの結果は論文を準備中である。

4.1.3 タンパク質凝集の自由エネルギーランドスケープ

2005 年度に引き続きプリオンの凝集を念頭に置いて、二個のタンパクからなる系の熱力学的安定状態を簡単な格子モデルを用いて調べた。2005 年度の研究では、translational entropy の効果に着目したが、2006 年度はより「異常凝集」の問題に本質的と考えられる conformational entropy の効果に注目し、二個のタンパクを極めて狭い領域に閉じこめた際の自由エネルギーランドスケープを調べた。エントロピー効果により、凝集が「吸熱反応」として生じる場合があることを見出した。

4.2 理論生物学

昨年度に引き続き、計算物理学、統計物理学、非線形物理学などの手法を用いて以下に示す生物モデルの理論的研究を進めた。

4.2.1 大規模生態系モデル

数理生物学、ゲーム理論、集団遺伝学、数理経済学などの様々な分野で研究されているレプリケーター・ダイナミクスに対する、非線形動力学的・統計力学的研究を行った。特に、大規模生物群集における、共存種数、個体数の分布、種の豊富さのパターンなどに対する理論研究を進め、その生態学的な意義を検討し、理論による予測・実証研究への提言などを考察した。この

結果は論文として Ecological Informatics 誌に掲載され (Tokita, 2006)、国内外国際会議で招待講演も行った。

また、イタリア・トリエステ・国際理論物理学研究所 (ICTP) Tobias Galla 氏と個体数分布の統計力学について共同研究をおこなった。理論物理学で使われてきた生成汎関数の方法を日本で初めて生態系モデルに応用し、資源競争が種の多様性に与える影響などに関して新たな結果を得た。

4.2.2 種数面積関係と Zipf の法則

昨年度に引き続き、広島大学入江治行氏との共同研究を行い、対数正規分布、指数分布、ガンマ分布、ベキ分布などの、様々な分布関数から、生態学において古典的に調べられて来た面積と種数の間に成り立つべき関係（種数面積関係）を導く一般的な数理的手法の研究を行った。これにより、書物の中の単語数の分布、都市人口分布、姓の分布、細胞内の mRNA の量の分布などで知られる、いわゆる Zipf の法則（指数が -2 のベキ分布）が、系の多様性に関係する関数を最大化する臨界点で成り立つことなどを発見した。さらに、古典的な研究を拡張して、任意の指数のベキ分布を与える確率過程モデルを開発した。これは、大陸から島への種の移入のダイナミクスを考える「島の生物地理学」におけるモデルと相似であることがわかり、全く異なる分野で普遍的に成り立つ Zipf の法則に対する共通のメカニズムを生態学的な観点から統一的に考えることができることがわかった。

4.2.3 ウィルスと免疫系の進化モデル

HIV などのウィルスと免疫系の進化についての理論研究を行った。従来の数理モデルにウィルス株の進化を陽に取り入れた新たなモデルを提案し、その振る舞いを数理的に調べた結果、パラメータに依存して、HIV に特有な、AIDS 発症までのいわゆる「無症候期間」が再現された。さらに、その無症候期間の長さが、ウィルスの増殖や免疫細胞がウィルスに破壊される度合い等のパラメータに依存して変わることなども明らかになった。また、近似的な理論計算を用いることにより、進化を考慮しないモデルで得られていた AIDS 発症の条件（ウィルス変異株の「多様性のしきい値」と呼ばれる）が新しいモデルでも同様に得られることなどを示した。これらの結果は国際会議等で発表し、論文誌への投稿を準備中である。

4.2.4 神経回路網のモデル

神経回路網のダイナミクスについての理論的研究を行った。特に、興奮性細胞と抑制性細胞の数比が力学に与える影響について調べた結果、ある特徴的な数比において、複雑なダイナミクスが観察されることなどがわかった。さらに、非平衡統計物理学の手法を用いて、各神経細胞の従う確率微分方程式（マスター方程式）を縮約して、興奮性細胞群および抑制性細胞群の発火率などのマクロな物理量の従う方程式（非線形フォッカー・プランク方程式）を導いた。この結果は国際学会等で発表した。

4.3 モンテカルロ・シミュレーションの技法

4.3.1 Wang-Landau 法の魔方陣問題への応用

近年、マルチカノニカル法のバリエーションとして Wang-Landau の方法が使われている。我々はこれをマルチカノニカル法の学習フェーズを効率よく行う方法として使い、整数制約問題のひとつである「魔方陣の個数を数える問題」に応用し、その有効性を示した。

4.3.2 6-Clock モデルの vorticity modulus

古典スピン系である強磁性 6-Clock モデルは、常磁性相・Kosterlitz-Thouless 相・強磁性相の三つの相を持つ。特に KT 相への転移では自由渦の生成自由エネルギーが負から正へ変化すると考えられているが、その自由エネルギーを顕わに計算した例はなかった。我々は、川村・菊池が提唱した vorticity modulus を精度よく求めるために、マルチカノニカル法を拡張した新しい手法を提案し、計算を行った。結果として、二回の相転移それぞれで vorticity modulus のふるまいが変化することを示した。

4.4 研究協力

国内外の多くの研究者と積極的に研究協力を行うことにより、研究の活性化を計っている。

大学院生の吉野好美（博士後期課程 1 年）は、大阪大学海外短期留学助成金により 2006 年 10-11 月にトリエステ国際理論物理学研究所に滞在し、Galla 氏と大規模生態系モデルに関する共同研究を行った。同じく杉浦正康は、大阪大学海外短期留学助成金により 2007 年 2-4 月にハーバード大学理論生物学研究所に滞在し、Martin Nowak 教授らとウィルスと免疫系の進化に関する共同研究を行った。

科学研究費や公益信託五峯ライフサイエンス国際基金研究助成などの競争的獲得研究費により、韓国釜山大

学 Tae-Soo Chon 教授やフランス・トゥールーズ・Paul Sabatier 大学 Sovan Lek 教授らを含む、生態系に対する大規模実証研究における第一人者および国内研究者を招聘し、サイバーメディアセンターにて国際研究集会を開催した (CMC International Workshop on Ecology, August 26, 2006)。

台湾中央研究員物理学研究所より胡陳棍教授を招き、計算物理学に関する討論を行った。

なお、博士研究員として高城史子 (JST 研究員、サイバーメディアセンター招聘研究員)、金田亮 (サイバーメディアセンター招聘研究員)、理学研究科物理学専攻博士課程学生として下山紘充・杉浦正康・吉野好美の3名が研究に参加した。

5 社会貢献

5.1 「ニセ科学問題」へのとりくみ

科学者が社会に貢献するありかたのひとつとして、「ニセ科学」に警鐘を鳴らす活動に取り組んだ。なお、ここには一般市民向けの活動のみをまとめる。大学非常勤講師等は該当項目参照 (菊池)

5.1.1 講演等

- (1) 『水からの伝言』のニセ科学, ニセ科学フォーラム (2006/8/26 同志社女子大学今出川キャンパスおよび9/2 学習院中・高等科、なお、これは JST 研究開発テーマ: 「21 世紀の科学技術リテラシー」中の「市民の科学技術リテラシーとしての基本的用語の研究」(研究代表: 左巻健男同志社女子大学教授) の研究の一環として開催された)
- (2) ニセ科学と消費者問題, 2007/1/18 大阪府の消費者行政を良くする会
- (3) 「健康的」「環境にやさしい」と言うキャッチフレーズの問題点〜疑似科学と科学的な思考の違い〜, 2007/3/1 農林水産省農林水産研修所

5.1.2 テレビ番組

- (1) 2006/3/24, MBS 「VOICE」イマ解き「“ニセ科学”に我慢できない科学者」
- (2) 2006/12/18, NHK 教育「視点・論点: “まん延するニセ科学”」

5.1.3 論説

- (1) “ニセ科学とつきあうために”, 理科教室 2006 年 6 月号

- (2) “疑似科学の現在”, 科学 2006 年 9 月号 特集「疑似科学の真相／深層をよむ——なぜ信じてしまうのか」
- (3) 2006/9/20 朝日新聞夕刊 かがく批評室 (なお、この論説は複数の高校・大学等で国語の入学試験問題に使用された)
- (4) “『水からの伝言』が教えてくれないもの”, 論座 2007 年 2 月号 特集「ニセ科学を考える」
- (5) “スピリチュアル”と“ニセ科学”の間で”女性のひろば 2007 年 4 月号 特集「スピリチュアル・ブームを考える」
- (6) “物理学者からの提言 ニセ科学の現状と科学者の役割”, 化学 2007 年 4 月号

5.2 教育面における社会貢献

5.2.1 他大学非常勤講師

- (1) 筑波大学大学院数理物質科学研究科「物理化学特論」(菊池)
- (2) 東京大学理学系研究科「先端科学コミュニケーション特論」(分担、菊池)
- (3) 北海道大学科学技術コミュニケーター養成ユニット (分担、菊池)
- (4) 大阪女子大学理学部「環境理学特殊講義Ⅱ」(時田)
- (5) 神戸大学大学院自然科学研究科「複雑系科学概論」(時田)
- (6) 奈良県立医科大学「医学用数理」(金田)
- (7) 奈良県立医科大学「物理学実験」(金田)

5.2.2 他大学セミナー講師

- (1) 菊池誠, 「科学とニセ科学」2007/1/30 神戸大学発達科学部 HuSS

5.3 学会活動

5.3.1 国内学会における活動

- (1) 基礎物理学研究所計算機委員会所外委員 (菊池)
- (2) 日本数理生物学会運営委員, 日本数理生物学会学会サーバ運営委員 (時田)
- (3) Journal of Physical Society of Japan 編集委員 (菊池)

6 プロジェクト活動

- (1) 平成 14(2002) 年度〜 科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ゆらぎと生体システムのやわ

らかさをモデルとするソフトナノマシン」(菊池: 分担, 研究代表者: 柳田敏雄 (大阪大学生命機能研究科))

- (2) 平成 17(2005) 年～平成 18(2006) 年 科学研究費基盤研究 (C)「進化的に獲得された相空間ランドスケープについての理論的研究」(代表: 菊池誠, 分担: 高城史子, 茶碗谷毅 (大阪大学大学院情報科学研究科), 時田恵一郎)
- (3) 平成 17(2005) 年～平成 21(2009) 年 科学研究費特定領域研究「生命システム情報」「生物情報ネットワークの構造および動的挙動の数理解析」(時田: 分担、代表: 阿久津達也 (京都大学化学研究所バイオインフォマティクス研究センター))
- (4) 平成 18(2006) 年 公益信託五峯ライフサイエンス国際基金研究助成「生物群集における種の豊富さのパターンとその環境アセスメントへの応用」(代表: 時田恵一郎、分担: Tae-Soo Chon (Pusan National University, Korea))

7 2006 年度研究発表論文一覧

7.1 著書

- (1) 時田恵一郎, “複雑系の構造と予測” 複雑系叢書 1 (共著), 共立出版, 2006 年
- (2) 時田恵一郎, “プラントミメティックス”(分担:「水平構造の成立メカニズム」担当), エヌ・ティー・エス, 2006 年
- (3) 時田恵一郎, “進化経済学ハンドブック”(分担:「ゼロサムゲーム力学系」担当), 共立出版, 2006 年

7.2 解説記事

- (1) 時田恵一郎, 入江治行, “島の生物地理学と Zipf の法則”, 京都大学数理解析研究所講究録, No.1499 (2006), pp.1-6.
- (2) 時田恵一郎, “生態学”, 数理科学 特集「ランダム行列の広がり」, No.524 (2007), pp56-60.
- (3) 菊池誠, “「ニセ科学」入門”, 物理教育 特集「ニセ科学シンポジウム」, 54 (2006), pp220.

7.3 原著論文

- (1) Kei Tokita, “Statistical mechanics of relative species abundance”, Ecological Informatics, Volume 1, Pages 315-324 (2006).
- (2) Hiroo Kenzaki and Macoto Kikuchi, “Coarse-grained protein model, cooperativity of folding and

subdomain structure”, Chem. Phys. Lett., Volume 422, Issues 4-6, 10 May 2006, Pages 429-433(Available online 10 March 2006)

- (3) Hiroo Kenzaki and Macoto Kikuchi, “Diversity in Free Energy Landscape and Folding Pathway of Proteins with the Same Native Topology”, Chem. Phys. Lett., Volume 427, Issues 4-6, 31 August 2006, Pages 414-417(available online 14 June 2006)
- (4) Kazuki Nakanishi and Macoto Kikuchi, “Thermodynamics of Aggregation of Two Proteins”, J. Phys. Soc. Jpn., vol. 75, no. 6, p.064803.(published May 25, 2006)
- (5) Kazuo Sasaki, Ryo Kanada, and Satoshi Amari, “Efficiency of Energy Transduction in a Molecular Chemical Engine”, J. Phys. Soc. Jpn., vol. 76, No.2, p.023003 (published February 13, 2007).

7.4 研究集会主催, 国際学会セッションオーガナイズ

- (1) CMC International Workshop on Ecology, Sponsored by Cybermedia Center, Osaka University, Venue: Cybermedia Center, Toyonaka Education and Research Center, 7F Conference Room. Saturday, August 26, 2006. Organized by Kei Tokita.
- (2) International Conference on Ecological Modeling (ICEM2006), 2006/8/28Mon-9/1Fri, International Society for Ecological Modeling, Yamaguchi University, Tokiwa Campus (Ube), Yamaguchi University, (1) Keynote 1: organized by Tae-Soo Chon (National Pusan U. Korea) and Kei Tokita. Sovan Lek (University Paul Sabatier, France) (2) Community Modeling organized by Young-Seuk Park (Kyunghe U., Korea) and Kei Tokita.
- (3) Japanese-Korean Joint Meeting for Mathematical Biology, 2006/09/17Sat - 09/18Mon, Kyushu University, Organized Session: Title: General Community Structure, Organizer: Kei Tokita.
- (4) シンポジウム「第 12 回 交通流のシミュレーション」2006 年 12 月 1 日～12 月 2 日, サイバーメディアセンター豊中教育研究棟 (菊池)

7.5 国際会議発表

- (1) Kei Tokita, “Dynamic theory of species abundance distributions”, Frontiers in Dynamics: Physical and Biological Systems, University of Tokyo, Tokyo, Japan, May 22-24, 2006, poster.

- (2) Yoshimi Yoshino, "Excitatory-inhibitory balance in neural networks", *Frontiers in Dynamics: Physical and Biological Systems*, University of Tokyo, Tokyo, Japan, May 22-24, 2006, poster.
- (3) Fumiko Takagi, Macoto Kikuchi, "Structural Change Myosin Motor Domain and Nucleotide Dissociation: Molecular Dynamics Simulation", *Physics of Molecular Machines: Joining theory and experiments*, Ecole de Physique, Les Houches, France, May 22-26, 2006; poster
- (4) Kazuo Sasaki, Ryo Kanada, Satoshi Amari, Takeshi Nakagawa, "A Minimal Model of Molecular Chemical Engines", Workshop on "Physics of Molecular Machines", Les Houches, France, May 22-26, 2006; Oral.
- (5) Kei Tokita, "Dynamic Theory of Species Abundance Distributions", *International Conference on Ecological Modeling (ICEM2006)*, Yamaguchi University, Yamaguchi, Japan, August 28-September 1, 2006; Invited.
- (6) Kei Tokita, "Relating species abundance distributions to community sustainability", *Advances in food-web theory and its application to ecological risk assessment*, Yokohama National University, Yokohama, Japan, September 13-14, 2006; Invited.
- (7) Masanori Sugiura and Kei Tokita, "Dynamics of HIV antigenic diversity and asymptomatic interval", *Japanese-Korean Joint Meeting for Mathematical Biology*, Kyushu University, Fukuoka, Japan, September 16-18, 2006, Poster.
- (8) Kei Tokita, "Species abundance distributions, the species-area relationship and the Zipf's law", *Japanese-Korean Joint Meeting for Mathematical Biology*, Kyushu University, Fukuoka, Japan, September 16-18, 2006, Oral.
- (9) Yoshimi Yoshino and Kei Tokita, "Stochastic Dynamics of Dale-type Asymmetric Neural Networks", *Japanese-Korean Joint Meeting for Mathematical Biology*, Kyushu University, Fukuoka, Japan, September 16-18, 2006, Poster.
- (10) Kei Tokita, "Species abundance distributions in random replicator dynamics", *Complex Adaptive Systems and Interacting Agents (CASIA)*, Satellite Workshop of ECCS 2006, Said Business School University of Oxford, Oxford, UK. September 28 - 29, 2006; Invited.
- (11) Yoshimi Yoshino and Kei Tokita, "Stochastic dynamics of Dale-type asymmetric neural networks", *Complex Adaptive Systems and Interacting Agents (CASIA)*, Satellite Workshop of ECCS 2006, Said Business School University of Oxford, Oxford, UK. September 28 - 29, 2006; Oral.
- (12) Kazuo Sasaki, Ryo Kanada, Satoshi Amari and Takeshi Nakagawa, "Energy Transduction in Rotary and Linear Molecular Motors", *International Symposium on Bio-nanosystems*, Matsushima, Japan, September 1-3, 2006; Poster.
- (13) Kei Tokita, "Dynamic Theory of Species Abundance Distributions", *Reaction-Diffusion Processes in Biological and Biomimetic Systems: from Experiments to Mathematical Modeling and Analysis*, Domaine Universitaire Bordeaux I, France, October 2-5, 2006; Invited.
- (14) Fumiko Takagi, Macoto Kikuchi, "Intramolecular Correlation and Structural Change of Myosin Motor Domain", *5th East Asian Biophysics Symposium (第44回日本生物物理学会と合同開催)*, Okinawa Convention Center, Okinawa, Japan, November 12-16, 2006; poster
- (15) Ryo Kanada, Kazuo Sasaki, "A refined Brownian motor model for the single-headed kinesin KIF1A", *Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan*, Okinawa, November 12-16, 2006; poster.
- (16) Hiromitsu Shimoyama, Macoto Kikuchi, "Coarse-graining of coarse-grained protein models", *5th East Asian Biophysics Symposium (第44回日本生物物理学会と合同開催)*, Okinawa Convention Center, Okinawa, Japan, November 12-16, 2006; poster
- (17) Fumiko Takagi, Macoto Kikuchi, "Structural Change of Myosin Motor Domain and Nucleotide Dissociation", 'Discussions on "Theory and simulation of biomolecular systems"', Seaside Hotel Maiko Villa Kobe, Kobe, Japan, December 12-16, 2006; poster
- (18) Macoto Kikuchi and Kazuki Nakanishi, "Thermodynamics of Protein Aggregation", 'Discussions on "Theory and simulation of biomolecular systems"', Seaside Hotel Maiko Villa Kobe, Kobe, Japan, December 12-16, 2006; poster
- (19) Ryo Kanada, Kazuo Sasaki, "Energetic properties of the single-headed kinesin KIF1A", 'Discussions on "Theory and simulation of biomolecular systems"', Seaside Hotel Maiko Villa Kobe, Japan, December 12-16, 2006; poster.
- (20) Macoto Kikuchi, "Free-energy landscape of lattice protein model", 2006 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems,

Chung-Yuan Christian University, Taiwan, November 10-12, 2006; Invited.

- (21) Macoto Kikuchi, “Fluctuation and Relaxation of Motor Proteins”, 2006 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Chung-Yuan Christian University, Taiwan, November 10-12, 2006; Invited.
- (22) Macoto Kikuchi, “Simulations and experiments of highway traffic flow”, 2006 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Chung-Yuan Christian University, Taiwan, November 10-12, 2006; Invited.
- (23) Masanori Sugiura and Kei Tokita, “Evolution of antigenic types of viruses and genetic affinity”, 2nd International Symposium on Dynamical Systems Theory and Its Applications to Biology and Environmental Sciences, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, March 14-17, 2007; Oral.
- (24) Yoshimi Yoshino, Tobias Galla and Kei Tokita, “Random replicators with resource competition”, 2nd International Symposium on Dynamical Systems Theory and Its Applications to Biology and Environmental Sciences, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, March 14-17, 2007; Oral.
- (25) Kei Tokita, “Species abundance distributions in replicator dynamics with random interactions”, 2nd International Symposium on Dynamical Systems Theory and Its Applications to Biology and Environmental Sciences, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, March 14-17, 2007; Oral.

7.6 国内学会発表

- (1) 入江治行・石神英樹・時田恵一郎, “日本の苗字における多様性と種数面積関係”, 日本物理学会 2006 年秋季大会千葉大学:2006 年 9 月 23 日(土)~26 日(火)(口頭)
- (2) 杉浦正康・時田恵一郎, “HIV 抗原多様性と潜伏期間の関係”, 日本物理学会 2006 年秋季大会千葉大学(口頭)
- (3) 吉野好美・時田恵一郎, “Dale 型非対称ニューラルネットワークにおける興奮抑制バランスと空間構造の効果”, 日本物理学会 2006 年秋季大会千葉大学(口頭)
- (4) 下山紘充・菊池誠, “粗視化タンパク質モデルの粗視化”, 日本物理学会 2006 年秋季大会千葉大学(ポスター)
- (5) 時田恵一郎・入江治行, “種間相互作用を考慮した Simon モデルにおける種個体数分布”, 日本物

理学会 2006 年秋季大会千葉大学(口頭)

- (6) 金田亮・佐々木一夫, “リニアモーターへの分子化学機関モデルの拡張適用”, 日本物理学会 2006 年秋季大会, 千葉大学, 2006 年 9 月 25 日(口頭).
- (7) 北島顕正・菊池誠, “比較的新しい統計力学的手法による整数制約問題の近似解法”, 日本物理学会 2007 年春季大会鹿児島大学(PS)
- (8) 齊藤稔・菊池誠, “Wang-Landau 法によるクロックモデルの境界自由エネルギー”, 日本物理学会 2007 年春季大会鹿児島大学(口頭)
- (9) 吉野好美・Tobias Galla・時田恵一郎, “資源競争のあるランダム相互作用レプリケータ系の母汎関数解析”, 日本物理学会 2007 年春季大会鹿児島大学(口頭)
- (10) 下山紘充・菊池誠, “粗視化タンパク質モデルの粗視化”, 日本物理学会 2007 年春季大会鹿児島大学(口頭)
- (11) 菊池誠, “タンパク質凝集の空間サイズ効果”, 日本物理学会 2007 年春季大会鹿児島大学(PS)
- (12) 佐々木一夫・金田亮, “分子化学機関のエネルギー変換効率と仕事率の最適化”, 日本物理学会 2007 年春季大会, 鹿児島大学, 2007 年 3 月 20 日(口頭).
- (13) Kei Tokita and Tobias Galla, “Species abundance patterns in a general community model”, 第 54 回日本生態学会大会, 愛媛大学, 2007 年 3 月 19 日(月)-23 日(金)(口頭・英語セッション)

7.7 国内研究会発表

- (1) 吉野好美, Tobias Galla, 時田恵一郎, “資源競争のある生態系モデル解析”, 「COE 冬の学校」 六甲, 兵庫, 2006 年 2 月 18-20 日, 口頭.
- (2) 吉野好美, “Generating Functional for Ecosystems, Game Theory, Econophysics and Neural Networks”, Modeling Seminar 静岡大学, 浜松, 2006 年 12 月 18 日-20 日, 口頭
- (3) 吉野好美, 時田恵一郎, “Dale 型非対称相互作用アトラクタニューラルネットワークモデルにおける空間構造の効果”, 「COE 夏の学校」 高野山, 和歌山, 2006 年 9 月 6 日-8 日, ポスター. ポスター賞受賞
- (4) 吉野好美, 時田恵一郎, “Dale 型非対称ニューラルネットワークモデルにおける空間構造の効果”, 第 12 回創発システムシンポジウム「創発夏の学校」 計測自動制御学会, インテック大山研修センター, 富山市, 2006 年 8 月 18 日(金)-20 日(日), ポスター.
- (5) 杉浦正康, 時田恵一郎, “HIV 抗原多様性ネットワーク”, 日本ソフトウェア科学会ネットワークが創

発する知能研究会第2回ワークショップ, ニュー
阿寒ホテル, 釧路市, 2006年9月27日-29日, 口頭

- (6) 時田恵一郎, “レプリカ, レプリケーター, レプリカント”, 大阪大学 21世紀 COE「究極と統合の新しい基礎科学」研究報告会, ピアザ淡海 滋賀県立県民交流センター (大津市), 2007年3月9日(金)-10日(土)(口頭)
- (7) 吉野好美 「ニューラルネットワークにおける興奮性細胞・抑制性細胞の役割」ミニ研究会「ネットワークの構造とダイナミクス」 基礎生物学研究所 (岡崎) 2006年4月(口頭)
- (8) 金田亮, “回転モーターとリニアモーターのエネルギー論”, 生体分子とゆらぎ研究会 2006, 大阪大学生命機能研究科, 2006年9月20日, (招待講演).
- (9) Kazuo Sasaki, Ryo Kanada, and Satoshi Amari, “Theoretical model for chemically driven molecular machines”, The Second International Symposium on Bio- and Nano-Electronics in Sendai, 2006年12月9-2006年12月10日, (Oral).
- (10) 齊藤稔, 菊池誠, “Wang-Landau 法によるクロックモデルの境界自由エネルギー”, 「COE 冬の学校」 六甲, 兵庫, 2007年2月18-20日, 口頭.

7.8 卒業論文

- (1) 大浦健志「マイノリティーゲームと実際の系」(理学部物理学科)
- (2) 森井雄飛「デトネーションの1次元解析」(理学部物理学科)
- (3) 野田数人「動的平均場理論を用いた電子状態密度計算」(理学部物理学科)

7.9 修士論文

- (1) 鈴木賢一, 「周期境界条件における1次元交通流の研究」(大学院理学研究科物理学専攻)
- (2) 三木崇史, 「接触ポテンシャルを持つ格子たんぱく質模型への Langevin dynamics の導入」(大学院理学研究科物理学専攻)
- (3) 山下賢太郎, 「2次元古典スピン系の界面自由エネルギー」(大学院理学研究科物理学専攻)

7.10 博士論文

- (1) 検崎博生, “Free-energy Landscape of Protein by Realistic Lattice Go-like model: Mechanism of Folding and Conformational Change” (大学院理学研究科物理学専攻)