

審査の結果の要旨

氏 名 川又生吹

本論文は、DNA、RNAといった核酸分子を構成要素とした反応系のシミュレーションの効率化および人工デバイス設計の自動化手法について論じたものである。DNA、RNA等の核酸分子は、生体内におけるもっとも重要な分子の1つであり、その挙動の解析は生体反応の理解につながるため分子生物学においてきわめて重要である。しかし、その挙動のシミュレーションを詳細に行おうとすると、考慮する必要のある構造数が指数的な組合せ爆発を起こし、シミュレーションが困難となる場合も多い。本論文では、その組み合わせ爆発を回避しながらシミュレーションを行う新しい手法を提案し、検証した。一方、核酸分子は、その化学的性質を用いながら人工核酸反応系が作成され、将来的なドラッグデリバリーや分子計算、ナノロボティクスなどへの応用が考えられている。それらの実現のためには、シミュレーションを行うだけでなく、構成要素や化学反応をうまく組わせて設計していく必要がある。本論文では、そのような設計の自動化をめざし、グラフ書き換え系にもとづく新しい設計手法を提案し、実際に実装可能な核酸反応系の設計も行った。

本論文は七章からなり、第一章では、本論文の構成について述べるとともに、核酸反応系、そのモデル化、シミュレーション手法、反応系の設計手法などの基礎ならびに既存知識を概観している。

第二章では、本研究を行う動機となった背景として、DNAの性質、ナノテクノロジー・分子センサーの研究等を紹介し、さらに既存の生体反応のシミュレーションの既存手法などを紹介するとともに、関連の深い他の研究についても紹介している。

第三章では、核酸反応系をグラフ書き換え系として記述する方法を提案し、それをもとにしたシミュレーション手法を提案している。さらに、それらの手法の有効性を確認するために、実際の既知の反応系のシミュレーションを行い、知られている反応を実際にシミュレーションできることを示した。

第四章では、前章の方法を核酸の水素結合反応系に適応した際に起きうる構造数の組み合わせ爆発について考察し、それを避けて計算するグラフの抽象化に基づく発見的な手法を提案するとともに、その手法でもシミュレーションがほぼ正確であること、また、理論的に正確に計算できる場合もあることなどを示した。

第五章では、さらに同様の抽象化による効率化の手法を酵素反応系にも適用し、やはり効率的なシミュレーションが可能であることを示した。

第六章では、核酸反応系を用いた人工反応系の、シミュレーテッド・アニーリングを用いた進化的計算による自動設計手法を提案し、効率的な設計が可能であること、そして実際に実装が可能な新しい設計を見つけることも可能であることを示した。

第七章では、本論文の成果を総括し、既存手法との差異と利点ならびに欠点に関する議論を行うとともに、今後の研究への洞察を行っている。

このように、本論文は、生体の理解に欠かせない生体分子の分子反応系シミュレーションの新たな理論を切り開いているだけでなく、今後の発展が期待されるドラッグデリバリーやナノロボティクスにつながる人工生体分子反応系設計の第一歩となる基礎研究を推し進める研究をまとめたもので、情報科学的なアプローチから分子生物学やナノロボティクス、という複数の学際分野に対して大きな貢献を行っている。

よって本論文は博士（情報理工学）の学位請求論文として合格と認められる。