

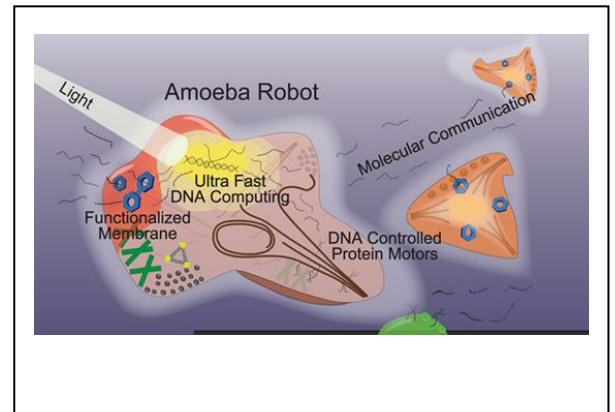
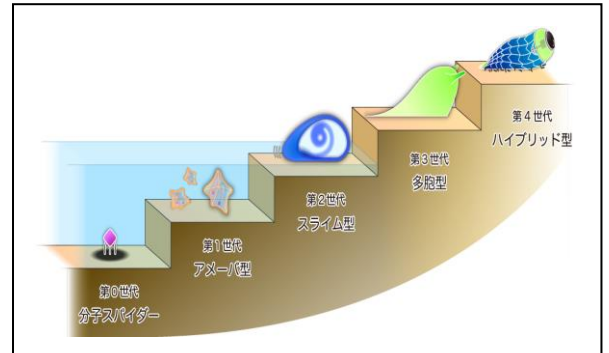
# 小長谷研究室活動紹介

## 分子ロボティクスにおける情報処理技術

小長谷研究室では、生体分子から構成される分子ロボットの設計を支援するために DNA オリガミの自動認識、微小管運動解析、実時間可視化シミュレーションシステムなどの開発に取り組んでいる[1]。本資料では、現在の研究活動について紹介する。

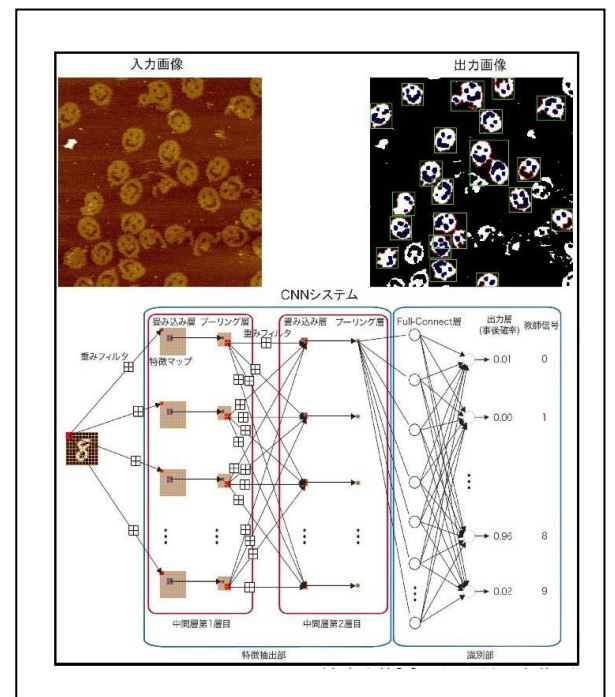
### 1. アメーバ型分子ロボット

2012年に発足した新学術領域研究「分子ロボティクス」は生物のように生体分子を自己組織化させることで、ロボットのように動作させる人工物の創成を目指したプロジェクトである[2]。分子ロボットとしては、これまでに DNA 断片から構成される分子スパイダー(Milan Stojanovic, 2006)のような DNA 型ロボットが作られているが、自律性はなく、ランダムな動きしかできない。このランダム性の壁を超えるために、アメーバ型ロボットでは巨大リポソームをコンパートメントとして持ち、外界と隔てた内部状態を確立している。また、DNA オリガミで構築した分子センサーを備えることで外界の情報を内部に DNA の断片として伝える。内部には、DNA コンピューティングで動く分子制御回路があり、DNA 断片の増幅や他の DNA 変換を実現する。分子制御回路からのシグナルを利用して、DNA 修飾された微小管と分子モーターから構成される分子アクチュエーターを動かす。現在、概念実証 (proof-of-concept) に向けてプロトタイプシステムを開発中である[3]。



### 2. DNA オリガミ自動認識

DNA オリガミ(Paul W.K. Rothemund, 2006)は約 7000 塩基の環状 DNA に 200 本くらいの短鎖 DNA を混ぜるだけで、100 ナノメートルサイズのスマイリーマークや星型などの構造を作成する DNA ナノ構造技術である。現在、田町キャンパスに原子間力顕微鏡(AFM)を設置しており、このような DNA オリガミを観測することができる[4]。小長谷研究室では AFM 画像にある DNA オリガミを自動認識するような深層学習(deep learning)システムを開発中である。



[1] <http://konagaya-lab.sakura.ne.jp/jp/>

[2] <http://www.molecular-robotics.org/>

[3] Hagiya M. et al, ACR (2014)

[4] <http://www.konagaya-lab.com/afm/>



### 3. 微小管運動解析

分子モーターは生体内において力学的な運動を実現する。例えばキネシンは ATP を ADP に変換する際に発生するエネルギーを動力源として微小管の上を一方方向に移動する。微小管滑走アッセイではガラス板上に分子モーターを固定化し、微小管を分子モーター上で滑走させることで微小管の運動パターンを観測する。微小管同士を結合する DNA 断片を導入することで微小管が凝集し、リングや棒などの様々な形状を構成することができる[5]。

微小管は直径が約 25 ナノメートル、壁の厚さが約 5 ナノメートルの中空の筒状であり、細胞内の骨格構造や繊毛の構成要素に使用されている。チューブリンというタンパク質が多数重合することにより、マイクロメートルサイズの非常に長い分子を構成する。ナノスケールの分子運動においては慣性力がほとんどきかず、粘性力が支配的になる。このため、微小管結合分子を導入した際の微小管の凝集は個体と液体の間のような特異的な流動性（レオロジー）を示す。

微小管運動を録画したビデオデータを解析するため、粒子画像流速測定法(Particle Image Velocimetry, PIV)法を使用する。PIV 法は水の流りに浮いた木の葉の動きから水流を予測するような方法である。流動場に混入した粒子の動きを追跡して、一番もってもらい移動方向を推定する。これを各格子で繰り返すことで全体の運動ベクトル場を推定する。このような運動ベクトル場の相関を時間軸に沿って計算すると場全体のエネルギー変化を知ることができる[5]。

### 4. 実時間可視化シミュレーション

微小管運動をコンピュータ上で再現するために実時間可視化シミュレーションシステムの開発を進めている。シミュレーションシステム上では、分子モーターは一つの粒子で、各微小管は数十個の粒子の列として表現される。シミュレーションの各ステップで全ての粒子間に働く相互作用を計算することで粒子の次の位置を決める。これを繰り返すことで微小管運動を再現することができる。本システムの最大の特徴は、グラフィックプロセッサ(GPU)を用いることで実時間可視化を実現している点にある。2880 コアを備えた GPU を 4 基用いたシステムでは、3 百万個以上の粒子からなる微小管運動を通常のビデオ画像レート (30 フレーム/秒以上) で動作させることが可能である[6]。

[5] Bulbul Mathemuti, et al., NEMS 2016

[6] Greg Gutmann, et al., NEMS 2016

