

計算機シミュレーションによる 研究を振り返って(その2)

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>

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

コーネル大学で博士号を取得後、9月からヴァージニア工科大学のRobert E. Marshak教授の博士研究員となりました(2年任期)。



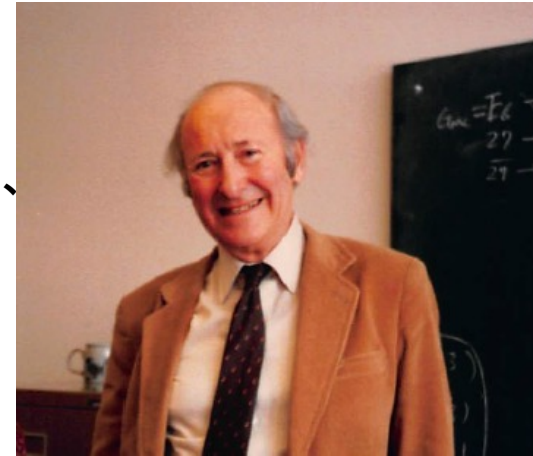
左から、Lay Nam Chang 教授、岡本、Robert E. Marshak 教授

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授

ボスのMarshak教授は、私と同じCornell Universityで博士号を取得しました。指導教員はノーベル物理学賞受賞者のHans A. Betheでした。長くUniversity of Rochesterで教授を勤めましたが、その間に、有名な素粒子論の国際会議Rochester Conference (後に、International Conference on High Energy Physicsとなった)を毎年開催したことで知られますが、大久保進さん(U. of Rochester)や崎田文二さん(City College N.Y.)達を大学院生として日本から「連れてきた」人でもあり、日本にとっての恩人です。

ちなみに、ノーベル物理学賞の小柴昌俊さんもUniversity of Rochesterの大学院で博士号を取得しました。University of Rochesterを退職後は、City College of New Yorkの学長を約10年間務め、その後、Virginia TechのUniversity Distinguished Professorとなっていました。Marshak教授の有名な研究成果はたくさんありますが、特に、二中間子論や弱い力のV-A (Vector – Axial Vector)相互作用*などが有名です。



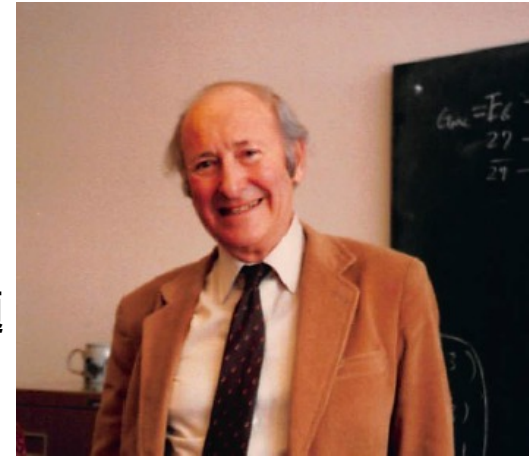
Robert E. Marshak 教授

* E.C.G. Sudarshan and R.E. Marshak, in *Proceedings of Padua-Venice Conference on Mesons and Newly Discovered Particles* (1957); *Phys. Rev.* **109**, 1860 (1958).
Cf. R.P. Feynman and M. Gell-Mann, *Phys. Rev.* **109**, 193 (1958).

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授

1985年にRichard Feynmanの”Surely You’re Joking, Mr. Feynman!”(邦訳は「ご冗談でしょう、ファインマンさん」)という自伝が出版されました(W.W. Norton & Company, New York, 1985)。その直後だったと思いますが、研究室の皆で近くのハンバーガーレストランで昼食を取った時に、この本のことが話題になりました。ボスのMarshak先生は、V-A相互作用について、どのように書かれているかを気にされていたようでした。この本では以下のように書かれていました(pp. 250-253)。



Robert E. Marshak 教授

They thought I was joking. But the thing that I had trouble with at the Rochester meeting—the neutron and proton disintegration: everything fit *but* that, and if it was V and A instead of S and T, *that* would fit too. Therefore I had the whole theory!

I thought about Dirac, who had his equation for a while—a new equation which told how an electron behaved—and I had this new equation for beta decay, which wasn’t as vital as the Dirac Equation, but it was good. It’s the only time I ever discovered a new law.

Murray Gell-Mann and I wrote a paper on the theory. The theory was rather neat; it was relatively simple, and it fit a lot of stuff. But as I told you, there was an awful lot of chaotic data. And in some cases, we even went so far as to state that the experiments were in error.

Marshak先生はSudarshan and Marshakの仕事が完全に無視されていたので、残念そうでした。

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授

1992年、Virginia Polytechnic Institute and State Universityを再訪する機会を得ました。Marshak先生宅で奥さんのRuthさんも一緒に話しました。Marshak先生は戦時中、原爆を開発したマンハッタン・プロジェクトに参加して、夫婦でLos Alamosに滞在したそうです。それが、日本人の私を前にしていても、いかにも楽しかった(?)というような話し方でした。「楽しい」というのはちょっと違って、正確には、国を守るんだという強い使命感に満たされて頑張ったということだと思います(私は複雑な思いで話を聴きました)。そう言えば、私はコーネル大学時代にマンハッタン・プロジェクトの理論部長だったHans Betheの一般公演を何回か聴きました(米国政府のアドバイザーとしての、核開発の話でしたが、水爆開発に反対したために赤狩りによって失脚させられたRobert Oppenheimerを弁護するような内容を含みました)。その公演でも、Betheが、ドイツに原爆開発競争で負けないように、「自分の研究人生でこの時程頑張った時はなかった」というようなことを言っていました。Marshak先生の奥さんも懐かしそうに話が盛り上がり、「あの時に、スキーなんかと一緒にいったロシア人はソビエトのスパイだったということが後で分かったのよ。」とか言っていました。おいとまする時に、奥さんが、Los Alamos滞在中の奥さん達がまとめた回想録をくれました。



Robert E. Marshak 教授

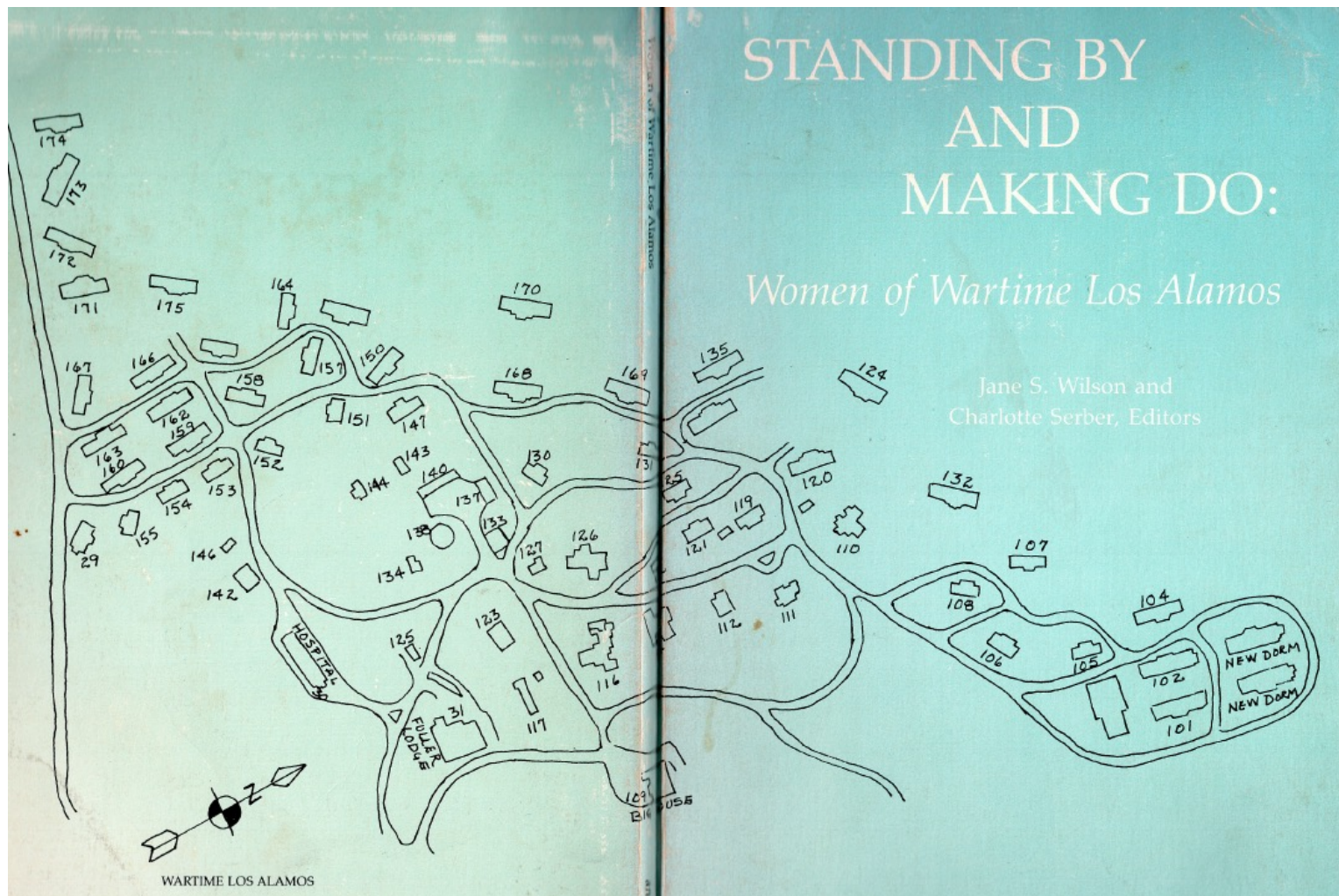
5. Virginia Polytechnic Institute and State University

ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授の奥さんのRuth Marshakさん

J.S. Wilson and C. Serber (eds.), "Standing by and making do: Women of wartime Los Alamos," (The Los Alamos Historical Society, 1988)

(私が日本人だということに気を使ってか?)、「この研究所が2度と兵器を作るために必要とされませんように」という言葉を添えてサインしてくれました。



5. Virginia Polytechnic Institute and State University

ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授の奥さんのRuth Marshakさん

J.S. Wilson and C. Serber (eds.), "Standing by and making do: Women of wartime Los Alamos," (The Los Alamos Historical Society, 1988)

Los Alamos Historical Society Books

When Los Alamos Was a Ranch School, Fermor and Peggy Pond Church, 1974

A Los Alamos Reader, Margaret Wohlberg, 1976

Inside Box 1663, Eleanor Jette, 1977

Los Alamos Outdoors, Dorothy Hoard, 1981

Guide to Bandelier National Monument, Dorothy Hoard, 1983

Flowers of the Southwestern Forests and Woodlands, Teralene Foxx and Dorothy Hoard, 1984

Los Alamos: The First Forty Years, Fern Lyon and Jacob Evans, 1984

Los Alamos: The Beginning of an Era 1943-1945, a Los Alamos Scientific Laboratory publication, reprinted by the Los Alamos Historical Society, 1986

Standing By and Making Do: Women of Wartime Los Alamos, Jane S. Wilson and Charlotte Serber, Editors, 1988

STANDING BY AND MAKING DO: *Women of Wartime Los Alamos*

Jane S. Wilson and Charlotte Serber, Editors

I hope that this laboratory
will never be needed again
for building weapons.

Ruth Marshak
May 7, 1992

The Los Alamos Historical Society
Los Alamos, New Mexico
1988

5. Virginia Polytechnic Institute and State University

ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授の奥さんのRuth Marshakさん

J.S. Wilson and C. Serber (eds.), "Standing by and making do: Women of wartime Los Alamos," (The Los Alamos Historical Society, 1988)



RUTH MARSHAK

During the greater part of her stay at Los Alamos, Ruth Marshak taught third grade in the Los Alamos School. She also worked in the Housing Office. Her husband, Robert Marshak, was Deputy Head of a theoretical physics group. Before going west to work on the Los Alamos Project, Dr. and Mrs. Marshak were in Montreal where British research along the same lines was being conducted. After Los Alamos, Dr. Robert Marshak became an Associate Professor of Physics at the University of Rochester.

The Marshaks stayed at the University of Rochester for 25 years. During those years, Ruth taught in primary school and reared two children. In 1970 the Marshaks moved to New York City, where Robert became President of City College. Ruth earned a Master of Arts degree in remedial reading, did volunteer work at a child development center in Harlem, and carried out the duties of a college president's wife. In 1979 the Marshaks moved to Blacksburg, Virginia. While Ruth took up gardening, knitting, and reading, Robert was a Distinguished University Professor and taught at Virginia Tech and State University. In September 1987 the Marshaks retired. They continue to live in Blacksburg. Their two children are married and pursuing their own careers. Ann is an Associate Professor in immunology at Boston University Medical School. Steve is an Assistant Professor in Geology at the University of Illinois. The Marshaks have three grandchildren.

1

SECRET CITY

Ruth Marshak

A physicist's wife in peacetime and a physicist's wife in wartime are, I have discovered, two very different things. In the years before our country was at war, this wife's interests were identical with those of any other academic lady. She went to faculty teas, fretted over her budget, and schemed for her husband's advancement. Although a physicist was inclined to work rather longer hours than his colleagues in other departments of the university, his wife's life was no different from that of the wife of a history professor. It was a good life, too.

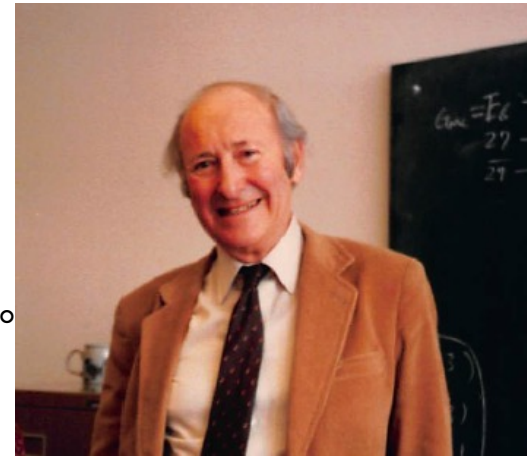
Even before the Pearl Harbor attack, however, the physicist's routine had changed. Defense projects were started in college laboratories; armed guards began to pace the thresholds of physics buildings. One's husband grew more secretive about his work, and one knew that his job must be important, for he was immune from the draft. The physicist's wife realized that her husband, in wartime, was more than just a college professor—his was a key profession in the defense of his country.

Some physicists remained at home to teach the few students who were left in the universities. Others worked on subcontracts for the Army or the Navy in their own laboratories. But many were forced to leave home in order to do their part in developing and perfecting the weapons of war. They went to a giant installation at the Massachusetts Institute of Technology to work on radar. They went to Washington as Naval Ordnance men. They went to the Aberdeen Proving Grounds. Then, sometimes, the wives who accompanied them found that they were moving to a destination without a name.

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授

話を博士研究員時代に戻します。ボスのMarshak教授は、1947年6月2-4日にニューヨークのShelter IslandのRam's Head Innで開催された有名な素粒子の研究会議(Shelter Island Conference)に出席しました。Wikipediaによると、以下の研究者が参加しました。H. Bethe, D. Bohm, G. Breit, K. Darrow, H. Feshbach, R. Feynman, H. Kramers, W. Lamb, D. MacInnes, R. Marshak, J. von Neumann, A. Nordsieck, J. R. Oppenheimer, A. Pais, L. Pauling, I. Rabi, B. Rossi, J. Schwinger, R. Serber, E. Teller, G. Uhlenbeck, J. van Vleck, V. Weisskopf, J. Wheeler



Robert E. Marshak 教授

この研究会で有名なのは、Lamb shiftの実験結果が発表されたが、会議後にコーネル大学へ帰る列車の中でBetheがLamb shiftを説明する計算を仕上げた話ですが、Marshak先生も二中間子論にたどり着いています。

ある日の私との雑談でMarshak先生が言いました。

Marshak: Shelter Island Conferenceの話だが、当時はアメリカでもまだユダヤ人に対する差別があつてね、会場のホテルの入口に「ユダヤ人は入場不可」というような標識が出ていたのだよ。でも、私を含めて、この会議の参加者の多くはユダヤ人だったので、我々は顔を見合わせたけど、無視して入って行ったのだよ。

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

* Robert E. Marshak教授

ある日の午後にボスMarshakの部屋へ行った時のこと:

部屋に入るとMarshak教授がテープレコーダーに何か話しかけていました。そして、録音が終わると、隣の秘書室へ行ってテープを渡しました。今書いている論文の原稿だそうです。私など、論文を書くときは、紙に文章を少し書いては消し、少し書いては消して、ものすごく時間が掛かっていたのですが、Marshak教授は、テープレコーダーに話すだけで論文の原稿が出来上がることにとても驚きました。その時、その論文の内容の一部に関してだと思いますが、以下のように言いました。

Marshak: 名古屋大学の坂田スクールは結束力が強いね。二中間子論は私も独立に提唱したのだけど、無視されて、一切引用してくれないんだよ。

20年後、私が名大の物理学科に着任してから、ある時、E研の棚橋誠治さんにこの話をしたら、

棚橋: 僕はちゃんとMarshakを引用していますよ。

と言いました。

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

以下がMarshak教授が、あの時、テープレコーダーに話し掛けることで書き上げた論文だと思います。

R. E. Marshak, *Progress of Theoretical Physics Supplement No. 85*, 63 (1985).

This huge discrepancy received a thorough discussion at the first Shelter Island Conference held June 1~3, 1947 in the USA. The discussion gave rise to my two-meson hypothesis¹⁰⁾ in which I proposed that two kinds of mesons exist in nature, possessing weakly with matter. Thus, I independently arrived at the same basic conclusion as the Japanese workers,⁸⁾ whose papers did not reach the USA until the end of 1947. The

8) S. Sakata and T. Inoue, *Prog. Theor. Phys.* **1** (1946), 143.

Y. Tanikawa, *Prog. Theor. Phys.* **2** (1947), 220.

9) E. Fermi, E. Teller and V. Weisskopf, *Phys. Rev.* **71** (1947), 314.

10) R. E. Marshak and H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **72** (1947), 506.

Also B. Pontecorvo, *ibid.* **72** (1947), 246.

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

M. Tanabashi, *Progress of Theoretical Physics Supplement No. 197*, 4 (2012).

1942 became the memorial year for the second generation leptons (μ and ν_μ), when Sakata and Inoue advocated their “two-meson theory”.¹⁶⁾ At that time, a

An alternative scenario, in which μ was assumed to be a bosonic particle, was discussed by Y. Tanikawa and S. Nakamura at the same time.*⁾ Unfortunately, due to the war circumstances, the English printing of Sakata-Inoue’s two-meson theory paper was delayed until 1946,¹⁸⁾ one year before the “two-meson theory” of Marshak and Bethe¹⁹⁾ and the famous nuclear emulsion photographs catching $\pi \rightarrow \mu\nu$ taken by Powell’s group in their cosmic ray experiment.²⁰⁾

16) S. Sakata and T. Inoue, “Chuukanshi to Yukawa Ryuushi no Kannkei ni tsuite” (On the Correlations between Mesons and Yukawa Particles), in Japanese, Bull. Phys.-Math. Soc. Jpn. **16** (1942), 232.

17) Y. Tanikawa, Prog. Theor. Phys. **2** (1947), 220.

18) S. Sakata and T. Inoue, Prog. Theor. Phys. **1** (1946), 143.

19) R. E. Marshak and H. A. Bethe, Phys. Rev. **72** (1947), 506.

20) C. M. G. Lattes, H. Murihead, G. P. S. Occhiellini and C. F. Powell, Nature **159** (1947), 694.

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

そろそろ私の研究について話しましょう。私は、コーネルでは、ミュオンの異常磁気モーメントの計算と格子ゲージ理論のモンテカルロシミュレーションをやりましたが、ここでは群論を使ってクォークやレプトンの複合模型をやらなければなりません。全く経験がありませんでした。

それで半年ぐらい、この分野の勉強ばかりしていて、何も成果が出ませんでした。2年任期の職では、実質、1年間で成果を出さないと次の職を得るのが難しくなります。1年後の秋には次の職に応募しないといけなくなるからです。だんだんとプレッシャーが高まり、**帯状疱疹**に罹ってしまいました。ゾクゾクとして、何か体調が悪くなりそうだと感じたので、スーパーから多めの食糧を買い込んで冷蔵庫に入れて引きこもりましたが、お腹の周りに半周の水ぶくれの帯ができて、チクチクと痛くて夜も寝られません。疲れ果てて明け方にやっと寝入るという生活が3週間続きました。その間、日本人の家族が料理を差し入れしてくれたこともあり、助かりました。やっと治って研究室へ行ったら、ボスの**Marshak**先生が、怒って言いました。

Marshak: 君はアメリカの医療を信用しないのか？

岡本: いいえ、そういうことではありません。私は日本にいても、歯医者以外は、ほとんど医者に行かず、薬も飲みません。

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

それから少し経って、1985年5月末頃、しびれを切らしたボスが、

Marshak: 2ヶ月の猶予を与えるから、7月末までに何らかの成果を出しなさい。

それができなければ、君のことは諦める。また、スーパーコンピューターセンターの計算時間も取得してあげたのだから、それも使用しなさい。

と**最後通牒**を言い渡されました。これは、次の職に応募する時、現在のボスの推薦書が一番大切になりますが、それがもらえないか、もらえても良い推薦書は期待できないことを意味します。ヴァージニア工科大学のあるBlacksburgは寂しいところで、今までのように、一緒に遊べる大学院生もおりません。もう一人の博士研究員の**Gary Staebler**は結婚していてあまり遊んでくれません。しかし、追い込まれて分かったのですが、必死になって頑張り始めたら、一切寂しいという気持ちはなくなりました。これまではたるんでいたのだなと痛感しました。この2ヶ月間は、朝8時に起きて、食事時間を除いて、夜8時まで素粒子の複合模型の研究、夜8時から午前2時までは計算プログラムの作成を行うというスケジュールで毎日を過ごしました。

また、日本人からの食事のお誘いも涙を飲んで全て断りました。 **Gary Staebler** 博士研究員



5. Virginia Polytechnic Institute and State University

ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

もらったスーパーコンピュータの計算時間で何を計算するかについてはコーネルの川合光氏に相談しました。

川合: 我々の共通の友達で、コーネル大学化学科の Harold Scheraga 教授の博士研究員をしている

菊地武司さんの蛋白質の折り畳み問題をやったらどうか。 Simulated Annealing (徐冷法) が使えると思う。君が6月初めに卒業式に来る時に議論しよう。

素粒子の問題じゃなかったもので、びっくりしました。それで、卒業式にコーネルへ行った時に3人で議論し(川合さんには徐冷法を教えてもらい、菊地さんには蛋白質の説明をしてもらいました)、私が徐冷モンテカルロシミュレーションのプログラムを書くことになりました。7月末の期限までには計算プログラムの方はほぼ完成したのですが、本業の素粒子の複合模型の方は何も成果を出せませんでした。



菊地武司 さん

5. Virginia Polytechnic Institute and State University ヴァージニア工科大学 博士研究員(1984-1986)

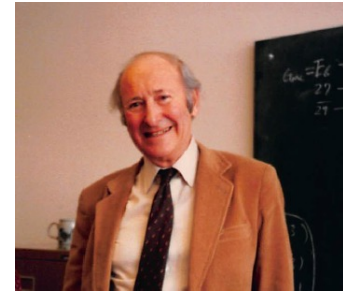


Gary Staebler 博士研究員

2ヶ月はあっという間に過ぎ去り、締切まで後1週間という時になり、もう諦めようかなと思い始めた頃、博士研究員のGary Staeblerがプレプリント室から一つ原稿を持って来て、言いました。

Gary: Yuko、君のやっているテーマに似た原稿が出ていたよ。

私はそのプレプリントを見て、1、2時間ぐらいの計算で論文を書くための結果を出すことができたのでした。ボスのMarshakに見せたら、とても喜んでくれて、私の首が繋がったのでした。Garyのおかげです。クォーク・レプトンの複合模型の最初の論文が*Physics Letters*に出版されました。



Robert E. Marshak 教授

THE $E_6 \otimes SO(10)$ PREON MODEL BASED ON GLOBAL $SU(18)$ COLOR-FLAVOR

Y. Okamoto and R.E. Marshak, *Phys. Lett. B* **162**, 333-334 (1986).

Yuko OKAMOTO and R.E. MARSHAK

Physics Department, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA 24061, USA

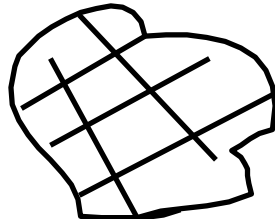
Received 12 August 1985

本論文は[5] Y. Okamoto and R.E. Marshak, “A grand unification preon model with E_6 metacolor,” *Nuclear Physics B* **268**, 397-405 (1986).

We have constructed a version of the chiral three-preon model $E_6 \otimes SO(10)$ based on the global color-flavor symmetry group $SU(18)$. By applying the 't Hooft anomaly matching condition to the subgroup $SU(16) \times SU(2)$ of $SU(18)$ together with a few physical constraints, we obtain a unique solution that gives rise to three generations of the spinorial representation 16 of $SO(10)$ without exotics. Except for $N=18$, no solution at all exists for the global color-flavor group $SU(N)$ ($16 < N < 22$) when $SU(N)$ breaks to $SU(16) \times SU(N-16)$.

1. Metropolis Monte Carlo Method (メトロポリスのモンテカルロ法)

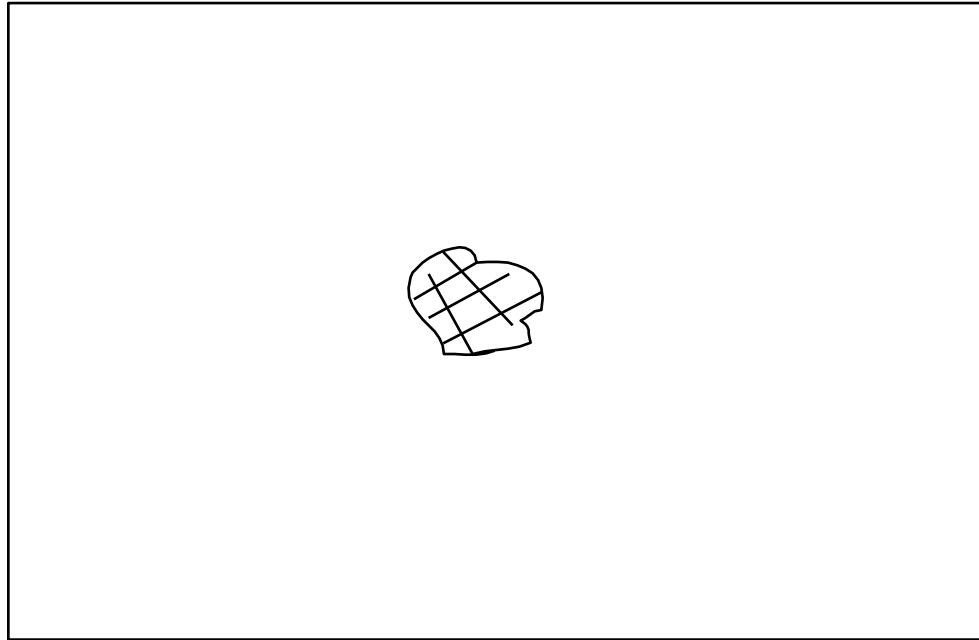
Microcanonical Ensemble (ミクロカノニカルアンサンブル)



Isolated System: $E_{\text{tot}} = \text{const}$

孤立系: $E_{\text{tot}} = \text{一定}$

Canonical Ensemble (カノニカルアンサンブル)

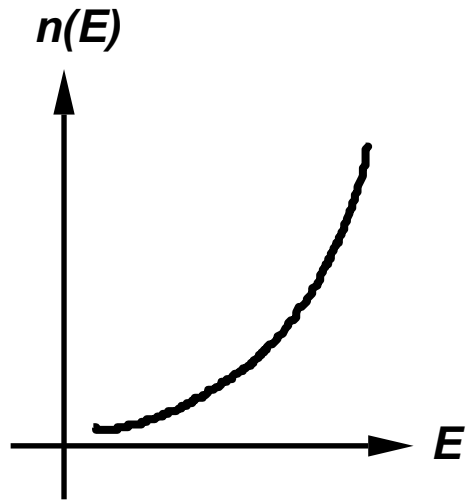


System in Heat Bath (Exchange Energy w/ Heat Bath)

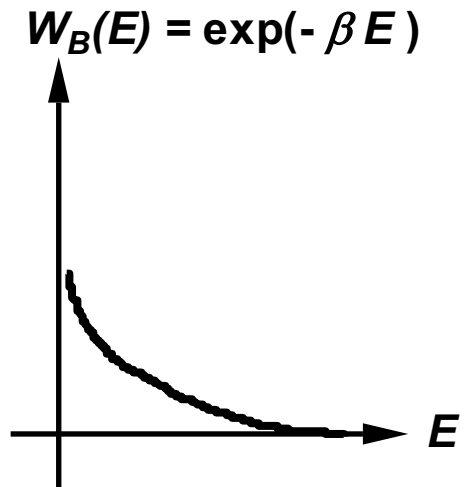
熱浴中の系 (熱浴とエネルギーをやりとり):

$$T = \text{const} = \text{一定}$$

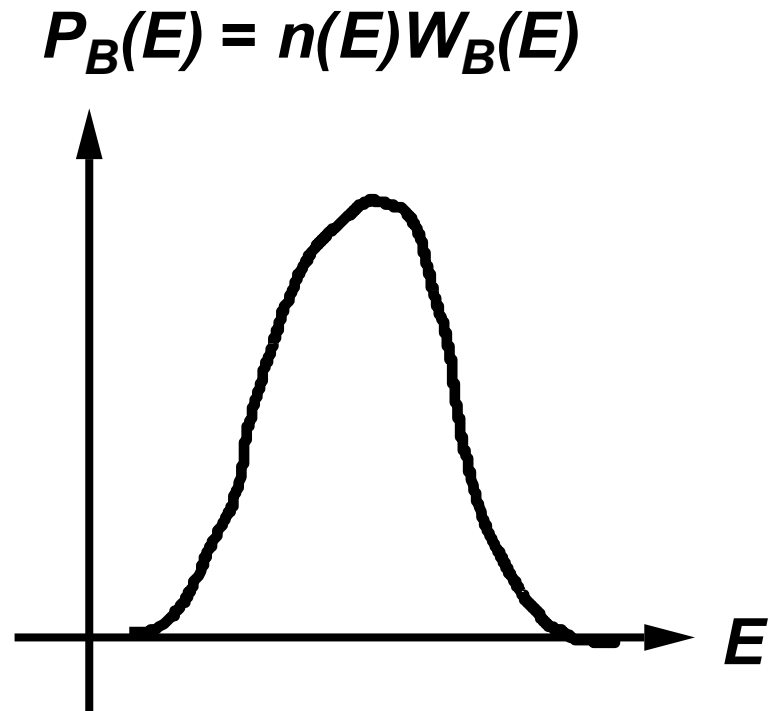
Canonical Ensemble at Temperature T



Density of States

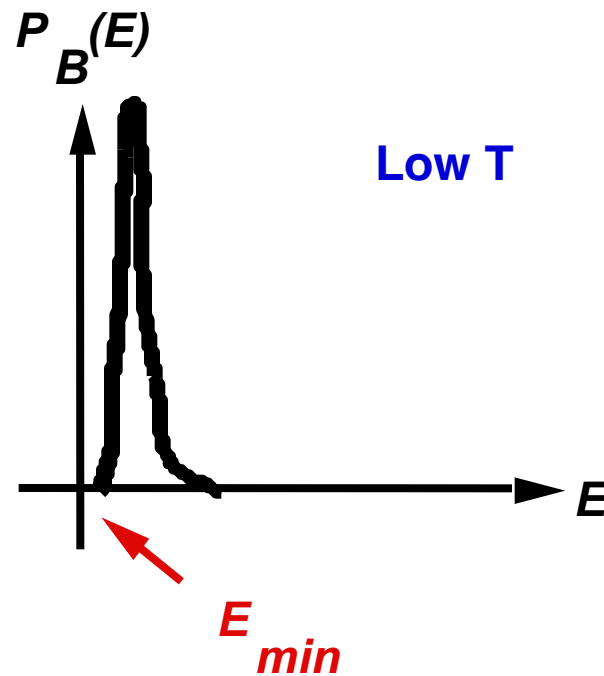
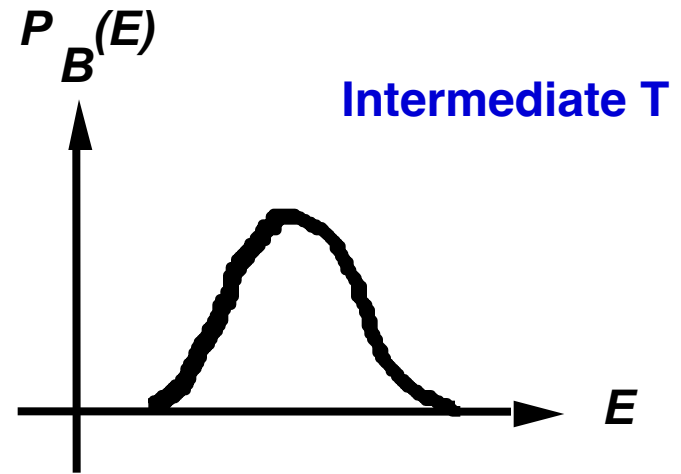
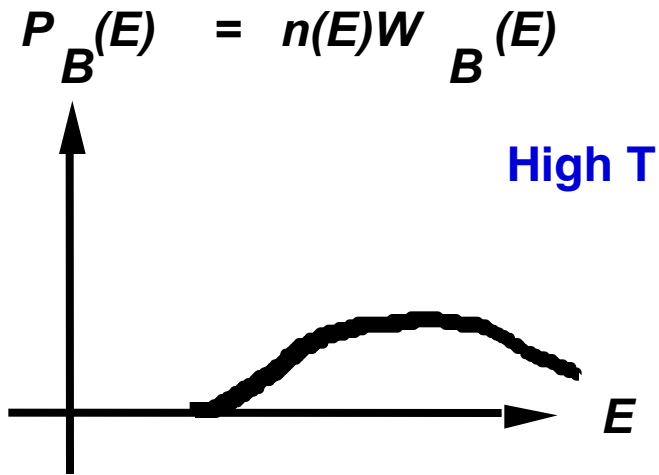


Boltzmann Factor



Canonical Probability Distribution

Canonical Distributions of Potential Energy



MONTE CARLO

State x

$$x = \{ \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \dots, \mathbf{q}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots, \mathbf{p}_N \}$$

Generate states one after another.

$$x^{(1)} \rightarrow x^{(2)} \rightarrow x^{(3)} \rightarrow \dots \rightarrow x^{(v)} = x_j \rightarrow x^{(v+1)} = x_k$$

Suppose at the v -th step the state was x_j and the candidate for the $(v+1)$ -th step is x_k .

Suppose also that the transition probability w satisfies the following: **Markov Chain**

$$w\left(x^{(v)} = x_j \rightarrow x^{(v+1)} = x_k; x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(v-1)}\right) = w\left(x_j \rightarrow x_k\right)$$

By definition, the transition probability w satisfies

$$P^{(v+1)}(x_k) = \sum_j P^{(v)}(x_j) w(x_j \rightarrow x_k)$$

where $P^{(v)}(x)$ is the probability distribution of state x at the v -th step.

The equilibrium probability distribution (平衡確率分布) $P_{eq}(x)$ should satisfy

$$P_{eq}(x_k) = \sum_j P_{eq}(x_j) w(x_j \rightarrow x_k)$$

A sufficient condition for this to be satisfied is to impose a detailed balance condition (詳細釣り合いの条件):

$$P_{eq}(x_j) w(x_j \rightarrow x_k) = P_{eq}(x_k) w(x_k \rightarrow x_j)$$

One solution to this detailed balance condition is
(**Metropolis method**):

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

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

In Canonical Ensemble, where the equilibrium probability distribution is \propto to the Boltzmann weight factor, we have

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{1}{Z} W_B(x; T) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(x)}$$

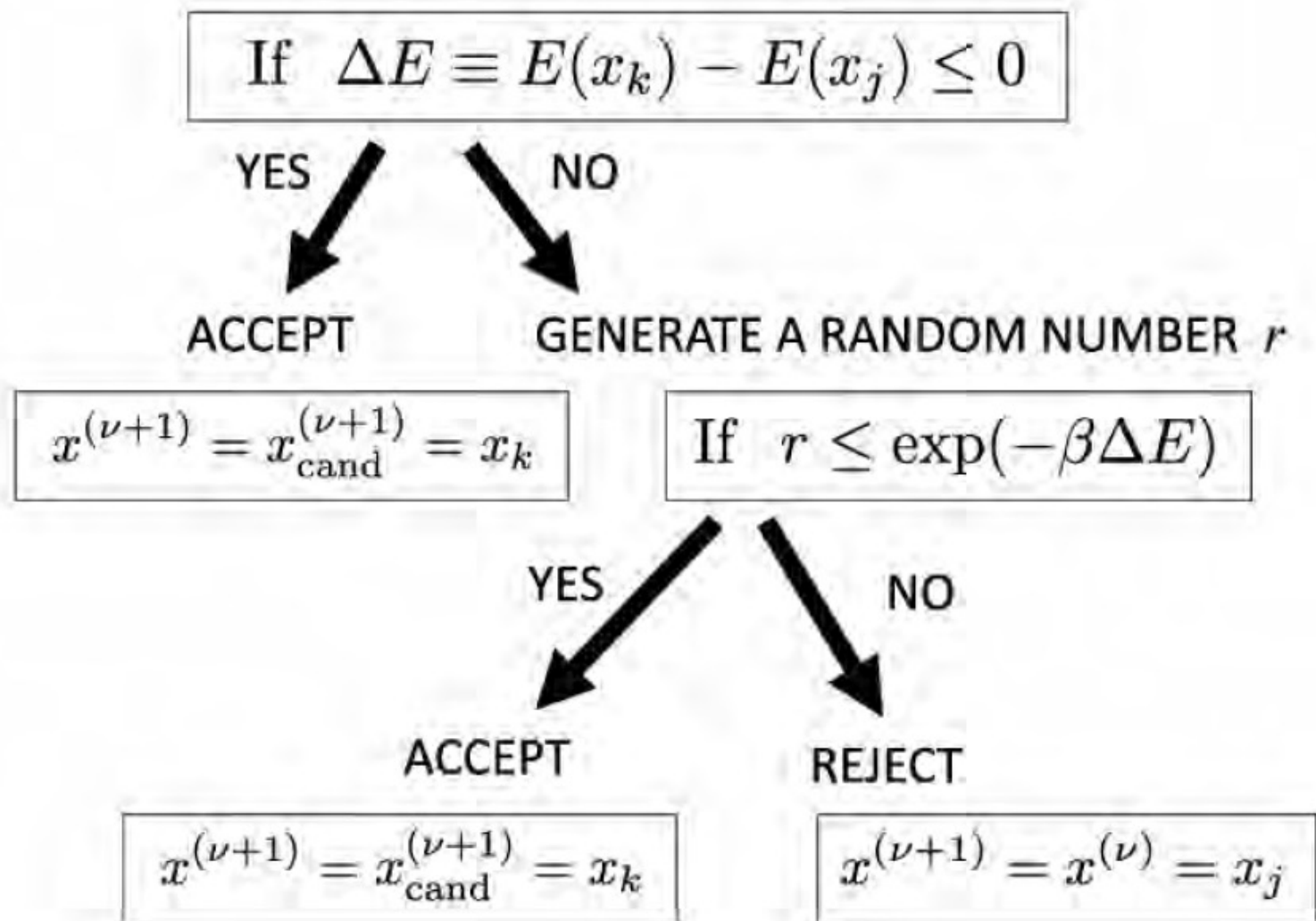
$$\text{where } Z = \int dx W_B(x; T) \text{ and } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\frac{P_{\text{eq}}(x_k)}{P_{\text{eq}}(x_j)} = e^{-\beta \Delta E} \quad \text{where } \Delta E \equiv E(x_k) - E(x_j)$$

$$w(x_j \rightarrow x_k) = \begin{cases} 1 & , \text{ if } \Delta E \leq 0 \\ e^{-\beta \Delta E} & , \text{ if } \Delta E > 0 \end{cases}$$
$$= \min(1, e^{-\beta \Delta E})$$

$$x^{(1)} \rightarrow x^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow x^{(\nu)} = x_j \rightarrow x_{\text{cand}}^{(\nu+1)} = x_k$$

Suppose at the ν -th step the state was x_j and the candidate for the $(\nu+1)$ -th step is x_k .

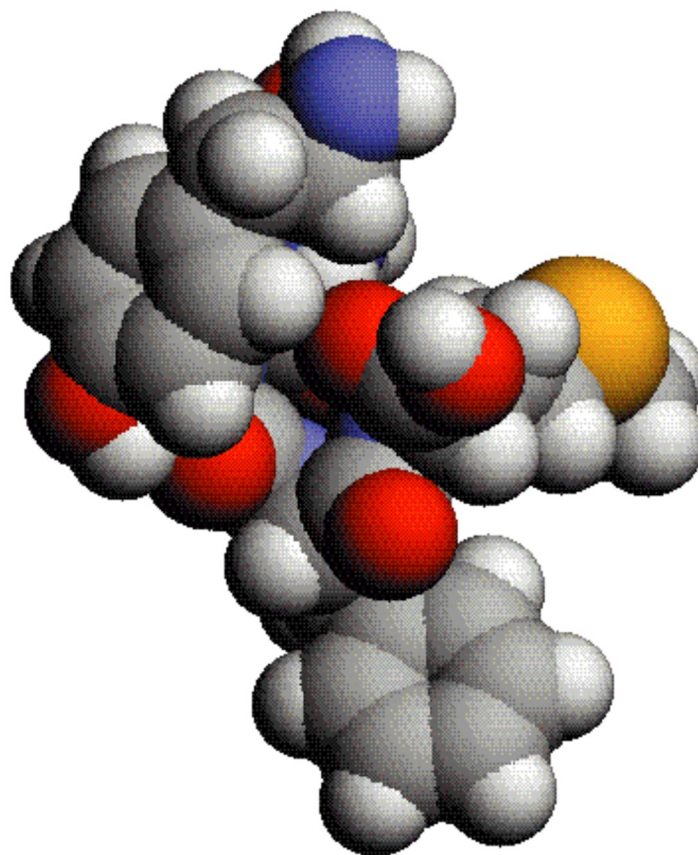


Met-Enkephalin:

Global Minimum Structure in Gas Phase

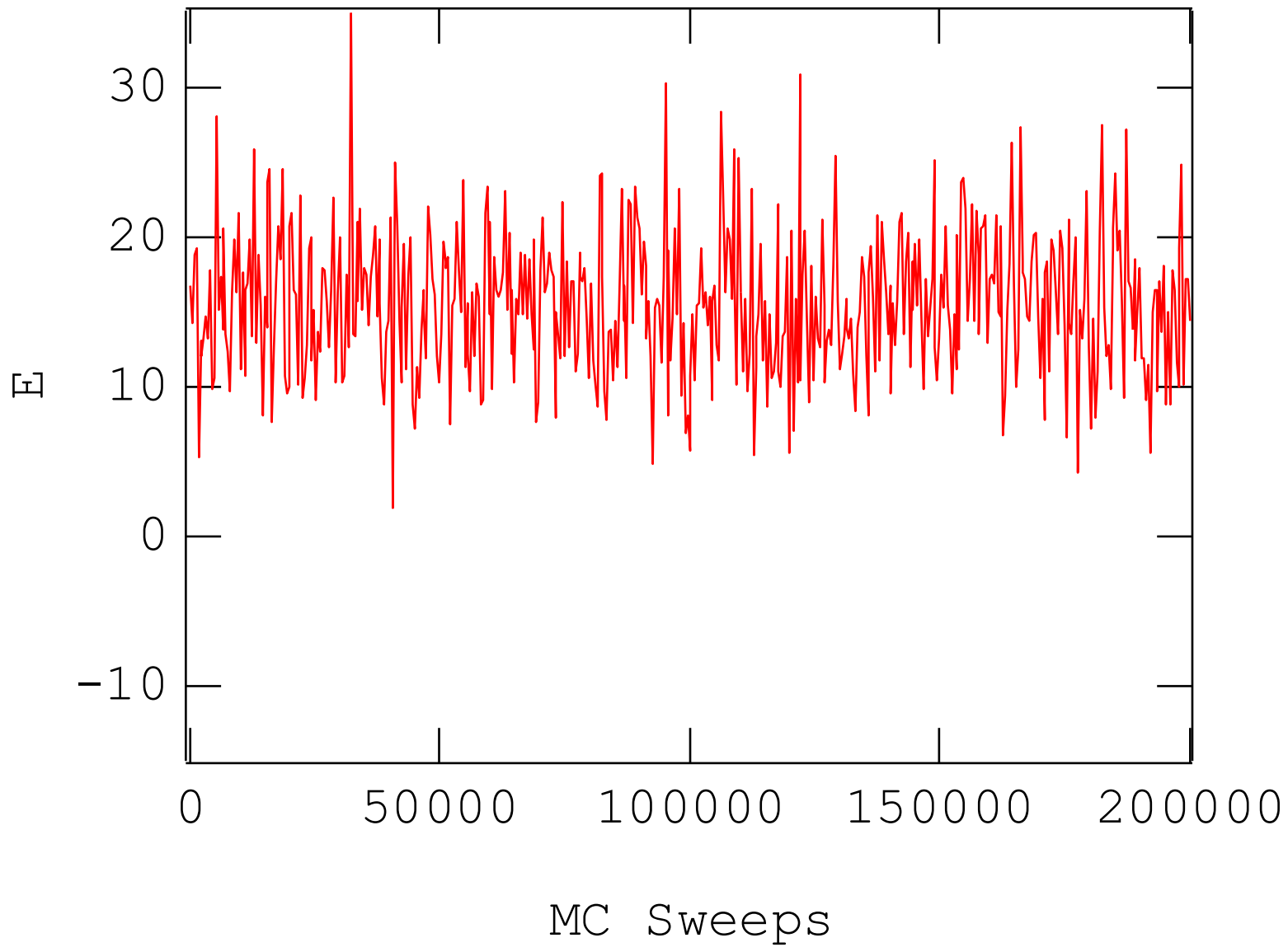
Tyr-Gly-Gly-Phe-Met

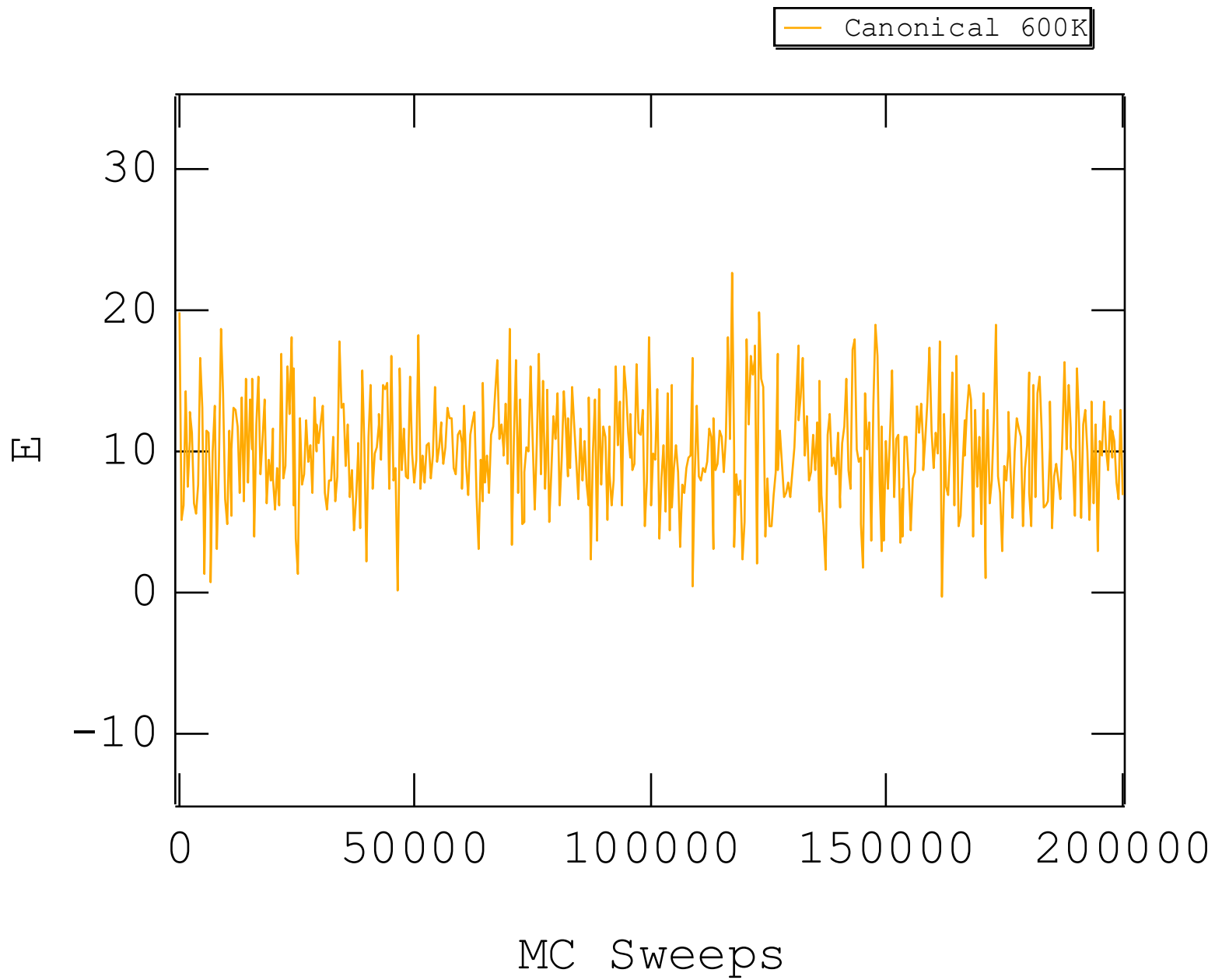
(N = 5)

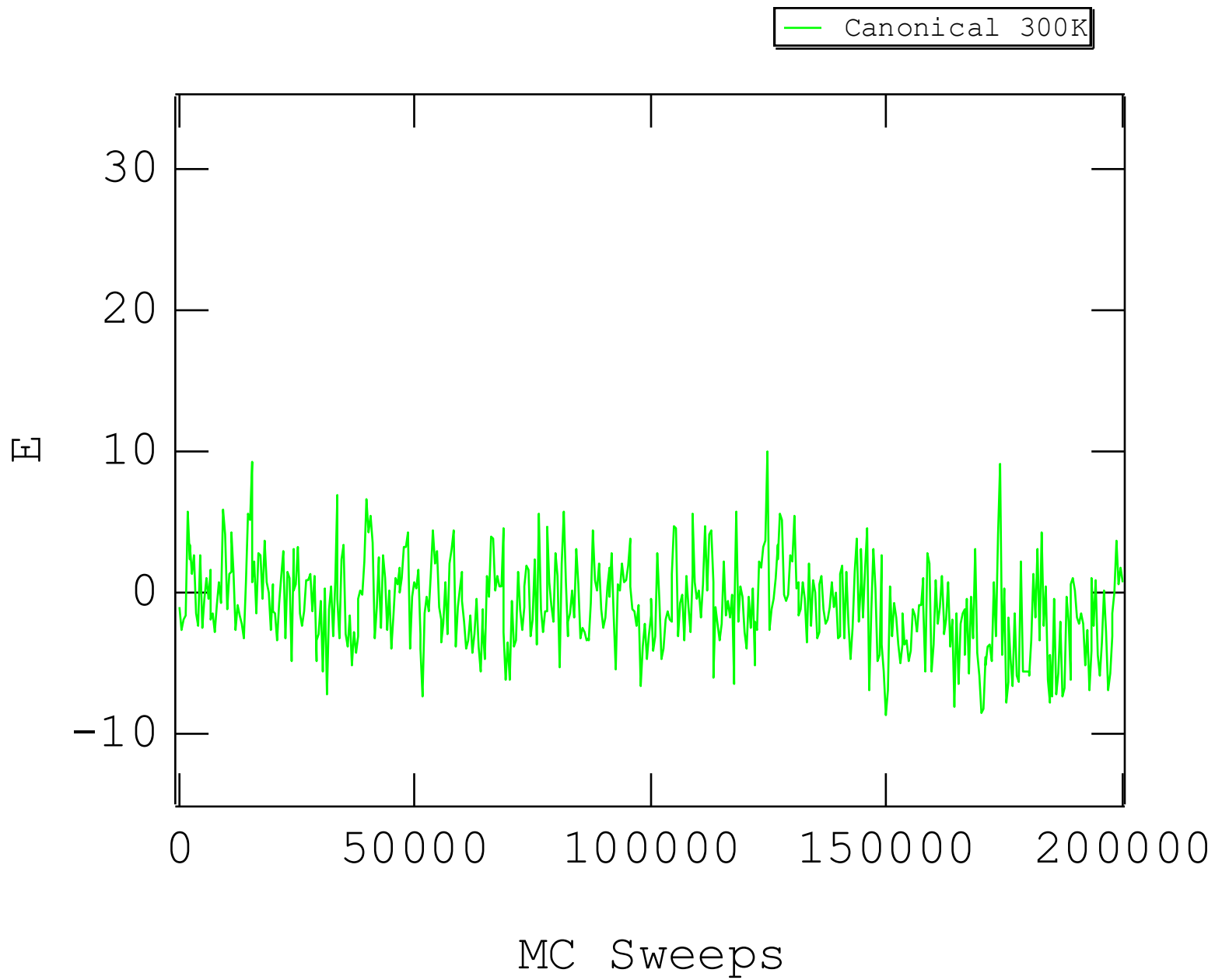


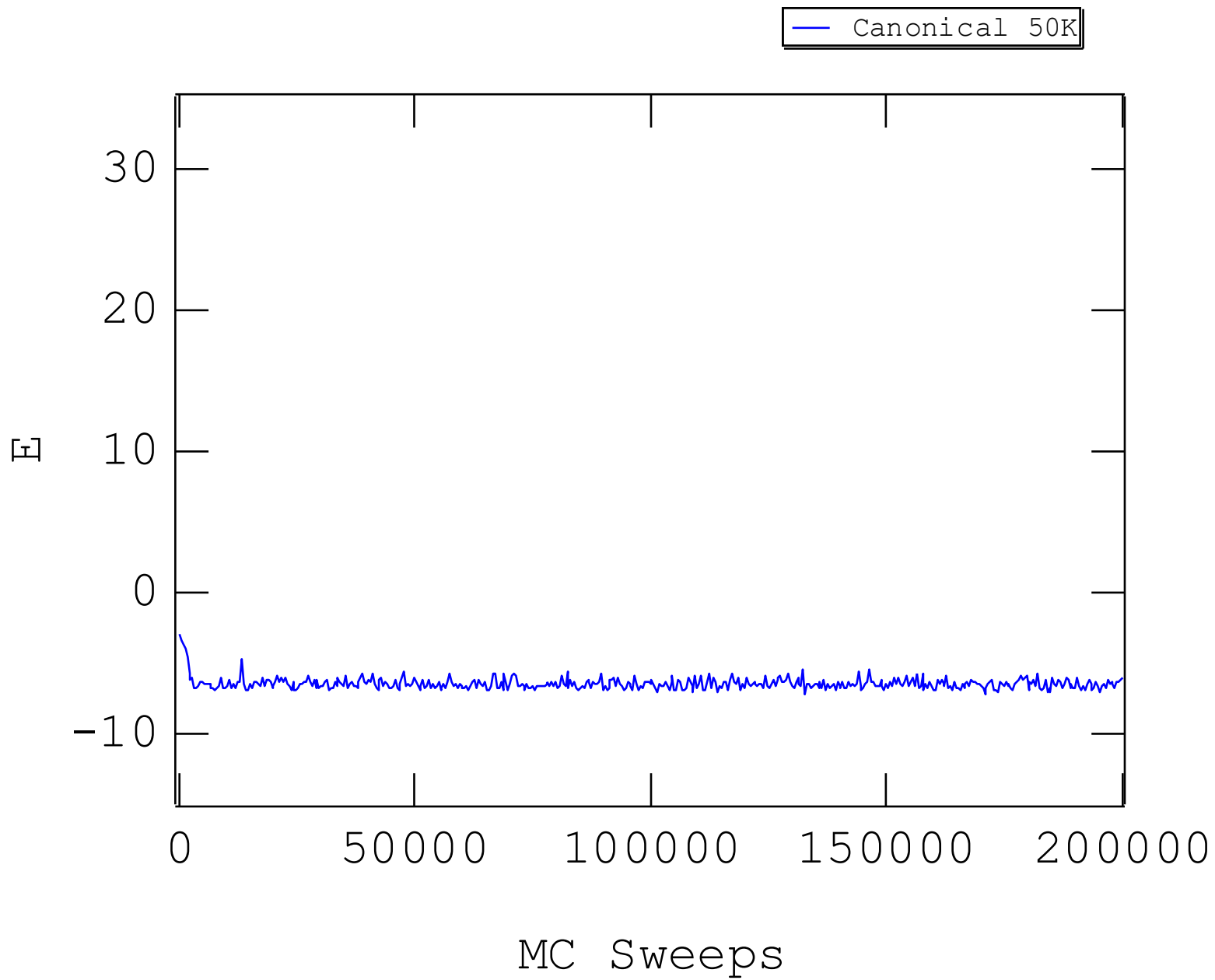
E = -12 kcal/mol

Canonical 1000K









2. Molecular Dynamics Method (分子動力学法)

MOLECULAR DYNAMICS

Newton's equations of motion: Microcanonical Ensemble

$$m\ddot{\mathbf{q}}_i = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}_i} = \mathbf{f}_i$$

Nose's method: Canonical Ensemble at temperature T

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

S. Nose, *Mol. Phys.* **52**, 255 (1984); *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).

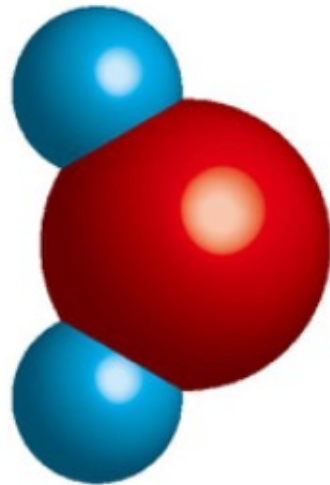
水分子(H₂O)の原子間に働く力

1. 静電力

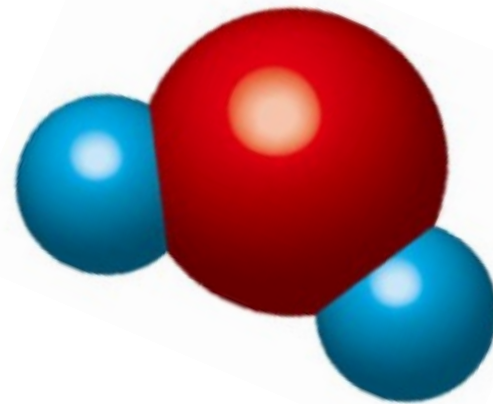
Oの電荷 = - 0.8, Hの電荷 = +0.4

2. ファンデルワールス力

ファンデルワールス半径内では反発力
(他の原子はその半径内に入れない)、
その外では引力



赤球: 酸素原子
青球: 水素原子



画像出典:

<https://www.illust-box.jp/sozai/149841/>

各原子はニュートンの運動法則に従う

ニュートンの運動方程式: $F = m a$

(力) = (質量) × (加速度)

これを解くと、任意の時刻 t における各原子の位置座標 $q(t)$ と速度 $v(t)$ が分かる。

しかし、原子数が2個を越えるとこの方程式は解けない。

よって、計算機を使って数値的にニュートンの運動方程式を解く。

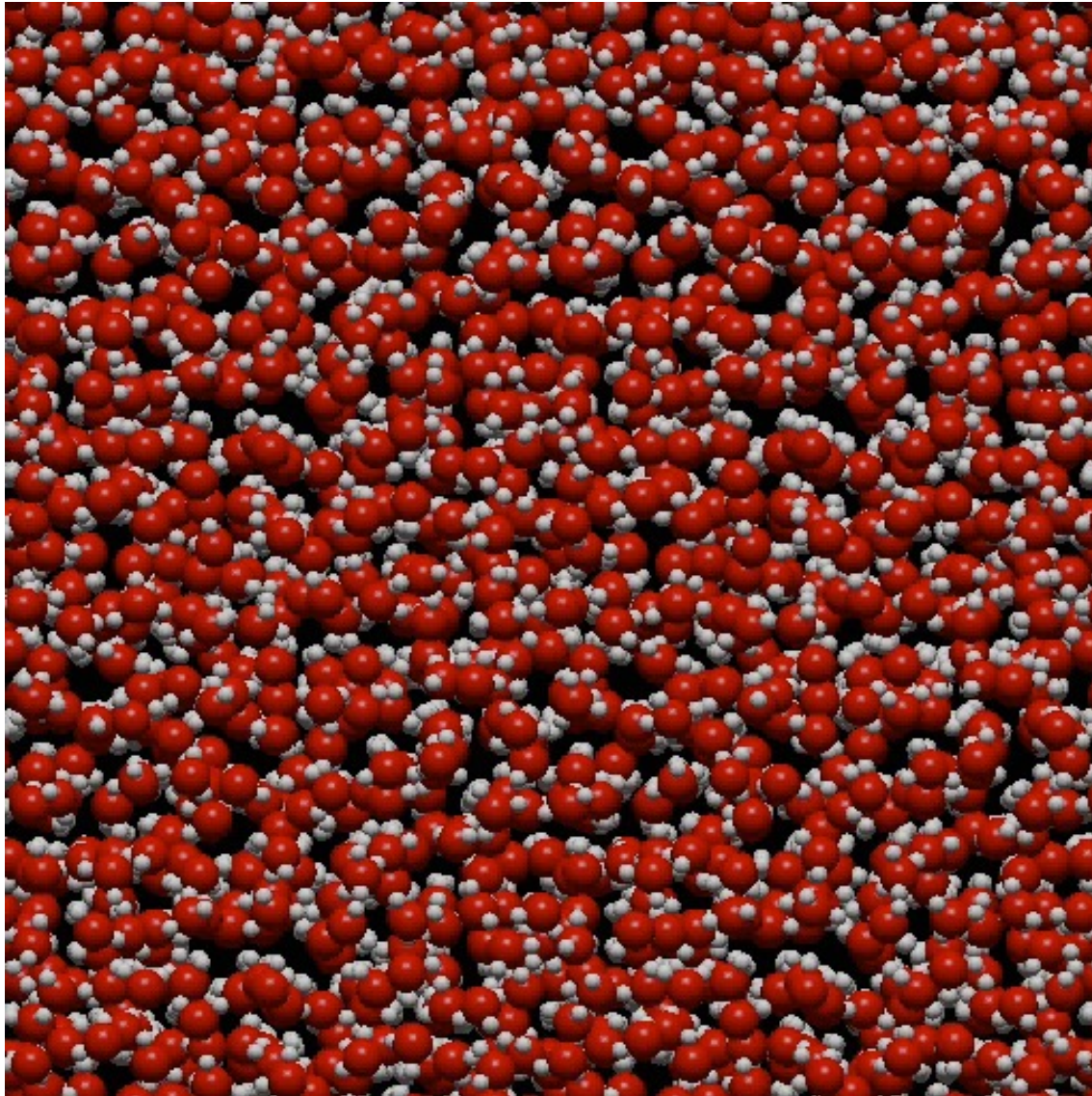
水の場合

密度(単位体積当たりの質量): 1 g/cm^3

100万原子の場合、水分子は333,333個

1辺 $220 \text{ \AA} = 22 \text{ nm}$ の立方体に入っている。

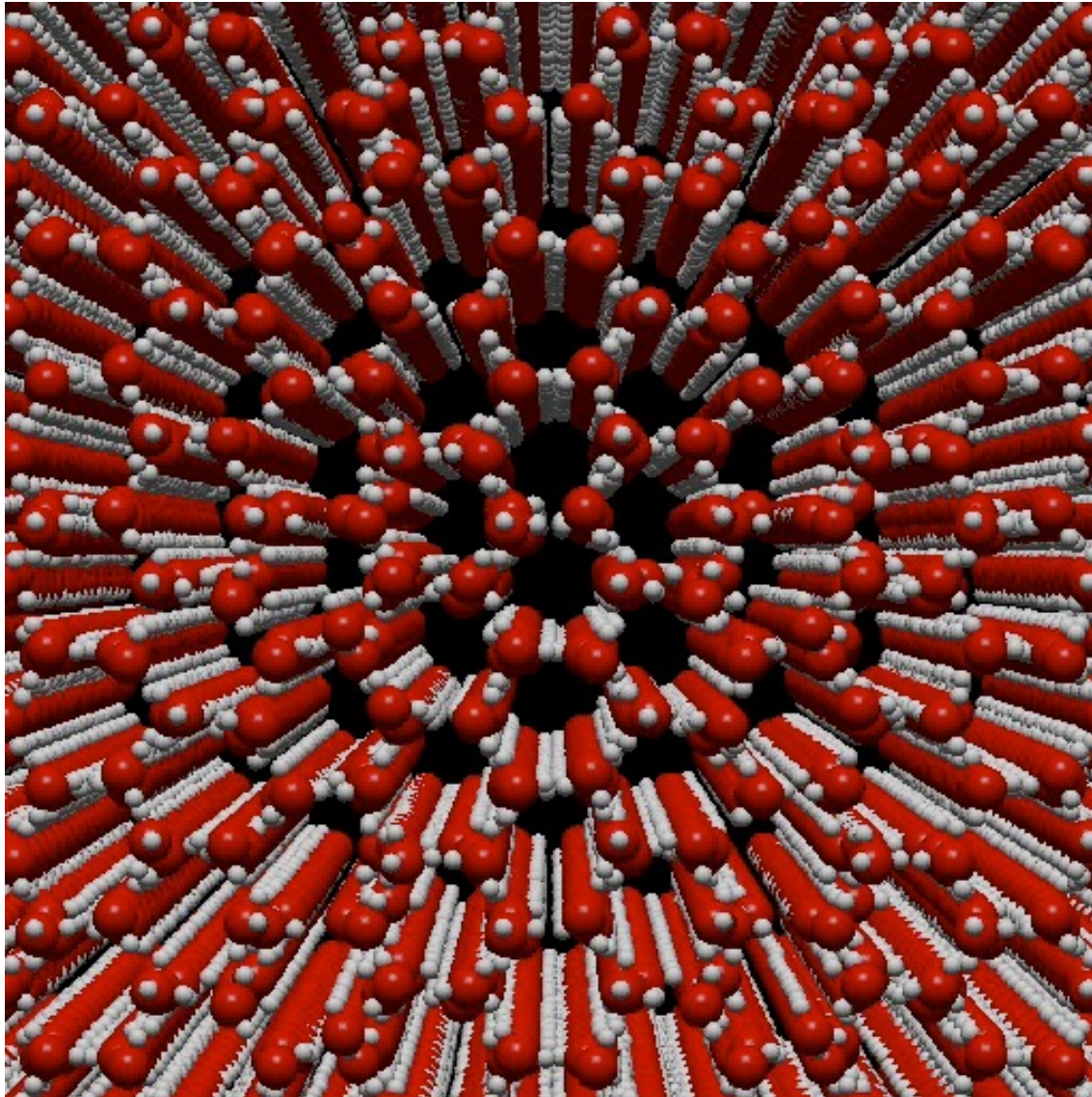
水の計算機シミュレーション



赤球：酸素原子
白球：水素原子

動画提供：岡崎進名誉教授(名古屋大学)

氷の計算機シミュレーション



赤球：酸素原子
白球：水素原子

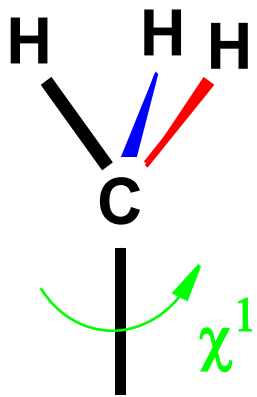
動画提供：岡崎進名誉教授(名古屋大学)

EXAMPLES OF AMINO ACID SIDE CHAINS



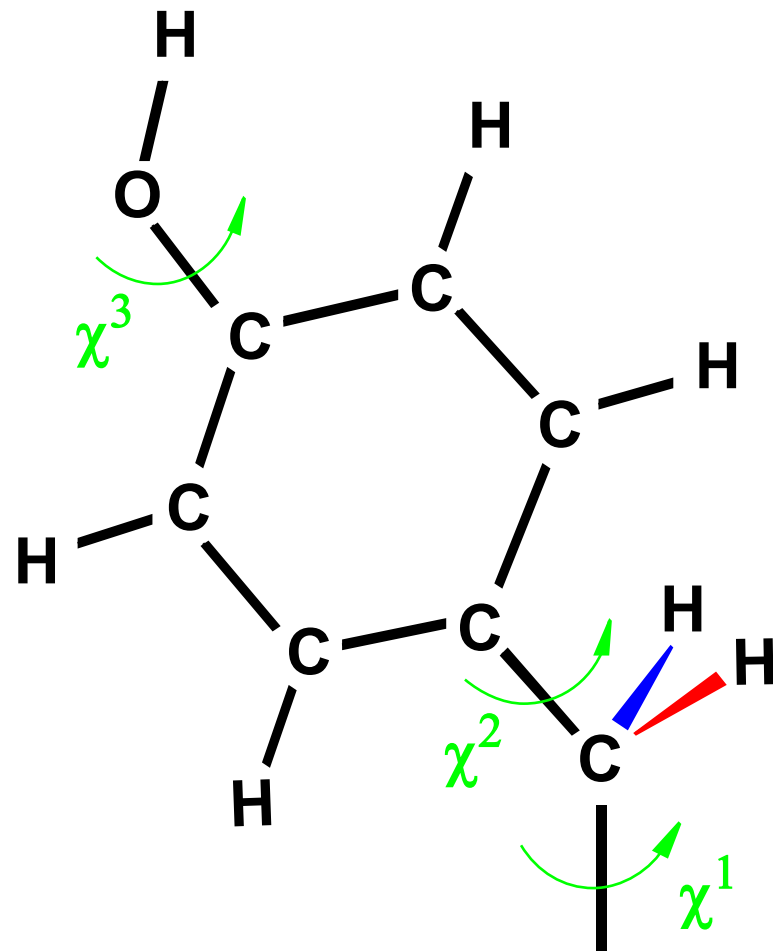
a)

GLY



b)

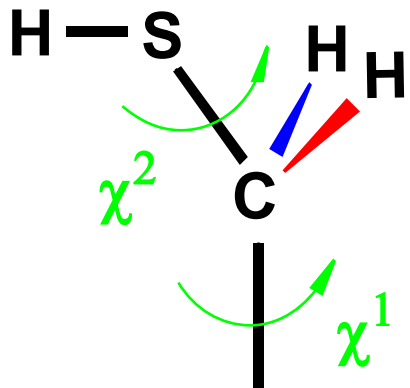
ALA



c)

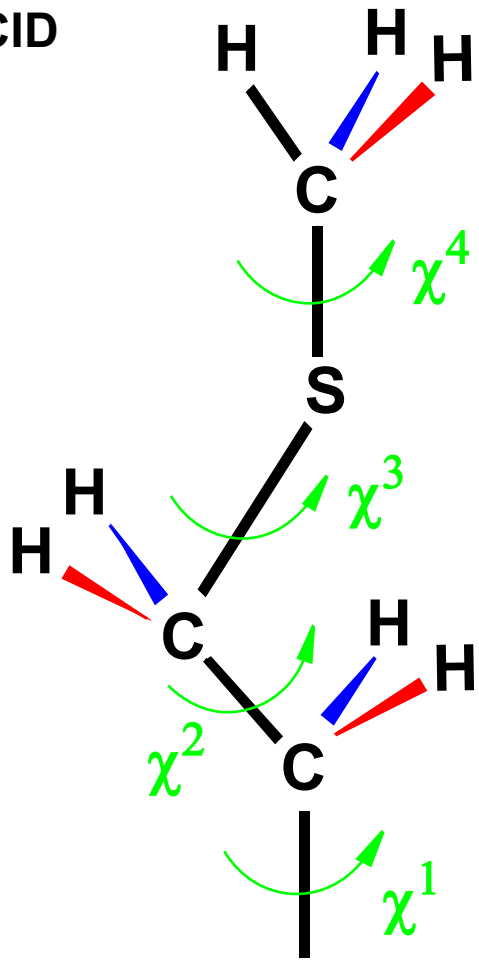
TYR

EXAMPLES OF AMINO ACID SIDE CHAINS



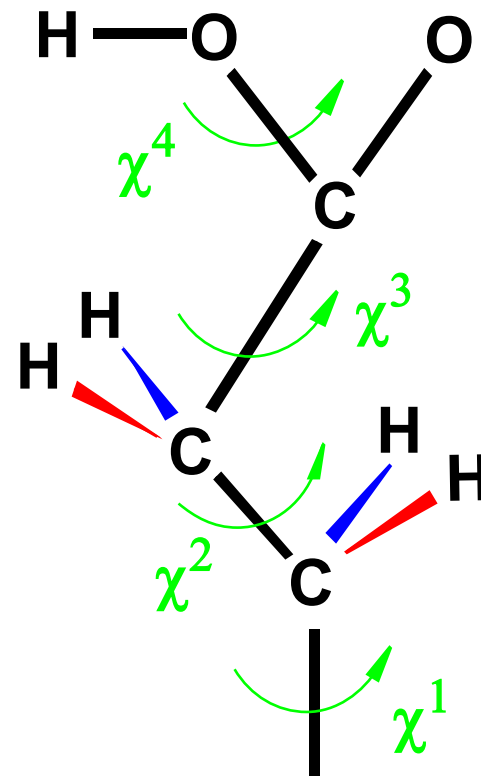
d)

CYS



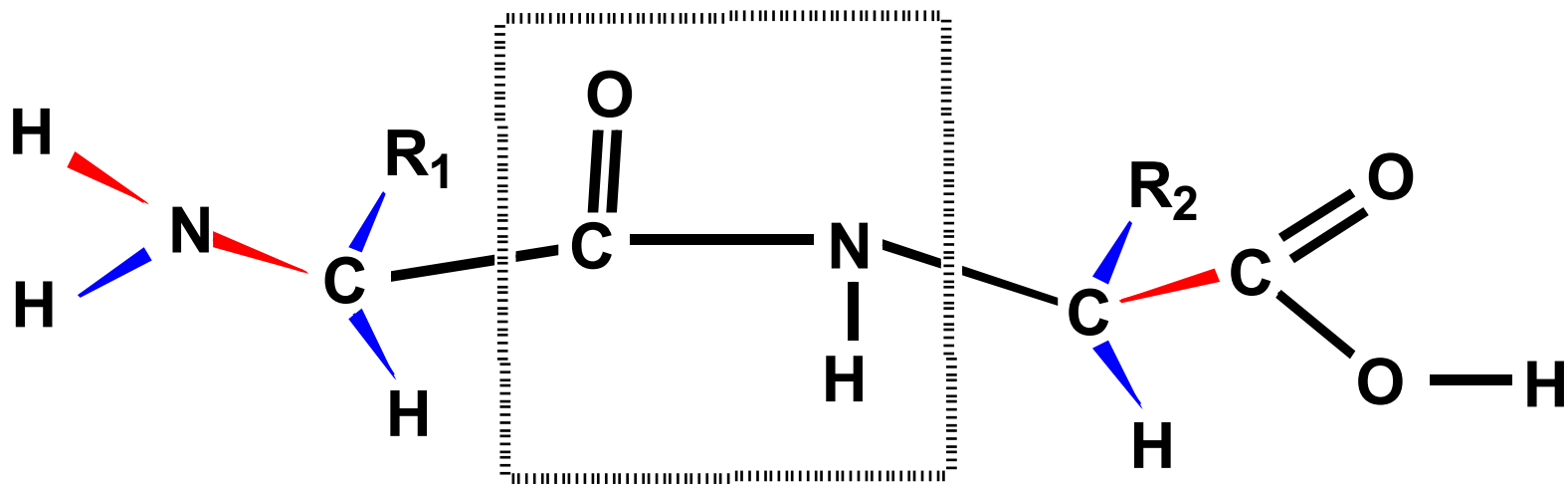
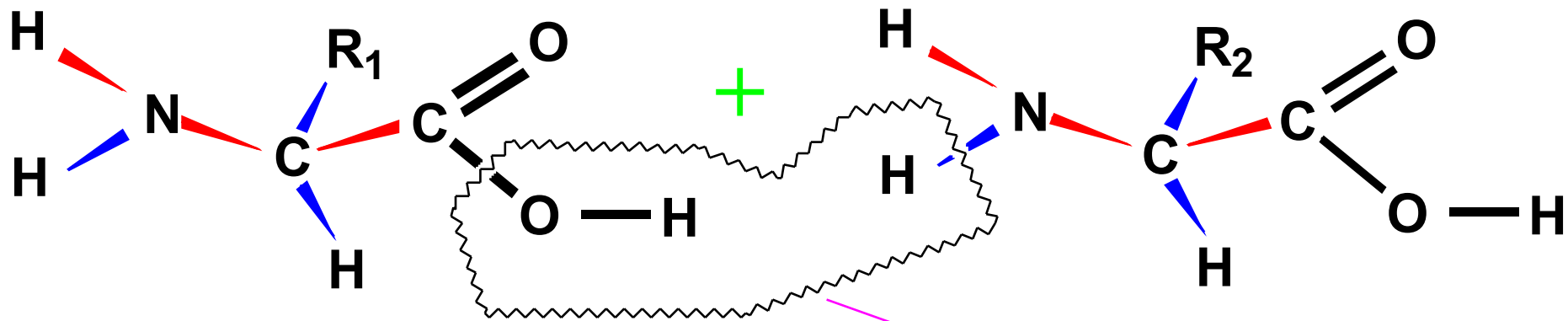
e)

MET



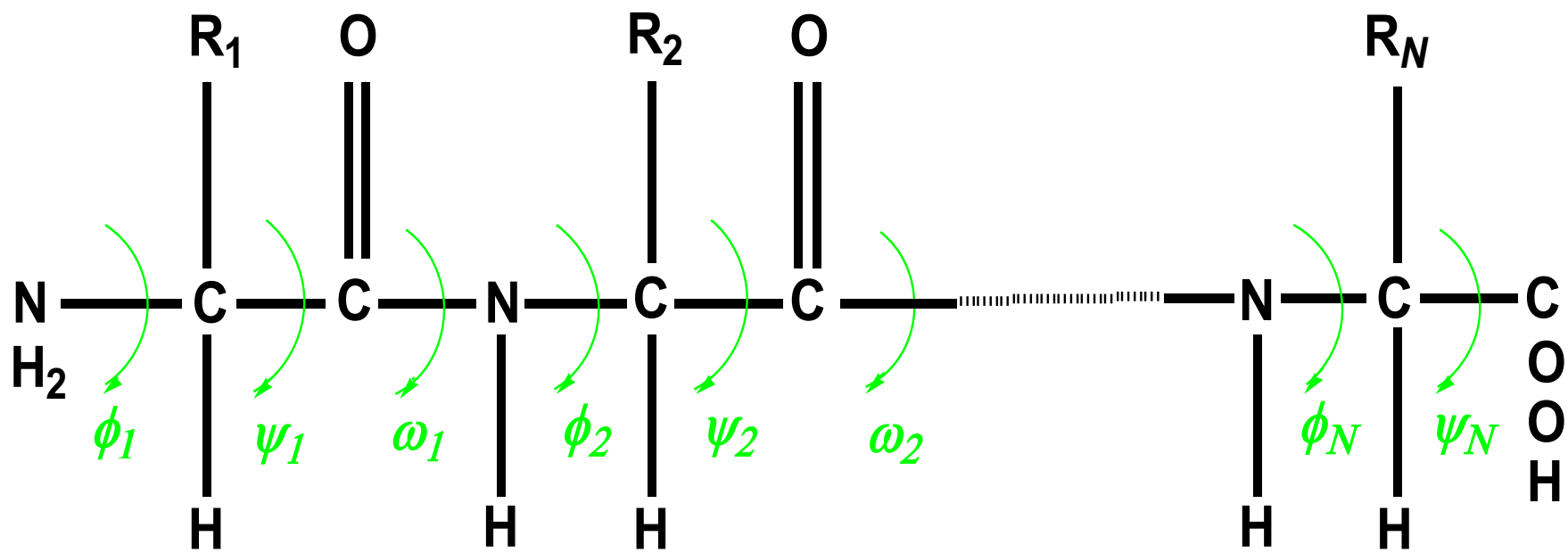
f)

GLU

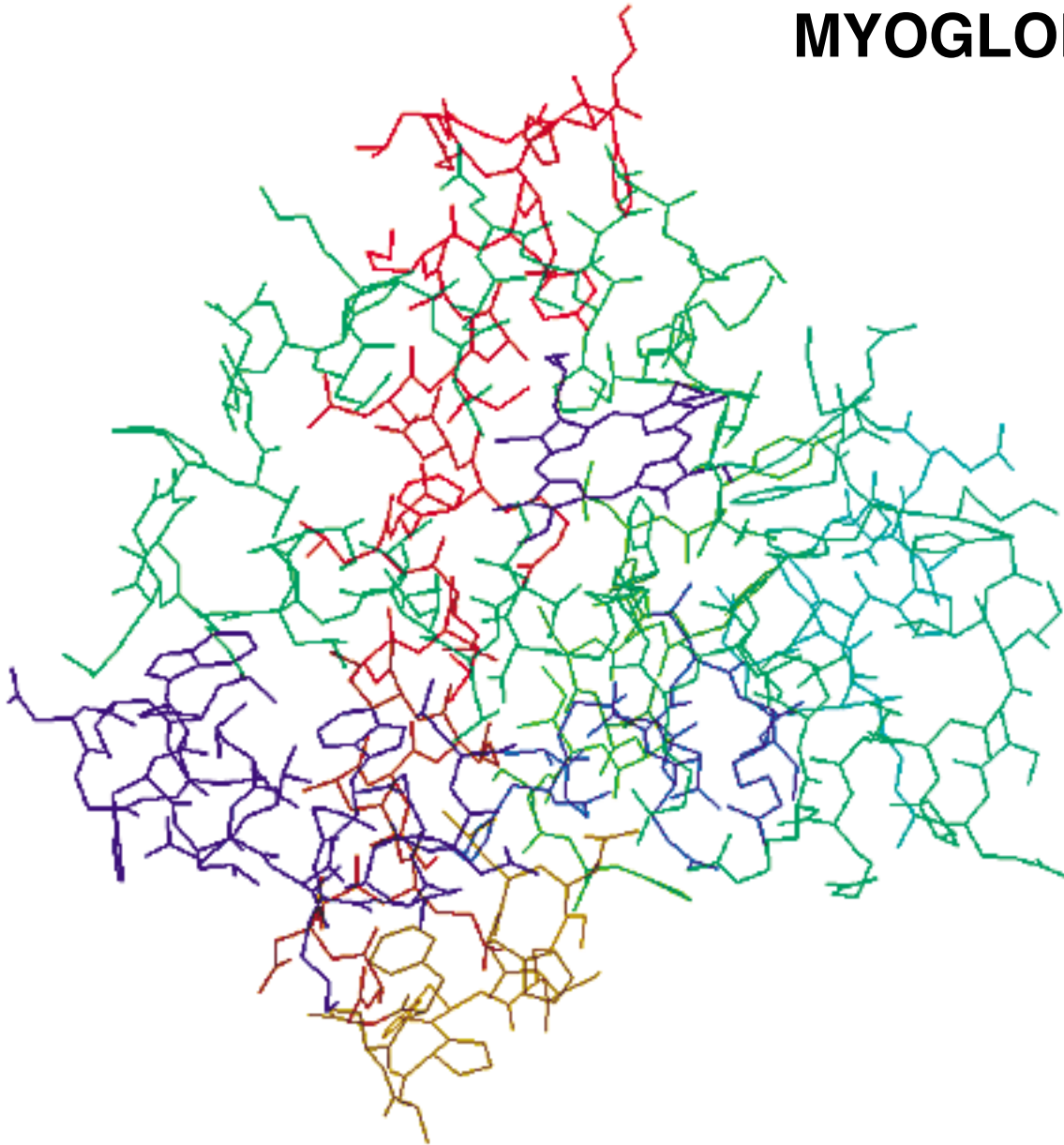


PEPTIDE BOND

PROTEIN



MYOGLOBIN (N=153)

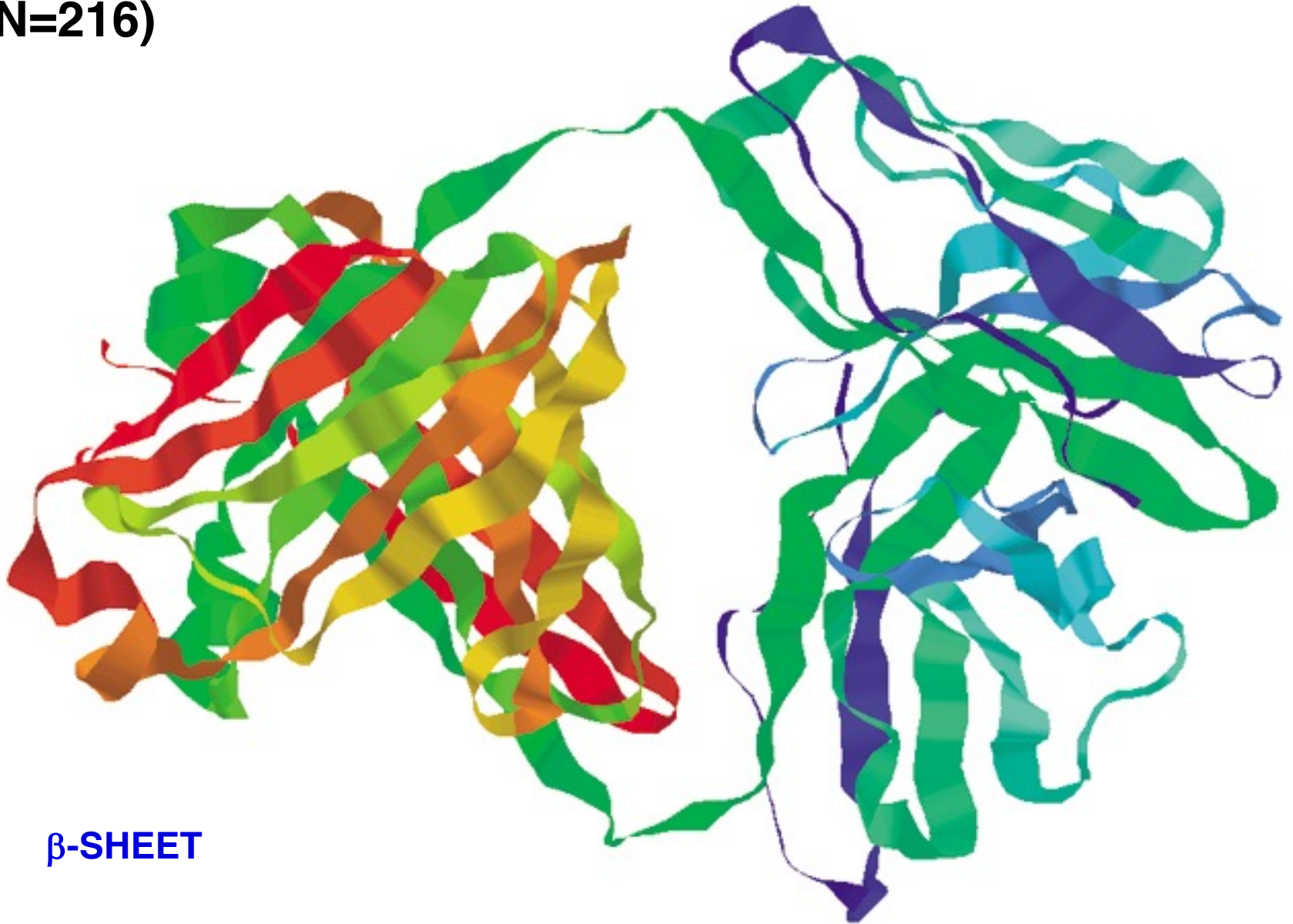


MYOGLOBIN (N=153)



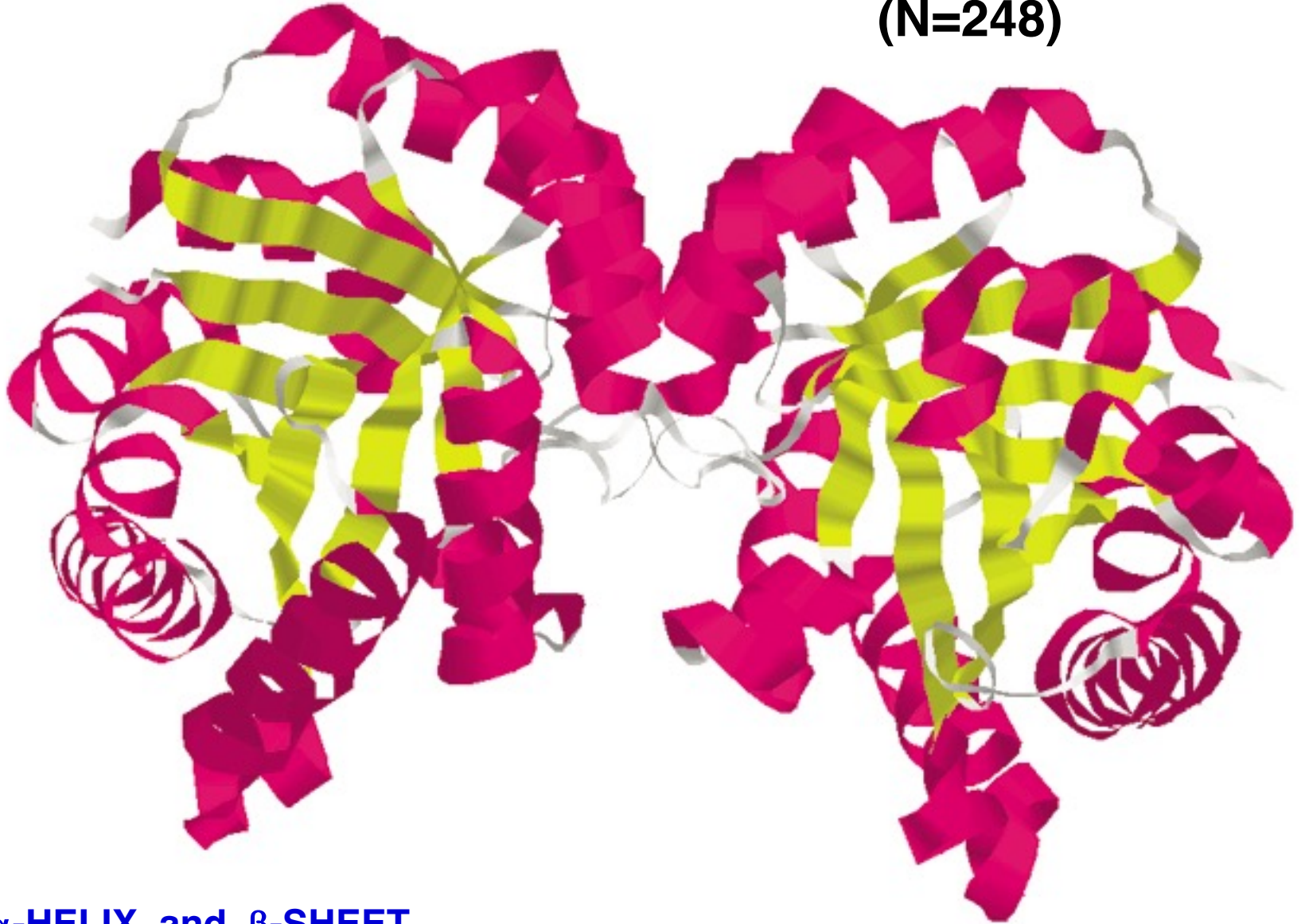
α -HELIX

IMMUNOGLOBULIN (N=216)



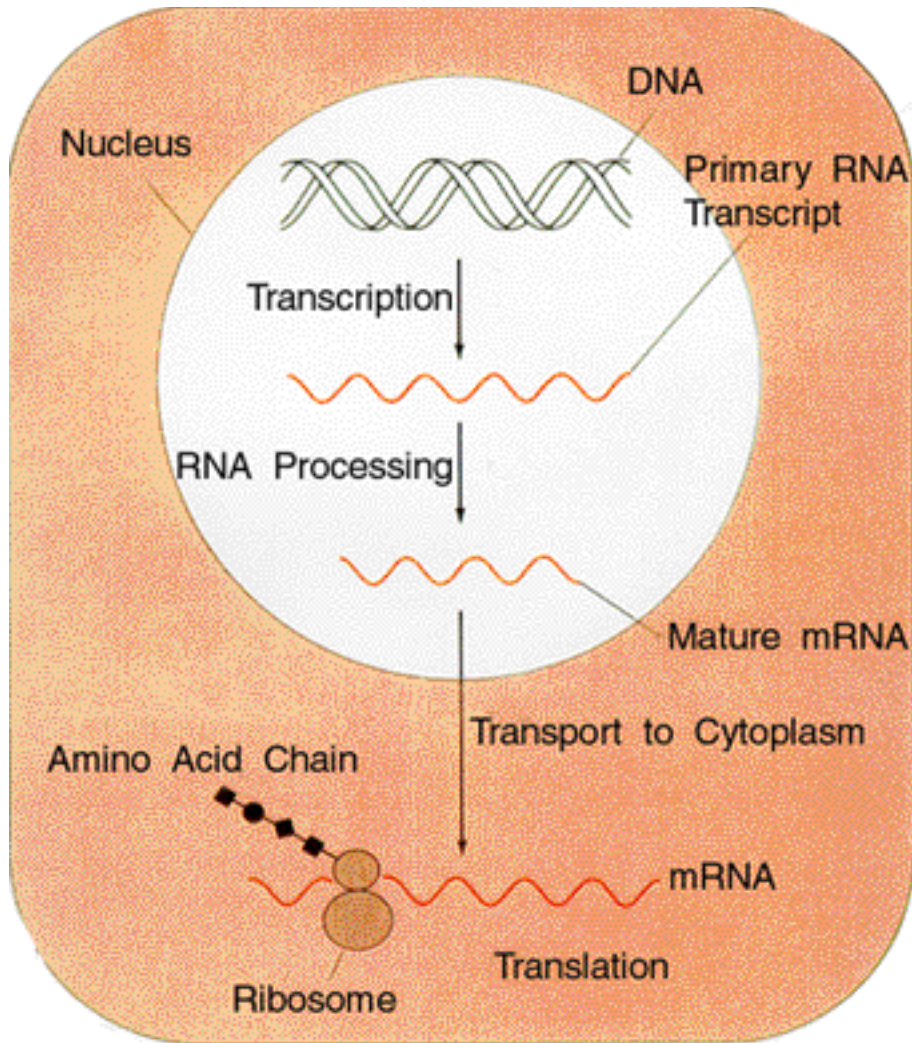
β -SHEET

TRIOSE PHOSPHATE ISOMERASE (N=248)



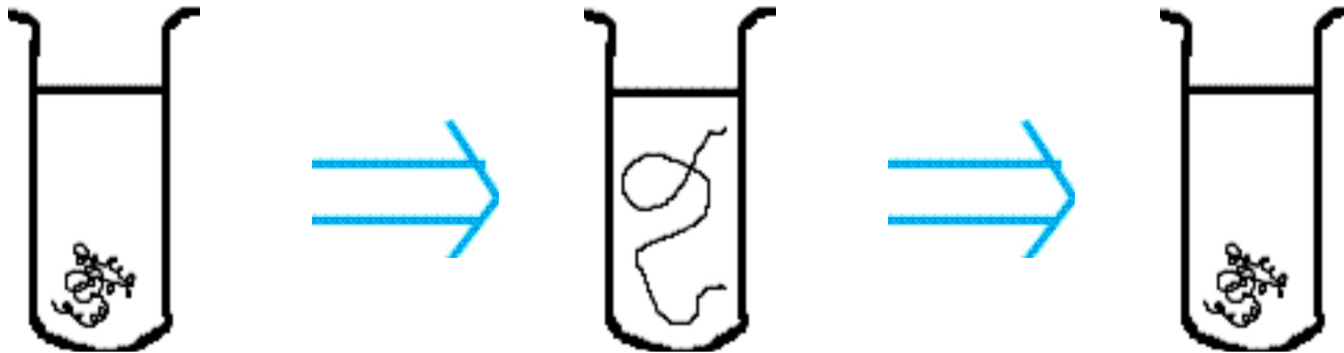
α -HELIX and β -SHEET

細胞



蛋白質は細胞内の
リボソームで合成される。

Anfinsen's Experiment (1960's)



変性剤を添加

変性剤を除去

ANFINSEN'S DOGMA

アンフィンセンのドグマ(教義)

- 蛋白質分子の立体構造はそのアミノ酸配列の情報で決まっている(自由エネルギーの最小状態)。

よって、

系の正しいエネルギー関数が与えられれば、
後は、計算機シミュレーションで蛋白質分子
の立体構造が予測できるはず。

蛋白質立体構造予測での我々の戦略

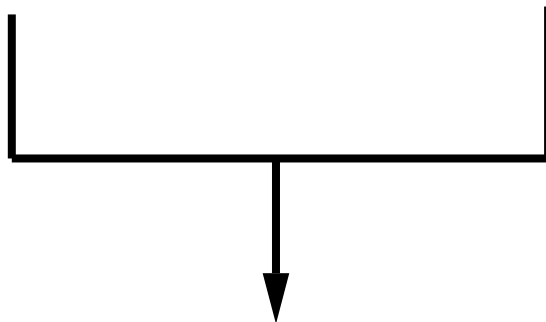
溶媒理論

電子状態理論



シミュレーション法

タンパク質系の
エネルギー関数



第一原理からのタンパク質の
立体構造予測

やるべきことその1

- ・ シミュレーションがエネルギー極小状態に留まらない強力な手法を用いる

我々は次の手法を適用することを提唱してきた。

* **徐冷法 (Simulated Annealing)**

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

エネルギー空間上のランダムウォークを実現

[例えば、マルチカノニカル法、焼き戻し法 (Simulated Tempering) 、

レプリカ交換法 (Replica-Exchange Method, also referred to as

Parallel Tempering) 、1/k Sampling 、Tsallis 統計, etc.]

利点

唯一回のシミュレーションの結果から、最小エネルギー状態ばかりでなく、

幅広い温度領域における熱力学量を計算できる

やるべきことその2

- ・ 厳密なエネルギー関数を用いる

タンパク質自身の構造エネルギー

(ボンド長項 + ボンド角項 + ねじれエネルギー項 +
Lennard-Jones 項 + 静電相互作用項, etc.)

$$E_{total} = \sum_{bonds} K_R (R - R_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{dihedrals} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] \\ + \sum_{i < j} \left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^6} + \frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}} \right]$$

+

溶媒との相互作用エネルギー

3. Simulated Annealing (徐冷法)

徐冷法 (Simulated Annealing)

S. Kirkpatrick, C. Gelatt, Jr. & M. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).

Reproduce a Crystal-Making Process on a Computer

Applications of Simulated Annealing to Systems of Biopolymers

- H. Kawai, T. Kikuchi & Y.O., *Protein Eng.* **3**, 85 (1989).
- H. Kawai, Y.O., M. Fukugita, T. Nakazawa, & T. Kikuchi, *Chem. Lett.* **1991**, 213 (1991)
- Y.O., M. Fukugita, T. Nakazawa, & H. Kawai, *Protein Eng.* **4**, 639 (1991).
- M. Fukugita, T. Nakazawa, H. Kawai, & Y.O., *Chem. Lett.* **1991**, 1279 (1991).
- T. Nakazawa, H. Kawai, Y.O., & M. Fukugita, *Protein Eng.* **5**, 495 (1992).
- Y.O., T. Kikuchi, & H. Kawai, *Chem. Lett.* **1992**, 1275 (1992).
- Y.O., T. Kikuchi, T. Nakazawa, & H. Kawai, *Int. J. Peptide Protein Res.* **42**, 300 (1993)

See also:

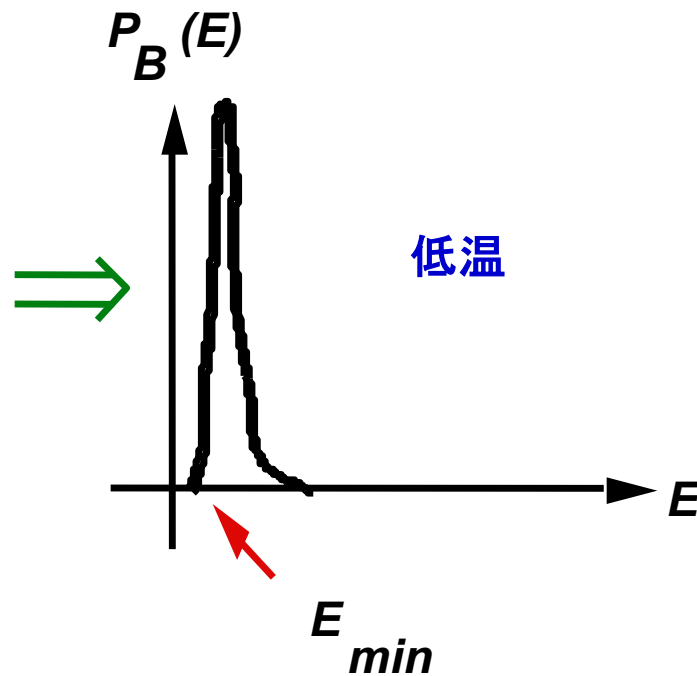
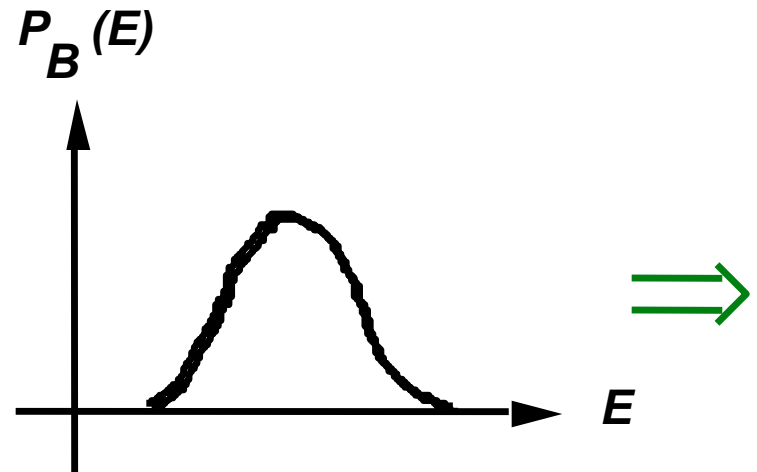
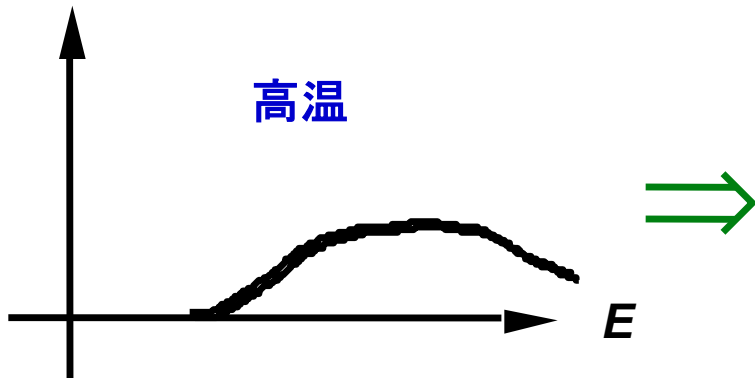
- S. Wilson, W. Cui, J. Moskovitz & K. Schmidt, *Tetrahedron Lett.* **29**, 4373 (1988).
- C. Wilson & S. Doniach, *Proteins* **6**, 193 (1989).
- A. Brunger, *J. Mol. Biol.* **203**, 803 (1988).
- M. Nilges, G. Clore & A. Gronenborn, *FEBS Lett.* **229**, 317 (1988).

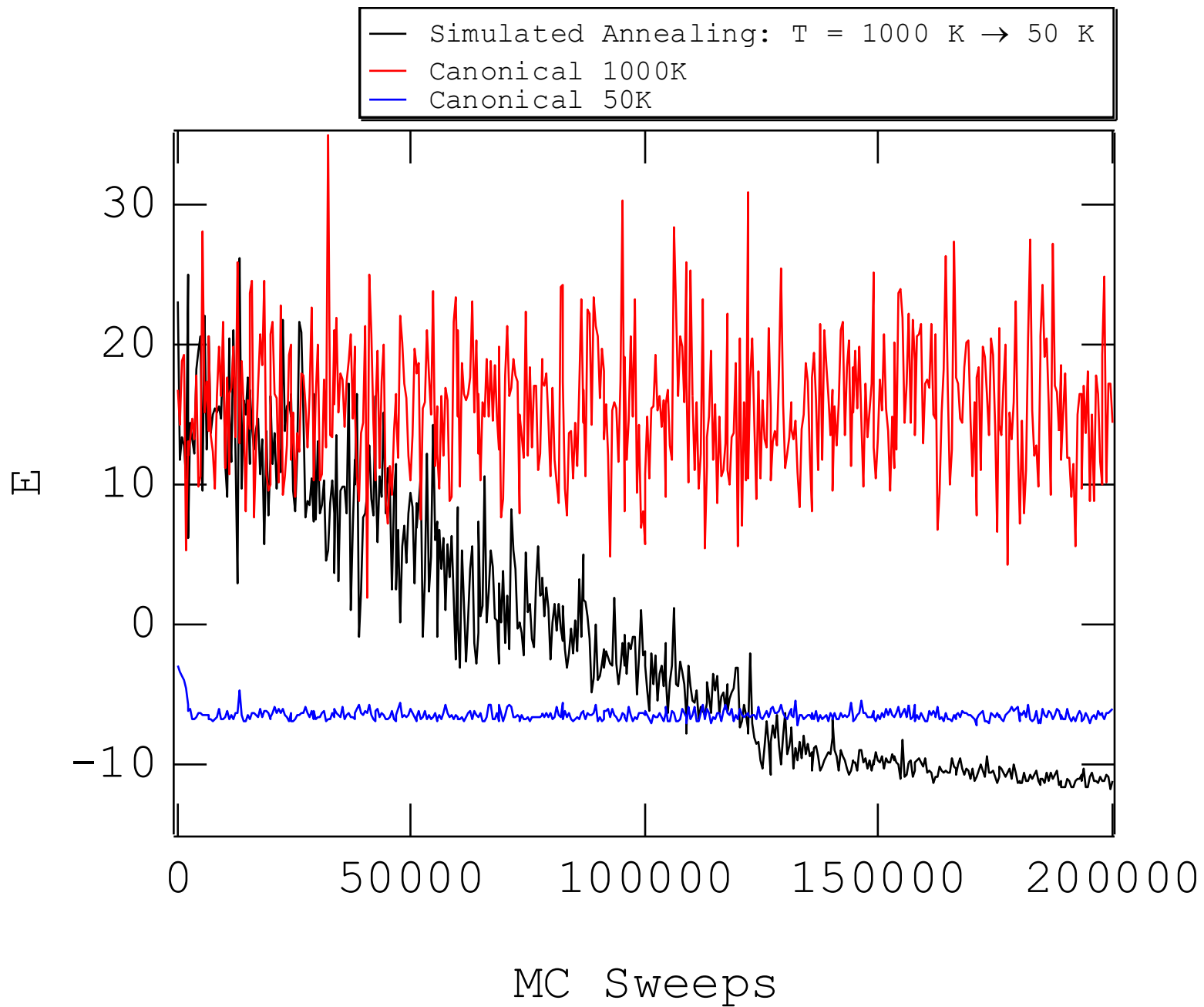
For a review see:

- Y.O., *Recent Res. Devel. In Pure & Applied Chem.* **2**, 1 (1998).

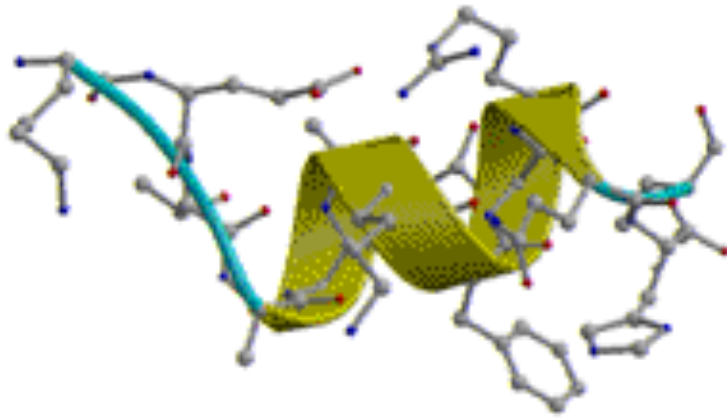
Simulated Annealing (徐冷法)

$$P_B(E) = n(E)W_B(E)$$





C-Peptide (N = 13): X-Ray

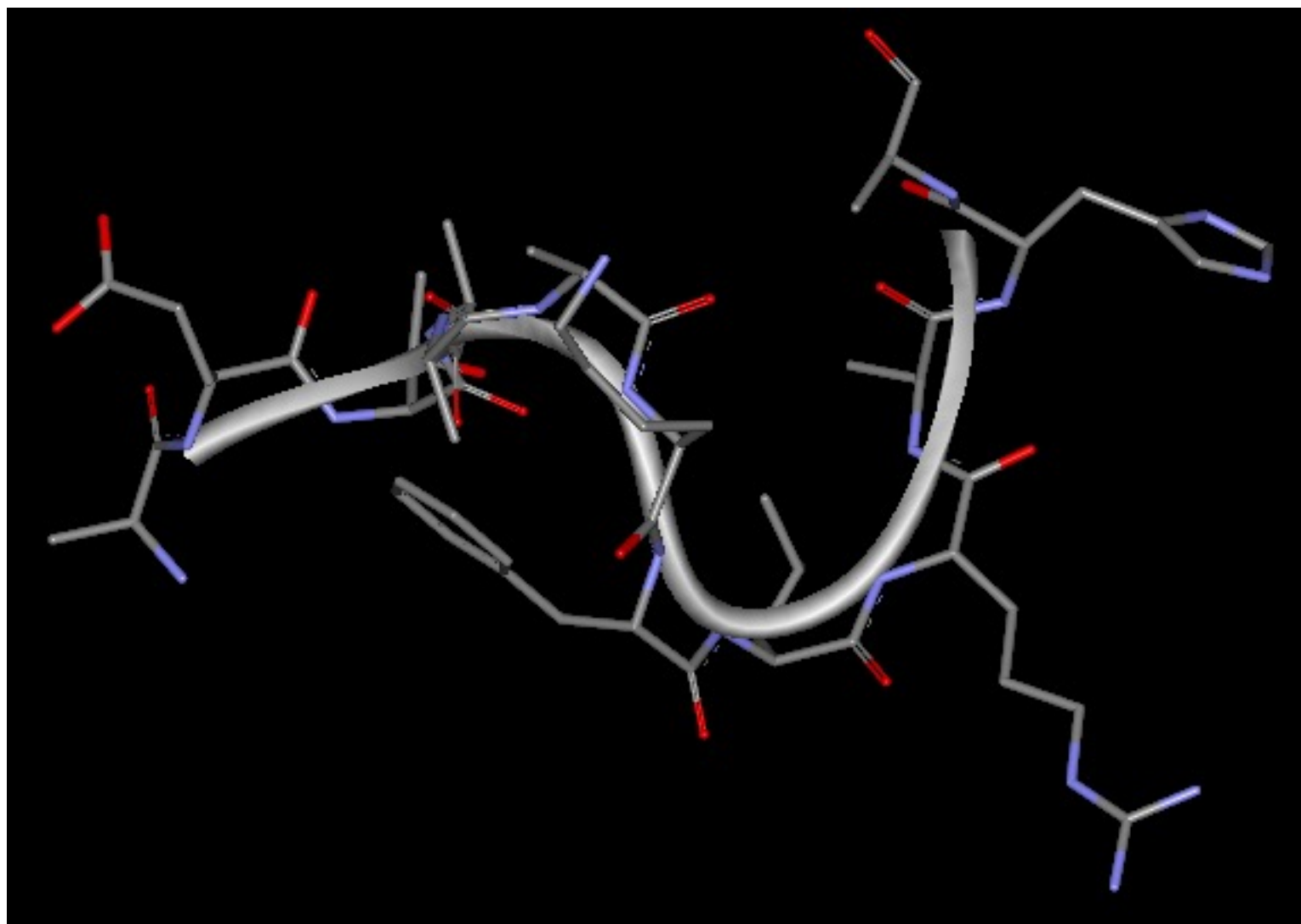


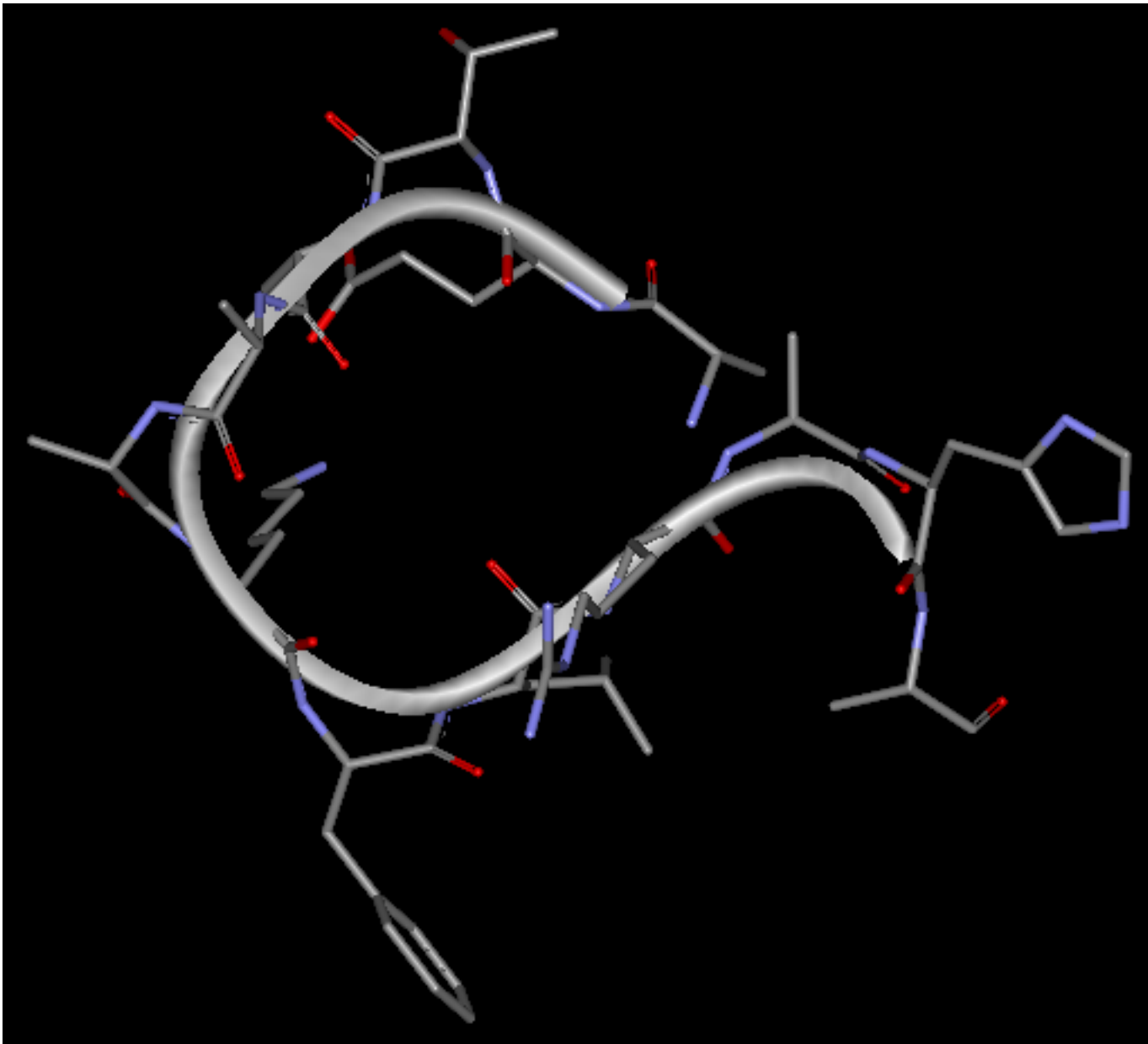
C-Peptide of Ribonuclease A

Amino-Acid Sequence:

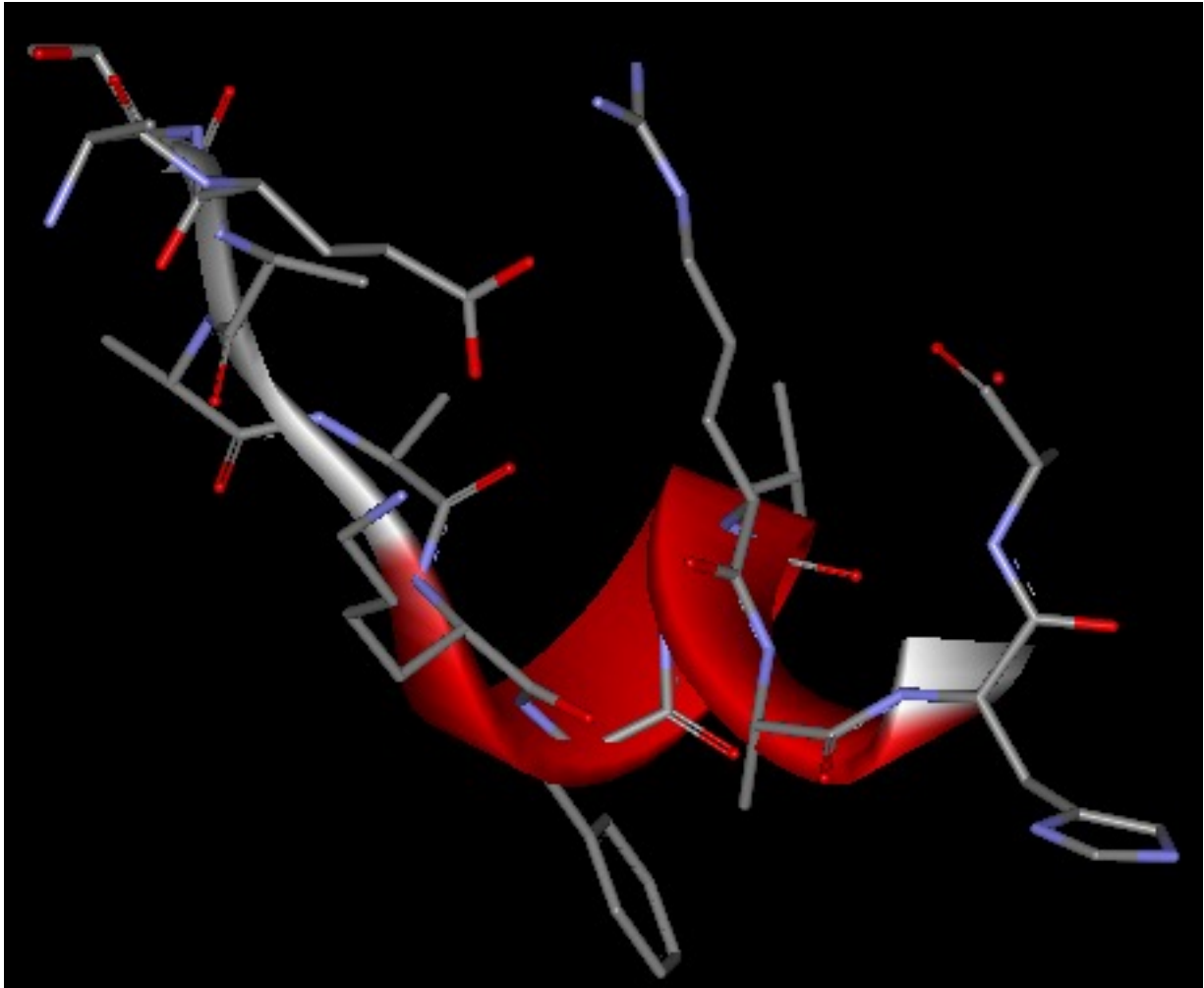
Lys-Glu-Thr-Ala-Ala-Lys-Phe-Glu-Arg-

Gln-His-Met



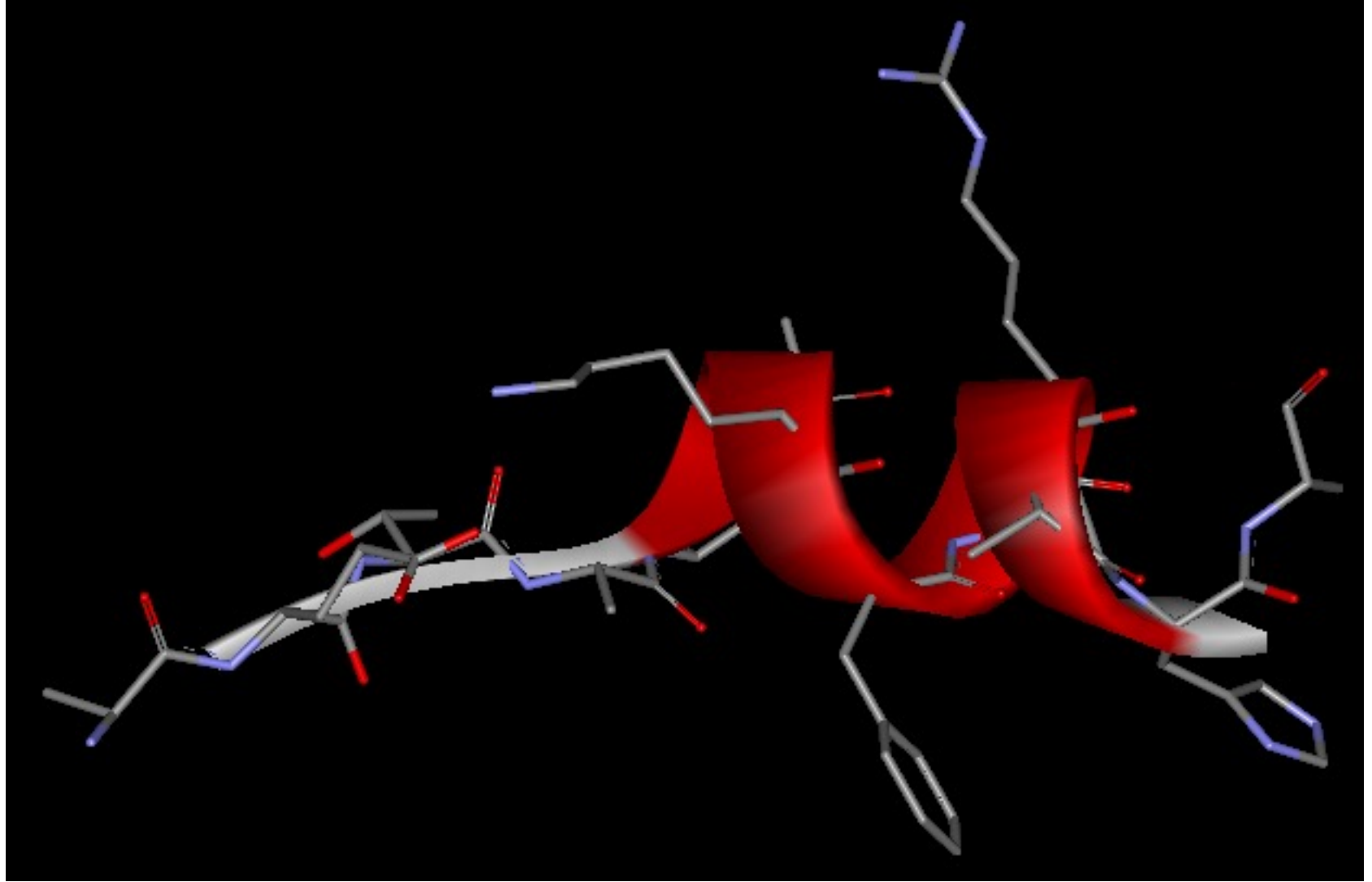


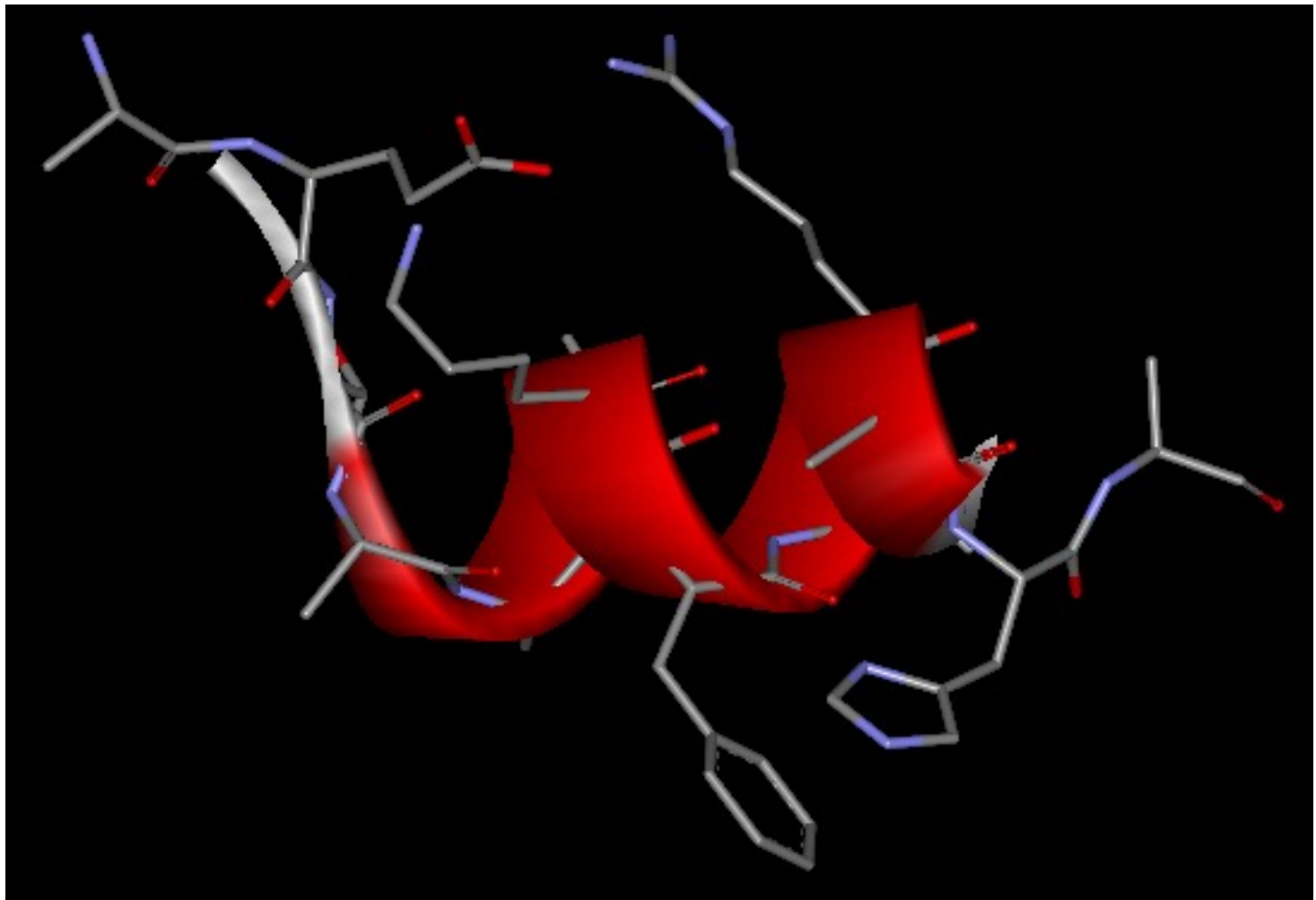


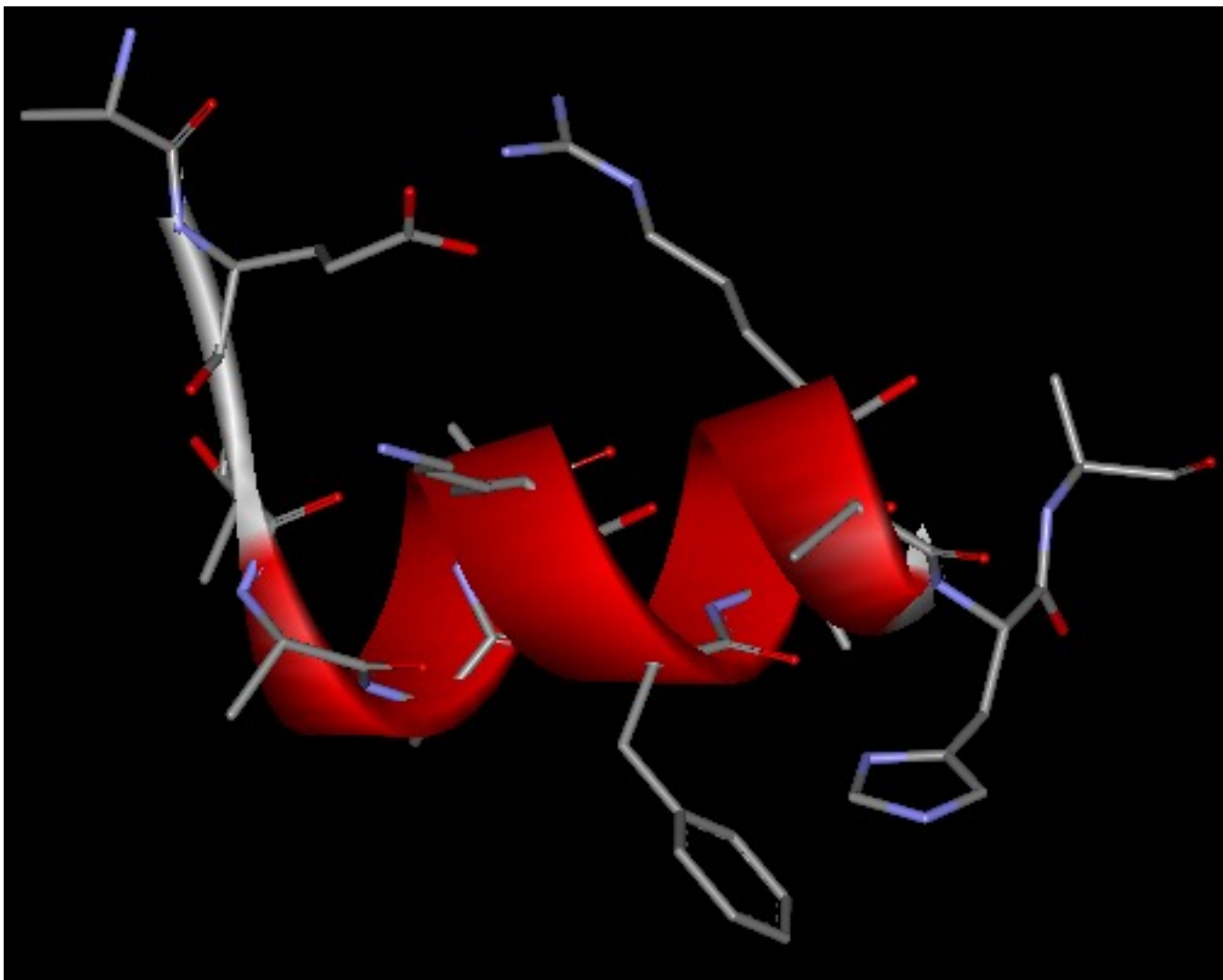




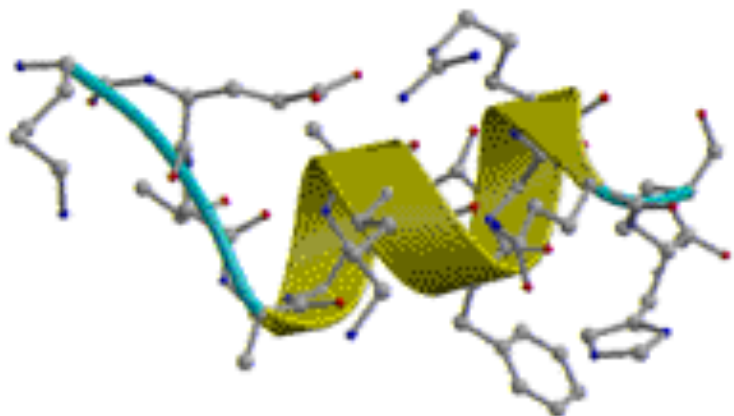




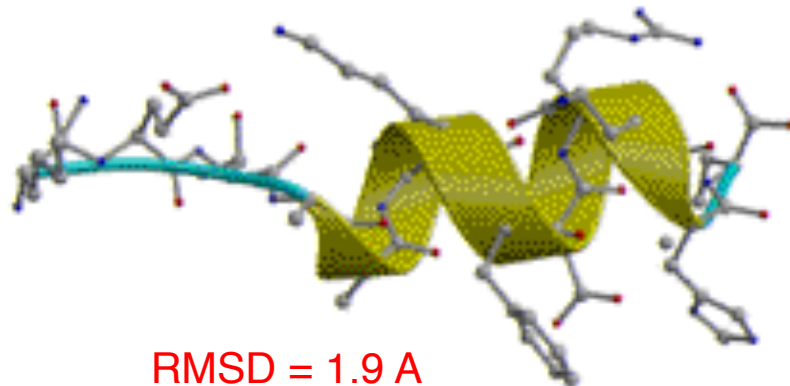




C-Peptide (N = 13): X-Ray

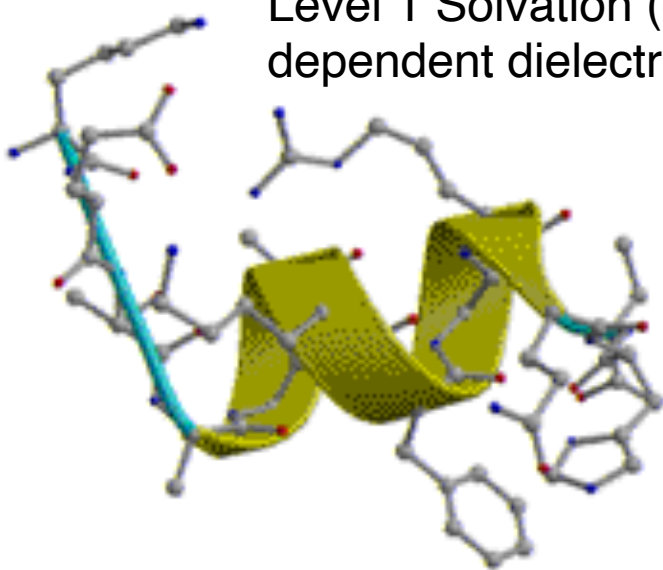


Level 0 Solvation (Gas Phase)



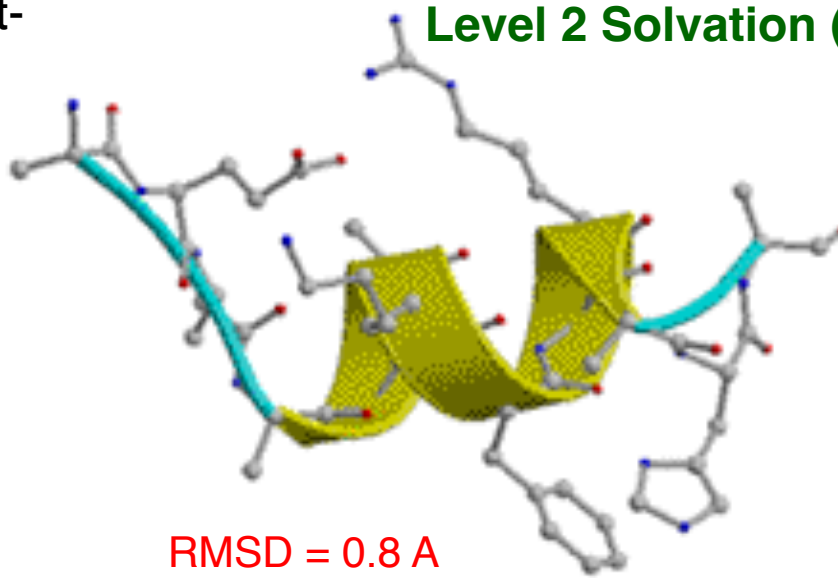
RMSD = 1.9 Å

Level 1 Solvation (distant-dependent dielectric)



RMSD = 1.4 Å

Level 2 Solvation (SASA)



RMSD = 0.8 Å

Problems of Simulated Annealing (SA)

(徐冷法の問題点)

Because we lower the temperature during the simulation, we are always **breaking thermal equilibrium** (and detailed balance conditions).

Hence, **thermodynamic quantities obtained from SA are not reliable.**

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

私は運良く、1986年4月に奈良女子大学理学部物理学科の素粒子論の助手に採用されました。当時は助手には任期がなく、これでパーマネントの職を得たことになります。



6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

当時の研究室は以下のメンバーでした。

見目正克 (素粒子論) : 助教授

久米健二 (原子核理論) : 助教授

岡本祐幸 (素粒子論) : 助手

また、帝塚山大学の

重本和泰 (素粒子論) : 教授

とも共同研究を行いました。



見目正克氏



久米健二氏



重本和泰氏

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

物理学教室の教員達



澤田達郎先生退官記念パーティー H4.3.21.

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

ニュートン祭で



奈良女子大学 理学部 物理学科 NEWTON祭 H3.12.21

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

奈良での初期の論文は弦理論の話でした。



[9] M. Kenmoku, Y. Okamoto, and K. Shigemoto, “Moebius and super-moebius gauge fixing for the closed string amplitudes on the disk,” *Physics Letters B* **213**, 160-164 (1988).

Volume 213, number 2

PHYSICS LETTERS B

20 October 1988

MÖBIUS AND SUPER-MÖBIUS GAUGE FIXING FOR THE CLOSED STRING AMPLITUDES ON THE DISK

M. KENMOKU, Y. OKAMOTO

Department of Physics, Nara Women's University, Nara 630, Japan

and

K. SHIGEMOTO

Faculty of Liberal Arts, Tezukayama University, Nara 631, Japan

Received 10 June 1988

We systematically study the gauge fixing of the Möbius and the super-Möbius transformations for the N -point closed-string amplitudes on the disk. Using the Faddeev–Popov method, we obtain the explicit formulas for the Koba–Nielsen factors for these amplitudes.

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

ヴァージニア工科大学で1985年に計算が終わっていた蛋白質の徐冷モンテカルロシミュレーションの論文はまだ投稿されていませんでした。著者の3人が遠くにいて、当時はインターネットもなく、連絡が取りにくかったからです。それでも、プレプリントは作りましたが投稿はしませんでした。その間にWilson-Cuiの論文が出てしまいました。

NWUPT (87-1)

A PREDICTION OF CHAIN MOLECULE STRUCTURES

BY MONTE CARLO SIMULATED ANNEALING

H. Kawai¹, T. Kikuchi², and Y. Okamoto³

幻の論文



Tetrahedron Letters, Vol. 29, No. 35, pp 4373-4376, 1988
Printed in Great Britain

0040-4039/88 \$3.00 + .00
Pergamon Press plc

Conformational Analysis of Flexible Molecules:
Location of the Global Minimum Energy Conformation by the
Simulated Annealing Method

Stephen R. Wilson*, Weili Cui,
Jules W. Moskowitz and Kevin E. Schmidt
Department of Chemistry,
New York University
Washington Square, NY, NY 10003

(Received in USA (28 March 1988))

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

結局、我々の論文は1989年に出版されました。



[11] H. Kawai, T. Kikuchi, and Y. Okamoto, “A prediction of tertiary structures of peptide by the Monte Carlo simulated annealing method,” *Protein Engineering* **3**, 85-94 (1989).



Protein Engineering vol.3 no.2 pp.85–94. 1989

A prediction of tertiary structures of peptide by the Monte Carlo simulated annealing method

H.Kawai, T.Kikuchi¹ and Y.Okamoto²

Departments of Physics and ¹Pharmaceutical Science, University of Tokyo, Hongo 113, Tokyo and ²Department of Physics, Nara Women's University, Nara 630, Japan

The Monte Carlo simulated annealing method has been applied to the prediction of three-dimensional structures of enkephalin. The low-energy conformations obtained were classified into a few groups of similar structures, which indicates that our method is effective. New low-energy structures were identified together with previously proposed structures.

Key words: enkephalin/globular protein/Monte Carlo/simulated annealing/tertiary structures

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

奈良女には計算機センターがなかったので蛋白質のシミュレーションはやらないつもりでしたが、なんと1988年に奈良女に情報処理センターが設置されました。それで、川合さんがシミュレーションを再開しようと言いました。そして、共同研究者を増強しようということで、奈良女理学部化学科の中沢隆助手(蛋白質の実験家、特にNMR実験)と京大基研の福来正孝助教授(素粒子論)に加わってもらいました。

福来さんも川合さんとは違うタイプの天才と言えるかも知れません。ものすごく記憶容量が多い人です。また、研究への意欲もすごいものがあります。

福来: 岡本君、1日には24時間あることを忘れてはいけないよ。

(ココロは、徹夜をバンバンやって頑張れ！)

福来さんの偉いところは、(当時40歳代前半だったと思いますが)自分でもそれを実践していたことです。2、3時間仮眠を取っては、研究を続けるというようなことをされていました。

共同研究者が増えて、どんどん論文が出ました。



中沢隆氏

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

CHEMISTRY LETTERS, pp. 213-216, 1991.

© 1991 The Chemical Society of Japan

Prediction of α -Helix Folding of Isolated C-Peptide of Ribonuclease A by Monte Carlo Simulated Annealing

Hikaru KAWAI,[†] Yuko OKAMOTO,* Masataka FUKUGITA,^{††} Takashi NAKAZAWA,^{†††} and Takeshi KIKUCHI^{†††}

Protein Engineering vol.4 no.6 pp.639-647, 1991

α -Helix folding by Monte Carlo simulated annealing in isolated C-peptide of ribonuclease A

Yuko Okamoto, Masataka Fukugita¹, Takashi Nakazawa² and Hikaru Kawai³

CHEMISTRY LETTERS, pp. 1279-1282, 1991.

© 1991 The Chemical Society of Japan

Monte Carlo Simulated Annealing Prediction for α -Helix Propensity of Amino Acid Homopolymers

Masataka FUKUGITA,* Takashi NAKAZAWA,[†] Hikaru KAWAI,^{††} and Yuko OKAMOTO^{†††}

Protein Engineering vol.5 no.6 pp.495-503, 1992

β -sheet folding of fragment (16-36) of bovine pancreatic trypsin inhibitor as predicted by Monte Carlo simulated annealing

Takashi Nakazawa, Hikaru Kawai¹, Yuko Okamoto² and Masataka Fukugita³

著者名はこの順序で回して行くことに合意。

コンピューターのプログラム名:

KONF90 [中沢氏が命名]

⇕

Conformation (立体構造)

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

CHEMISTRY LETTERS, pp. 1275-1278, 1992.

© 1992 The Chemical Society of Japan

Prediction of Low-Energy Structures of Met-Enkephalin by Monte Carlo Simulated Annealing

Yuko OKAMOTO,* Takeshi KIKUCHI,[†] and Hikaru KAWAI^{††}

Int. J. Peptide Protein Res. 42, 1993, 300-303
Printed in Belgium - all rights reserved

Copyright © Munksgaard 1993
INTERNATIONAL JOURNAL OF
PEPTIDE & PROTEIN RESEARCH
ISSN 0367-8377

α -Helix structure of parathyroid hormone fragment (1-34) predicted by Monte Carlo simulated annealing

YUKO OKAMOTO¹, TAKESHI KIKUCHI², TAKASHI NAKAZAWA³ and HIKARU KAWAI⁴

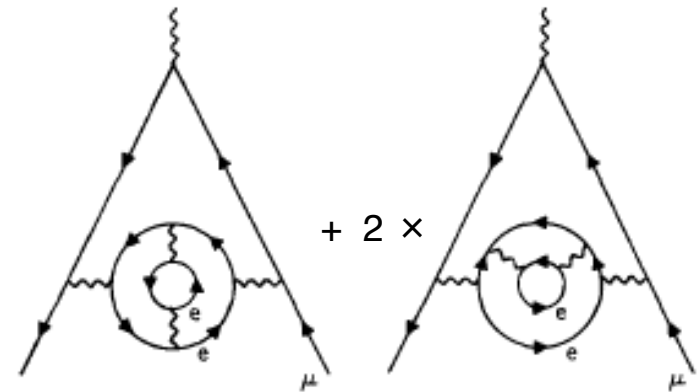
6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

ロシアからの挑戦

1990年の夏にコーネル大学時代の指導教員だった木下東一郎先生から、突然、奈良女の私のオフィスに電話が掛かってきました。今、夏休みで東大を訪問しているとのことで、私の大学院時代の計算結果の一部が間違っているというロシア人の論文原稿の査読が回ってきたのだけど、私のコーネル時代のこの計算のノートは残っているかと聞かれました。捨ててしまっていますと答えましたら、とにかく東京まで議論をしに来なさいと言われましたので、つくばの高エネルギー研究所の宿舎に3週間ぐらい滞在して、東大に通いました。そして、コーネルから東大へ帰り、助教授になっていた川合光さんも加わって、3人で議論をしました。459個のファインマン・ダイアグラムの計算のうち、以下の3個の計算が間違っているという話でした。我々の計算は数値積分なのに対し、

ロシア人の計算は計算機を使った解析計算なので、数値積分が間違っているはずだという議論でした。しかし、川合さんが気づいたのですが、ロシア人が有限のoverall counter terms (2ページ後のFig. 3の四角で囲ったダイアグラムの項、このオーダーで初めて出てくる項)の計算を入れるのを忘れていた

のでした。この寄与を我々で解析的に計算し、元々のロシア人の計算結果に足すと数年前の私の数値計算の結果と一致することを示すことができたのでした。



6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

□ミアからの挑戦

Kataev, et al.

Volume 260, number 1,2

PHYSICS LETTERS B

9 May 1991

Asymptotic photon propagator
and higher-order QED Callan-Symanzik β function

H. Kawai

Department of Physics, Tokyo University, Tokyo 113, Japan

T. Kinoshita

Newman Laboratory, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA

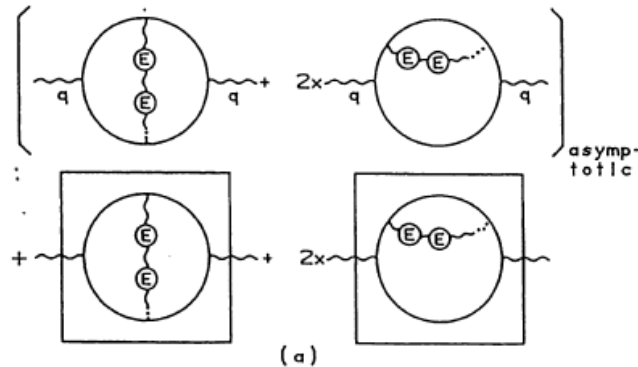
and

Y. Okamoto

Department of Physics, Nara Women's University, Nara 630, Japan

Received 8 February 1991

g-2 の計算
10次元の数値積分
459中3つの
ダイアグラム



6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

$$\Delta P_n^{[n-1]}(\text{fig. 3a}) = (-1)^{n-1}$$

$$\times \frac{1}{16} \int_0^1 d\theta [\varpi^{n-2} - (\varpi^\infty)^{n-2}] \frac{1+\theta}{\theta(1-\theta)} \Xi(\theta), \quad (22)$$

where the integration variable θ is related to $-k^2$ by $-k^2 = [(1-\theta)^2/\theta]m^2$. In terms of θ we have [3]

$$\varpi = a_1 + b_1 \frac{4\theta(1-\theta) - (1-4\theta+\theta^2)(1+\theta) \ln \theta}{(1-\theta)^3},$$

$$\varpi^\infty = a_1 + b_1 \ln \frac{(1-\theta)^2}{\theta},$$

$$\Xi(\theta) = -48 \frac{\theta^2(1+\theta^2) \ln \theta}{(1+\theta)^5(1-\theta)} - 4 \frac{1+10\theta^2+\theta^4}{(1+\theta)^4}. \quad (23)$$

$$\Delta P_3^{[2]}(\text{fig. 3a}) = \frac{7}{32} - \frac{7}{64}\zeta(3),$$

ここで、 $\zeta(3)$ はリーマンのツェータ関数

$$\zeta(3) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-3} = 1.20205\dots$$

A3の紙24ページにわたる積分計算、2晩徹夜して、丸2日間かかる(パンをかじりながら)。

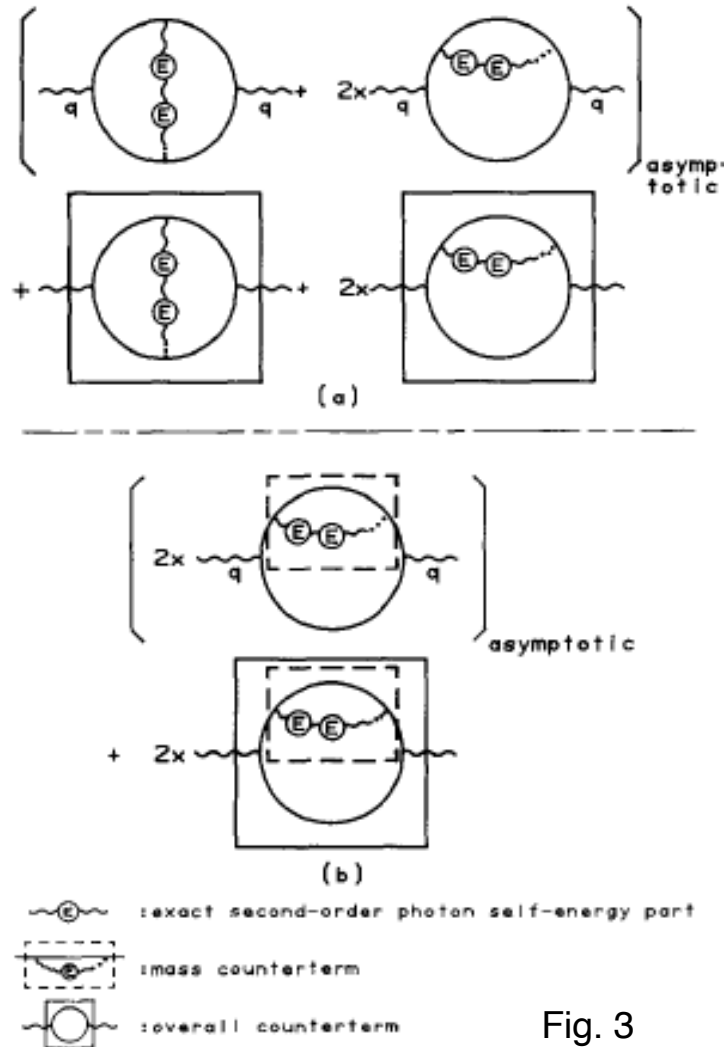


Fig. 3

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

ロシアからの挑戦

ちなみに、計算に2晩の徹夜を要した前ページの式(22)の積分(ロシア人が忘れた **overall counter terms** の一部)ですが、2年余り後に**Maple**という解析計算プログラムに入れてみたら、計算機が2時間ぐらい頑張りましたが、結局、memory overflow で計算を終えることができませんでした。よって、まだ、人間の方が機械に負けないのだと安心しました。

ところが、それから、20年余り経って、名大を訪問していた西オーストラリア大学の研究者が**Mathematica**という解析計算プログラムをよく使うと言うので、上の話をして、この積分の式を試してもらったら、なんと1分以内に正しい計算結果を出したので、本当に驚いてしまいました。

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

素粒子関係では、宇宙物理学／宇宙論に興味が移りました。

* うず巻き銀河の回転速度

$$I_g = -\frac{1}{16\pi G} \int d^4x \sqrt{g} (R + 2\Lambda + c_1 R^2 + c_2 R_{\mu\nu} R^{\mu\nu})$$

International Journal of Modern Physics D, Vol. 2, No. 1 (1993) 123–133

© World Scientific Publishing Company

ROTATION CURVES OF SPIRAL GALAXIES AND LARGE-SCALE STRUCTURE OF THE UNIVERSE UNDER GENERALIZED EINSTEIN ACTION

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu} - \Lambda g_{\mu\nu} + c_1 J_{\mu\nu} + c_2 K_{\mu\nu} = -8\pi G T_{\mu\nu},$$

M. KENMOKU, E. KITAJIMA and Y. OKAMOTO

Department of Physics, Nara Women's University, Nara 630, Japan

K. SHIGEMOTO*

Department of Physics, Tezukayama University, Nara 631, Japan

$$\phi = -GM \left[\frac{1}{r} + \frac{1}{3} \frac{e^{-m_1 r}}{r} \right].$$

Received 17 July 1992

We consider an addition of the term which is a square of the scalar curvature to the Einstein–Hilbert action. Under this generalized action, we attempt to explain (i) the flat rotation curves observed in spiral galaxies, which is usually attributed to the existence of dark matter, and (ii) the contradicting observations of the uniform cosmic microwave background and the nonuniform galaxy distributions against redshift. For the former, we attain the flatness of velocities, although the magnitudes remain about half that of the observations. For the latter, we obtain a solution with the oscillating Hubble parameter under uniform mass distributions. This solution leads to several peaks of galaxy number counts as a function of redshift with the first peak corresponding to the Great Wall.

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

素粒子関係では、宇宙物理学／宇宙論に興味が移りました。

* 宇宙の大構造

$$I = \int d^4x \sqrt{-g} \left\{ -\frac{1}{16\pi G} (R + c_1 R^2 + c_2 R^{\mu\nu} R_{\mu\nu}) - \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{\mu^2}{2} \sigma^2 + g_1 \sigma R - \frac{1}{2} (D_\mu A_\nu)(D^\mu A^\nu) - \frac{m^2}{2} A^\mu A_\mu + g_2 (D_\mu A^\mu) R + L^{\text{matter}} \right\},$$

PHYSICAL REVIEW D

VOLUME 48, NUMBER 2

15 JULY 1993

Generalized Einstein theory on solar and galactic scales

Masakatsu Kenmoku*

Department of Physics, Nara Women's University, Nara 630, Japan

Yuko Okamoto[†]

Stanford Linear Accelerator Center, Stanford University, Stanford, California 94309

Kazuyasu Shigemoto[‡]

Department of Physics, Tezukayama University, Nara 631, Japan

(Received 11 November 1992)

We study a generalized Einstein theory with the following two criteria: (i) on the solar scale, it must be consistent with the classical tests of general relativity, (ii) on the galactic scale, the gravitational potential is a sum of Newtonian and Yukawa potentials so that it may explain the flat rotation curves of spiral galaxies. Under these criteria we find that such a generalized Einstein action must include at least one scalar field and one vector field as well as the quadratic term of the scalar curvature.

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

1992年4月から10ヶ月間、長期在外研究員(若手枠)として、Stanford Universityの線型加速器研究センターを訪問することになりました。福来さんは以下のようにアドバイスしてくれました。

福来: せっかくだから、新しいことをやると良いよ。

アメリカ滞在中にFlorida State Universityの素粒子論屋Ulrich Hansmann氏がわざわざStanfordまで会いに来て、マルチカノニカル法という拡張アンサンブル法を教えてくださいました。彼の説明を聞いて、これは徐冷法に代わり得る強力な手法だと直感しました。徐冷法は熱平衡を常に破るのに対し、拡張アンサンブル法は常に熱平衡を保つので、熱力学量を精度良く計算できる利点があります。



Ulrich H. E. Hansmann

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

Hansmann氏とは帰国寸前に以下の、マルチカノニカル法という拡張アンサンブル法を蛋白質の立体構造予測に適用することを提唱した論文を投稿できました。

[25] U.H.E. Hansmann and Y. Okamoto, "Prediction of peptide conformation by multicanonical algorithm: new approach to the multiple-minima problem," *Journal of Computational Chemistry* **14**, 1333-1338 (1993).

Prediction of Peptide Conformation by Multicanonical Algorithm: New Approach to the Multiple-Minima Problem

Ulrich H.E. Hansmann^{1†} and Yuko Okamoto^{2*†}

¹*Department of Physics and Supercomputer Computations Research Institute, The Florida State University, Tallahassee, Florida 32306, and* ²*Stanford Linear Accelerator Center, Stanford University, Stanford, California 94309*

Received 27 January 1993; accepted 27 May 1993

We apply a recently developed method, the multicanonical algorithm, to the problem of tertiary structure prediction of peptides and proteins. As a simple example to test the effectiveness of the algorithm, met-enkephalin is studied and the ergodicity problem, or multiple-minima problem, is shown to be overcome by this algorithm. The lowest-energy conformation obtained agrees with that determined by other efficient methods such as Monte Carlo simulated annealing. The superiority of the present method to simulated annealing lies in the fact that the relationship to the canonical ensemble remains exactly controlled. Once the multicanonical parameters are determined, only one simulation run is necessary to obtain the lowest-energy conformation and further the results of this one run can be used to calculate various thermodynamic quantities at any temperature. The latter point is demonstrated by the calculation of the average potential energy and specific heat as functions of temperature. © 1993 by John Wiley & Sons, Inc.



6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

このアメリカ滞在中には、Purdue Universityの教授になっていた仲西久夫氏(グルー基金の先輩)宅を訪問したり、University of Chicagoの大学院生になっていた大平徹氏(グルー基金の後輩、現名古屋大学多元数理研究科教授)を訪問したこともありました。University of Chicagoの近くの大平氏のアパートまで車で行ったのですが、その近くで2台の車の間に空いていたスペースに縦列駐車をしようとした。しかし、下手なので、何回かそのスペースで出たり入ったりして、後続車の通過を少し邪魔してしまいました。そうしたら、私のすぐ後ろにいて通過できなかった車の運転手の窓が開き、私に向かって手招きを始めました。この辺りは危険な所であると聞いていたので焦り、最初は頭を下げるだけで無視していましたが、その人の手招きが益々大きくなりました。これはまずいと思い、とりあえず、その運転手の所まで行って、謝ることにして、近づいたら、その人が、“Yuko Okamoto, Brown University!” と叫び、握手を求めてきました。私はびっくりして、その運転手の顔をよく見てみたら、何と、Brown時代の同級生でした。と言っても、1年生の1学期にドイツ語と一緒に受講しただけで、その後は、あまり交流がなかった人でした。私はその人の名前を必死に思い出そうとしましたが、13年前に卒業してから一度も会ったことがなく、Edwardという名前をかりうじて思い出しましたが、苗字は思い出せませんでした。Edが私であることを見極め、更にフルネームで私に呼び掛けることができたのは、本当に奇跡的でした。

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

研究以外では、奈良女はスポーツが盛んな所でした。

着任早々から理学部の教職員チームで毎週のように土曜日午後にソフトボールの練習が始まりました。本格的に運動をするのは久しぶりのことで、最初のうちは走塁中に足が空回りしてひっくり返ったりしていました。

テニス:

1988.11 奈良県大学工專教職員大会

久米さんと組んで、初心者の部 3位

朝練[久米、小川氏と]

1989.9 全国公務員レクリエーション奈良地区大会

奈良女Aチーム[磯田・小川、久米・松川、

宮崎(小田原)・岡本] 一回戦敗退

奈良女Bチーム[岸田、河井、浪原、山田、乾、松村] 優勝

卓球: 1986年秋 ~ 半年間程 毎週土曜 7 ~ 10 pm

中沢、上江洩、小川、石川、柳沢、岡本、(時々)久米、、、

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

理学部ソフトボールチーム：

ピッチャー：海崎、伯耆、香川、池原、三方、、、

キャッチャー：清水[監督]、松川、檜垣、、、

ファースト：高木、大石、島田、、、

セカンド：上江洩、大石、香川、池原、柳沢、、、

ショート：小川、宮武、塚原、和田(恵)、、、

サード：坂本、永沢、上江洩、大石、、、

レフト：中沢、川島、、、

センター：見目、岡本、三方、、、

ライト：石川、赤川、松山、清水、、、

オールマイティー：乾、名賀、、、

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

奈良女子大学全学ソフトボール大会 我が理学部チームの結果

1986年度: 理学部チームは3位

1. 理学部: 35 - 附属図書館: 0
2. 理学部: 6 - 附属高・中学校: 10

1988年度: 理学部チームは優勝

1. 理学部: 3 - 家政学部: 3
2. 理学部: 8 - 附属図書館: 0
3. 理学部: 14 - 事務局: 3 (決勝)

1989年度: 理学部チームは準優勝

1. 理学部: 9 - 事務局: 6
2. 理学部: 8 - 附属小学校: 1
3. 理学部: 4 - 附属高・中学校: 5 (決勝)

1993年度: 理学部チームは準優勝

1. 理学部: 28 - 文学部: 1
2. 理学部: 13 - 事務局: 1
3. 理学部: 7 - 附属高・中学校: 8 (決勝)



バックホーム

理学部チームは附属高・中学校チームにどうしても勝てませんでした。

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

1989年の附属高・中学校チームとの決勝戦も接戦で、緊迫した戦いでした。試合の終盤、私はセンターを守っていましたが、ランナーが三塁にいる時に、フライがセンターに上がりました。私はそのボールを捕った時に、三塁ランナーがタッチアップして本塁に突っ込みました。それで、私は慎重にキャッチャーにワンバウンドで届くようにボールを投げたら、キャッチャーの清水晃さんのミットのと真ん中に届いたのです。タッチもできてタイミングは完全にアウトでした。しかし、三塁ランナーが清水さんに体当たりしたので、軽量の清水さんが吹っ飛んでボールをポロリと落としました。それから数年間は飲み会の度に、清水さんが以下のように言ったものです。

清水: 岡本さん、あの時、我々はあと少しでヒーローになれたんだけどね。残念だったね。

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

駅伝：理学部チーム

1989.4 第一回大会[16 km] 1° 15' 07" 優勝

1989.12 第二回大会[16 km] 1° 11' 55" 優勝 歴代学内記録

1990.11 第三回大会[12 km] 59' 27" 5位(学内3位)

1991.11 第四回大会[12 km] 57' 31" 4位(学内2位)

1992.12 第五回大会 5位(学内優勝)

1993.12 第六回大会 2位(学内2位)

1994.12 第七回大会 3位(学内2位)

...

...

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

第1回 奈良女子大学親睦駅伝大会
(奈良女子大学創立80周年記念大会)

平成元年 4月15日

区間	1 区 (2 Km)		2 区 (4 Km)		3 区 (2 Km)		4 区 (2 Km)		5 区 (4 Km)		6 区 (2 Km)		番外 (16 Km)					
	名前	総合順位	総合TIME	名前	総合順位	総合TIME	名前	総合順位	総合TIME	名前	総合順位	総合TIME	名前	総合順位	総合TIME			
		区間順位	区間TIME		区間順位	区間TIME		区間順位	区間TIME		区間順位	区間TIME		区間順位	区間TIME	区間順位	区間TIME	
1. 小学校	浜田東起夫	4	9'07"	森仲洋一郎	6	29'58"	後藤充郎	5	40'04"	岬香春治	5	50'24"	嶋守哲夫	4	1'07'52"	廣岡正昭	5	1'19'07"
2. あるこ〜ルズ	与那原進	8	11'07"	森山直治	3	26'34"	奈良重幸	1	35'36"	岡本直美	2	46'53"	笹松保	1	1'05'06"	井上光邦	2	1'15'45"
3. ガンバレ小西君	松村和之	1	8'43"	中窪利周	1	26'13"	豊嶋葉子	3	37'12"	中村史郎	1	46'14"	小西弘	2	1'05'16"	清水晃	3	1'16'00"
4. 会計課	福岡秀史	3	9'00"	小刀脇英樹	4	27'14"	喜多朋美	4	38'52"	宮崎節子	4	49'10"	小田原孝次	5	1'08'03"	河野富行	4	1'17'42"
5. のろまなカメさん	稲垣隆子	6	10'16"	檜垣邦夫	8	33'22"	前田重樹	7	42'37"	村尾真弓	7	52'38"	斎藤大輔	8	1'17'33"	窪田順一	8	1'27'31"
6. 元祖理学部	小川英巳	②	8'46"	中沢隆	②	26'29"	赤川安正	②	36'30"	沢井直子	③	48'03"	岡本祐幸	③	1'05'26"	柳沢卓	①	1'15'07"
7. かせいでのもう会	三好正満	5	9'51"	横山寿江	7	31'27"	早川和代	8	43'19"	笠間裕美子	8	54'05"	磯田憲生	7	1'13'02"	進藤雄三	7	1'22'55"
8. 体育学	豊田直子	9	12'02"	石川味保	9	36'05"	木村純子	9	47'48"	中西敦子	9	58'02"	松本直子	5	1'18'12"	山本ゆかり	9	1'29'42"
9. 大築先生ガンバ!!	山川真記代	7	10'59"	江口泰	5	29'55"	大築立志	6	40'43"	夏目美紀	3	10'14"	山田陽子	8	20'10"	中村雅美	6	1'21'54"
0. ゴーストバスターズ																近藤公夫 近藤健佳 遠藤金次		1'21'07"

岡本: 3位でタスキを受け取り、3位でタスキを渡した(第5区約4キロを17分23秒で区間賞)。
 1位との差: 1分49秒差 → 10秒差、2位との差: 1分10秒差 → 20秒差(1位と2位の順位入れ替わる)。次の第6区アンカーの**柳沢卓**氏が2人を抜いて「元祖理学部」チームが優勝。
 記録: 約16キロの距離で、1時間15分07秒
 その年(1989年)の12月2日に開催された第2回大会でも優勝した。
 記録: 1時間11分55秒(岡本は第5区、17分21秒で区間2位)

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

上江洩

岡本

清水



FUJICOLOR 89



小川

柳沢



赤川

勝利の美酒に酔う



赤川

中沢

岡本

FUJICOLOR 89

6. 奈良女子大学 助手／助教授 (1986-1995)

研究以外では、奈良女はスポーツが盛んな所でした。

私が分子科学研究所に転任することになって、ソフトボールの理学部教職員チームで送別会を企画してくれました。夜の宴会の前の午後の部で、いつものようにソフトボールの練習(守備と打撃)を一通りやりました。そして、最後に皆で**胴上げ**をしてくれたのは良い思い出です。