

「インフォマティクス4」 第1回
(令和5年12月1日)

“ガイダンス”+ α

長岡正隆・フシェーミ・フランチェスコ・
太田元規・鈴木泰博

名古屋大学 情報学部 自然情報学科
数理情報系・複雑システム系

インフォマティクス4

～自然情報学科系の情報学入門-非ノイマン型計算-～

◆授業概要

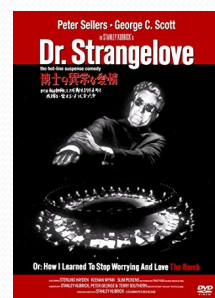
(自然情報学科系の)情報学の入門として、自然や生態に基づくアルゴリズムなど非ノイマン型計算方法について紹介する。量子計算、材料情報、人工タンパク、DNAコンピュータ、粘菌コンピュータ等についてオムニバス形式で講述する(オムニバス方式/全8回)。

◆講義目的

(自然情報学科系の)情報学の入門として、自然や生態に基づくアルゴリズムなど非ノイマン型計算方法について紹介する。



ジョン・フォン・ノイマン (ハンガリー名: Neumann János (ナイマン・ヤーノシュ、[ˈnoʝmɒn ˈjaːnoʃ])、ドイツ名: ヨハネス・ルートヴィヒ・フォン・ノイマン、John von Neumann, Margittai Neumann János Lajos, Johannes Ludwig von Neumann, 1903年12月28日 - 1957年2月8日) はハンガリー出身のアメリカ合衆国の数学者。**20世紀科学史における最重要人物の一人**。数学・物理学・工学・計算機科学・経済学・気象学・心理学・政治学に影響を与えた。第二次世界大戦中の原子爆弾開発や、その後の核政策への関与でも知られる。



『博士の異常な愛情／または私は如何にして心配するのを止めて水爆を愛するようになったか』(1997)

監督:スタンリー・キューブリック
配給:コロムビア映画



Wikipedia

1. ガイダンス

0. 長岡

- ・コンピュータ ノイマン型 vs. 非ノイマン型
- ・自然の階層性 とくにミクロ世界の不思議

1. ブシェーミ

- ・量子コンピュータ
 - ・歴史
 - ・基礎

2. 長岡

- ・マテリアルズ・インフォマテクス
 - ・量子物質科学
 - ・分子シミュレーション

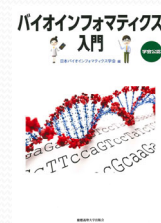
3. 太田

- ・人工タンパク
- ・バイオインフォマテクス

6. 鈴木

- ・DNAコンピュータ
- ・粘菌コンピューティング

「マテリアルズインフォマテクス
～機械学習を活用した材料工学への誘い～」
足立吉孝, Design Egg, 2016



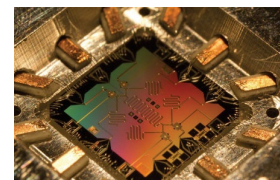
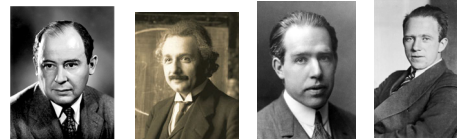
「DNAコンピュータ」
萩谷昌己・横森真・培森館, 2001

ブシェーミ先生

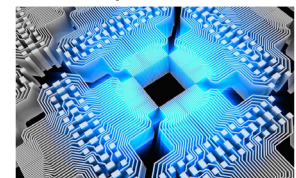
2. 量子コンピュータの歴史

レクチャーラ：ブシェーミF.

- ・量子理論の誕生
- ・情報理論の誕生
- ・現在の情報処理と量子力学
- ・量子効果とは？
- ・量子情報科学の誕生
- ・現代の量子情報科学
- ・優越性を目指す
- ・IBMの「Quantum Experience」と「QISKit」：Python言語で本物の量子コンピュータをプログラムする



NEWS TECHNOLOGY 10 October 2017
Google's quantum computing plans threatened by IBM curveball



上左(ノイマン) Los Alamos National Laboratory

上右(ハイゼンベルク) Wikipedia

中左(量子コンピュータ) <https://www.technologyreview.com/s/602283/googles-quantum-dream-may-be-just-around-the-corner/> 2024.2.7

中上(量子もつれ) <https://www.sciencealert.com/sorry-einstein-physicists-just-reinforced-the-reality-of-quantum-weirdness-in-the-universe> 2024.2.7

中下(半導体チップ) Eric Lucero, カリフォルニア大学サンタバーバラ校マルチニクスグループ

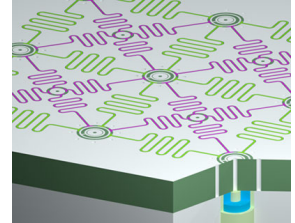
下左(記事: Google Plans...) <https://spectrum.ieee.org/google-plans-to-demonstrate-the-supremacy-of-quantum-computing> 2024.2.7

下右(記事: Google's...) <https://www.newsscientist.com/article/2151032-googles-quantum-computing-plans-threatened-by-ibm-curveball/> 2024.2.7

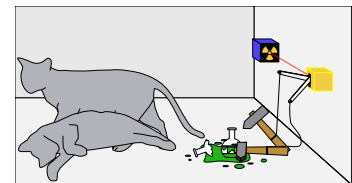
ブシェーミ先生

3. 量子コンピュータの基礎

- 古典論理回路と量子論理回路
- 量子力学の公理 1：量子ビットと量子状態
- 公理 2：量子ゲート
- 公理 3：合成量子系と量子もつれ
- 公理 4：量子測定
- 量子テレポーテーションの回路
- 量子高密度符号化の回路



https://www.ist.go.jp/erato/nakamura_mqm/project_overview/o01.html 2024.2.7

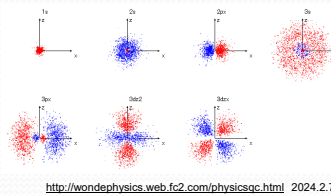


<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=4279886> 2024.2.7

長岡正隆

4. マテリアルズ・インフォマティクス (MI) (物質情報学、Materials Informatics)

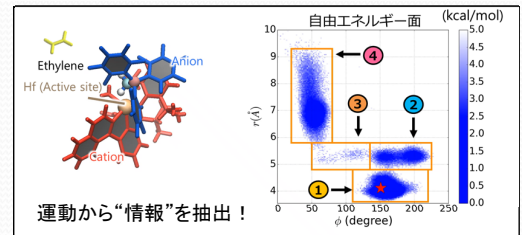
物質情報論講座 (Since 1992)



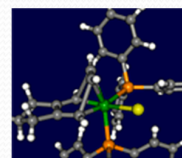
<http://wonderphysics.web.fc2.com/physicsqc.html> 2024.2.7

人間情報学研究科 (1992-)
↓
情報科学研究科 (2003-)
↓
情報学研究科 (2017-)

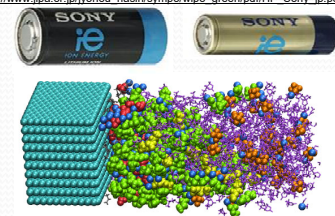
原子 (物理)
↓
分子 (化学)
↓
物質



©SONY https://www.iipc.or.jp/yohou_hasin/sympo/wipo_green/pdf/HP_Sony_ip.pdf 2024.2.7



©名古屋大学古賀研究室

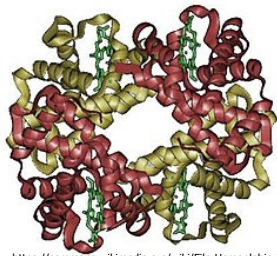


物質のモデル化と分子シミュレーション

～分子運動のコンピュータ・シミュレーション～

ニュートンの運動方程式を一度にたくさん解かなければならない！

■ヘモグロビンなら358,263個のニュートンの運動方程式

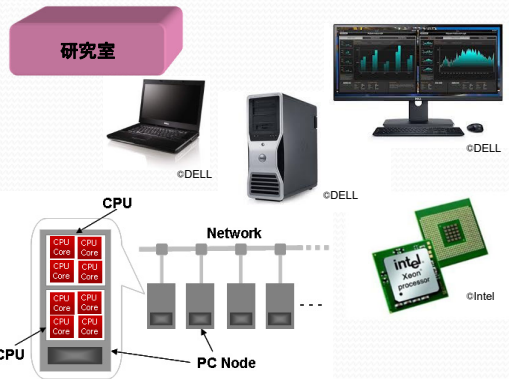


<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Hemoglobin.jpg> 2024.2.9

ヘモグロビン
(119,421原子)

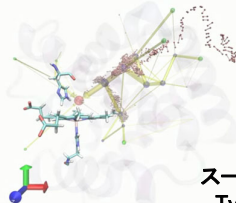
$$\begin{aligned} \vec{F}_1 &= m_1 \vec{a}_1 \\ \vec{F}_2 &= m_2 \vec{a}_2 \\ \vec{F}_3 &= m_3 \vec{a}_3 \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\vec{F}_{358263} = m_{358363} a_{358263}$$

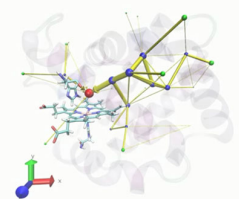


■分子シミュレーションは、物質情報学（マテリアルズ・インフォマティクス（MI））の大きな武器！

- ・今日、コンピュータ・シミュレーションは、理論、実験に次ぐ“第三の科学”とみなされている。
- ・分子シミュレーションは、普通の実験に対して、「計算機実験」と呼ばれたり、「計算科学」と呼ばれたりする。



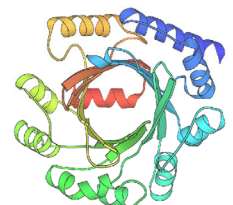
名古屋大学
情報基盤センター



スーパーコンピュータ「不老」(大規模分散並列型演算サーバ)
Type I サブシステム: Fujitsu PRIMEHPC FX1000
Type II サブシステム: Fujitsu PRIMERGY CX2570 M5

太田元規先生

5. 人工タンパク質の設計



公開されているPDBの構造データをもとに作成



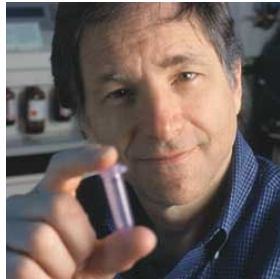
公開されているPDBの構造データをもとに作成

- ・遺伝情報発現とタンパク質の生合成(分子生物学の基礎知識)
- ・人工タンパク質の(配列)設計をどうやって行うのか
- ・どういう応用が考えられるのか
- ・設計事例と未来 (などをお話する予定です)

鈴木泰博先生

6. DNAコンピュータ

DNA計算とその発展;計算・ナノテク・ロボット

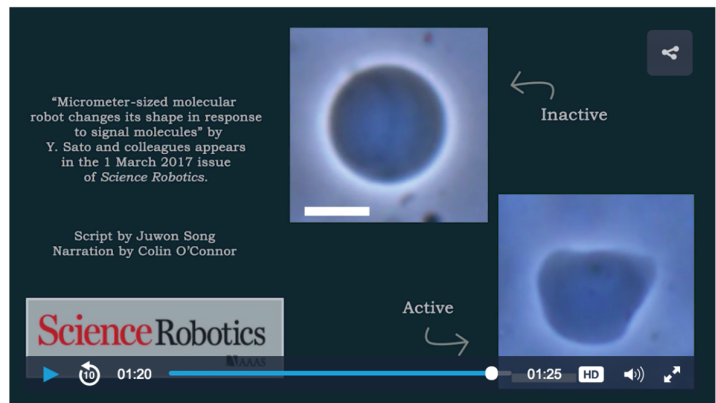


<https://condor.depaul.edu/sjost/it130/documents/images/adleman.htm> 2024.2.7

Adelman
DNAによる
ハミルトン経路問題
の分子実装



DNA
折り紙



世界初の分子ロボットの分子実装
(新学術領域「分子ロボティクス」
東北大学 野村ら

7. 粘菌コンピュータ

粘菌計算・場による計算



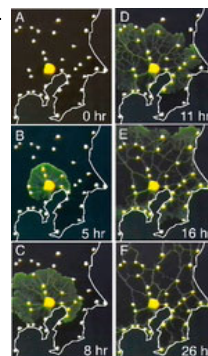
©Arthur Winfree / Scienc Photo Library

興奮場における計算
Belousov Zhabotinsky反応

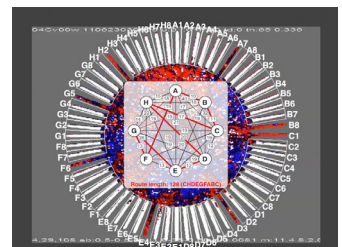


<https://life.sq.hokudai.ac.jp/mf/keywords-for-learning/k420> 2024.2.9

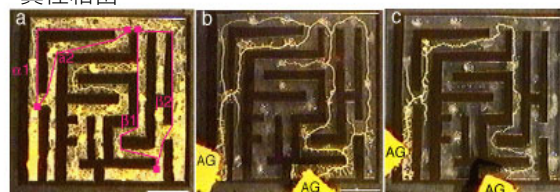
興奮場における計算
真性粘菌



粘菌計算による単点、多点
最短経路探索 (中垣・北大)



粘菌による計算機
青野・慶大



ビッグナンバー“アボガドロ数” を体感しよう！ その巻

例題

“いま仮に、コップ一杯の水（180 mL）の分子にすべて目印をつけることができたとします。次にこのコップの中の水を海に注ぎ、海を十分にかきまわして、この目印のついた分子が七つの海にくまなく一様にゆきわたるようにしたとします。もし、そこで海の中のお好みの場所から水をコップ一杯汲んだとすると、その中には目印をつけた分子が“入っているであろうか？ 入っているとしたら何個ぐらいであろうか。”

TACTの「インフォマティクス4」の「小テスト」に、予想する個数を記せ！

生命とは何か



「生命とは何か 一物理的にみた生細胞」シュレーディンガー、岡小天・頼目恭夫(訳)、岩波文庫、2008

問題 1 / 1

追加指示を見る場合はクリックします
(解答欄)

目印をつけた分子の数= 個

数字は半角数字を用いること、また、
入っていないと思う者は0を記入すること。