

はじめに

分子コンピューティングは、特にDNA等の生体分子が潜在的に持っている計算能力を引き出し、計算能力を有する分子システムを構築することを目標としている。本特定領域「分子プログラミング」は、従来の分子コンピューティング研究を発展させるとともに、分子コンピューティングを実現するためのシステムティックな設計論を確立することを目指している。

近年、分子コンピューティングの研究は、分子の持つ計算能力を応用することを目指して様々な方向へと発展している。DNAの自己組織化を活用したDNAナノテクノロジーはその典型例である。DNAを用いて複雑な分子パターンを構成するためには、DNAの持つ自己組織化の能力を深く理解するとともに、実際に目標のパターンに自己組織化する配列を設計しなければならない。また、分子コンピューティングをバイオテクノロジー、特に遺伝子計測へ応用しようとする試みも盛んになって来た。分子レベルの情報処理を活用して効率よく遺伝子計測を行おうとする試みである。さらに、タンパク工学において分子進化を利用する際に、進化計算の知見をもとに分子の持つ進化能力を理解し制御する試みが始まっている。

以上のような様々な応用へ向かうと同時に、分子コンピューティングの新しい計算モデルを開拓する意欲も衰えていない。例えば、オートマトンやチューリング機械に代表される状態遷移機械を、生体分子によって実現しようとする試みは活発である。

しかし、以上のような応用を開拓し新しい計算モデルを実現するためには、ビギナーズラックに頼らずに、計算能力を持った分子システムの汎用的な設計論を確立する必要がある。我々は、分子システムの設計論に焦点を当てた研究分野を特に「分子プログラミング」と呼んでいる。すなわち、「分子プログラミング」は、生体分子やそ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、生体分子の化学反応の設計論を確立することを目指している。

本年度も、昨年度に引き続き本特定領域「分子プログラミング」の公開シンポジウムを開催することができた。本年度は、本特定領域の班員でもある大阪大学の吉信達夫先生に招待講演をお願いした。特にナノテクノロジーと分子プログラミングの関連について講演していただく。また、本年度の研究発表は、班ごとではなく関連するテーマに従って次ページのようなプログラムを編成した。結果的に、分子プログラミングの最も典型的な技術である配列設計に関する発表が前半にまとまることになった。後半は、分子コンピューティングの新しいアーキテクチャとそのための設計論に関する発表となった。なお、本報告書の方は、班ごとに研究成果がまとめてある。

最後に、班員の方々、総括班の先生方には深く感謝いたします。

特定領域研究「分子プログラミング」代表

萩谷昌己

特定領域研究「分子プログラミング」公開シンポジウム

日 時:平成16年3月19日(金)

会 場:すずかけホール

横浜市緑区長津田町4259 東京工業大学 すずかけ台キャンパス

プログラム:

11:00～12:00 招待講演:「AFMナノ加工技術を利用した生体分子のパターニングとバイオセンサ」

吉信達夫(阪大)

昼 食

13:30～15:10 セッション1「DNA計算のための設計論」

- (1)「自己修復可能なDNAタイル」藤林健一・村田智(東工大)
- (2)「分岐状態分子マシンと最小流域アルゴリズム」久保田光宏・萩谷昌己(東大)
- (3)「分子の二次構造変化のマルコフ過程(仮)」定兼邦彦・山下雅文(九大)(仮)
- (4)「二次構造を作らない配列設計」小林聡(電通大)

休 憩

15:40～17:20 セッション2「さまざまなアーキテクチャ」

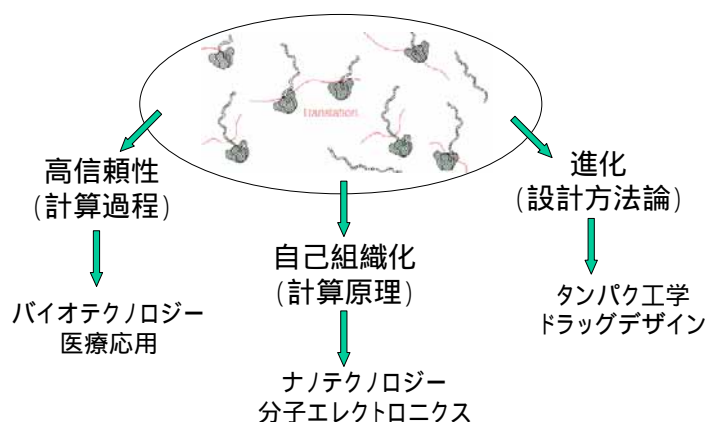
- (1)「自律的DNA計算とハイブリダイゼーション反応速度」陶山明(東大)
- (2)「ヘアピン型メモリを用いたアクエラスコンピューティングの実現」山本雅人・大内東(北大)
- (3)「拡張コドンを用いた有限オートマトン」榊原康文(慶大)
- (4)「試験管ウィルスによる進化リアクタの実現」伏見譲(埼大)(山村雅幸(東工大))

18:30～ 懇親会

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旨とする。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。

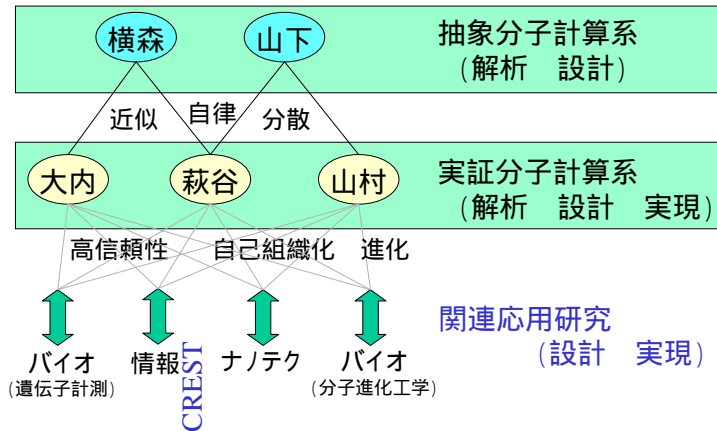
実証分子計算系

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。

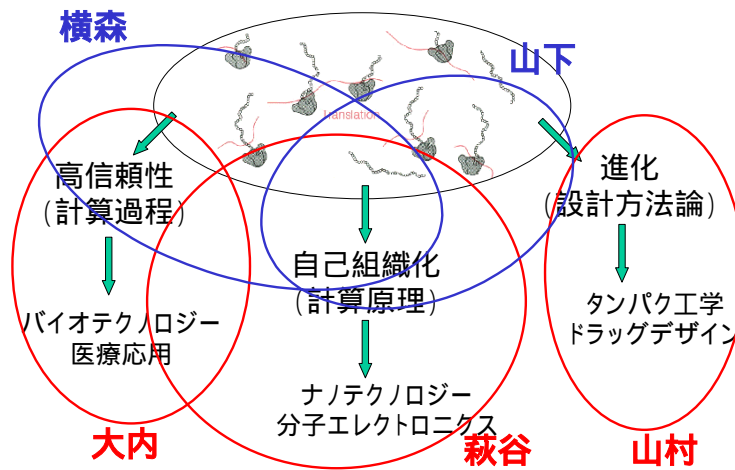
萩谷班、大内班、山村班の3班がこれに属する。

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