

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4774529号
(P4774529)

(45) 発行日 平成23年9月14日(2011.9.14)

(24) 登録日 平成23年7月8日(2011.7.8)

(51) Int.Cl. F I
G06F 19/00 (2011.01) G06F 19/00 110

請求項の数 2 (全 13 頁)

<p>(21) 出願番号 特願2004-94073 (P2004-94073) (22) 出願日 平成16年3月29日 (2004.3.29) (65) 公開番号 特開2005-284429 (P2005-284429A) (43) 公開日 平成17年10月13日 (2005.10.13) 審査請求日 平成19年1月17日 (2007.1.17)</p> <p>(出願人による申告)平成15年度通信・放送機構、研究テーマ「人間情報コミュニケーションの研究開発」に関する委託研究、産業活力再生特別措置法第30条の適用を受ける特許出願</p>	<p>(73) 特許権者 393031586 株式会社国際電気通信基礎技術研究所 京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2</p> <p>(74) 代理人 100067828 弁理士 小谷 悦司</p> <p>(74) 代理人 100075409 弁理士 植木 久一</p> <p>(74) 代理人 100109438 弁理士 大月 伸介</p> <p>(72) 発明者 邊見 均 京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2 株式会社国際電気通信基礎技術研究所内</p> <p>(72) 発明者 真栄城 哲也 京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2 株式会社国際電気通信基礎技術研究所内 最終頁に続く</p>
--	--

(54) 【発明の名称】 ハードウェアシミュレータ

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

所定のハードウェアから構成され、シミュレーション対象物間の反応によるシミュレーション対象物の変化量をシミュレーションするハードウェアシミュレータであって、

シミュレーション対象物に関する値をカウントする複数の個別カウント回路と、

前記シミュレーション対象物間の反応に応じて、前記個別カウント回路のカウント値を増減させる反応回路と、

前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記反応回路と前記個別カウント回路との接続を切り換える切り換え回路とを備え、

前記複数の個別カウント回路は、

第1のシミュレーション対象物と反応する複数の第2のシミュレーション対象物をグループ分けしたグループごとに設けられ、前記第1のシミュレーション対象物に関する値をグループごとにカウントする複数の分割カウント回路を含み、

前記複数の分割カウント回路に接続され、前記第1のシミュレーション対象物に関する値をカウントし、前記複数の分割カウント回路のカウント値を管理する統合カウント回路をさらに備え、

前記分割カウント回路は、予め設定された上限カウント値及び下限カウント値を有し、

前記統合カウント回路は、前記分割カウント回路のカウント値が上限カウント値に達した場合に当該分割カウント回路のカウント値から所定値を減算するとともに、自身のカウント値に所定数を加算し、前記分割カウント回路のカウント値が下限カウント値に達した

場合に当該分割カウント回路のカウント値に所定値を加算するとともに、自身のカウント値から所定数を減算することを特徴とするハードウェアシミュレータ。

【請求項 2】

前記統合カウント回路は、

前記複数の分割カウント回路をグループ分けしたグループごとに設けられ、各グループに属する複数の分割カウント回路のカウント値を管理する複数の第 1 の統合カウント回路と、

前記複数の第 1 の統合カウント回路のカウント値を管理する第 2 の統合カウント回路とを備えることを特徴とする請求項 1 記載のハードウェアシミュレータ。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、所定のハードウェアから構成され、シミュレーション対象物間の反応によるシミュレーション対象物の変化量をシミュレーションするハードウェアシミュレータに関するものである。

【背景技術】

【0002】

従来の化学反応シミュレーション方法としては、例えば、シミュレーションプログラムを計算機で実行することにより、有限温度及び有限時間を設定し、これら有限温度及び有限時間における分子動力学計算を行い、分子動力学計算により求められた励起状態を含む構造のすべてを用いて物質の全原子に働く力がすべて緩和される安定構造を複数求める処理等を行うものがある（特許文献 1 参照）。

【0003】

一方、上記のような化学反応シミュレーションにおいて多数の物質を容易に取り扱うことができるように、本願発明者は、化学反応シミュレーションを所定のハードウェアを用いて行うことを提案しており、この場合、物質ごとにカウンタが設けられ、このカウンタの値を増減させてシミュレーションが行われる（特許文献 2 参照）。

【特許文献 1】特開 2002 - 260975 号公報

【特許文献 2】特開 2002 - 126497 号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

しかしながら、物質ごとにカウンタを設けたのでは、反応に関係する物質が多数ある場合、物質間のネットワークが複雑となり、当該カウンタへの配線が困難になる。また、カウンタがカウントできる範囲には限りがあり、物質の数がカウント範囲を超えた場合、シミュレーションを中止しなければならない。一方、すべてのカウンタのカウント範囲を単に大きくしたのでは、カウンタのコストが増大する。

【0005】

本発明の目的は、カウント回路に対する配線を容易に行うことができるとともに、カウント回路の狭いカウンタ回路を用いてより広いカウント範囲を実現することができるハードウェアシミュレータを提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明に係るハードウェアシミュレータは、所定のハードウェアから構成され、シミュレーション対象物間の反応によるシミュレーション対象物の変化量をシミュレーションするハードウェアシミュレータであって、シミュレーション対象物に関する値をカウントする複数の個別カウント回路と、前記シミュレーション対象物間の反応に応じて、前記個別カウント回路のカウント値を増減させる反応回路と、前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記反応回路と前記個別カウント回路との接続を切り換える切り換え回路とを備え、前記複数の個別カウント回路は、第 1 のシミュレーション対象物と反応する複数の

10

20

30

40

50

第2のシミュレーション対象物をグループ分けしたグループごとに設けられ、前記第1のシミュレーション対象物に関する値をグループごとにカウントする複数の分割カウント回路を含み、前記複数の分割カウント回路に接続され、前記第1のシミュレーション対象物に関する値をカウントし、前記複数の分割カウント回路のカウント値を管理する統合カウント回路をさらに備え、前記分割カウント回路は、予め設定された上限カウント値及び下限カウント値を有し、前記統合カウント回路は、前記分割カウント回路のカウント値が上限カウント値に達した場合に当該分割カウント回路のカウント値から所定値を減算するとともに、自身のカウント値に所定数を加算し、前記分割カウント回路のカウント値が下限カウント値に達した場合に当該分割カウント回路のカウント値に所定値を加算するとともに、自身のカウント値から所定数を減算する。

10

【0007】

本発明に係るハードウェアシミュレータでは、シミュレーション対象物間の反応に応じてシミュレーション対象物に関する値をカウントする複数の個別カウント回路のカウント値が反応回路によって変更されることにより、シミュレーション対象物間の反応によるシミュレーション対象物の変化量がシミュレーションされる。このとき、第1のシミュレーション対象物と反応する複数の第2のシミュレーション対象物がグループ分けされ、第1のシミュレーション対象物に対して割り当てられる複数の分割カウント回路がグループごとに設けられ、複数の分割カウント回路のカウント値を管理する統合カウント回路が複数の分割カウント回路に接続される。

【0008】

したがって、第1のシミュレーション対象物と反応する第2のシミュレーション対象物が多数ある場合でも、第2のシミュレーション対象物がグループ分けされ、このグループごとに第1のシミュレーション対象物の分割カウント回路が設けられているので、第1のシミュレーション対象物の各分割カウント回路と接続されるべき第2のシミュレーション対象物の個別カウント回路の数を低減することができ、分割カウント回路に対する配線を容易に行うことができる。

20

【0009】

また、分割カウント回路のカウント値を管理する統合カウント回路が設けられているので、分割カウント回路のカウント範囲が狭い場合でも、分割カウント回路のカウント値を補正することにより第1のシミュレーション対象物に対するカウント範囲を広くすることができ、カウント範囲の狭いカウント回路を用いてより広いカウント範囲を実現することができる。また、分割カウント回路をオーバーフローさせることなく動作させることができるので、シミュレーションを中断させることなく、シミュレーションを完了させることができる。

30

【0010】

前記統合カウント回路は、前記複数の分割カウント回路をグループ分けしたグループごとに設けられ、各グループに属する複数の分割カウント回路のカウント値を管理する複数の第1の統合カウント回路と、前記複数の第1の統合カウント回路のカウント値を管理する第2の統合カウント回路とを備えることが好ましい。

【0011】

この場合、統合カウント回路を多段にすることができるので、分割カウント回路のカウント範囲が狭い場合でも、簡略な回路構成でシミュレーション対象物のカウント範囲をより広くすることができる。

40

【発明の効果】**【0014】**

本発明によれば、第1のシミュレーション対象物の各分割カウント回路と接続されるべき第2のシミュレーション対象物の個別カウント回路の数を低減することができるので、分割カウント回路に対する配線を容易に行うことができるとともに、分割カウント回路のカウント範囲が狭い場合でも、第1のシミュレーション対象物に対するカウント範囲を広くすることができるので、カウント範囲の狭いカウント回路を用いてより広いカウント範

50

図を実現することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0015】

以下、本発明によるハードウェアシミュレータの一例として、生化学反応をシミュレーションし、シグナル伝達ネットワーク、遺伝子ネットワーク等の解明に好適に用いられる化学反応シミュレーション装置について図面を参照しながら説明する。

【0016】

図1は、本発明の一実施の形態によるハードウェアシミュレータの構成を示すブロック図である。図1に示すハードウェアシミュレータは、複数の乱数発生器R1～Rn（nは任意の正数）、複数の酵素カウンタK1～Kn、複数の絞り回路V1～Vn、複数の反応実行回路H1～Hn、複数の物質カウンタB1～Bm（mは任意の正数）、接続切り換え回路SW、下位統合カウンタL1、L2及び上位統合カウンタHCを備える。

10

【0017】

酵素カウンタK1～Kn、絞り回路V1～Vn及び反応実行回路H1～Hnは、シミュレーションに使用される生化学反応ごとに設けられ、例えば、物質カウンタB1～B5は、シミュレーションに使用される一の物質に対して設けられ、物質カウンタB6～Bmは、シミュレーションに使用される他の物質ごとに設けられる。このとき、一の物質と反応する複数の物質がグループ分けされ、物質カウンタB1～B5は、このグループごとに設けられる。なお、物質カウンタB1～Bmに対する各物質の割り当て方法は、上記の例に特に限定されず、一の物質を分割して4個以下又は6個以上の物質カウンタに割り当てたり、複数の物質の各々を分割して複数の物質カウンタに割り当てる等の種々の変更が可能である。

20

【0018】

乱数発生器R1は、絞り回路V1の入力側に接続され、反応実行回路H1は、絞り回路V1の出力側に接続され、酵素カウンタK1は、絞り回路V1に接続される。他の乱数発生器、酵素カウンタ、絞り回路及び反応実行回路も上記と同様に接続される。

【0019】

接続切り換え回路SWは、例えば、空間スイッチ等から構成され、複数の増加指令用の入力配線I1～In及び減少指令用の入力配線D1～Dnと、複数の増加指令用の出力配線i1～im及び減少指令用の出力配線d1～dmを含み、各配線がマトリックス状に配置されている。

30

【0020】

反応実行回路H1は、接続切り換え回路SWの増加指令用の入力配線I1及び減少指令用の入力配線D1に接続され、他の反応実行回路も同様に接続される。物質カウンタB1は、接続切り換え回路SWの増加指令用の出力配線i1及び減少指令用の出力配線d1に接続され、他の物質カウンタも同様に接続される。また、接続切り換え回路SWにおいて図中に黒丸で示す各配線の交点NDには、時分割ゲート及び時分割ゲートのオン/オフを制御する保持メモリ等から構成されるスイッチ（図示省略）が配置されている。

【0021】

接続切り換え回路SWは、各スイッチをオン/オフすることにより、増加指令用の入力配線I1～Inと増加指令用の出力配線i1～imとの接続状態及び減少指令用の入力配線D1～Dnと減少指令用の出力配線d1～dmとの接続状態を制御し、各反応実行回路H1～Hnが表す生化学反応の反応前の物質を表す物質カウンタ及び反応後の物質を表す物質カウンタと対応する反応実行回路とを接続する。なお、接続切り換え回路SWは、上記の空間スイッチに特に限定されず、反応実行回路と物質カウンタとの接続状態を切り換えることができるものであれば、他の接続切り換え回路を用いてもよいし、また、接続切り換え回路を用いることなく、反応実行回路と物質カウンタとを配線により直接接続するようにしてもよい。

40

【0022】

物質カウンタB1～Bm、下位統合カウンタL1、L2及び上位統合カウンタHCは、

50

例えば、バイナリカウンタ等から構成され、下位統合カウンタL 1は、物質カウンタB 1 ~ B 3に接続され、下位統合カウンタL 2は、物質カウンタB 4, B 5に接続され、上位統合カウンタH Cは、下位統合カウンタL 1, L 2に接続される。

【0023】

例えば、物質カウンタB 1 ~ B 5、下位統合カウンタL 1, L 2及び上位統合カウンタH Cは、反応前又は反応後の一の物質の数、すなわち分子数又は原子数のうち所定数をそれぞれ初期カウント値として設定され、物質カウンタB 6 ~ B mは、反応前又は反応後の他の物質の数、すなわち分子数又は原子数を初期カウント値としてそれぞれ設定される。物質カウンタB 1 ~ B mは、反応実行回路H 1 ~ H nの減少指令及び増加指令に応じて、そのカウント値を減少及び増加させる。

10

【0024】

なお、物質カウンタは、上記のバイナリカウンタに特に限定されず、他のカウンタ等を用いてもよい。例えば、代謝経路におけるクエン酸回路のような生化学反応を状態遷移と捉え、状態遷移機械(有限状態オートマトン)を組み合わせて使用する場合、物質カウンタとしてジョンソンカウンタを用いることにより、コンパクトな回路により高速にシミュレーションすることができる。

【0025】

乱数発生器R 1は、生化学反応の反応速度を制御するための所定の乱数を、絞り回路V 1を介して反応実行回路H 1に出力する。乱数発生器としては、擬似乱数を発生させる擬似乱数発生回路、カオス的な乱数を発生させるカオス発生回路、熱雑音に基づく乱数を発生させる熱雑音発生回路等を用いることができる。

20

【0026】

例えば、擬似乱数発生回路としては、線形フィードバックシフトレジスタを用いることによって、線形フィードバックシフトレジスタがL個のレジスタから構成されると、 $2^L - 1$ の長周期を有するが、ほぼランダムな乱数を発生させることができる。カオス発生回路としては、コンデンサと可変抵抗回路とで構成される閉ループにより不規則な信号を発生させる回路等を用いることによって、カオス的な振る舞いを行う不規則な乱数を発生させることができる。熱雑音発生回路としては、短周期のパルスで長周期のパルスによりラッチし、ラッチされた短周期のパルスのレベルを乱数として出力する回路等を用いることによって、ホワイトノイズによる周期性のない乱数を発生させることができる。

30

【0027】

酵素カウンタK 1は、反応実行回路H 1が表す生化学反応に使用される酵素物質の数、すなわち酵素物質の分子数をそのカウント値として設定され、設定されたカウント値に応じて絞り回路V 1の絞り量が調整される。なお、一般の化学反応の場合は、酵素カウンタが触媒カウンタに変更され、生細胞内で作られる蛋白性の生体触媒である酵素の代わりに、触媒物質の数がそのカウント値として設定される。また、触媒(酵素)を使用しない化学反応の場合、触媒(酵素)カウンタ及び絞り回路は不要となる。

【0028】

具体的には、乱数発生器R 1が乱数として“1”又は“0”のデータをランダムに発生し、酵素カウンタK 1がそのカウント値に応じて“0”に対する“1”の頻度を調整して“1”又は“0”のデータを出力する。このとき、絞り回路V 1は両データの論理積を取り、その結果を反応実行回路H 1へ出力する。したがって、酵素カウンタK 1のカウント値に応じて反応実行回路H 1へ入力される“1”の頻度が調整される。

40

【0029】

反応実行回路H 1は、データとして“1”が入力された場合、反応を実行させるため、増加指令用の入力配線I 1にカウント値を1だけ増加させるための増加指令を出力するとともに、減少指令用の入力配線D 1にカウント値を1だけ減少させるための減少指令を出力する。一方、反応実行回路H 1は、データとして“0”が入力された場合、反応を行わないようにするため(不実行の状態)、増加指令及び減少指令を出力しない。

【0030】

50

このとき、接続切り換え回路SWは、減少指令用の入力配線D1と、反応実行回路H1が表す生化学反応における反応前の物質の数、すなわち分子数又は原子数を表す物質カウンタに接続されている減少指令用の出力配線とを接続している。したがって、反応実行回路H1から出力される減少指令が反応前の物質に対して設けられた物質カウンタへ入力され、当該物質カウンタが自身のカウント値を1だけ減少させる。また、接続切り換え回路SWは、増加指令用の入力配線I1と、反応実行回路H1が表す生化学反応における反応後の物質の数、すなわち分子数又は原子数を表す物質カウンタに接続されている増加指令用の出力配線とを接続している。したがって、反応実行回路H1から出力される増加指令が反応後の物質に対して設けられた物質カウンタへ入力され、当該物質カウンタが自身のカウント値を1だけ増加させる。

10

【0031】

他の乱数発生器、酵素カウンタ、絞り回路及び反応実行回路も、上記と同様に構成され、生化学反応に応じて上記と同様に動作する。なお、酵素カウンタに割り当てられる酵素の数が生化学反応等により増減する場合は、酵素カウンタも物質カウンタと同様に構成されて接続切り換え回路に接続され、対応する反応実行回路によりそのカウント値が増減される。

【0032】

また、物質カウンタB1～B3は、上限カウント値及び下限カウント値を有し、自身のカウント値が上限カウント値に達した場合、上限到達信号を下位統合カウンタL1へ出力し、自身のカウント値が下限カウント値に達した場合、下限到達信号を下位統合カウンタL1へ出力する。物質カウンタB4，B5は、上限カウント値及び下限カウント値を有し、自身のカウント値が上限カウント値に達した場合、上限到達信号を下位統合カウンタL2へ出力し、自身のカウント値が下限カウント値に達した場合、下限到達信号を下位統合カウンタL2へ出力する。

20

【0033】

下位統合カウンタL1は、物質カウンタB1～B3から上限到達信号を受けたとき、当該物質カウンタのカウント値から所定値を減算することを指示する減算指令信号を出力するとともに、自身のカウント値に所定数を加算する。減算指令信号を受けた物質カウンタは、自身のカウント値から所定値を減算する。下位統合カウンタL1は、物質カウンタB1～B3から下限到達信号を受けたときも、当該物質カウンタのカウント値に所定数を加算することを指示する加算指令信号を出力するとともに、自身のカウント値から所定数を減算する。加算指令信号を受けた物質カウンタは、自身のカウント値に所定値を加算する。下位統合カウンタL2及び物質カウンタB4，B5も、下位統合カウンタL1及び物質カウンタB1～B3と同様に動作する。

30

【0034】

下位統合カウンタL1，L2は、上限カウント値及び下限カウント値を有し、自身のカウント値が上限カウント値に達した場合、上限到達信号を上位統合カウンタHCへ出力し、自身のカウント値が下限カウント値に達した場合、下限到達信号を上位統合カウンタHCへ出力する。上位統合カウンタHCは、下位統合カウンタL1，L2から上限到達信号を受けたとき、当該下位統合カウンタのカウント値から所定値を減算することを指示する減算指令信号を出力するとともに、自身のカウント値に所定数を加算する。減算指令信号を受けた下位統合カウンタは、自身のカウント値から所定値を減算する。上位統合カウンタHCは、下位統合カウンタL1，L2から下限到達信号を受けたとき、当該下位統合カウンタのカウント値に所定値を加算することを指示する加算指令信号を出力するとともに、自身のカウント値から所定数を減算する。加算指令信号を受けた下位統合カウンタは、自身のカウント値に所定値を加算する。

40

【0035】

例えば、物質カウンタB1～B5、下位統合カウンタL1，L2及び上位統合カウンタHCがkビットカウンタ(kは任意の正数)から構成され、物質カウンタB1～B5の最上位ビットを下位統合カウンタL1，L2の最下位ビットに対応させ、下位統合カウンタ

50

L 1 , L 2 の最上位ビットを上位統合カウンタ H C の最下位ビットに対応させた場合、物質カウンタ B 1 ~ B 5、下位統合カウンタ L 1 , L 2 及び上位統合カウンタ H C による縫合的なカウント範囲は、 2^{3k-2} となる。なお、統合カウンタの段数は、上記の例に特に限定されず、1 段の統合カウンタのみを設けたり、3 段以上の統合カウンタを設けたりしてもよい。また、統合カウンタが管理する物質カウンタの数も上記の例に特に限定されず、4 個以上の物質カウンタを管理する等の変更が可能である。

【 0 0 3 6 】

本実施の形態において、物質カウンタ B 1 ~ B m が個別カウント回路の一例に相当し、反応実行回路 H 1 ~ H n、乱数発生器 R 1 ~ R n、酵素カウンタ K 1 ~ K n、絞り回路 V 1 ~ V n 及び接続切り換え回路 S W が反応回路の一例に相当し、物質カウンタ B 1 ~ B 5 が分割カウント回路の一例に相当し、下位統合カウンタ L 1 , L 2 及び上位統合カウンタ H C が統合カウント回路の一例に相当し、下位統合カウンタ L 1 , L 2 が第 1 の統合カウント回路の一例に相当し、上位統合カウンタ H C が第 2 の統合カウント回路の一例に相当する。

10

【 0 0 3 7 】

次に、上記のように構成されたハードウェアシミュレータの動作について説明する。まず、シミュレーションの対象となる物質、生化学反応及び酵素等に関する必要なデータを用いて、物質カウンタ B 1 ~ B 5、下位統合カウンタ L 1 , L 2 及び上位統合カウンタ H C にこれらの初期値の合計が一の物質の数を表すように分配して設定され、物質カウンタ B 7 ~ B m に各物質の数を表すカウンタの初期値が設定されるとともに、酵素カウンタ K 1 ~ K n に各酵素の数を表すカウンタの初期値が設定される。次に、乱数発生器 R 1 ~ R n は上記の乱数を発生させ、絞り回路 V 1 ~ V n は、酵素カウンタ K 1 ~ K n の酵素の数に応じて乱数を補正する。反応実行回路 H 1 ~ H n は、酵素数により補正された乱数の値に応じて反応が実行されるように、反応前の物質の分子数又は原子数を表す物質カウンタ B 1 ~ B m のカウント値を 1 だけ減少させるとともに、反応後の物質の分子数又は原子数を表す物質カウンタ B 1 ~ B m のカウント値を 1 だけ増加させる。

20

【 0 0 3 8 】

このようにして、各反応実行回路 H 1 ~ H n が表す生化学反応の反応速度が反応実行回路 H 1 ~ H n ごとに調整され、各反応実行回路 H 1 ~ H n が表す生化学反応の反応前後の物質に対応する物質カウンタ B 1 ~ B m が対応する反応実行回路 H 1 ~ H n に接続されるとともに、各反応実行回路 H 1 ~ H n が表す生化学反応に応じて反応前後の物質に対応する物質カウンタ B 1 ~ B m のカウント値が減少又は増加され、複数の生化学反応が並列的にシミュレーションされる。

30

【 0 0 3 9 】

このように、反応前後の各物質の量をカウント値、すなわち数（整数）として捉え、生化学反応による物質の変化量をシミュレーションしているため、物質カウンタ B 1 ~ B m の数を増加するだけでシミュレーションに使用する物質の種類を増加させることができる。また、未知の生化学反応が新たにわかった場合、病体等によりある生化学反応が欠損している場合及び野生種のために生化学反応が通常と異なる場合でも、新たな生化学反応、欠損した生化学反応及び通常と異なる生化学反応に応じて接続切り換え回路 S W により反応実行回路 H 1 ~ H n と物質カウンタ B 1 ~ B m との接続状態を変更等することにより容易に対処することができる。

40

【 0 0 4 0 】

ここで、物質カウンタ B 1 ~ B 5 は、一の物質に対して設けられるとともに、当該一の物質と反応する複数の物質が 5 グループに分割され、物質カウンタ B 1 ~ B 3 は、3 個のグループに対して各々設けられており、以下、物質カウンタ B 1 ~ B 3 を例に物質カウンタの分割方法を説明する。

【 0 0 4 1 】

図 2 は、物質カウンタの分割方法を説明するための模式図である。例えば、物質カウンタ B 0 に割り当てられる物質 b 0 が、7 個の物質 x 1 ~ x 7、3 個の物質 y 1 ~ y 3 及び

50

5 個の物質 $z_1 \sim z_5$ の 15 個の物質と反応する場合、7 個の物質 $x_1 \sim x_7$ 、3 個の物質 $y_1 \sim y_3$ 及び 5 個の物質 $z_1 \sim z_5$ を割り当てられている物質カウンタ $X_1 \sim X_7$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Z_1 \sim Z_5$ と物質カウンタ B_0 との関係は、図 2 の (a) に示すようなネットワークにより表現される。なお、図中の矢印の方向は反応方向を示しており、反応に応じて矢印の始点側の物質カウンタの値が減少し、矢印の終点側の物質カウンタの値が増加する。この場合、物質カウンタ B_0 は、15 個の物質カウンタ $X_1 \sim X_7$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Z_1 \sim Z_5$ との配線が必要となる。

【0042】

一方、図 2 の (b) に示す例では、7 個の物質 $x_1 \sim x_7$ 、3 個の物質 $y_1 \sim y_3$ 及び 5 個の物質 $z_1 \sim z_5$ を 7 個の物質 $x_1 \sim x_7$ のグループ、3 個の物質 $y_1 \sim y_3$ のグループ及び 5 個の物質 $z_1 \sim z_5$ のグループからなる 3 グループにグループ分けし、各グループに対して物質 b_0 の物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ が設けられ、3 個の物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ を統合する統合カウンタ L_1 が設けられている。この場合、物質カウンタ B_1 は、7 個の物質カウンタ $X_1 \sim X_7$ と接続され、物質カウンタ B_2 は、3 個の物質カウンタ $Y_1 \sim Y_3$ と接続され、物質カウンタ B_3 は、5 個の物質カウンタ $Z_1 \sim Z_5$ と接続され、物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ と他の物質カウンタとの最大接続数は 7 個となり、一の物質カウンタに対する配線数を削減することができる。

10

【0043】

また、上記のシミュレーション中に、物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ は、自身のカウント値が上限カウント値又は下限カウント値に達した場合、上限到達信号又は下限到達信号を下位統合カウンタ L_1 、 L_2 へ出力する。このとき、下位統合カウンタ L_1 、 L_2 は、自身のカウント値に対して所定数を加算又は減算した後、減算指令信号又は加算指令信号を返信する。減算指令信号又は加算指令信号を受けた物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ は、自身のカウント値に対して所定値を減算又は加算する。下位統合カウンタ L_1 、 L_2 及び上位統合カウンタ H_C も、上記と同様に動作する。

20

【0044】

図 2 の (b) に示す例において、例えば、物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ 及び統合カウンタ L_1 が 6 ビットカウンタから構成され、物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ の最上位ビットを統合カウンタ L_1 の最下位ビットに対応させ、初期値として、統合カウンタ L_1 に“0”、物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ に“32”がそれぞれ設定されている場合、シミュレーション中に物質カウンタ B_1 のカウント値が“63”になると、物質カウンタ B_1 は、上限到達信号を統合カウンタ L_1 へ出力し、統合カウンタ L_1 は最下位ビットをセットしてカウント値を“32”に設定し、減算指令信号を返信する。減算指令信号を受けた物質カウンタ B_1 は、最上位ビットをクリアしてカウント値を“31”に設定する。その後、物質カウンタ B_2 のカウント値が“0”になると、物質カウンタ B_2 は、下限到達信号を統合カウンタ L_1 へ出力し、統合カウンタ L_1 は最下位ビットをクリアしてカウント値を“0”に設定し、加算指令信号を返信する。加算指令信号を受けた物質カウンタ B_2 は、最上位ビットをセットしてカウント値を“32”に設定する。この場合、物質カウンタ $B_1 \sim B_3$ のカウント範囲は 0 ~ 63 となるが、統合カウンタ L_1 を含めた総合カウント範囲は、0 ~ 2047 となり、カウント範囲を大幅に拡大することができる。

30

40

【0045】

上記のように、本実施の形態では、一の物質と反応する他の物質が多数ある場合でも、他の物質がグループ分けされ、このグループごとに一の物質の物質カウンタ回路 $B_1 \sim B_5$ が設けられているので、各物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ に接続されるべき物質カウンタの数を低減することができ、物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ に対する配線を容易に行うことができる。また、物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ のカウント値を管理する下位統合カウンタ L_1 、 L_2 及び下位統合カウンタ L_1 、 L_2 を管理する上位統合カウンタ H_C が設けられているので、物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ のカウント範囲が狭い場合でも、一の物質に対するカウント範囲を大幅に拡大することができ、カウント範囲の狭いカウント回路を用いて簡略な回路構成で非常に広いカウント範囲を実現することができる。さらに、物質カウンタ $B_1 \sim B_5$ が

50

上限カウント値又は下限カウント値に達した場合でも、物質カウンタ B 1 ~ B 5 のカウント値をカウント可能な値に修正することができるので、物質カウンタ B 1 ~ B 5 をオーバーフローさせることなく動作させることができ、シミュレーションを中断することなく、シミュレーションを完了させることができる。

【 0 0 4 6 】

次に、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする場合について説明する。図 3 は、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための模式図である。

【 0 0 4 7 】

図 3 に示すように、細胞内の生化学反応をシミュレーションする場合、一つの細胞を複数のセル C E に空間分割し、セル C E ごとに物質の量を保持させ、セルオートマトンにより各物質の濃度勾配をシミュレーションする。すなわち、対象とするセル内の各物質の濃度（量）と近傍の 6 個のセル内の物質の濃度（量）とからセル間での各物質の拡散をシミュレーションする。

【 0 0 4 8 】

例えば、隣接する 2 つのセル C 1 , C 2 に、濃度の異なる物質 1、物質 2 及び物質 3 がそれぞれ含まれている場合、セル C 1 , C 2 間では、濃度の高い方から低い方へ各物質が拡散し、このセル間での拡散を以下のようにしてシミュレーションすることができる。

【 0 0 4 9 】

図 4 は、図 3 に示す 2 つのセルにおける物質の拡散をシミュレーションする場合のハードウェアシミュレータの構成を示すブロック図である。図 4 に示すハードウェアシミュレータは、セル C 1 用のハードウェアシミュレータ C B 1、セル C 2 用のハードウェアシミュレータ C B 2 及び拡散回路 K C を備える。

【 0 0 5 0 】

図 4 に示すハードウェアシミュレータ C B 1 内の物質カウンタ B 1 a ~ B 1 c 及び統合カウンタ I C のカウント値の合計値は、セル C 1 内の物質 1 の分子数又は原子数を表し、物質カウンタ B 2 , B 3 の各カウント値は、セル C 1 内の物質 2 , 3 の分子数又は原子数を表し、ハードウェアシミュレータ C B 2 内の物質カウンタ B 1 a ' ~ B 1 c ' 及び統合カウンタ I C ' のカウント値の合計値は、セル C 2 内の物質 1 の分子数又は原子数を表し、物質カウンタ B 2 ' , B 3 ' の各カウント値は、セル C 2 内の物質 2 , 3 の分子数又は原子数を表し、各物質カウンタ B 1 a ~ B 3 , B 1 a ' ~ B 3 ' は、拡散回路 K C を介して接続されている。なお、図 4 に示す例では、統合カウンタを 1 段のみ用いている。

【 0 0 5 1 】

拡散回路 K C は、統合カウンタ I C , I C ' 及び物質カウンタ B 1 a ~ B 3 , B 1 a ' ~ B 3 ' のカウント値、すなわち各物質の分子数又は原子数に応じて各物質が拡散するように、物質カウンタ B 1 a ~ B 3 , B 1 a ' ~ B 3 ' のカウント値を制御する。例えば、物質カウンタ B 1 a ~ B 1 c 及び統合カウンタ I C のカウント値の合計値が物質カウンタ B 1 a ' ~ B 1 c ' 及び統合カウンタ I C ' のカウント値の合計値より大きい場合、平衡状態になるまで、所定の拡散速度に従い、物質カウンタ B 1 a ~ B 3 のカウント値を順次減少させるとともに、これに対応させて物質カウンタ B 1 a ' ~ B 3 ' のカウント値を順次増加させる。

【 0 0 5 2 】

なお、図 4 では、セル C 1 , C 2 用のハードウェアシミュレータ C B 1 , C B 2 において統合カウンタ I C , I C ' 及び物質カウンタ B 1 a ~ B 3 , B 1 a ' ~ B 3 ' のみを図示しているが、各ハードウェアシミュレータ C B 1 , C B 2 も、図 1 に示すハードウェアシミュレータと同様に構成され、乱数発生器、酵素カウンタ、絞り回路、反応実行回路及び接続切り換え回路（図示省略）を有している。したがって、ハードウェアシミュレータ C B 1 , C B 2 も、図 1 に示すハードウェアシミュレータと同様に動作し、各セル C 1 , C 2 ごとに内部の生化学反応がシミュレーションされ、物質カウンタ B 1 a ~ B 1 c , B 1 a ' ~ B 1 c ' は、自身のカウント値が上限カウント値又は下限カウント値に達した場

10

20

30

40

50

合、上限到達信号又は下限到達信号を統合カウンタ IC , IC' へ出力し、統合カウンタ IC , IC' は、自身のカウント値に対して所定数を加算又は減算した後、減算指令信号又は加算指令信号を返信し、物質カウンタ $B1a \sim B1c$, $B1a' \sim B1c'$ は、自身のカウント値に対して所定値を減算又は加算する。

【0053】

上記のように、細胞を複数のセルに分割し、セルごとに生化学反応による物質の変化量をシミュレーションするとともに、隣接するセル間での各物質の拡散をシミュレーションすることにより、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の物質の変化量をシミュレーションすることができる。同時に、物質カウンタ $B1a \sim B1c$, $B1a' \sim B1c'$ をオーバーフローさせることなく動作させることができ、シミュレーションを中断することなく、シミュレーションを完了させることができる。また、物質カウンタ $B1a \sim B3$, $B1a' \sim B3'$ に対する配線を容易に行うことができるとともに、カウント範囲の狭い物質カウンタ $B1a \sim B3$, $B1a' \sim B3'$ を用いて簡略な回路構成で広いカウント範囲を実現することができる。

10

【0054】

次に、多細胞の生化学反応をシミュレーションする場合について説明する。図5は、多細胞の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための概略図である。図5に示すように、図3と同様に各細胞を複数のセル CE (図中のハッチングのないセル) に分割するとともに、細胞間に存在する細胞壁を複数の細胞壁セル WC (図中のハッチングを施したセル) に分割する。この場合、各細胞内では、図3及び図4を用いて説明した細胞内のシミュレーションと同様に生化学反応がシミュレーションされる。

20

【0055】

また、細胞壁を表す細胞壁セル WC の部分は、例えば、拡散が起こらない、すなわち細胞間で物質が拡散しないものとしてシミュレーションを行ってもよく、また、細胞壁でもある程度の拡散が行われるとして、細胞内の細胞セルと同様に拡散回路を用いて拡散をシミュレーションしてもよい。

【0056】

上記のように、各細胞を複数のセルに分割するとともに、細胞壁を複数の細胞壁セルに分割し、セルごとに生化学反応による物質の変化量をシミュレーションしながら、細胞内で隣接するセル間の各物質の拡散等をシミュレーションすることにより、多細胞についても、その生化学反応を同様にシミュレーションできる。同時に、物質カウンタをオーバーフローさせることなく動作させることができ、シミュレーションを中断することなく、シミュレーションを完了させることができる。また、物質カウンタに対する配線を容易に行うことができるとともに、カウント範囲の狭いカウント回路を用いて簡略な回路構成で広いカウント範囲を実現することができる。

30

【0057】

なお、本発明が適用可能なハードウェアシミュレータは、上記の例に特に限定されず、所定のハードウェアから構成され、シミュレーション対象物間の反応によるシミュレーション対象物の変化量をシミュレーションするハードウェアシミュレータであれば、種々の分野に適用可能である。例えば、脳細胞及び神経回路網等の生物シミュレーション、遺伝子進化及び生物の個体進化シミュレーション、渡り鳥の移動等に関する生態系シミュレーション、移動物に関する交通システムシミュレーション、避難シミュレーション、数値流体シミュレーション、気象シミュレーション、ロジスティクスシミュレーション、電力供給シミュレーション、都市計画等に関する都市シミュレーション、企業間取引及び株式・先物取引等に関する経済システムシミュレーション、経営シミュレーション、電気回路及び集積回路等の電磁シミュレーション、半導体及び材料の電子レベルシミュレーションに適用することができる。

40

【図面の簡単な説明】

【0058】

【図1】本発明の一実施の形態によるハードウェアシミュレータの構成を示すブロック図

50

である。

【図2】物質カウンタの分割方法を説明するための模式図である。

【図3】細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための模式図である。

【図4】図3に示す2つのセルにおける物質の拡散をシミュレーションする場合のハードウェアシミュレータの構成を示すブロック図である。

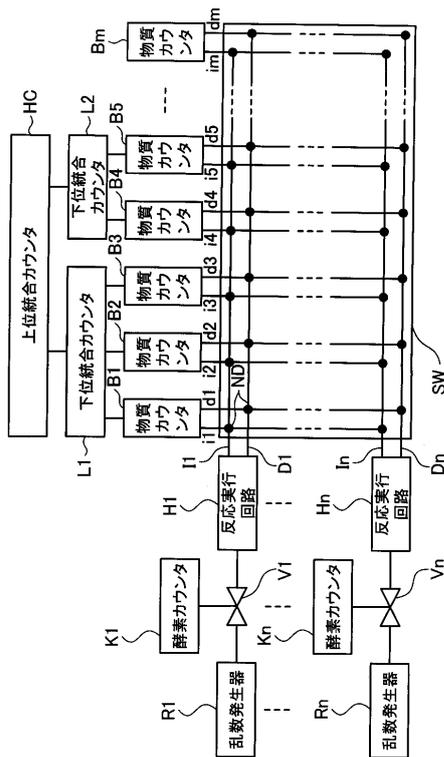
【図5】多細胞の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための概略図である。

【符号の説明】

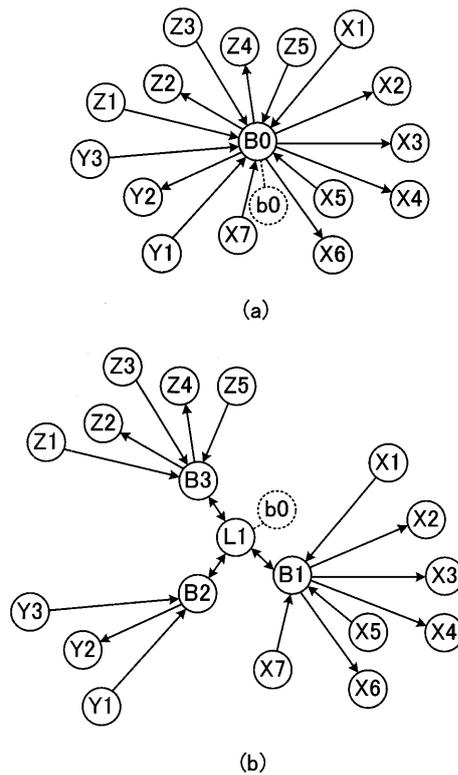
【0059】

- R 1 ~ R n 乱数発生器
- K 1 ~ K n 酵素カウンタ
- V 1 ~ V n 絞り回路
- H 1 ~ H n 反応実行回路
- B 1 ~ B m 物質カウンタ
- S W 接続切り換え回路
- L 1 , L 2 下位統合カウンタ
- H C 上位統合カウンタ

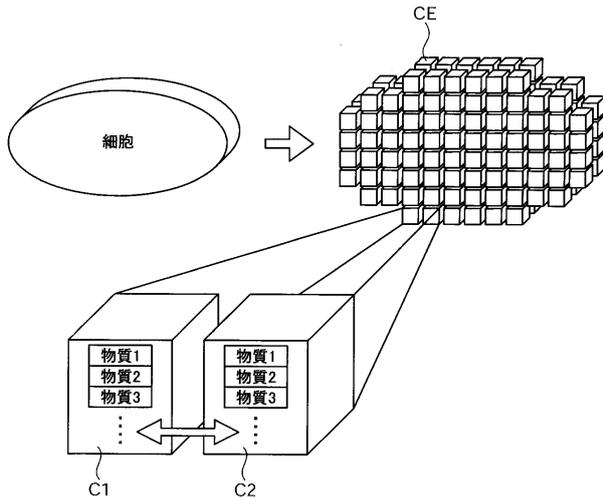
【図1】



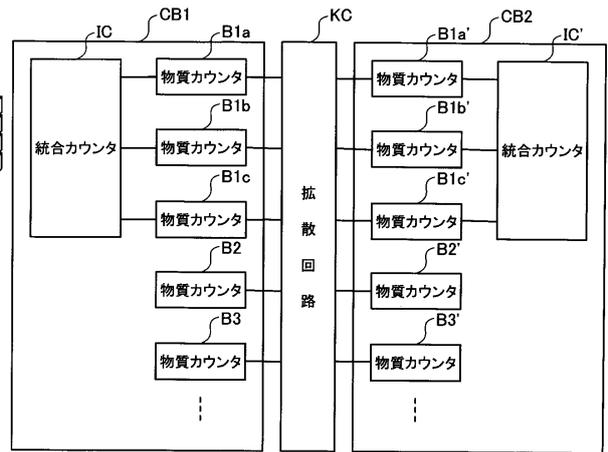
【図2】



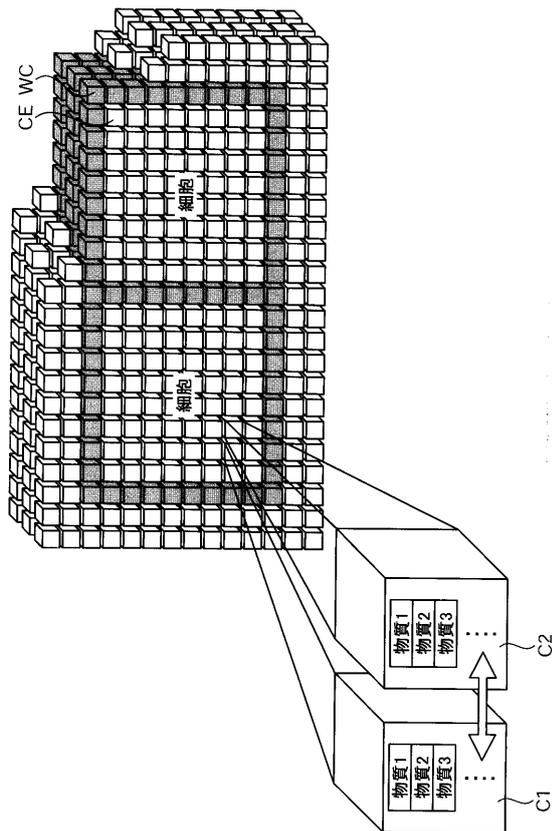
【図3】



【図4】



【図5】



フロントページの続き

(72)発明者 下原 勝憲

京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2 株式会社国際電気通信基礎技術研究所内

審査官 神田 和輝

(56)参考文献 特開2002-126497(JP,A)

特開2003-180400(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G06F 19/00

B01J 19/00