

氏 名	リュウ ケン キン 劉 健 勤
学位(専攻分野)	博 士 (情 報 学)
学 位 記 番 号	論 情 博 第 69 号
学位授与の日付	平 成 18 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	Theoretical Biomolecular Computing Inspired by Signaling Pathways of Cells (細胞内生体分子の信号伝達パスウェイ機構を利用した分子計算の理論に関する研究)
論文調査委員	(主 査) 教 授 片 井 修 教 授 松 田 哲 也 教 授 守 屋 和 幸

論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、これまでにない斬新な情報処理パラダイムとして細胞の信号伝達経路に学ぶ生体分子計算（キナーゼコンピューティング）を提案し、その計算理論と情報学的方法論の創出を目指した研究を行っている。具体的にはキナーゼコンピューティングにおける情報表現法、構造的な操作機構を提案し、NP 問題解決アルゴリズムとして具体化したうえで、オートマトン型の計算モデルの設計および生体分子の信号伝達メカニズムの並列性から生ずる計算性能について論じている。全体は7章から構成されている。

1章では、本論文の研究の目的を述べ、生体分子計算の方法論および生体分子計算分野におけるキナーゼコンピューティングの意義と位置付けを論じている。

2章では、代表的な生体分子計算の諸手法との比較に基づき、生体分子計算の操作に関する生化学メカニズムを分析し、異なる生体分子をオペレータとする生化学的な信号伝達メカニズムを利用した情報の表現法と操作機構を提案している。まず、これまで提案された、Adleman の DNA コンピューティングとして知られる試験管ベースの DNA 計算、RNA 計算、サーフェス・ベースの DNA 計算、微生物や細菌の遺伝子情報を用いた生体分子計算方法までを論じている。それら従来手法との比較・分析を踏まえ、生きた細胞に学ぶシステム的な生体分子情報処理メカニズムを提案している。すなわち GEF・GAP およびキナーゼ・ホスファターゼによる新しい情報表現法、分子メモリのパスウェイ操作、信号伝達パスウェイによる符号化アルゴリズムを提案し、それらの情報理論的な意義を明らかにしている。

3章では、2章で論じた情報理論的な基盤を踏まえ、このパスウェイ構造に基づくキナーゼコンピューティングを NP 問題解決アルゴリズムのベンチマークテストに適用し計算性能について論じている。すなわち 3-SAT（積和充足）問題へ応用するため、細胞の信号伝達メカニズムと自己再構成できるパスウェイ構造を利用したアルゴリズムとして具体化している。その結果、制御空間複雑性がパスウェイ構造の並列操作機構によって線形オーダーと対数オーダーとなることを理論的な証明を通じて明らかにしている。

4章では、キナーゼコンピューティングによる 3-SAT 問題解決アルゴリズムの結果を踏まえ、キナーゼコンピューティングを一般的な計算機構へと展開している。並列計算のパスウェイユニットの制御構造について検討し、計算理論的な観点からキナーゼコンピューティングの一般化記述に向けてキナーゼコンピューティングの形式化プロセスが有するオートマトン構造を明らかにしている。その結果、このオートマトン構造により自己継続的な計算が可能となることを明らかにしている。具体的には、キナーゼコンピューティングの計算能力が再帰 μ 関数と等価であることを証明している。これはキナーゼコンピューティングがチューリングマシンの万能計算の能力を備えることを示すものである。

5章では、汎用計算プロセスの論理的な展開として、キナーゼコンピューティングを、入出力関係と内部構造を個別のグラフとして形式化する書き換え機構を解析している。またこの並列構造を用いて McNaughton 形式言語の生成が可能であることを証明している。さらにキナーゼコンピューティングが並列計算の同調性を備えることを明らかにしている。

6章では、キナーゼコンピューティングの分子生物学的な背景を紹介している。理論的な可制御性を証明したうえで、生

物物理の情報学的なレベルでの位相と振幅の点において、異種のパスウェイユニットの同期が制御可能であるというシミュレーション結果を示している。

7章は結論であり、本論文の研究成果をまとめて、今後の方向性を展望している。

論文審査の結果の要旨

本論文は、細胞の信号伝達経路に学ぶ生体分子計算の理論と情報学的方法論に関する研究成果をまとめたものである。具体的には、細胞の信号伝達経路に学ぶ、新たな生体分子計算理論としてキナーゼコンピューティングを提案し、キナーゼコンピューティングにおける情報表現法、構造的な操作機構、NP問題解決アルゴリズムとしての具体化、オートマトン型の計算モデルの設計および生体分子の信号伝達メカニズムの並列性に基づく計算性能について論じている。得られた主な成果は以下のように要約される。

1. 細胞の信号伝達メカニズムに学び、自己再構成できるパスウェイ構造を利用した情報の表現法、符号化方式とそのアルゴリズムを提案した。
2. キナーゼコンピューティングに基づき設計された符号化方式は情報理論的に環境への高度な適応能力を備えることを明らかにした。
3. キナーゼコンピューティングをNP問題解決アルゴリズムのベンチマークテストである3-SAT（積和充足）問題に適用し、キナーゼコンピューティングが計算性能において他の分子計算手法に比べ最良であることを示した。
4. 細胞の信号伝達経路に基づくキナーゼコンピューティングの一般化記述を試み、並列計算プロセスが有するオートマトン構造を明らかにした。
5. 計算理論的な観点から、キナーゼコンピューティングの計算能力が再帰 μ 関数と等価であることを証明した。
6. キナーゼコンピューティングの並列構造によって、McNaughton形式言語が生成可能であることを明らかにした。
7. キナーゼコンピューティングをグラフ書き換え機構として解析し、情報学的な意味で異種のパスウェイユニットの同期が制御可能であることをシミュレーションにより示し、その結果が理論的な可制御性と一致することを確認した。

以上、要するに本論文は新しい情報処理パラダイムとして細胞の信号伝達経路に学ぶ生体分子計算の理論モデルとアルゴリズムを提案し、それらをNP問題解決と符号化へ応用して、情報学的方法論として考察を行ったものである。これらの成果は情報学の展開上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（情報学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成18年1月30日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。