

## 高等研究所 第46回 月例研究会

【日 時】 7 月 13 日(金) 10:30~12:00

【会 場】 7 号館 1 階ファカルティラウンジ

【発表者】 小林 正人 助教、木田 哲夫 助教

### 1. 小林 正人 助教 (Masato Kobayashi) : 10:30~11:10(質疑応答含む)

#### 「化学者はなぜスパコンを求めるか：『京』コンピュータを取り巻く現状とあわせて」



理系の高校3年生に「物理学と化学のイメージはどのように違いますか」と尋ねると、「あらゆるものを法則に当てはめて考えるのが物理学、各論や暗記が多いのが化学」といった具合に返されることが多い。この認識はあながち間違っていない。なぜなら、「フラスコを振ってものを混ぜ新しい物質を作り出す」という化学実験は、混ぜる物質の比や温度、圧力、用いるフラスコ

の大きさ、混ぜる速度、さらに微量の副成分などの細かな要因が、反応そのものを全く変えてしまうほどに大きな影響を与える複雑なシステムであるからである。このため、理論が学問を先導してきた物理学とは異なり、錬金術の時代から化学は多くの研究者の試行錯誤により発展してきた。しかし、高速なスーパーコンピュータの出現により、先のような現実の複雑な系の反応をシミュレートすることが可能になりつつある。これにより今までにない「演繹的な化学」が実現すれば、材料や薬剤の開発にとって極めて大きなブレイクスルーとなることは間違いない。本発表では、昨年世界第1位の性能が認められた我が国の国策スパコン『京』の現状と併せて、化学者がスパコンを使って何をしようとしているのか、分野全体の取り組みを紹介したい。

#### “Why Do Chemists Need Supercomputers? –With the Present Stage of K Computer”

If I ask twelfth grade students in the science course how different physics and chemistry are, many of them will answer “Concrete laws of nature are always applied to anything

in physics. In chemistry, there are many exceptions to the laws, then memory work is required.” This is correct in some sense, because chemical experiments, which will make you think of mixing chemicals in a flask, are complicated systems where the reaction is often affected drastically by the ratio of chemicals, temperature, pressure, size of flask, speed of mixing, a small amount of additives, and many other factors. Thus, chemistry has been developed by trial and error after another of many researchers since the era of alchemy, as contrasted with physics guided by theoretical studies. The appearance of high-performance supercomputers, however, is enabling to simulate reactions of complicated real systems mentioned above. It is no doubt that the deductive chemistry by supercomputers brings breakthrough innovation in developing materials and drugs, if it is realized. In this presentation, I will explain the present stage of K Computer, Japan's government-funded supercomputer that was recognized as the best performance computer in the world last year, and show what chemists want to do with K Computer.

## 2. 木田 哲夫 助教 : 11:20~12:00 (質疑応答含む)

### 「認知機能に関わる脳内ネットワークの機能的特性」



認知機能には様々なものがありますが、これまで私が焦点を当ててきたのは「注意」の働きと仕組みです。立食パーティー（カクテルパーティー）の場を思い浮かべてください。大勢の人たちがそれぞれのグループで会話をしています。しかし、耳から入ってくる聴覚情報の多くは、実は不必要な情報いわば雑音です。我々は周囲の多くの人たちの会話を雑音として無視する一方で、隣の会話相手の言葉、身

振り手振り、視線などに能動的に注意を向けることにより、多くの感覚情報の中から必要な会話情報のみを選択的に抽出しています。つまり注意は必要な情報を選択する機能およびその仕組みと言えます。何らかの形で注意機能が障害を受けた場合、個人またコミュニティーに与える影響は大きく、その脳内機構を明らかにする研究は大変重要と考えられます。私はこれまで脳波・脳磁場計測や近赤外分光法などの非侵襲的な（傷つけない）脳活動計測法を

用いて注意機能の脳内基盤について検証を行ってきました。今回の研究会では私のこれまでの研究成果を中心に、今後の展望も含めて紹介します。

## **"Functional property of human brain network associated with cognitive function"**

The human brain has a variety of cognitive functions. I have previously investigated the neural mechanisms of attention using noninvasive neuroimaging techniques. Imagine that you take part in a buffet party (or cocktail party). There are a number of people having conversations in groups. Most auditory signals received by your ears are actually unnecessary for the conversation, that is, noise. You ignore the unnecessary auditory signals coming from the surroundings while actively attending to words, gestures, and directions of the eyes of the conversational partners to obtain necessary information selectively. This is the function of attention. If the attention system of the brain is damaged by disease or trauma, the impact on the individual and society is significant, and, thus, understanding the neural mechanisms of attention is one of the central goals in cognitive neuroscience. Recent advances in neuroimaging techniques have revealed the functional localization and timing of neural activations associated with a variety of cognitive functions. I will talk about studies of attention using completely noninvasive techniques to investigate neuronal activity in the living human brain.