

組織構成・メンバー

本ユニットは、数理科学、物理科学、生命科学の3つの分野に分かれています。
 連携推進委員：國府寛司、西村和雄、引原隆士、福山秀直、村瀬雅俊、
 アドバイザー：David Pines (ICAM/Santa Fe 研究所教授)、上田皖亮(京都大学名誉教授)、
 余田 成男(理学研究科教授)
 フェロー：Vaijyanthi Thangavel (理学研究科 PD)

梅野 健	情報学研究科 教授	西村 和雄	経済研究所 特任教授
江上 雅彦	経済学研究科 教授	原 千秋	経済研究所 教授
大野 照文	三重県総合博物館 館長	引原 隆士	工学研究科 教授
梶井 厚志	経済研究所 教授	福山 秀直	医学研究科 教授
熊谷 隆	数理解析研究所 教授	馬見塚 拓	化学研究所 教授
國府 寛司	理学研究科 教授	村瀬 雅俊	基礎物理学研究所 准教授
佐々 真一	理学研究科 教授	矢野 誠	経済研究所 教授
榎木 哲夫	工学研究科 教授	山内 淳	生態学研究センター 教授
杉山 弘	理学研究科 教授	吉村 一良	理学研究科 教授
関口 格	経済研究所 教授	渡辺 宏	化学研究所 教授
土居 伸二	工学研究科 教授		

フェロー

Vaijyanthi Thangavel 理学研究科PD

統合複雑系科学国際研究ユニット

International Research Unit of Integrated Complex System Science (IRU-ICSS)

編集委員長：矢野誠

編集委員：村瀬雅俊

IRU-ICSS事務局

〒606-8501

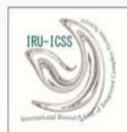
京都市左京区吉田本町

京都大学経済研究所内

電話: 075 (735) 7124

FAX: 075 (735) 7157

URL: <http://www.kier.kyoto-u.ac.jp/ICSS/index.htm>



ここに
切手を
貼って
下さい

京都大学学際融合教育研究推進センター

2017年・春

統合複雑系科学国際研究ユニット

International Research Unit of Integrated Complex System Science (IRU-ICSS)

IRU-ICSS ニュースレター



統合複雑系科学国際研究ユニットが発足して丸6年が経過しました。当研究ユニットは、異分野の研究者が「複雑系」というキーワードのもとに集う学際的な集まりです。本ユニットのメンバーは、この強みを生かして得られた知見を、自らの研究だけではなく社会に還元する活動も行っています。このニュースレターでは、2016年度に私たちがどのような活動を行ったかを皆様にお伝えします。

ご挨拶

複雑系科学とは、自然界や社会・経済などの中に見られる複雑な現象の背後に存在する共通な構造や秩序を研究し、そのネットワークのダイナミクスが創発する複雑な現象を説明しようという学問体系です。統合複雑系科学国際研究ユニットでは、生物学、物理学、経済学、化学、医学、工学など、従来は独立して研究をしていた学問分野の研究者が参加して、分野横断的な共同研究を行うものです。

2010年4月に発足して以来、本ユニットは州立カリフォルニア大学に本部を置く国際複雑系研究所 (ICAM) の京都支部としても機能しています。ICAMの創立者であり、サンタフェ研究所の創立者の一人であるDavid Pines教授には、ユニットのアドバイザーの一人として参加して頂いています。統合複雑系科学国際研究ユニットでは、例年、ICAMやサンタフェ研究所の研究者を招待して、国際コンファランスやセミナーを開催してきており、またさらにユニットメンバーはそれぞれの専門分野において多くの研究成果を発表するとともに、シンポジウムや公開講義の形で情報発信を行ってきました。

また、本国際研究ユニットは、平成22年(2010年)4月に発足し、5年の設置期間を経て、設置期間延長を学際融合教育研究センターに申請しておりましたが、1年の移行期間(その間も設置は継続)を経て、昨年の平成28年(2016年)4月1日より平成34年(2022年)3月31日まで6年間の期間延長が認められました。さらなる本研究ユニットの発展を大いに期するところであります。今後は、さらに「未来創成学国際研究ユニット」などとの共同研究を通して、未踏科学領域への本格的な展開・応用が大きな焦点になってくると思われます。具体的には、公開シンポジウム、国際ワークショップ、科学教育 in 京都、GSEE/Kyoto、International Symposium on Advanced Future Studiesなどを共催してさらなる発展を目指します。

私自身の専門は物性物理・化学、無機物性科学というような研究分野ですが、そこで現れる履歴電子メタ磁性転移や様々な相転移現象のメカニズムなど、「社会」、「経済」や「こころ」の活動などにも共通するところが数多く存在します。あまり自然科学系とか人文科学系といった分野にとらわれず、京大らしく自由な発想で、複雑化・多様化する諸問題の解決や新たな未踏領域の研究分野の創生を目指し、さらに頑張っていく所存です。どうぞよろしく願い申し上げます。

ユニット代表

吉村 一良

(京都大学大学院理学研究科 教授
京都大学国際高等教育院 教授)



目次

ユニット長ご挨拶 1

研究室訪問 #7 2~3
杉山 弘教授

活動の記録 4~5

リレーコラム #7 6~7
『グラフの機械学習、ネットワーク科学、そして複雑系』
馬見塚 拓 教授

ユニットメンバー表 8

研究室訪問第7回目は、京都大学理学研究科の杉山弘先生をお訪ねしました。

Q.杉山先生の研究内容についてご紹介させて下さい。

A.DNAを中心としたケミカルバイオロジーの研究を進めています。中心テーマとして、1)人工遺伝子スイッチを作る 2)DNAオリガミ法を用いた一分子の観察、を行っています。最近、特にゲノムプロジェクトが終了したあと生命科学が急速に進んで、遺伝子発現の制御のメカニズムがわかってきました。その結果、様々な病気が遺伝子の発現の異常としてとらえられるようになりました。遺伝子

A.中学の理科の先生が夏休みをつかって1週間ほど大学の化学の研究室に滞在させて下さいました。先生はガラス細工が有機化学者にとっては重要なのでまずこれをトレーニングして下さいました。先生の予想に反して有機化学者にとってガラス細工は今や必須ではなくなったわけですが、滞在した時に実験室で見た有機合成や液体窒素を使った実験や、夜遅くまで実験室で研究が進められていることにとっても憧れをもちました。それをきっかけにしてローソクの化学やナイロンの発見などの化学の入門書を読んで、自分も意味のあることを考え悩む人生を送りたいと思いました。

ローソクの化学やナイロンの発見などの化学の入門書を読んで、
自分も意味のあることを考え悩む人生を送りたいと思いました。

発現を人為的にONやOFFに調節できるようになれば根本的な究極の病気の治療法になるはずだと思っています。もちろん私たちが作ろうとしている人工遺伝子スイッチはまだほとんどないので、どのようにこれに論理的にこの難題に近づけるか研究しています。2番目のDNAオリガミ法を用いた一分子観察は全く違う研究のように見えますが、目論みとしては分子レベルで遺伝子をONにしたりOFFにしたりするところをみて遺伝子発現のメカニズムをこれで明らかにし、最終的には人工遺伝子スイッチの開発につなげていきたいと思っています。遺伝子発現の制御メカニズムはわかってきたといってもまだ肝心なところは不明です。これらを解きながら人工遺伝子スイッチを開発したいと思っています。

Q.先生が研究者を志されたきっかけを教えてください。

Q.研究の醍醐味、大変なところを教えてください。

A.自分なりに納得し仮説を立ててそれを実証していく、それは研究の醍醐味です。中々うまくいかないけれど、複雑で全く統一性も無いようなことが急に一つの仮説で説明できることがわかったりするともう堪えられません。実際は自分たちの仮説の小ささや浅はかさを思い知らされ毎日ですが、たまにうまくいって問題が氷解することがあります。うまくいなくて落ち込んだ時はうまくいったことを思い出して、また一つ一つコツコツ組み上げてチャレンジしていくわけです。

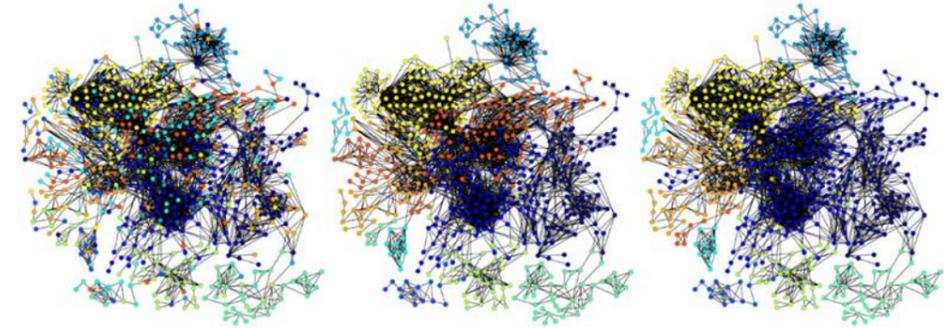


図1: クラスタ結果: 左 (行列のみ)、中 (行列+グラフ)、右 (グラフのみ)

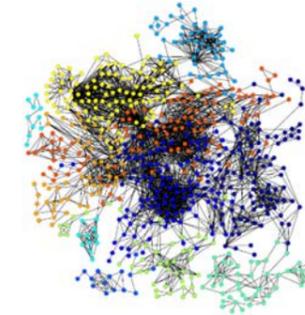


図2: 真のクラスタ

図1は、実際の遺伝子クラスタリング結果をグラフ上に示したもので、クラスタ毎に色を変えてあります。左が、行列のみ、右がグラフのみ、真ん中が行列とグラフの両方を使った結果です。図からわかるように、左では色がランダムに近く、一方、右はグラフだけを使っていますので、グラフの連結に忠実で比較的是っきりと分かれています。真ん中はそれらの中間です。図2は、生命学者が遺伝子の機能を自ら申告・登録するデータベースであるGene Ontologyの遺伝子機能クラスタで、言わば真(正解)のクラスタです。クラスタの色は、図1の真ん中のクラスタリング結果に良く対応していることがわかります。つまり、行列とグラフの両データを使った時に最もクラスタリング精度が高いことがわかります。

これまで、遺伝子クラスタリングに限らず、様々な問題設定で、遺伝子ネットワークを中心とした生命科学のグラフを入力とした機械学習手法を作ってきました。例えば、異なる相同性から作られた複数の遺伝子ネットワークを統合して遺伝子クラスタリングを行う。あるいは、教師あり学習(この場合は、一部の遺伝子にだけラベル(機能)あり)の設定で、遺伝子ネットワークを扱う等々です。

このような「グラフの機械学習」と隣り合わせの研究分野が21世紀に入り生まれた「ネットワーク科学」と呼ばれる分野です。例えば、機械学習は「データマイニング」とほぼ同義で、実際、上記遺伝子クラスタリングの結果も、データマイニングの世界最大の国際会議ACM KDD (ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining) で発表したものですが、ACM KDDにはネットワーク科学の論文も多く受理されてきました。むしろ科学の有名誌に掲載されたネットワーク科学の手法が既にACM KDDで発表されていたこともありました。ネットワーク科学の対象の1つは、ソーシャル・ネットワークで、インターネット上の個人のやり取り、すなわち電子メール、メッセージ、ツイッター等々で形成されるネットワークです。最近では、ソーシャル・ネットワーク科学なる分野も生まれ、ネットワーク科学は、さらに深耕が進んでいます。もちろんネットワーク科学が、幅広い複雑系科学の1つの側面であることは言うまでもありません。今後、グラフの機械学習をベースにネットワーク科学を含む様々な研究分野に貢献できればと思っています。

研究室ホームページ:

<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/pathway>

リレーコラム:

第7回『グラフの機械学習、ネットワーク科学、そして複雑系』

馬見塚 拓教授 化学研究所附属バイオインフォマティクスセンター

与えられたデータから規則やパターンを見つける「機械学習 (Machine Learning)」の研究をしています。まず機械学習の歴史を振り返ります。1970年代に、既知の規則やパターンを保持し、未知の入力に対し予め設定された規則を使い答えを出力するエキスパートシステムが出現しました。例えば、患者の症状を入力として、医師の代わりに計算機が規則をあてはめ病名を診断するシステムです。エキスパートシステムは、万能に見えますが、規則を予め知る必要があります。しかし、規則が未知の場合もありますし、既知の規則でも人間の知識の限界から正しくない場合もあります。これらを解決する方法は、過去の事例から計算機で自動的に規則やパターンを学習することです。これが、1980年代に生まれた機械学習です。機械学習は、1990年代に飛躍的に発展し2000年を過ぎて成熟し、現在、人工知能研究の最大分野となりました。機械学習の研究は、特定の規則やパターンを発見可能なデータ量を計算する理論計算機科学の研究から、実際のデータに適用して知識発見を行う応用研究まであります。私自身は、応用対象で解決すべき問題を数学的に定式化し、問題を解く学習アルゴリズムを設計し、実際にデータに適用する、というスタイルで研究をしています。

この研究スタイルにはデータが必要ですが、主に生命科学のデータを対象としてきました。生命科学では、21世紀に入り、ハイスループットと呼ばれる、生命現象を網羅的に計測可能な技術が出てきました。例えば、個体の遺伝子全体をゲノムと呼びますが、ゲノムの塩基配列を短時間かつ低コストで決定できるようになり、また、細胞内の数千から数万に上る遺伝子の発現量を1回の実験で計測できるようになりました。こういった計測技術の進歩で、生命科学のデータ量が爆発的に増え、人手の知識発見は難しくなり、機械学習が適用されることは必然でした。話が少し脱線しますが、このようなデータの爆発的増大は、生命科学に限らず、科学、工学、さらには一般社会でも見られます。例えば、電子化さらにインターネット化により個人情報や個人行動が記録され、その量は膨大です。このため、機械学習は、ここ数年一層ニーズが高まり、さらに大きな分野となろうとしています。

機械学習の問題は、教師「あり」あるいは「なし」学習の主に2つに分けることができます。教師あり学習は、事例各々に「ラベル」が付き、目的は、ラベル付き事例(学習データ)から規則やパターンを学習し、それらを使い、ラベル未知の事例(テストデータ)のラベルを予測することです。一方、教師なし学習にラベルはなく、目的は、学習データをグループ化(クラスタリング)する、あるいは学習データを構成する因子を見つけることです。

一般に、機械学習のデータは行列で、事例を行、事例の特徴量を列に取ります。例えば、個人情報でしたら、行は個人、列は性別、年齢、職業等です。行列データに対する機械学習手法はかなり成熟しています。そのためもあり、2005年頃より、グラフ(やネットワーク)が入力とする機械学習の研究を進めてきました。より重要な理由は、生命科学データにグラフがデータとしてよく見受けられるようになったからです。

(次頁に続く)さて、具体的に、生命科学データに対する機械学習の例、遺伝子クラスタリングを紹介いたします。問題背景を説明します。例えば、ヒトの遺伝子は10,000ともそれ以上とも言われていますが、未だに機能未知の遺伝子が多くあります。遺伝子クラスタリングが精密にできれば、同じクラスターにある遺伝子の既知の機能を使い、機能未知の遺伝子の機能を予測できます。ここで、使用できるデータのタイプは2つあります。1) 上記ハイスループットデータの例で挙げた、遺伝子の発現データのように、行が遺伝子、列が様々な実験条件という行列。2) 遺伝子の相同性(例えば、遺伝子配列の類似性、同じ機能を持つかどうか等)から、遺伝子をノード、相同性をエッジの重みとしたグラフ=遺伝子ネットワーク。データ1からは、通常の行列に対する遺伝子クラスタリングができ、データ2からは、ノードの連結による遺伝子クラスタリングができます。しかし、2つの結果が一致するとは限りません。また、どちらの結果が良いかもわかりません。そこで、方法の詳細は省略しますが、データを直接組み合わせるのではなく、クラスタリングの目的関数の上でマージするクラスタリング手法を開発しました。

Q.お薦めの本を一冊教えて下さい。

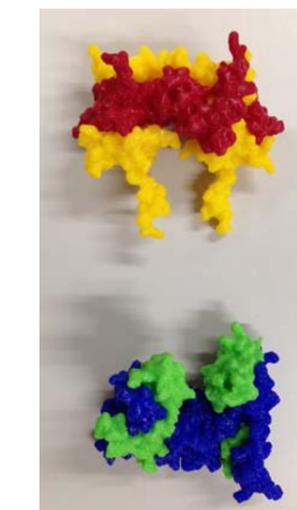
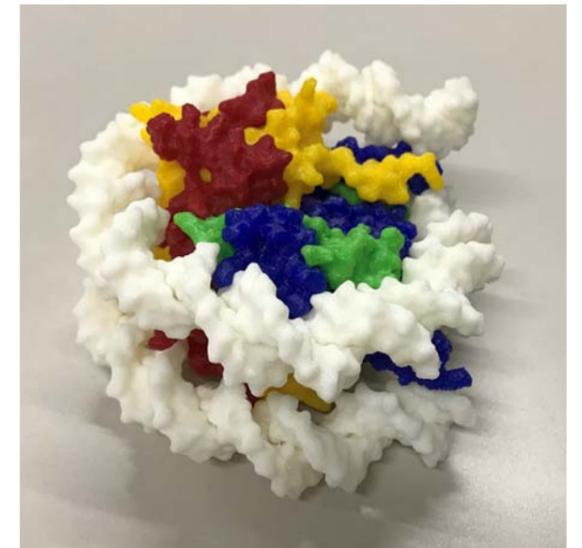
A.佐々木閑先生の「出家の人生のすすめ」でしょうか。著者の佐々木先生は本学工学部で有機合成化学を学ばれていたわけですが、その後文学部哲学科で仏教学を専攻され博士を取られています。釈迦が本來說いた仏教では捨ててある布で袈裟をつくり、働いて稼がず施ししか食べないで生きてゆく。出家とは世を捨てるのではなく社会からの支援を前提に同士とやりたいことを一生かけて追求する。これは研究者や科学者としてとても通じるものがあります。

Q.先生にとって至福のひとつときというのは、どんな時でしょうか。

A.いろいろな複雑な事象について仮説を思いついた時でしょうか。また1:1のディスカッションでキャッチボールのように論理を組み上げてゆく作業も楽しい。一人で考えることもとても重要だがたまにディスカッションで苦しみ紛れに発した言い訳がきっかけで新しいことに気が付くことも多いです。たっぷり時間があっても中々集中できずにむだに時間を過ごしてしまうことも多いし、非常に忙しいときにうつらうつらしている時に面白いことに気がつくこともある。他分野の研究者とのディスカッションはいろいろ常識や使う言葉が違ってコミュニケーションができないことも最初はありますが、わかってくるといういろいろ合点がいくところも多く楽しい。

Q.今後の研究計画についてお聞かせください。

A.還暦を迎えて今年1月に研究室の皆さんでお祝いをしてくれました。少し変に思われるかもしれませんが、これまでの研究は準備だったようにも感じてしまっています。どんどん新しいことがわかってきてこれから本番という感じです。回り道をして、とても時間がかかってしまいました。しかし化学と生物という近そうで遠い学問がやっと現象の記述にめどがたち、統一的に理解できるようになってきたように感じてしまいます。あと5年で何とかはじめに述べた2つの研究テーマを少しでも前に進めたいと思っています。



研究室のD2の橋谷文貴君が3Dプリンターで作ってくれたヌクレオソーム。下図のように分解もできます。DNAは細胞核の中でこのようなかたちで収納されています。私の33年前の博士論文はヌクレオソームの中のDNAとヒストンとの光クロスリンク反応で、現在もこれに働く遺伝子スイッチを作っています。

杉山弘教授～略歴～

1979年 京都大学工学部卒業。1984年京都大学工学部研究科にて工学博士取得。米国バージニア大学博士研究員、日本学術振興会特別研究員、京都大学工学部助手、助教授を経て、1996年東京医科歯科大学医用器材研究所教授、2003年より現職。2007年より物質-細胞統合システム拠点教授併任。専門はDNAを中心としたケミカルバイオロジー。原著論文360報。1999年日本IBM科学賞、2005年日本化学会学術賞受賞。
<http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/chembio/>

活動の記録 (2016年4月~2017年3月)

シンポジウム・ワークショップ・セミナー等主催されたメンバーに下記の多彩な活動報告を頂きました。

●セミナー「宇宙とこころの不思議に迫る」

2016年4月28日

京都大学基礎物理学研究所・湯川記念館1階
パナソニック国際交流ホール

佐々木 節・京都大学基礎物理学研究所所長が「重力波天文学の夜明け」の講演、河合 俊雄・京都大学こころの未来研究センター教授が心理療法の実践を通し、現代のこころのあり方を捉える課題を論じ、会場の出席者を含めて活発な討論が行われた。



●セミナー

「失敗から学ぶ未来創成学への挑戦」

2016年7月9日(土)

三重大学大学院医学研究科

三重大学大学院医学研究科において、村瀬雅俊・基礎物理学研究所准教授と大野照文・三重県総合博物館長が参加し、認識の文法構造の試み、認識過程と教育研究の課題などについて、生物進化の視点を交えて「失敗から学ぶ」ことについて包括的な議論を試みた。大学院生・教員が参加し、異分野の学術交流の課題と展望についても、活発な意見交換がなされた。

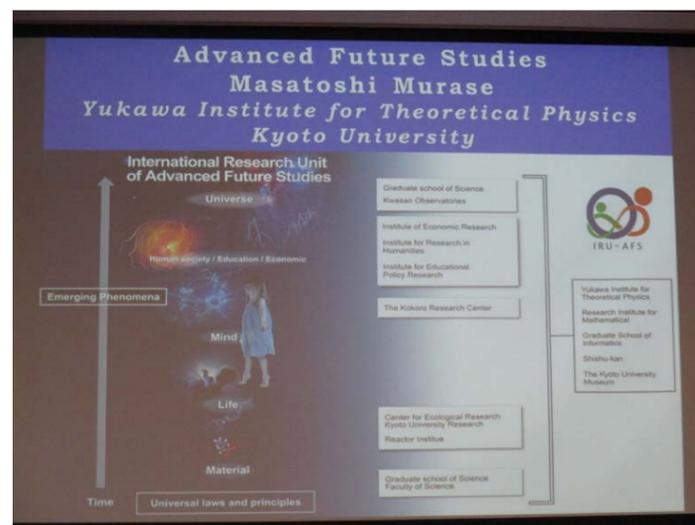


● International Symposium on “Chemical, Physical and Mathematical Foundations of Complex Phenomena”

2016年8月5日(金)

京都大学数理解析研究所 4階

村瀬雅俊・基礎物理学研究所准教授が問題提起をして、前半は岡本久・京都大学数理解析研究所教授の司会で、Anna Cadoret・Ecole Polytechnique教授が講演し、吉村一良・京都大学理学研究科化学専攻教授の司会で、Herwig Michor・Technische Universität Wien教授とPaul G. Mezey・Memorial University of Newfoundland教授が講演を行った。



●公開シンポジウム「教育を科学する」

2016年9月3日(土) 京都大学時計台記念館国際交流ホール I

教育への挑戦、教育への本質に迫る、子育てと能力開発について、教育者や研究者から実践研究報告があり、パネルディスカッション「子育て・教育が育てる成人の能力」について、会場からの活発な質疑応答を行った。



●京都大学統合複雑系科学国際研究ユニット 特別講演会

2017年2月8日(水) 14:00~ 理学部6号館(北棟)2階 セミナー室

「ワイル半金属NbP, TaP のNMR/NQR による研究」安岡弘志 先生

近年、凝縮系物理学においてトポロジーの果たす役割への関心が大きく広がっている。特に三次元的なバンド構造を持ち、表面にトポジカルな電子状態を示すトポジカル絶縁体やワイル半金属に大きな注目が集まっている。空間反転対称性を持たずSOIが大きい遷移金属モノクタイド(NbP, TaP等)を対象とし、NMRやNQRを用いて、特にワイル点近傍の低エネルギー磁気励起を中心とした研究について講演を行った。

●国際シンポジウム Transdisciplinary Symposium on Advanced Future Studies

2017年2月8日(水)、9日(木)、10日(金)

2月8日、9日 京都大学基礎物理学研究所・湯川記念館

2月10日 京都大学百周年記念館 国際交流ホール I、百周年記念ホール)

物質や生命から人間社会や経済に至る、様々な階層レベルのシステムを、ダイナミックなプロセスとして捉えるなら、どの階層レベルのシステムにおいても、「プロセスの結果がプロセスそのものに影響を与える」ことによって、システムを構成している「要素」のスケールをはるかに超える大規模なパターンが突然創発する。生命の起源やこころの進化、社会構造の自己組織化、バブル経済の崩壊、超伝導現象を、このような創発現象として捉えた。その上で、人文科学・社会科学および自然科学の叡智を結集し、その背後に働いている普遍原理の解明と、それぞれのシステムに特異的な原理・法則の理解を検討した。さらに、創発現象、脳のホログラフィー理論を伸展させ、生命のホログラフィー理論について、数学者・物理学者・工学者・脳科学者・哲学者を交えて学際的・国際的に議論した。

●京都大学統合複雑系国際研究ユニット研究会

遍歴電子系研究会「新世代の遍歴磁性」

2017年3月21日(火) 神戸商工貿易センタービル26階第2会議室

新世代の遍歴磁性について、太田寛人(東京農工大)、三井好古(鹿児島大)、和氣剛(京大)、石田憲二(京大)等、8人の研究者が報告を行った。