

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号
特許第4761287号
(P4761287)

(45) 発行日 平成23年8月31日(2011.8.31)

(24) 登録日 平成23年6月17日(2011.6.17)

(51) Int.Cl.

F I

G O 6 F 19/00 (2011.01)

G O 6 F 19/00 1 1 O

B O 1 J 19/00 (2006.01)

B O 1 J 19/00 3 2 1

C O 7 B 61/00 (2006.01)

C O 7 B 61/00 Z

請求項の数 3 (全 14 頁)

(21) 出願番号	特願2004-94074 (P2004-94074)	(73) 特許権者	393031586
(22) 出願日	平成16年3月29日 (2004.3.29)		株式会社国際電気通信基礎技術研究所
(65) 公開番号	特開2005-279353 (P2005-279353A)		京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2
(43) 公開日	平成17年10月13日 (2005.10.13)	(74) 代理人	100067828
審査請求日	平成19年1月17日 (2007.1.17)		弁理士 小谷 悦司
(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		(74) 代理人	100075409
			弁理士 植木 久一
		(74) 代理人	100109438
			弁理士 大月 伸介
		(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
		(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

(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演算する複数の演算素子と、

前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記演算素子の値を変化させる反応回路と、

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演算素子との接続を切り換える切り換え回路と、

前記演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、前記停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて前記演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させる修正手段とを備え、

前記演算素子は、第1のシミュレーション対象物に対して割り当てられ且つ前記第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カウントする複数のカウント回路を含み、

前記複数のカウント回路は、反応の進行において総カウント数が一定に保たれるようにカウント値が設定された反応系に用いられ、

前記反応回路は、原料物質から生成物質を生成する反応の進行状態に応じて、反応前の原料物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を減少さ

10

20

せるとともに、反応後の生成物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を増加させ、

前記カウント回路は、予め設定された上限カウント値を有し、

前記修正手段は、前記停止条件として前記複数のカウント回路のうちのカウント回路のカウント値が上限カウント値となったか否かを判定し、前記一のカウント回路のカウント値が上限カウント値となったと判定した場合、装置の動作を停止させ、前記一のカウント回路のカウント値が上限カウント値より小さいカウント値になるように前記一のカウント回路のカウント値を減少させるとともに、前記一のカウント回路のカウント値と前記一のカウント回路以外の他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように前記他のカウント回路のカウント値を増加させた後、装置の動作を再開させる修正回路を含むことを特徴とするハードウェアシミュレータ。

10

【請求項 2】

所定のハードウェアから構成され、反応物質である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演算する複数の演算素子と、

前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記演算素子の値を変化させる反応回路と、

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演算素子との接続を切り換える切り換え回路と、

20

前記演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、前記停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて前記演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させる修正手段とを備え、

前記演算素子は、第 1 のシミュレーション対象物に対して割り当てられ且つ前記第 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カウントする複数のカウント回路を含み、

前記複数のカウント回路は、反応の進行において総カウント数が一定に保たれるようにカウント値が設定された反応系に用いられ、

前記反応回路は、原料物質から生成物質を生成する反応の進行状態に応じて、反応前の原料物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を減少させるとともに、反応後の生成物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を増加させ、

30

前記カウント回路は、予め設定された下限カウント値を有し、

前記修正手段は、前記停止条件として前記複数のカウント回路のうちのカウント回路のカウント値が下限カウント値となったか否かを判定し、前記一のカウント回路のカウント値が下限カウント値となったと判定した場合、装置の動作を停止させ、前記一のカウント回路のカウント値が下限カウント値より大きいカウント値になるように前記一のカウント回路のカウント値を増加させるとともに、前記一のカウント回路のカウント値と前記一のカウント回路以外の他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように前記他のカウント回路のカウント値を減少させた後、装置の動作を再開させる修正回路を含むことを特徴とするハードウェアシミュレータ。

40

【請求項 3】

前記修正手段は、ホストコンピュータから構成されることを特徴とする請求項 1 又は 2 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

50

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、化学反応ごとに反応実行回路が設けられ、この反応実行回路により各物質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、すべての事象に対処可能なように各回路を構成したのでは、回路構成が複雑になりすぎるとともに、シミュレーション時間も増加する。特に、稀にしか発生しない事象に対処可能なように各回路を構成した場合、上記の傾向が顕著になり、装置コストが莫大なものとなる。また、稀にしか発生しない事象に対して人手で対処していたのでは、シミュレーションが長時間中断され、シミュレーション時間がさらに増加する。

【0005】

本発明の目的は、回路構成を複雑化することなく、稀にしか発生しないような事象にも自動的に対処することができるようにシミュレーションデータを修正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演算する複数の演算素子と、前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記演算素子の値を変化させる反応回路と、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演算素子との接続を切り換える切り換え回路と、前記演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、前記停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて前記演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させる修正手段とを備え、前記演算素子は、第1のシミュレーション対象物に対して割り当てられ且つ前記第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カウントする複数のカウント回路を含み、前記複数のカウント回路は、反応の進行において総カウント数が一定に保たれるようにカウント値が設定された反応系に用いられ、前記反応回路は、原料物質から生成物質を生成する反応の進行状態に応じて、反応前の原料物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を減少させるとともに、反応後の生成物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を増加させ、前記カウント回路は、予め設定された上限カウント値を有し、前記修正手段は、前記停止条件として前記複数のカウント回路のうちのひとつのカウント回路のカウント値が上限カウント値となったか否かを判定し、前記ひとつのカウント回路のカウント値が上限カウント値となったと判定した場合、装置の動作を停止させ、前記ひとつのカウント回路のカウン

10

20

30

40

50

ト値が上限カウント値より小さいカウント値になるように前記一のカウント回路のカウント値を減少させるとともに、前記一のカウント回路のカウント値と前記一のカウント回路以外の他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように前記他のカウント回路のカウント値を増加させた後、装置の動作を再開させる修正回路を含む。

【 0 0 0 7 】

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演算する複数の演算素子の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、演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させているので、稀にしか発生しないような事象を停止条件として検出し、この事象の結果生じる演算素子の値をシミュレーション可能な値に変更することができ、回路構成を複雑化することなく、稀にしか発生しないような事象にも自動的に対処することができるようにシミュレーションデータを修正することができる。

10

【 0 0 0 9 】

この場合、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カウント回路が個別に設けられているので、第1のシミュレーション対象物のカウント回路に接続されるべき第2のシミュレーション対象物のカウント回路の数を低減することができ、カウント回路の配線を容易にすることができる。

20

【 0 0 1 1 】

この場合、修正回路により、複数のカウント回路のうちのカウント回路のカウント値が上限カウント値となった場合、装置の動作を停止させ、一のカウント回路のカウント値が上限カウント値より小さいカウント値になるように一のカウント回路のカウント値を減少させるとともに、一のカウント回路のカウント値と他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように他のカウント回路のカウント値を増加させた後、装置の動作を再開させているので、カウント回路のカウント値が上限カウント値となった場合でも、カウント回路のカウント値をシミュレーション可能な値に自動的に変更することができる。

30

【 0 0 1 2 】

本発明に係る他の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、反応物質である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演算する複数の演算素子と、前記シミュレーション対象物間の反応に応じて前記演算素子の値を変化させる反応回路と、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演算素子との接続を切り換える切り換え回路と、前記演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、前記停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて前記演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させる修正手段とを備え、前記演算素子は、第1のシミュレーション対象物に対して割り当てられ且つ前記第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カウントする複数のカウント回路を含み、前記複数のカウント回路は、反応の進行において総カウント数が一定に保たれるようにカウント値が設定された反応系に用いられ、前記反応回路は、原料物質から生成物質を生成する反応の進行状態に応じて、反応前の原料物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を減少させるとともに、反応後の生成物質である各シミュレーション対象物の量を表すカウント回路のカウント値を増加させ、前記カウント回路は、予め設定された下限カウント値を有し、前記修正手段は、前記停止条件として前記複数のカウント回路のうちのカウント

40

50

回路のカウント値が下限カウント値となったか否かを判定し、前記一のカウント回路のカウント値が下限カウント値となったと判定した場合、装置の動作を停止させ、前記一のカウント回路のカウント値が下限カウント値より大きいカウント値になるように前記一のカウント回路のカウント値を増加させるとともに、前記一のカウント回路のカウント値と前記一のカウント回路以外の他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように前記他のカウント回路のカウント値を減少させた後、装置の動作を再開させる修正回路を含む。

【 0 0 1 3 】

この場合、修正回路により、複数のカウント回路のうち一のカウント回路のカウント値が下限カウント値となった場合、装置の動作を停止させ、一のカウント回路のカウント値が下限カウント値より大きいカウント値になるように一のカウント回路のカウント値を増加させるとともに、一のカウント回路のカウント値と他のカウント回路のカウント値との合計値が修正前後で一致するように他のカウント回路のカウント値を減少させた後、装置の動作を再開させているので、カウント回路のカウント値が下限カウント値となった場合でも、カウント回路のカウント値をシミュレーション可能な値に自動的に変更することができる。

10

【 0 0 1 4 】

前記修正手段は、ホストコンピュータから構成されてもよい。この場合、汎用のホストコンピュータを用いて上記の修正処理を行うことができる。

【 発明の効果 】

20

【 0 0 1 5 】

本発明によれば、演算素子の値を基に所定の停止条件を満たしているか否かを判定し、停止条件を満たしていると判定した場合、装置の動作を停止させて演算素子の値を修正した後、装置の動作を再開させているので、稀にしか発生しないような事象を停止条件として検出し、この事象の結果生じる演算素子の値をシミュレーション可能な値に変更することができ、回路構成を複雑化することなく、稀にしか発生しないような事象にも自動的に対処することができるようにシミュレーションデータを修正することができる。

【 発明を実施するための最良の形態 】

【 0 0 1 6 】

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。

30

【 0 0 1 7 】

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 R 1 ~ R n (n は任意の正数)、複数の酵素カウンタ K 1 ~ K n、複数の絞り回路 V 1 ~ V n、複数の反応実行回路 H 1 ~ H n、複数の物質カウンタ B 1 ~ B m (m は任意の正数)、接続切り換え回路 S W 及びカウンタ管理部 C M を備える。

【 0 0 1 8 】

酵素カウンタ K 1 ~ K n、絞り回路 V 1 ~ V n 及び反応実行回路 H 1 ~ H n 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 B 1 ~ B 3 は、シミュレーションに使用される一物質に対して設けられ、物質カウンタ B 4 ~ B m 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 B 1 ~ B 3 は、このグループごとに設けられる。なお、物質カウンタ B 1 ~ B m 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、一物質を分割して 2 個以下又は 4 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等々の種々の変更が可能である。

40

【 0 0 1 9 】

乱数発生器 R 1 は、絞り回路 V 1 の入力側に接続され、反応実行回路 H 1 は、絞り回路

50

V 1 の出力側に接続され、酵素カウンタ K 1 は、絞り回路 V 1 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。

【 0 0 2 0 】

接続切り換え回路 S W 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 I 1 ~ I n 及び減少指令用の入力配線 D 1 ~ D n と、複数の増加指令用の出力配線 i 1 ~ i m 及び減少指令用の出力配線 d 1 ~ d m を含み、各配線がマトリックス状に配置されている。

【 0 0 2 1 】

反応実行回路 H 1 は、接続切り換え回路 S W の増加指令用の入力配線 I 1 及び減少指令用の入力配線 D 1 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 B 1 は、接続切り換え回路 S W の増加指令用の出力配線 i 1 及び減少指令用の出力配線 d 1 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 S W において図中に黒丸で示す各配線の交点 N D 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。

【 0 0 2 2 】

接続切り換え回路 S W 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 I 1 ~ I n と増加指令用の出力配線 i 1 ~ i m との接続状態及び減少指令用の入力配線 D 1 ~ D n と減少指令用の出力配線 d 1 ~ d m との接続状態を制御し、各反応実行回路 H 1 ~ H n 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 S W 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。

【 0 0 2 3 】

物質カウンタ B 1 ~ B m は、バイナリカウンタ等から構成され、例えば、物質カウンタ B 1 ~ B 3 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を初期カウント値として設定され、物質カウンタ B 4 ~ 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。

【 0 0 2 4 】

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、シミュレーション対象物に対して設けられ、当該シミュレーション対象物に関する値を演算する演算素子であれば、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）を組み合わせる使用する場合、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。

【 0 0 2 5 】

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。

【 0 0 2 6 】

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、短周期のパルスを長周期のパルスによりラ

10

20

30

40

50

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。

【 0 0 2 7 】

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。

【 0 0 2 8 】

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。

【 0 0 2 9 】

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。

【 0 0 3 0 】

このとき、接続切り換え回路 S W は、減少指令用の入力配線 D 1 と、反応実行回路 H 1 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 H 1 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 S W は、増加指令用の入力配線 I 1 と、反応実行回路 H 1 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 H 1 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。

【 0 0 3 1 】

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。

【 0 0 3 2 】

また、物質カウンタ B 1 ～ B 3 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、上限到達信号をカウンタ管理部 C M 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、下限到達信号をカウンタ管理部 C M へ出力する。

【 0 0 3 3 】

カウンタ管理部 C M は、所定の論理回路等から構成され、物質カウンタ B 1 ～ B 3 から上限到達信号を受けたとき、上限到達信号を出力した物質カウンタのカウント値が上限カウント値となったと判定し、装置の動作を停止させるための停止信号 S S を各部へ出力して装置の動作を停止させる。その後、カウンタ管理部 C M は、上限到達信号を出力した物質カウンタのカウント値が上限カウント値より小さいカウント値になるように当該物質カウンタのカウント値を減少させるとともに、当該物質カウンタのカウント値と他の物質カ

10

20

30

40

50

ウンタのカウンタ値との合計値、すなわち物質カウンタ B 1 ~ B 3 のカウンタ値の合計値が修正前後で一致するように他の物質カウンタのカウンタ値を増加させた後、装置の動作を再開させるための再開信号 R S を各部へ出力して装置の動作を再開させてシミュレーション動作を継続させる。

【 0 0 3 4 】

また、カウンタ管理部 C M は、物質カウンタ B 1 ~ B 3 から下限到達信号を受けたときも、下限到達信号を出力した物質カウンタのカウンタ値が下限カウンタ値となったと判定し、装置の動作を停止させるための停止信号 S S を各部へ出力して装置の動作を停止させる。その後、カウンタ管理部 C M は、下限到達信号を出力した物質カウンタのカウンタ値が下限カウンタ値より大きいカウンタ値になるように当該物質カウンタのカウンタ値を増加させるとともに、当該物質カウンタのカウンタ値と他の物質カウンタのカウンタ値との合計値、すなわち物質カウンタ B 1 ~ B 3 のカウンタ値の合計値が修正前後で一致するように他の物質カウンタのカウンタ値を減少させた後、装置の動作を再開させるための再開信号 R S を各部へ出力して装置の動作を再開させてシミュレーション動作を継続させる。

【 0 0 3 5 】

例えば、物質カウンタ B 1 ~ B 3 が 6 ビットカウンタから構成され、そのカウンタ範囲が 0 ~ 6 3 の場合、“ 0 ” が下限カウンタ値となり、“ 6 3 ” が上限カウンタ値となり、物質カウンタ B 1 ~ B 3 のカウンタ値が下限カウンタ値又は上限カウンタ値に達してカウンタ範囲を超えることが停止条件となる。なお、物質カウンタのビット数等は、上記の例に特に限定されず、種々の変更が可能である。また、停止条件も上記の例に特に限定されず、稀にしか発生しない種々の事象等の予め決定された条件であれば種々の条件を停止条件として用いることができ、カウンタ管理部 C M が管理する物質カウンタも、上記の例に特に限定されず、他の物質カウンタを管理するようにしてもよい。

【 0 0 3 6 】

本実施の形態において、物質カウンタ B 1 ~ B m が演算素子及びカウンタ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、カウンタ管理部 C M が修正手段及び修正回路の一例に相当する。

【 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 3 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 4 ~ 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 のカウンタ値を 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 のカウンタ値を 1 だけ増加させる。

【 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 のカウンタ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。

【 0 0 3 9 】

このように、反応前後の各物質の量をカウンタ値、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ので、物質カウンタ B 1 ~ B m

10

20

30

40

50

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SWにより反応実行回路H1～Hnと物質カウンタB1～Bm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。

【0040】

ここで、物質カウンタB1～B3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グループ分けされ、このグループごとに設けられている。図2は、物質カウンタのカウント値の修正方法を説明するための模式図である。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。

10

【0041】

例えば、ある一の物質b0が、7個の物質x1～x7、3個の物質y1～y3及び5個の物質z1～z5の15個の物質と反応する場合、15個の物質x1～x7、y1～y3、z1～z5を7個の物質x1～x7のグループ、3個の物質y1～y3のグループ及び5個の物質z1～z5のグループの3グループにグループ分けし、各グループに対して物質b0の物質カウンタB1～B3が設けられる。物質カウンタB1は、7個の物質カウンタX1～X7（図1に示す物質カウンタB4～Bmのうち7個の物質カウンタ）と接続され、物質カウンタB2は、3個の物質カウンタY1～Y3（図1に示す物質カウンタB4～Bmのうち3個の物質カウンタ）と接続され、物質カウンタB3は、5個の物質カウンタZ1～Z5（図1に示す物質カウンタB4～Bmのうち5個の物質カウンタ）と接続される。

20

【0042】

上記のシミュレーション中に、物質カウンタB3のカウント値が下限カウント値である“0”に達し、物質カウンタB1、B2のカウント値が“45”、“53”の場合、物質カウンタB3は下限到達信号をカウンタ管理部CMへ出力する。このとき、カウンタ管理部CMは、装置の動作を停止させるための停止信号SSを各部へ出力した後、物質カウンタB1、B2からそのカウント値を取得して物質カウンタB1～B3のカウント値の合計値が98になり且つ物質カウンタB3のカウント値が最も大きくなるように物質カウンタB1～B3の各カウント値を決定する。例えば、物質カウンタB1～B3に対して“30”、“30”、“38”が決定された場合、カウンタ管理部CMは、物質カウンタB1～B3のカウント値として“30”、“30”、“38”をそれぞれ設定し、装置の動作を再開させるための再開信号RSを各部へ出力して装置の動作を再開させてシミュレーション動作を継続させる。

30

【0043】

なお、上記のカウンタ管理部CMによる修正処理は、ホストコンピュータが所定の修正プログラムを実行することによっても実現することができ、この場合、汎用のホストコンピュータを用いて上記の修正処理を自動的に行うことができる。

【0044】

40

上記のように、本実施の形態では、物質カウンタB1～B3のうち一の物質カウンタのカウント値が上限カウント値又は下限カウント値となったことを停止条件として検出し、この場合に装置の動作を停止させ、上限カウント値又は下限カウント値となった物質カウンタがカウント動作を継続できるようにそのカウント値を修正するとともに、修正前後で物質カウンタの合計値が変化しないように他の物質カウンタのカウント値も修正した後、装置の動作を再開させているので、回路構成を複雑化することなく、物質カウンタがカウントできないような状況になっても当該状況に自動的に対処することができるようにシミュレーションデータを修正することができる。また、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B1～B3が設けられているので、各物質カウンタB1～B3に接続されるべき物質カ

50

ウンタの数を低減することができ、物質カウンタ B 1 ~ B 3 に対する配線を容易に行うことができる。

【 0 0 4 5 】

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 6 】

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、セルラ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。

10

【 0 0 4 7 】

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 8 】

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。

20

【 0 0 4 9 】

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 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 ' 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。カウンタ管理部 C M は、物質カウンタ B 1 a ~ B 1 c を管理し、カウンタ管理部 C M ' は、物質カウンタ B 1 a ' ~ B 1 c ' を管理する。

30

【 0 0 5 0 】

拡散回路 K C は、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 のカウント値の合計値が物質カウンタ B 1 a ' ~ B 1 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 1 c 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 1 c ' のカウント値を順次増加させる。

【 0 0 5 1 】

40

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 においてカウンタ管理部 C M , C M ' 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合、上限到達信号又は下限到達信号をカウンタ管理部 C M , C M ' へ出力する。このとき、カウンタ管理部 C M , C M ' は、装置全体の動作を停止させ、上限カウント値又は下

50

限カウント値となった物質カウンタがカウント動作を継続できるようにそのカウント値を修正するとともに、修正前後で物質カウンタの合計値が変化しないように他の物質カウンタのカウント値も修正した後、装置の動作を再開させる。

【 0 0 5 2 】

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 $B1a \sim B1c$, $B1a' \sim B1c'$ のうちの物質カウンタのカウント値が上限カウント値又は下限カウント値となったことを停止条件として判定し、この場合に装置の動作を停止させ、上限カウント値又は下限カ

10

【 0 0 5 3 】

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。

【 0 0 5 4 】

20

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。

【 0 0 5 5 】

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、稀にしか発生しないような事象を停止条件として検出し、この事象の結果生じる物質カウンタのカウント値をシミュレーション可能な値に変更することができ、回路構成を複雑化することなく、稀にしか発生しないような事象にも自動的に対処することができるようシミュレーションデータを修正することができる。

30

【 0 0 5 6 】

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 】

【 0 0 5 7 】

【 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である。

【 図 2 】 物質カウンタのカウント値の修正方法を説明するための模式図である。

50

【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。

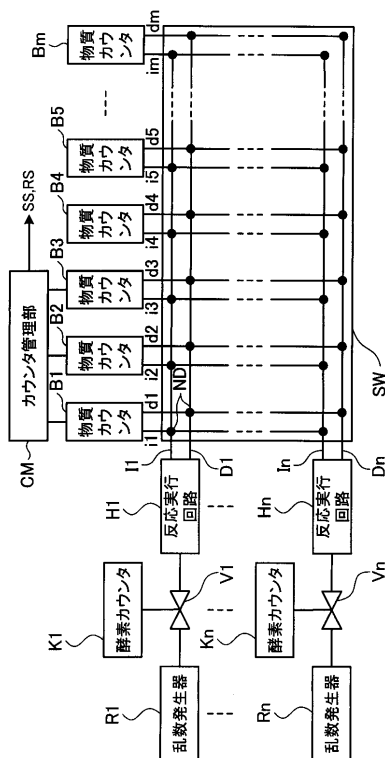
【符号の説明】

【 0 0 5 8 】

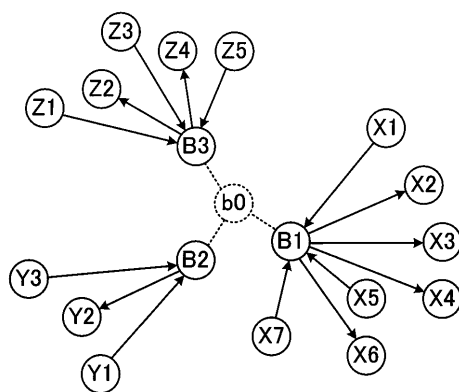
- R 1 ~ R n 乱数発生器
- K 1 ~ K n 酵素カウンタ
- V 1 ~ V n 絞り回路
- H 1 ~ H n 反応実行回路
- B 1 ~ B m 物質カウンタ
- S W 接続切り換え回路
- C M カウンタ管理部

10

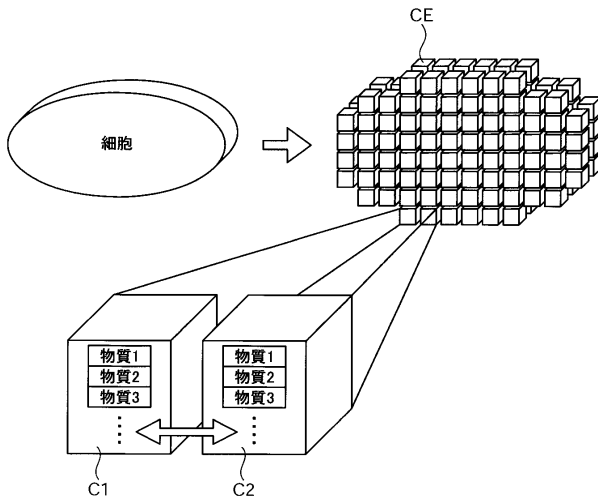
【図 1】



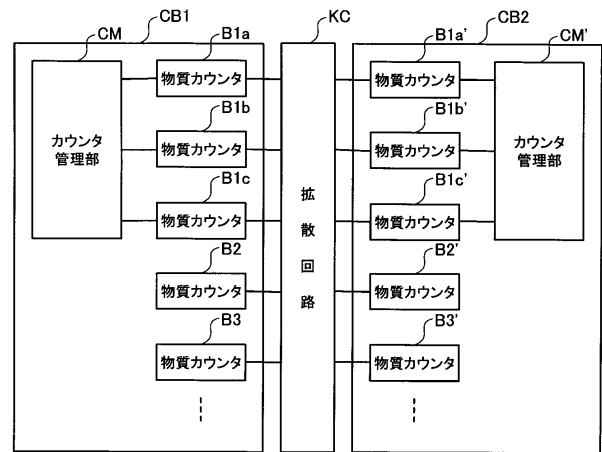
【図 2】



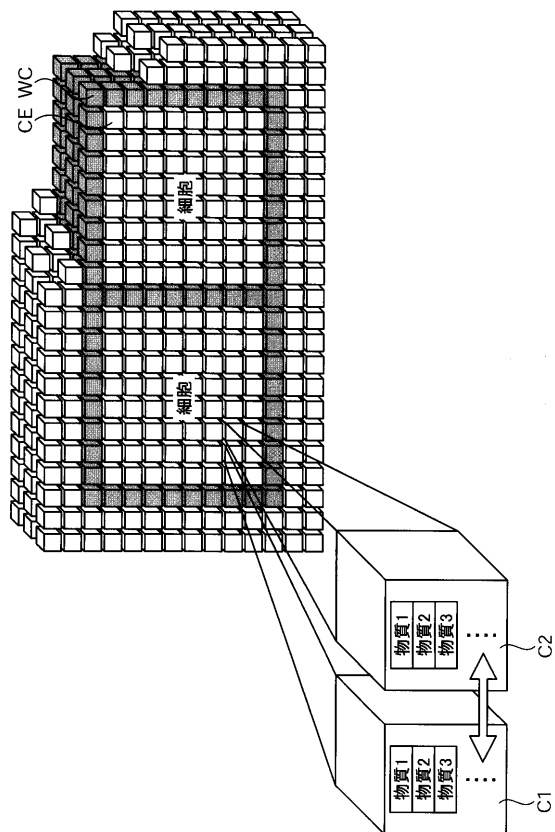
【図 3】



【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 特開平06-170217(JP,A)
特開2002-126497(JP,A)
特開2002-091506(JP,A)
特開2003-180400(JP,A)
特表2004-517388(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

B01J 19/00
C07B 61/00
G06F 17/00 - 17/18
G06F 19/00