

大規模計算科学研究部門

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研究部門教授。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)

准教授 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研究部門助教授、2007 年 4 月より同准教授。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
ナノサイエンスの世界 (分担: 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)

(4) 理学部専門科目

統計物理学 3 (物理学科、菊池)

生態学概論 (生物科学科、時田)

統計物理学 2 (物理学科、時田)

統計物理学 2 演義 (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 1 (分担、菊池・時田)

2.1 卒業論文

- (1) 太田直樹、降水予測のための雨滴成長に関する考察 (理学部物理学科)
- (2) 増田寛、繰り込み群を用いた Hubbard モデルの解析 (理学部物理学科)

2.2 修士論文

- (1) 辻田賢、組織形成のメカニズムにおけるシミュレーション (大学院理学研究科物理学専攻)

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デザイン、分子モーターの運動機構解明、生態系や免疫系などの生物ネットワークの進化と安定性、高速道路交通流、砂丘のダイナミクスなどである。

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 タンパク質の二量体形成

タンパク質凝集のメカニズム、特に二個のタンパク質が「閉じ込め」の効果によって凝集するメカニズムを Go-like モデルを使って調べた。具体的には、細胞内では主として単量体として存在するが、機能する際には二量体として働くことが知られる λ -Cro repressor の二量体形成を空間体積を制限した Go-like モデルの分子動力学計算によって調べている (高城・菊池, 学会発表)。

4.1.2 天然変性タンパク質

本年度より、科研費新学術領域「天然変性タンパク質の分子認識機構と機能発現」が始まり、菊池は計画研

究分担者として参加している。天然変性タンパク質は単体では変性状態にありながら、他のタンパクと結合すると構造を作る (coupled folding-and-binding といわれる) 一連のタンパク質で、最近大量に発見され、注目を集めている。

普通のタンパク質は折れたたみ構造を作って機能するので、この天然変性タンパク質は従来のタンパク質概念を覆すものとする向きもあるが、我々はこれまでの研究で「タンパク質の機能部位は大きく熱揺らぎする」ことを確認してきたので、むしろ、その極端な場合として自然に理解できると考えている。このような天然変性タンパク質の coupled folding-and-binding がどのような自由エネルギー構造によって実現しているかを考えようというのが、我々の目標である。これは前述の二量体形成とも深く関係している。

本年度は (1)NRSF の粗視化モデル (2)coupled folding-and-binding の格子モデル、のふたつの研究を開始した。前者は、天然変性タンパク質の例として NRSF の天然変性領域をとりあげ、肥後 (阪大蛋白研) が全原子計算で求めた構造をもとに粗視化モデルを構築しようというものである。後者は coupled folding-and-binding の一般的な自由エネルギー構造を検討するために、大胆に簡略化した格子モデルを構築しようとするものである (白井・菊池, 学会発表)

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、英国マンチェスター大学の Tobias Galla 氏、博士後期課程杉浦正康氏と、言語の進化やウイルスなどの病原体の進化のモデルである、レプリケーター・ミューテーター方程式に対する統計力学・計算物理学的な研究を行い、大学院生の博士後期課程杉浦正康氏が日本数理生物学会などで発表した。2010 年度も引き続き Galla 氏との国際共同研究を進める予定である。

2009 年 4 月 7 日から 12 日まで、タイ、プーケットで開催された国際会議 2009 International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, ICCES'09 において基調講演「Large-scale Biological Networks(大規模生物ネットワーク)」を行った。

2009年7月27日から30日まで、平成21年度日本学術振興会国際学会等派遣事業(第I期)の海外渡航費助成を受け、カナダ、バンクーバー市で開催された国際会議 International Conference on Mathematical Biology and Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology に出席し、講演「Species abundance distributions, species-area relationships and the Zipf's law(種個体数分布、種数面積関係、そしてジップの法則)」を行った。

2009年11月9日から13日まで九州大学で開催された国際会議 The International conference "Casimir Force, Casimir Operator and the Riemann Hypothesis"において招待講演「Random matrices and their application to mathematical biology(ランダム行列と数理生物学への応用)」を行った。

4.3 交通流の物理

高速道路交通流における渋滞発生を非線形動力学的な相転移とみなす立場での研究を継続している。この立場では交通工学での理解と違い、ボトルネックがなくても密度をコントロール・パラメータとして渋滞が発生する。本年度は2003年に行った「ボトルネックなしの渋滞発生」の実証実験を解析した第二論文を出版した(Nakayama et al., 2009)。

さらに、2003年の実験よりも大きなシステムで、より詳細なデータを取得すべく、本年度はナゴヤドームを使って二日間にわたり「ボトルネックなし渋滞」の大規模実験を行った。この結果は解析中である。

4.4 拡張アンサンブル法の応用

拡張アンサンブルを用いたモンテカルロ法の新たな応用も重要なテーマであり、継続的に取り組んでいる。2009年度は特に(1)力学形での珍しい軌道の探索(北島・伊庭・菊池、学会発表)(2)ランダム行列の最大固有値の分布推定(斉藤・伊庭・福島・菊池、学会発表)などの研究を行なった。

4.5 研究協力

学内・学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。また、学内・学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。また、博士研究員として松下勝義氏(科研費研究員)、理学研究科物理学専攻博士課程学生として杉浦正康・北島正顕・斉藤稔の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) 5/14 淡路消費者センター
- (2) 8/20 東播磨生活科学センター(加古川)
- (3) 8/25 但馬生活科学センター(豊岡)
- (4) 9/3 小松市生活安全対策室講演会
- (5) 9/12 大阪府保険医協会学術講演会
- (6) 11/6 川西市消費生活センター
- (7) 1/7 北海道高等学校教育研究会講演(札幌)
- (8) 2/1 西播磨生活科学センター(龍野)

5.1.2 シンポジウム

大阪大学21世紀懐徳堂との共済で「ニセ科学フォーラム2009」を開催し、菊池が実行委員長をつとめた(11/23 大阪大学中の島センター佐治敏三記念ホール)

5.2 教育面における社会貢献

5.2.1 高校生向け活動

- (1) サイバーメディアセンターと東工大学術国際情報センターの主催で「高校生のためのスーパーコンピューティング・コンテスト」を開催。菊池が実施委員長をつとめた。

5.2.2 他大学非常勤講師等

- (1) 鶴見大学「ニセ科学問題」(2009/6/30、菊池)
- (2) 新潟大学集中講義「生物物理学概論」、新潟大学、(2010/1/18-20、時田)

5.2.3 国際大学間交流

- (1) 2009年11月08日に東京国立オリンピック記念青少年総合センターで開催されたACM/ICPC(国際大学対抗プログラミングコンテスト)アジア地区予選に、大阪大学チーム"Imo (Kentarō Imajyo, Ayaka Kashiya, Etsuko Katsuda)"が出場した際、時田が監督・コーチを務め、同チームは8位入賞を果たした。

- (2) 2009年10月28日から30日に中国上海交通大学で開催された、第14回上海交通大学・大阪大学学術交流研究会に出席し、講演「Statistical mechanics of complex systems(複雑系の統計力学)」を行った。
- (3) 2010年3月に、台湾における大阪大学 International Physics Course(IPC)のプロモーション Campaignin NTU and NCKU に随伴、3月4日に国立台湾大(台北)にて、さらに3月5日に国立成功大(台南)において模擬授業「複雑系の物理 (Physics of complex systems)」を行った。さらに、3月6日に国立中興大を訪問、同大生物物理学教員と会合、IPCのプロモーションを行った。

5.3 学会活動

5.3.1 国際学会における活動

- (1) Program Committee, Fourth International Workshop on Natural Computing (IWNC 2009), Himeji International Exchange Center, Himeji, Japan, 2009.

5.3.2 国内学会における活動

- (1) 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会委員(時田)

5.3.3 論文誌編集

- (1) Journal of Physics Society of Japan 編集委員(菊池)

5.3.4 研究集会世話人

- (1) シンポジウム「交通流のシミュレーション」2009年12月3日～12月4日、名古屋大学(菊池)

6 2009年度研究発表論文一覧

6.1 著書

- (1) 時田、「数理科学事典」(分担:「多種共存の生態学」(pp241-247)担当)、丸善、2009年。
- (2) 時田、シリーズ群集生態学3「生物間ネットワークを紐とく」(共著:第6章「中立モデルとランダム群集モデル」(pp185-221),コラム2「複雑ネットワーク理論の基礎」(p223-244)担当)、京都大学出版会、2009年。
- (3) 菊池、「おかしな科学」(渋谷研究所Xと共著)、楽

工社、2009年

6.2 原著論文

- (1) Akihiro Nakayama, Minoru Fukui, Macoto Kikuchi, Katsuya Hasebe, Katsuhiko Nishinari, Yuki Sugiyama, Shin-ichi Tadaki and Satoshi Yukawa "Metastability in the formation of an experimental traffic jam", **11** (2009) 083025

6.3 解説・紀要等

- (1) 菊池誠・岡部豊、「繰り込み群と物性物理学～臨界現象、そして多様な展開へ～」、数理科学 2009.7

6.4 会議報告

- (1) 菊池誠、「『ユリイカ』-科学と疑似科学の時代に-」、ポ－研究 **1** (2009) p.61

6.5 国際会議発表

- (1) Kei Tokita, "Large-scale Biological Networks", 2009 International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, ICCES'09, Hilton Phuket Arcadia Resort & Spa, Phuket, Thailand, April 7-12, 2009. (Keynote)
- (2) Kei Tokita, "Species abundance distributions, species-area relationships and the Zipf's law", International Conference on Mathematical Biology and Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology, University of British Columbia, Vancouver, Canada, July 27-30, 2009. (Oral)
- (3) Kei Tokita, "Random matrices and their application to mathematical biology", The International conference "Casimir Force, Casimir Operator and the Riemann's Hypothesis", Nishijin Plaza, Kyushu University, Fukuoka, November 9-13, 2009. (Invited)
- (4) Kei Tokita, Akimasa Kitajima, "Supercomputing Contest 2009", SC09, Oregon Convention Center, Oregon, USA, November 14-22, 2009. (Poster)
- (5) Nen Saito, Yukito Iba, "Entropy of graphs with large spectral gap by multicanonical Monte Carlo", Conference on Computational Physics 2009, Kaohsiung, Taiwan, December 15-19, 2009. (Poster)
- (6) Akimasa Kitajima, Macoto Kikuchi, Yukito Iba, "Search for Rare Trajectories in Chaos by Multicanonical Monte Carlo", Conference on Computa-

tional Physics 2009, Kaohsiung, Taiwan, December 15-19, 2009. (Poster)

- (7) Fumiko Takagi, Macoto Kikuchi, and Nobuyasu Ito, "Confinement effect on protein dimerization: Molecular dynamics simulation", Conference on Computational Physics 2009, Kaohsiung, Taiwan, December 15-19, 2009. (Poster)

6.6 国内学会発表

- (1) 齊藤稔・菊池誠 "遺伝子制御ネットワークの頑健性の進化", 日本物理学会 2009 年年次大会、岡山大学、2009 年 3 月 20 日 - 23 日。(ポスター)
- (2) 白井伸宙・菊池誠 "Intrinsically disordered protein の格子モデル", 日本物理学会 2009 年年次大会、岡山大学、2009 年 3 月 20 日 - 23 日。(口頭)
- (3) 菅原啓・時田恵一郎 "2 次元格子中立モデルにおける中立性の緩和", 日本物理学会 2009 年年次大会、岡山大学、2009 年 3 月 20 日 - 23 日。(口頭)
- (4) Masanori Sugiura, Kei Tokita "Diversity and transition in the random replicator-mutator equation", 日本数理生物学会 2009 年年会、東京大学、2009 年 9 月 9 日 - 11 日 (口頭)
- (5) 吉田勝彦, 時田恵一郎 "生態系の融合時に起こる現象の非対称性について", 第 57 回日本生態学会大会, 東京大学駒場キャンパス, 2010 年 3 月 15 日-19 日。(ポスター)
- (6) 吉田勝彦, 時田恵一郎 "生態系の融合の影響", 日本古生物学会 2009 年年会 千葉大学, 2009 年 6 月 26 日-28 日。(口頭)

6.7 国内研究会発表

- (1) 北島顕正, "拡張アンサンブル法を用いた Coupled Standard map の研究", 研究集会「双曲型力学系から大自由度力学系へ」(京都大学), 2009 年 8 月.
- (2) 時田恵一郎「非線形な世界・パターン・砂丘」(招待講演) 大阪大学理学部物理学科縦断合宿, ブラウンールみささ, 鳥取県東伯郡三朝町, 2009 年 9 月.
- (3) 時田恵一郎 "多様なものの量の変動や流れをどう扱い, どう理解し, どう制御するか?"(招待講演), 「流通と理学に関する研究会」第 1 回研究会, 東京大学 山上会館, 2009 年 9 月.
- (4) 時田恵一郎, 「中立モデルの新展開」(招待講演) 京都大学数理解析研究所研究会「生物現象に対するモデリングの数理」, 2009 年 12 月.

7 競争的資金

- (1) 平成 21(2009) 年度～ 文部省科学研究費補助金 (新学術領域) 「天然変性タンパク質の分子認識機構と機能発現」(菊池: 分担、領域代表者: 佐藤衛 (横浜市大)、研究代表者: 肥後順一 (大阪大学蛋白研))
- (2) 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))
- (3) 平成 21(2009) 年度～ 文部省科学研究費補助金 (基盤研究 (B)) 「交通流および自己駆動粒子系の流動機構の解明」(菊池: 分担、代表: 杉山雄規 (名古屋大学情報科学研究科))
- (4) 平成 21 年度日本学術振興会国際学会等派遣事業 第 I 期 「国際数理生物会議および数理生物学会 (SMB) 年会」(2009 年 7 月 27 日～7 月 30 日; バンクーバー、カナダ)(No.211092).