

自己集合型ネットワークのためのポルフィリン・オートマトン

劉 健勤 益子信郎

独立行政法人 情報通信研究機構 未来 ICT 研究センター
〒651-2492 兵庫県神戸市西区岩岡町岩岡 588-2

Porphyrin Automata for Self-Assembled Networks

Jian-Qin Liu and Shinro Mashiko

National Institute of Information and Communications Technology (NICT),
Kobe Advanced ICT Research Center (KARC)
588-2, Iwaoka, Iwaoka-cho, Nishi-ku, Kobe, Hyogo, 651-2492 Japan

概要 金属ポルフィリン錯体に基づいて、ポルフィリン・オートマトンの数学モデルを提案し、これに応じる超分子自己集合の操作による書き換えプロセスを議論する。

Abstract Based on metalloporphyrin, a mathematical model of porphyrin automata is proposed, and its corresponding rewriting process by supramolecular self-assembly is discussed as well.

1. はじめに

新しい通信技術の基礎のひとつであるセンサー・ネットワークは通信機能の面でいろいろなメリットをもっている。ナノ技術の進展に伴って、超分子自己集合はナノ技術で新しい材料を創り出すツールであり、金属錯体ポルフィリン（金属ポルフィリン錯体）は有力なナノ材料になる。そこで、ナノ・センサー・ネットワークの研究開発が期待されている。

新世代ネットワークおよび未来ネットワークのネットワーク・アーキテクチャへの探索について、金属錯体ポルフィリンによる情報処理の能力検討はすべきものであろう。本文には具体的に金属錯体ポルフィリンに基づくオートマトン・モデルと書き換えプロセスを論じる。

2. ポルフィリン集合体の分子メカニズムによる分子情報処理のデータ構造

金属錯体ポルフィリンには基本的に化学の機能が分子・原子の構造から決められる。図1に示すように金属錯体ポル

フィリンが二つ部分から構成される：ポルフィリンと金属錯体。図1の中にポルフィリンの形は分子・原子の物理構造ではないので、十分な注意が必要である。集合体のポルフィリンの数によって、単量体、二量体、三量体、四量体といい、これがグラフで表現できる。図2に四量体を示す。ここで、情報学の立場でポルフィリン集合体[1]の構造を調べて、自己集合化された超分子構造から計算機科学のデータ構造を抽出する[2]。

ポルフィリン(金属錯体なし)

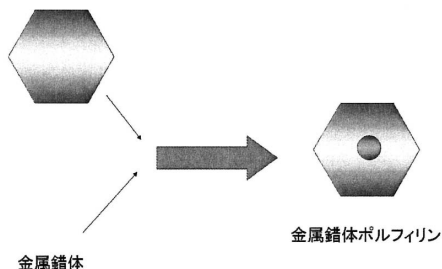


図1 金属錯体ポルフィリンの構成

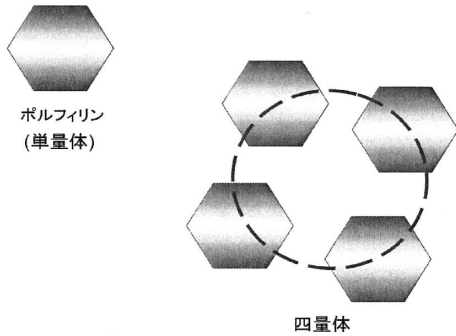


図2 超分子自己集合された四量体

図3に、四量体の構造に対して、頂点(ノード)で金属錯体(元素)を表現し、辺(リンク)で集合体のパターンを表現する。ここで、 V_1, V_2, V_3, V_4 が頂点であり、辺の集合は

$$\{(V_1 \rightarrow V_2), (V_2 \rightarrow V_3), (V_3 \rightarrow V_4), (V_4 \rightarrow V_1)\}$$

になる。このグラフから時計回りの順でストリングを定義する。抽出したデータ構造による超分子自己集合メカニズムに基づく金属錯体ポルフィリンの情報処理プロセスを定式化することが可能になる。

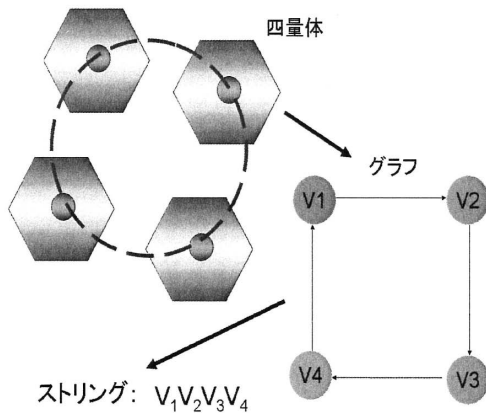


図3 グラフとストリングの構造

3. ポルフィリン・オートマトン

超分子自己集合から得た金属錯体ポルフィリンの情報処理プロセスを有限状態でモデル化して、次のポルフィリン・

オートマトンを定義する：

$$\langle Q, X, \delta, q_0, F \rangle$$

ここで、

Q -- 金属錯体ポルフィリン集合体から定義された状態の有限集合,
 X -- 金属錯体から定義されたアルファベット(集合), 例えば

$$X = \{a, b, c, d\},$$

δ -- 集合体の状態の間における遷移関数
 $q_0 (q_0 \in Q)$ -- 初期状態,
 $F (\subseteq Q)$ -- 終了状態の集合。

ポルフィリン・オートマトンの情報処理プロセスの一つの例として、オートマトンの構造とそれに応じる書き換えプロセスを議論する。図4による説明された情報処理メカニズムには状態変化を示す。ポルフィリンの真中に金属元素を入れて a, b, c, d として表記されると、入力 d によって、状態 $state(t)$ から状態 $state(t+1)$ へのオートマトンの操作はストリング書き換えプロセスとの等価のものになる：

$$abc \rightarrow abcd \quad \text{s.t. } d。$$

そして、空間パターンの集合は

$$\{abc, acb, cab, cba, bac, bca\}$$

とすると、書き換えされる結果の集合は

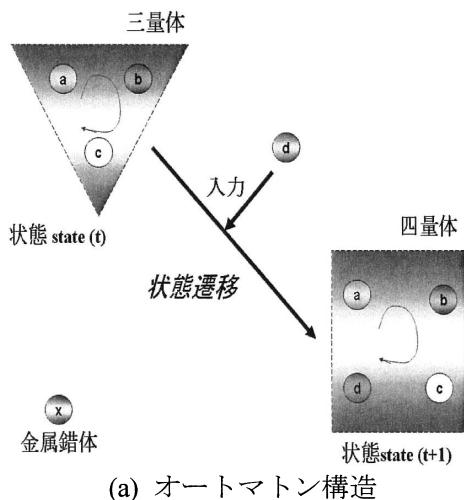
$$\{abcd, acbd, cabd, cbad, bacd, bcad, abdc, acdb, cadb, cbda, badc, bcda, adbc, adcb, cdab, dcba, bdac, bdca, dabc, dacb, dcab, dcba, dbac, dbca\}$$

である。

書き換え(rewriting)¹ (あるいは抽象書き換え系[3]) について、ポルフィリ

¹ <http://en.wikipedia.org/wiki/Rewriting>

ン・オートマトンに依る書き換えプロセスの属性が議論する必要がある。



状態state (t)に依る文字列

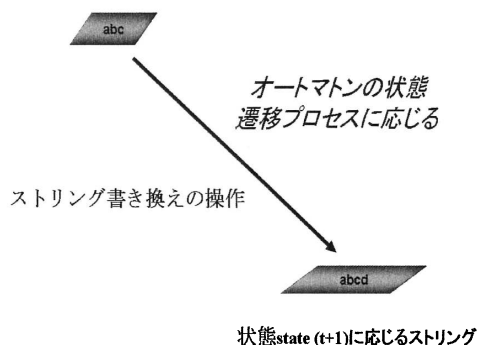


図 4 分子情報処理メカニズムの例

4. ポルフィリン構造による書き換えシステム

抽象書き換え系の概念で[3]ポルフィリン集合体の情報処理プロセスをモデル化すると、下記の文字列書き換えシステム[4]の数学モデルを定義する：

$$W = \langle S, R \rangle$$

ここで、

S が文字列集合である、ポルフィリン集合体の基本パターンの集合(セット)は

$$P = \{P1, P2, P3, P4\},$$

- P1 -- 単量体、
- P2 -- 二量体、
- P3 -- 三量体、
- P4 -- 四量体、

であり、文字列が P 集合の空間パターンに対する記号の組み合わせによる生成される。例えば

- P1 に対して $x \in X$
- P2 に対して xy, yx
- P3 に対して $xyz, xzy \dots$
- P4 に対して $uvxy, \dots$

x、y、z、u、v が金属錯体である。

そして、文字列集合 S は X の元素から組み合わせした文字列になる。これに対して書き換えの操作を考査すると、書き換えルール(規則)を設計できる：

$$R = \{r(1), r(2), \dots, r(n)\}.$$

ここで、R は書き換えルールの集合であり、 $r(1), r(2), \dots, r(n)$ は書き換えルールである。

されに、書き換えプロセスの属性を分析している：

標準形：

単量体、二量体、三量体、四量体のパターンを考えて、物理構造の上で、単量体から別のものへ書き換えできないので、単量体は標準形になるは明らかに成り立つ。

合流性：

合流性 (Confluence)²[5]は書き換えシステムの重要な属性であり、これから並列計算モデルへ展開することを目指す研究の基礎になる。ここで、局域合流性 (Local confluence)あるいは弱合流性を述べる。

まず、述語の形で金属錯体ポルフィリン集合体のパターンを表示する：

monomer (x): 単量体,
dimer (x1,x2): 二量体,
trimer (x1,x2,x3): 三量体,
tetramer (x1,x2,x3,x4): 四量体。

ここで、x ,x1,x2,x3,x4 は金属錯体である。例えば、書き換えルールを次のように定義する：

tetramer (a,b,c,d)
->
dimer (a,b) & dimer(c,d)
->
tetramer (a,b,c,d)。

そして、弱合流性を導出する。

5. 自己集合型ネットワークを目指す

新世代あるいは次世代ネットワークを着目して、光通信と無線通信の融合[6]は重要なトレンドであるので、ポルフィリンおよび金属錯体ポルフィリンから光信号に対し自律的に反応できるので、センサー・ネットワーク[7]としての応用を期待している。超分子自己集合化の合成による金属表面の上に固定した金属錯体ポルフィリン・アレーがセンサー・アレーとして活用され、金属錯体ポルフィリン集合体から抽出した局域的な情報³を

解析し⁴、超分子自己集合化のメカニズムに基づく自己集合型ネットワークを目指している。

参考文献

[1] Takashi Yokoyama, Shiyoshi Yokoyama, Toshiya Kamikado, Yoshishige Okuno and Shinro Mashiko, Selective assembly on a surface of supramolecular aggregates with controlled size and shape, *Nature*, 413, 2001, 619-621.

[2] Jian-Qin Liu and Katsunori Shimohara, *Biomolecular Computation for Bionanotechnology*, Boston|London: Artech House, 2007.

[3] 井田哲雄・浜名誠, 計算モデル論入門: チューリング機械からラムダ計算へ, 東京: サイエンス社, 2006年。

[4] R. V. Book, F. Otto, *String-Rewriting Systems*, New York: Springer-Verlag, 1993.

[5] M Beaudry, M. Holzer, G. Niemann, F. Otto, *McNaughton families of languages*, *Theoretical Computer Science*, 290 (2003), 1581-1628.

[6] 久利敏明、堀内幸夫、中戸川 剛、塚本勝俊, 光・無線融合技術をベースとする通信・放送システム, 電子情報通信学会論文誌 C, Vol.J91-C, No.1, 2008, pp.11-27.

[7] Holger Karl, Andreas Willig, *Protocols and Architectures for Wireless Sensor Networks*, Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 2007.

biomolecular information processing and moleware control for nanobio-mechatronics, *A Tutorial at 2007 IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics (September 4, 2007, ETH Zürich, Switzerland)*.

⁴ Jian-Qin Liu and Shinro Mashiko, On computational complexity of assembled porphyrin array, AMN-3 Satellite Meeting, Nano- & Bionano-Technology, Quantum Transport & Quantum Functional Semiconductors (NBT-QT 2007), Abstracts, p.68.

² http://en.wikipedia.org/wiki/Confluence_%28term_rewriting%29

³ Jian-Qin Liu and Shinro Mashiko, *Nanobiotechnology for mechatronics*: