

## はじめに

DNA、RNA、タンパク質等の生体分子と通常の分子の根本的な違いは、生体分子の持つ組み合わせ的な複雑さにある。例えば、DNAやRNAは、4種類の塩基を配列として組み合わせることにより、いくらでも複雑な情報を自由に表現することができる。このように生体分子は組み合わせ的な複雑さを有しているために、自分自身の化学反応を自律的に制御するための情報を自分自身の中に符号化して格納することが可能である。従って、個々の生体分子は計算能力を持った情報処理装置であり、生物はこのような生体分子の計算能力を利用して種々の情報処理を行っていると考えられる。この観点に立つとき、情報科学の立場から生体分子を研究し、生体分子の利用法を模索することが、今後ますます重要になると考えられる。

広義の「分子計算」は、生体分子が潜在的に持つ計算能力を発見し(分析、理学的側面)、それを利用して目的の機能や構造を実現する(合成、工学的側面)ことを目指す学問領域であり、DNA、RNA、タンパク質等の生体分子の形態変化・自己会合・拡散・変異等の化学反応を活用して、並行並列・分散・自己組織化・進化等の計算機構を実現することを目指している。後に述べるように日米欧で多彩な研究が急速に展開しており、情報科学の一分野として認知されてきている。しかし、研究者によって分子計算に対する取り組み方がまちまちで、やみくもな試行錯誤やビギナーズ・ラックに頼っている一面も否定できない。分子計算に対する普遍的な設計論の必要性が認識されつつある。

「分子プログラミング」とは、分子計算の技術をさらに一歩進めるための、分子計算に対するシステムティックな設計論のことである。本研究領域「分子プログラミング」は、生体分子の化学反応を設計する過程をプログラミングとみなし、計算モデルや計算量などの情報科学の技術を駆使して、上述したような計算機構を実現するために、生体分子の化学反応の設計論の確立を目指す。

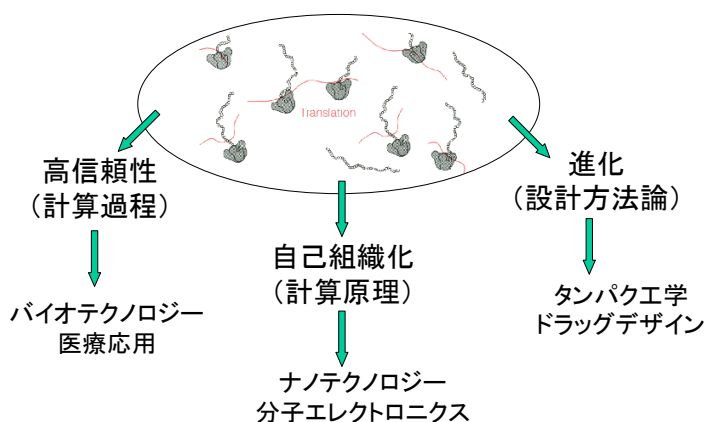
生体分子の化学反応を制御するプログラムには、DNAの塩基配列のように分子自身に符号化される部分と、実験操作の系列として実現される部分がある。特に、前者の形態のプログラムは自律的な計算能力を有する生体分子に特徴的なものである。二つの形態のプログラムを協調して動作させることにより、生体分子の化学反応を制御し、目標とする機能や構造を持った分子(または分子から成るシステム)を構築することができると考えられる。

このように、分子プログラミングの研究分野は、生体分子反応を制御するためのプログラミング技術を主として情報科学の観点から探求することを中心とするが、遺伝子解析、ナノテクノロジー、ナノマシン、コンビナトリアル・ケミストリなど、分子レベルの種々の技術とも密接なつながりを持っている。

## 特定領域を推進するに当たっての基本的考え方・研究組織

本研究領域は、以上で述べた設計論を確立するために、自己組織化、高信頼性、進化という3つの切り口から研究を展開する。自己組織化は分子の持つ最も基本的な計算能力の一つであり、ナノテクノロジーへの応用が期待される。自己組織化の設計論を確立するためには、計算原理に関する深い洞察が必要とされる。高い信頼性を有する生体分子反応を設計する技術には、バイオテクノロジーひいては医療への応用が期待される。これは、分子計算の観点からは、高い信頼性を持つ計算過程を設計することに他ならない。進化を計算と捉えるならば、分子の人工進化も分子計算の一種と考えることができる。従って、遺伝的アルゴリズムなどの進化的計算の技術を分子の人工進化の設計に応用することには実りが多いと期待される。

### 設計論のための3つの切り口



以上の3つの切り口に対して、以下の2つの階層から成る5つの研究班によって研究を進める。

#### ●抽象分子計算系

抽象分子計算系の研究は、情報科学からのパラダイムの導入と情報科学への貢献を目指す。情報科学的な手法を用いて分子計算系と分子プログラミングのための基礎理論を展開することを目指す。実際の分子をふくむ抽象的な人工分子を対象として、分子計算系の基礎となる計算モデルの研究によって研究領域全体を先導する。

横森班と山下班の2班がこれに属する。

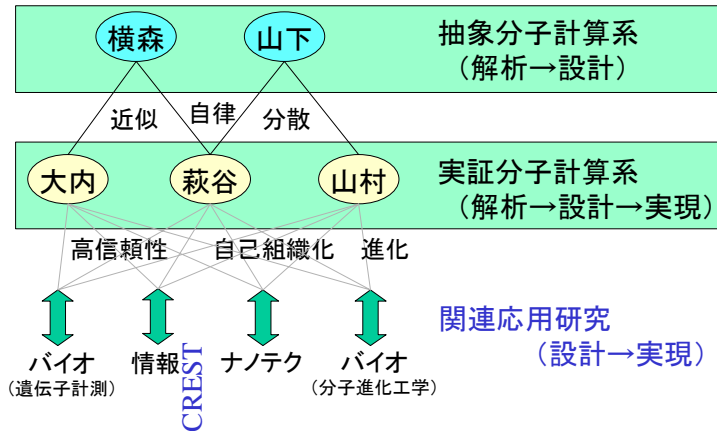
#### ●実証分子計算系

実証分子計算系の研究は、実際の分子を想定した計算系の研究を行う。具体的には、化学反応のシミュレーションや、計算モデルの実装としての分子生物学的実験を行う。存在する生体分子を利用した分子プログラミングの実現に注目している。バイオテクノロジーやナノテ

クロージーなどの応用分野への知識移転や、逆にこれらの応用分野からの新しいテクノロジーの導入の窓口にもなる。

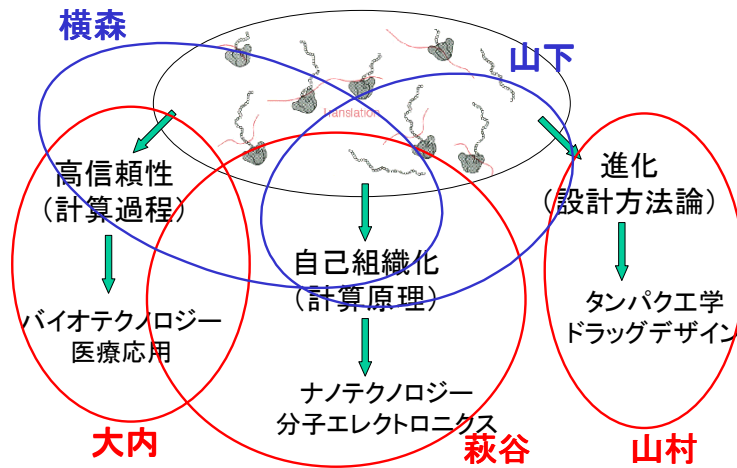
萩谷班、大内班、山村班の3班がこれに属する。

## 計画研究の組織と関連



これらの研究組織と先に述べた設計論の3つの切り口を関連させると以下の図のようになる。

## 設計論のための3つの切り口



## 総括班

5つの研究班に加えて、特定領域全体を統括し評価・助言を行う総括班を置いている。特に、以下の先生方には、それぞれのご専門からの助言をいただいている。

都甲潔(九大)	自己組織化に関する助言
塩谷光彦(東大)	超分子に関する助言
小長谷明彦(北陸先端大)	分子生物情報学の立場からの助言
小林重信(東工大)	広く、システム科学の立場からの助言
有川節夫(九大)	広く、理論計算機科学の立場からの助言
米澤明憲(東大)	並列計算・分散計算の立場からの助言
佐藤雅彦(京大)	広く、理論計算機科学の立場からの助言