

Theory and Construction of Molecular Computers 分子コンピュータの理論と構築



プロジェクトリーダー 萩谷昌己

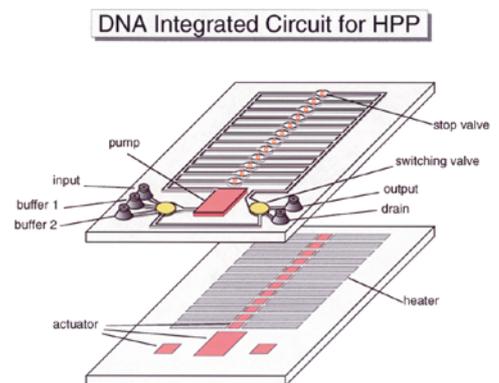
東京大学 大学院理学系研究科 教授



1. 研究の目的

生物の遺伝情報はいうまでもなく、シグナル伝達に代表される生物情報の処理機能は、すべて、タンパク質や核酸などの生体分子とその相互作用が担っています。このような生体分子の持つ情報処理機能を工学的に応用するための基礎理論を構築し、また、それを実現するための実験技術を開発することにより、分子レベルの反応に従って計算を行なうコンピュータを作ることが、本プロジェクトの最終的な目標です。

分子レベルの反応を利用することにより、より速く 超並列、より小さく 微小、より安い 省エネルギー 計算機構が実現できると期待されます。一つ一つの分子が独立した計算単位として情報を処理することができれば、いままでにない超並列性を持ったコンピュータを作ることができるでしょう。また、一つ一つの分子が情報を処理し記憶することにより、より小さいコンピュータ、エネルギー消費のより少ないコンピュータが可能となります。さらに、分子レベルの反応を適切に制御することができるようになれば、計算だけでなく分子サイズの構造を分子自らが形成することができるようになります。DNAやタンパクなどの生体分子は、他の種類の分子と比較して組合せ的な多様性が非常に大きく、このことが、生体分子に対して自ら計算する可能性や複雑な構造を形成する可能性を与えています。また、生体分子のもつ物理化学的性質や機能も多岐に渡っています。従って、計算の結果として、種々の物理化学的な機能を実現することができるでしょう。



2. 研究の内容

DNA分子を用いた計算、いわゆる、DNAコンピューティングの研究は、1994年にScience誌に掲載されたL.Adlemanの論文によって始まったと言っても過言ではありません。Adlemanはこの仕事においてDNAを用いてハミルトン経路問題を解く方法を提案し、実際に実験を行なって7点から成る有向グラフのハミルトン経路を求めることに成功しました。ただし、DNAコンピューティングの「超並列性」だけを強調し過ぎた点は否めません。分子の反応に基づく計算機構が利用されるならば、最終的な成果は必ずしも「計算」に限られるべきではなく、微小加工など様々な応用の可能性が考えられます。

本プロジェクトでは、Adleman流の超並列計算を含め分子による計算のための基本演算や計算モデルの研究を進めています。また、計算と進化の関係にも注目し、in-vitroのセレクションや進化リアクターの研究も行なっています。

2.1. 分子コンピュータの基本演算とその実現

本プロジェクトでは、これまでに、いくつかの題材に対して生体分子を利用した計算法を提案し、その実現可能性を分子生物学実験によって検証しました。また、それらの事例を通して、分子コンピュータを実現するために重要と考えられる基本演算の同定、その理論的基礎づけ、および、その実現可能性に関する検討を行っています。

ハミルトン経路問題はAdlemanの先駆の仕事でもとりあげられた題材ですが、本プロジェクトでは、特に、DNA分子を固相に固定して経路を段階的に生成する方法、重複した点を含む経路を検出するためにバルジ・ループを利用する方法を提案し、その実現可能性の検討を行なっています。

また、一つ一つの分子に独立した計算能力を与えることを目標として、DNA分子によって状態機械を実現する方法を研究しています。これまでに、有限オートマトンやブール μ 式などの状態機械をDNA分子を用いて実現するための方法を提案し、その実現可能性を実験によって検証しました。状態遷移はヘアピンのポリメラーゼ伸長によって行ないます。

以上の他に、DNA分子をタプルとする関係データベースの基本演算を実現する方法、DNA分子を用いて簡単な演算操作を行なう方法を提案し、その実現可能性に関して基礎実験を行なっています。

2.2. 分子コンピュータのための計算理論

スプライシング理論は、DNAやRNAの組み換え操作（スプライシング）をモデル化した形式言語理論です。通常の分子に対するスプライシングの計算能力は高々正則言語と同等なものであるため、本プロジェクトでは、その計算能力を高めるために種々の拡張を試みています。一つは環状分子に対するスプライシングで、本プロジェクトによって、万能の計算能力が得られることが示されました。また、木構造上のスプライシングを考えることにより、文脈自由言語と同等の能力が得られることも示されています。

以上の他に、DNAの操作機構の基本であるハイブリダイゼーションをその主要原理とする新たな計算モデルを提案しました。

2.3. in-vitroのセレクションと進化リアクター

分子による計算と分子の進化は非常に密接な関係にあります。本プロジェクトでは、in-vitroのセレクションと進化リアクターの研究も行なっています。

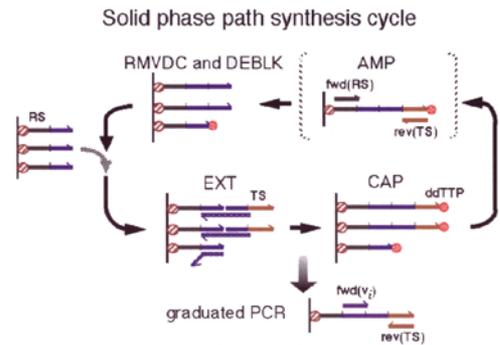
生体分子のin-vitroのセレクションの実験では、低分子化合物に特異的に結合する新規のRNA分子や、基質特異性の変化した酵素などを単離することに成功しました。また、DNAコンピューティングの研究では実現技術としてPCRが多用されていますが、PCRに関連して3SR法の研究を行っています。これは、恒温でPCRと同様のDNA複製を行う手法で進化リアクターに発展させることができます。

3. 研究の体制

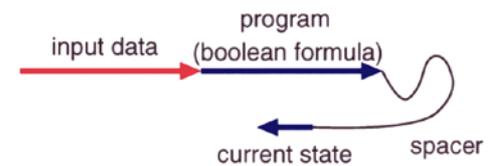
期 間：1996年10月～2001年3月

構 成：1998年2月の時点で、プロジェクトリーダー1名、コアメンバー4名、研究協力者4名で構成されています。

実施場所：この研究の主拠点は東京大学ですが、他大学との協力方式でプロジェクトを進めています。東京大学萩谷研究室（情報科学）横山研究室（生物化学）陶山研究室（広域科学）早稲田大学横森研究室、埼玉大学伏見研究室が緊密な連絡をとってプロジェクトを進めています。また、米国を中心に海外の研究グループとの交流も活発に行なっています。

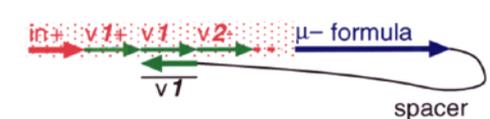


固相法によるハミルトン経路の段階的生成

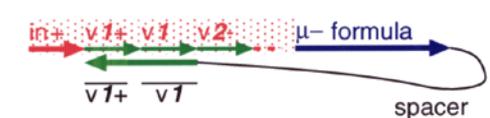


データとプログラムのDNAによる表現

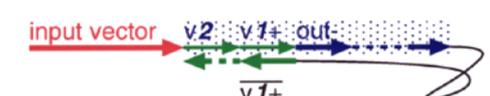
1. The head anneals to the input.



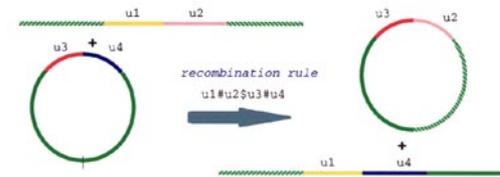
2. The head copies the input by one symbol.



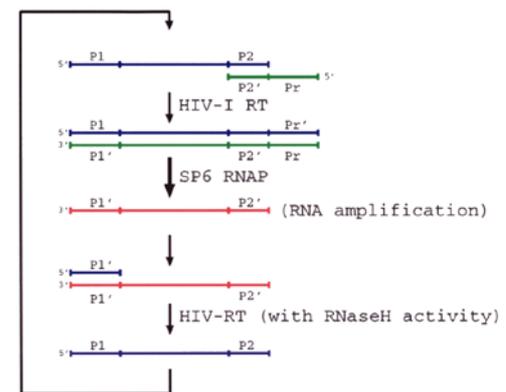
3. After denaturation, the head anneals to the μ -formula.



ヘアピンの伸長によるブール μ 式の評価



環状スプライシング理論



3SR法