

新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」
公募研究「A02：高速ロバストラランダムウォークの設計に基づく物質デザイン」

マルコフ連鎖反応モデルに基づくロバストな反応系デザイン

Reaction System Design Based on Markov Chain Model

小野廣隆

Hiroataka Ono

九州大学大学院経済学研究院

Department of Economic Engineering, Kyushu University, Fukuoka 812-8581

本研究では「コンピューティクスによる物質デザイン」の目標の下、(生)化学反応系に対するマルコフ連鎖モデル(ランダムウォーク型モデル)を提案する。物質生成・加工において、対象となる分子の集合の状態とそれらの結合関係がなす遷移関係は、前者を頂点、後者を辺とした有限グラフとして記述できる。化学反応はマルコフ的(無記憶的)つまり現在分子集合がどの状態にあるかのみ依存し、過去にどの反応経路を経由してその状態に到達したかによらない形で起こる。本研究課題は化学反応をマルコフ連鎖系(ランダムウォーク系)とみなすことにより、物質デザインを化学反応デザイン、マルコフ連鎖デザインの形として捉え、実現を目指すものである。本研究では具体的に2つの反応系のモデル化を試みる。一つは23merのDNA分子が構成する二重鎖の構成モデル、もう一つはペロブスカイト型構造をとるABO₃金属分子の分布推定のための反応モデルである。研究会ではこれまでの研究を踏まえ、提案モデルを利用した「望ましい反応系」をどのように実現するか予備的な取り組みについて発表する。

- [1] Suguru Kawashimo, Yen Kaow Ng, Hiroataka Ono, Kunihiko Sadakane, Masafumi Yamashita: Speeding Up Local-Search Type Algorithms for Designing DNA Sequences under Thermodynamical Constraints. DNA 2008: 168-178 (2008)
- [2] Masashi Shiozaki, Hiroataka Ono, Kunihiko Sadakane, Masafumi Yamashita: A Probabilistic Model of the DNA Conformational Change. DNA 2006: 274-285 (2006)
- [3] 松本広重, プロトン伝導性材料ーペロブスカイト型酸化物プロトン伝導体の応用と問題ー, セラミックス, (2007)