

1. 研究領域名：分子プログラミング - 分子レベルの情報処理機構の設計論 -

2. 研究期間：平成 14 年度～平成 18 年度

3. 領域代表者：萩谷 昌己（東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授）

4. 領域代表者からの報告

(1) 研究領域の目的及び意義

「分子コンピューティング(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標としている。「分子プログラミング」とは、分子コンピューティング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を意味している。すなわち、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、分子コンピューティングの計算機構を実現するための、生体分子の化学反応の設計論を確立することを目標とした。その発展として、分子コンピューティングの技術と分子プログラミングの設計論により、バイオテクノロジーやナノテクノロジーに対して計算論的な貢献をめざしてきた。また、基盤技術として、分子反応に適した新しい計算モデルの探求を並行して行った。ここで「計算論的」という言葉には、自然界の現象に対して「計算」という見方を与えること、および情報処理技術を道具として用いることの2つの側面があるため、単なる異分野間の知識移転ではなく、情報科学、バイオテクノロジー、ナノテクノロジーのすべてに貢献できる特長がある。

(2) 研究成果の概要

分子計算のための計算分子と分子反応の設計論および応用に関係する研究成果の中から、領域全体を通して主要なものを取捨選択し簡潔にまとめると、以下ようになる。 計算分子(DNA配列)の設計論(1-1)望ましくない構造を作らない配列の設計(1-2)望ましい構造を作る配列の設計(1-3)自在に構造変化する配列の設計(1-4)構造変化の数理モデルと実験的検証 分子反応の設計論(2-1)反応の並列化(2-2)反応の精密化(2-3)進化のための反応 計算論的ナノテクノロジー応用(3-1)DNAナノ構造の高信頼アセンブリ(3-2)4×4DNAタイルによるバイナリカウンタの実現(3-3)ヘアピンとバルジによる並行計算(3-4)光ライゲーションによる耐熱性DNAナノ構造体の構築 構成的生物学応用(4-1)in vitro論理演算素子、発振素子の構築(4-2)in vivo論理演算素子の構築(4-3)大腸菌を用いたバクテリアコンピュータの開発(4-4)WetTDGAによるaaRSの基質改変

、 は基礎的な設計技術に関する理論および実験で研究期間の前期の成果である。特に の配列設計はDNAを計算分子とするすべての分子計算に共通した基礎的成果であり、日本が世界に誇れる充実した内容となっている。

、 は計算論的ナノテクノロジーおよび計算論的バイオテクノロジーへの応用研究で研究期間の後期の成果である。このように、科学技術のライフサイクルによってその達成段階を萌芽・基礎・普及の順で評価するとすれば、本領域はこの分野を萌芽から基礎の段階に推し進めたものである。

5. 審査部会における所見

B(期待したほどではなかったが一応の進展があった)

生体分子の化学反応を計算と見なす分子計算を対象とし、その設計の方法論を確立するという意欲的な課題に取り組み、個別の基礎研究において十分な成果が得られた。一方、領域全体としての研究のまとめりや、本来の研究目的の達成度に関しては十分に明確ではない面があり、未だ概念先行の感がある。新しく、発展の見込まれる分野であり、本研究領域の成果を活かした今後の展開を期待する。