

学際的計算物理学：学際的計算物理学



研究室紹介

菊池 誠*

Interdisciplinary research of physics using computer simulation

Key Words : Interdisciplinary research, bio-molecular motor,
phase transition, criticism of false science

はじめに

サイバーメディアセンターは旧大型計算機センターと旧情報処理研究センターを統合してできたセンターです。他大学でも同時期に同種のセンターが作られました。それらとの大きな違いとして、統合に際し、さまざまな研究科からポストを集めていくつかの「研究部門」を作ったことが挙げられます。我々の部門は大学院理学研究科物理学専攻からのポストで作られました。サイバーメディアセンター内の位置づけとしては、スーパーコンピュータを含む研究用計算機システムに関する企画に関わる部門ということになります（運用実務ではありません）。ちなみに、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータはこの月にNEC-SX8Rを中心とする新しいシステムに置き換わりましたので、ぜひご利用ください。詳しくはサイバーメディアセンターのウェブサイトをご覧ください。

宣伝はそのくらいにして、当部門の紹介を。スタッフは菊池誠（教授）・時田恵一郎（准教授）の二名で、助教のいない（ポストがないので、今後もある予定のない）小さな研究グループです。サイバーメディアセンターには大学院がないので、各教員はそれぞれ関係する研究科に兼任として所属しています。我々のグループは、出身母体である大学院理学

研究科物理学専攻と大学院生命機能研究科の2研究科の協力講座になっており、大学院生はそれらの研究科から受け入れています。もっとも、実態としては、これまでのところほとんどが物理学専攻の学生です。

研究内容をひとことでまとめると、「学際計算物理学」とでも呼ばばいいでしょうか（我々は勝手にそう名乗っています。他に同じ言葉を使っている人たちがいるのかどうかは、知りません）。もうちょっと詳しく言うと、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主として用いて、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ます。中でも生物学と物理学・数理科学との境界領域には力をいれており、大学院生も生物物理学に興味を持って志望してくることが多いようです。阪大内には生物物理学の理論研究をやっている研究室がそれほど多くはないので、そういう分野に進みたい学生の受け皿になっているという感じでしょうか。

現在行なっている研究テーマは、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、生物以外では高速道路交通流、経済物理学など。また、計算手法の開発も重要な課題で、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）については、以前から精力的に取り組んでいます。以下では、いくつかのテーマについて、少し詳しく紹介しましょう。

(1) タンパク質の折れ畳みと 生体分子モーターの機能

タンパク質フォールディングの研究というと、全原子分子動力学による天然構造予測を思い浮かべる向きが多いかもしれませんが、我々はそうではなく、



* Macoto KIKUCHI

1958年11月生
東北大学大学院理学研究科物理学専攻博士後期課程修了（1986年）
現在、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（兼）大学院理学研究科物理学専攻（兼）大学院生命機能研究所、教授、理学博士、計算物理学
TEL : 06-6850-6840
FAX : 06-6850-6111
E-mail : kikuchi@cmc.osaka-u.ac.jp

タンパク質の機能発現メカニズムの物理的理解を目指して、格子模型やバネ・ビーズ模型など粗視化されたモデルを用いて計算機シミュレーションによる研究を行っています。これらのモデルでは構造予測はできません。

近年、タンパク質折れ畳みの概念的理解が進み、タンパク質では天然構造だけではなく、そこに至るための自由エネルギー構造全体が進化的に最適化されたと考える「ファネル描像」が大きな成功を収めてきました。我々はタンパク質の機能もまた自由エネルギー構造に反映しているはずと考えています。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・構造ゆらぎを伴うタンパク質では、その構造ゆらぎは「部分的unfolding - and - folding」によって実現されというのが、我々の仮説です。そこで、我々は機能発現メカニズムを理解するために、自由エネルギー景観の特徴を調べるという方針で、キネシン・ミオシンなどの分子モーター・タンパク質を研究してきました。計算も大変でなかなか確定的な結果が出ないのですが、それでもこれらのタンパク質の特徴的な構造ゆらぎを捉えることには成功したと考えています。

なお、最近と同様の手法によって、タンパク質の凝集についても検討しています。これは、アルツハイマーやCJDなどのアミロイド形成を念頭に置いたものです。

(2) 大規模生態系モデルと関連する問題

タンパク質の研究は菊池を中心に行っているのに対し、時田を中心として「マクロな生命系」の研究も進めています。興味の対象は多数の種が競争・共存する大規模な生態系の進化です。この分野では近年、大規模なフィールド・データも出てきており、現実の生態系と数理モデルとのかなり詳細な比較が可能になってきました。

我々のグループではレプリケーター方程式系をもとにしたモデルを用い、それにスピングラスやニューラルネットなどの分野で開拓された数理物理的な手法を応用することによって、生態系のさまざまな性質を理解しつつあります。

また、生態系モデルの考え方を別のシステムに応用する研究も行っており、現在のテーマとしては、HIVウイルスと免疫系の競合関係やコンピニエン

ス・ストアの「商品生態系」などがあります。特に後者はeconophysicsに対するecophysicalアプローチという意味で、我々が勝手にecoeconophysicsと呼んでいるものです。

(3) 交通流のモデルと実験

高速道路での渋滞発生について、従来の工学的解釈では、「ボトルネックがあるから渋滞が起きる」ことになっていました。しかし、1990年代以降、我々を含む物理学者による研究が進み、むしろ渋滞発生は「密度をパラメータとする動的相転移」と理解されるようになりました。もっとも、この点は未だに工学者と意見の一致を見ないところです。

我々は、国内のさまざまな大学に所属する研究者たちとひとつの研究グループを構成して、この問題に取り組んできました。特に最近のトピックは「ボトルネックがなくても渋滞は起きる」ことを示すための「サーキット実験」を行なったことです。これで、渋滞発生は「密度をパラメータとする動的相転移」であることが実証されたと我々は考えているのですが、この実験を報告した論文がさまざまな雑誌にrejectされており、いまだに日の目を見ていません。この分野の研究者にはだいぶ知れわたり、そろそろ「有名な未刊行実験データ」のひとつになりつつあります。なんとかしなくてはなりません。

研究以外の面では、昨年度より東工大の学術国際情報センターとの共催で「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」というのをやっており（一昨年まで、東工大の単独主催）、サイバーメディアセンター側では我々の部門が主にこの企画に関わっています。これを書いている現在、コンテスト準備の真っ最中です。コンピュータに興味を持つ高校生は多いと思いますが、単なるプログラミングではなく、計算科学(計算機科学ではない)を視野にいれたプログラミング技術を競う(しかも、スーパーコンピューターを使って)という点でユニークなプログラミング・コンテストです。ここから、将来の計算科学を担う人材が育てばと願っています。

また、最近では、社会貢献の一環として「ニセ科学批判」にも取り組んでおり、巷にあふれる「科学のようで科学ではないもの」についていろいろなお話

を捉えて警鐘を鳴らす活動をしています。残念なことに、大学の研究者にも「ニセ科学」に携わっている人がいるようです。科学というものをきちんと理解していないのでしょうか。産学連携が盛んな昨今ですが、うっかり妙なニセ科学商売に巻き込まれな

いよう(向こうは巧妙ですから)、みなさんもお気をつけください。あ、ちなみに血液型性格判断はまったくのニセ科学です。なぜかこの話題になると理性を失う理系研究者が意外に多いので、ここでひとつ釘を刺しておきます。

