

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4780544号  
(P4780544)

(45) 発行日 平成23年9月28日(2011.9.28)

(24) 登録日 平成23年7月15日(2011.7.15)

(51) Int.Cl.

F I

G 0 6 F 17/50 (2006.01)

G 0 6 F 17/50 6 3 8

請求項の数 5 (全 15 頁)

|                                                                                      |                               |           |                    |
|--------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|-----------|--------------------|
| (21) 出願番号                                                                            | 特願2004-89847 (P2004-89847)    | (73) 特許権者 | 393031586          |
| (22) 出願日                                                                             | 平成16年3月25日(2004.3.25)         |           | 株式会社国際電気通信基礎技術研究所  |
| (65) 公開番号                                                                            | 特開2005-275932 (P2005-275932A) |           | 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6日(2005.10.6)         | (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  | 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 |
|                                                                                      |                               | (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 |
|                                                                                      |                               |           | 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ごとに設けられ、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、

前記演算素子ごとに設けられ、前記演算素子が演算した値を記憶する複数の記憶装置と

10

前記演算素子ごとに設けられ、前記演算素子の値を前記記憶装置へ転送するように前記演算素子を制御し、前記記憶装置に記憶された演算値を前記演算素子に再度設定する転送制御回路とを備え、

前記記憶装置は、前記演算素子が演算した値を複数記憶し、

前記転送制御回路は、前記記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を前記演算素子に設定するように前記記憶装置を制御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】

前記演算素子が演算した値が所定の範囲内にあるか否かを判断する判断回路をさらに備

20

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。

【請求項3】

前記判断回路は、前記演算素子が演算した値が所定の範囲内ないと判断した場合、前記記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を前記演算素子に設定するように前記転送制御回路を制御することを特徴とする請求項2記載のハードウェアシミュレータ。

【請求項4】

前記複数の演算素子のうち所定の演算素子が演算した値が所定の条件を満たすか否かを判断する第1判断回路と、

前記第1判断回路により所定の条件を満たすと判断された場合に、前記複数の演算素子のうち所定の演算素子が演算した値に基づく値が所定の範囲内にあるか否かを判断する第2判断回路とをさらに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。

10

【請求項5】

前記第2判断回路は、前記所定の演算素子が演算した値に基づく値が所定の範囲内ないと判断した場合、当該演算素子に対して設けられている記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を当該演算素子に設定するように前記転送制御回路を制御することを特徴とする請求項4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】

20

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シミュレーション装置がある（特許文献1参照）。このとき、様々なパラメータの影響を調べるために、パラメータの値を種々変更してシミュレーションが行われる。

30

【特許文献1】特開2002-260975号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0003】

しかしながら、シミュレーション対象が大規模になると、シミュレーションをある特定の時点から再開する場合や複数のシミュレーションを同時に実行している場合に、特定の時点のデータや別のデータをシミュレーションデータとして転送するためには、膨大な時間が必要となる。

【0004】

40

本発明の目的は、シミュレーション対象が大規模な場合でも、シミュレーションデータを高速に再設定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】

【0005】

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ごとに設けられ、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、

50

前記演算素子ごとに設けられ、前記演算素子が演算した値を記憶する複数の記憶装置と、  
前記演算素子ごとに設けられ、前記演算素子の値を前記記憶装置へ転送するように前記演  
算素子を制御し、前記記憶装置に記憶された演算値を前記演算素子に再度設定する転送制  
御回路とを備え、前記記憶装置は、前記演算素子が演算した値を複数記憶し、前記転送制  
御回路は、前記記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を前記演算素子に設定す  
るように前記記憶装置を制御する。

【 0 0 0 6 】

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ごとに当該シミュ  
レーション対象物に関する値を演算する演算素子が設けられ、反応回路によりシミュレ  
ーション対象物間の反応に応じて演算素子の値が変化されることにより、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、演算素子が演算した値を記憶する記憶装置が演算素子ごとに設けられているので  
、演算素子が演算した値を記憶装置に適宜記憶させ、必要に応じて記憶装置に記憶させて  
いる値を演算素子に再度設定することができ、シミュレーション対象が大規模な場合でも  
、シミュレーションデータを高速に再設定することができる。

10

【 0 0 0 7 】

また、演算素子の値を記憶装置へ転送するように演算素子を制御することができるので  
、演算素子が演算した値を記憶装置に適宜記憶させることができる。

【 0 0 0 8 】

また、記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を演算素子に設定することがで  
きるので、記憶装置に記憶させている値を必要に応じて演算素子に再度設定することがで  
きる。

20

【 0 0 0 9 】

前記演算素子が演算した値が所定の範囲内にあるか否かを判断する判断回路をさらに備  
えることが好ましい。この場合、演算素子が演算した値が所定の範囲内にあるか否かを判  
断することができるので、演算素子が演算した値に応じて、記憶装置に記憶させている値  
を演算素子に再度設定することができる。

【 0 0 1 0 】

前記判断回路は、前記演算素子が演算した値が所定の範囲内ないと判断した場合、前  
記記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を前記演算素子に設定するように前記  
転送制御回路を制御することが好ましい。

30

【 0 0 1 1 】

この場合、演算素子が演算した値が所定の範囲内ないと判断されたとき、記憶装置が  
記憶している複数の値の中から一の値を演算素子に設定することができるので、演算素子  
が演算した値がシミュレーション結果として不要な値になった場合等において、適正な値  
を用いて再度シミュレーションを継続することができる。

【 0 0 1 2 】

前記複数の演算素子のうち所定の演算素子が演算した値が所定の条件を満たすか否かを  
判断する第1判断回路と、前記第1判断回路により所定の条件を満たすと判定された場合  
に、前記複数の演算素子のうち所定の演算素子が演算した値に基づく値が所定の範囲内  
にあるか否かを判断する第2の判断回路とをさらに備えることが好ましい。

40

【 0 0 1 3 】

この場合、複数の演算素子のうち所定の演算素子が演算した値が所定の条件を満たすか  
否かを判断し、このような状態が発生した場合に、演算素子が演算した値に基づく値が所  
定の範囲内にあるか否かを判断することができるので、ある物質が所定の条件を満たすこ  
とを条件としてある物質が反応を行う場合等の複雑な条件を考慮しながら、演算素子が演  
算した値に基づく値に応じて、記憶装置に記憶させている値を演算素子に再度設定するこ  
とができる。

【 0 0 1 4 】

前記第2判断回路は、前記所定の演算素子が演算した値に基づく値が所定の範囲内にな

50

いと判断した場合、当該演算素子に対して設けられている記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を当該演算素子に設定するように前記転送制御回路を制御することが好ましい。

【 0 0 1 5 】

この場合、演算素子が演算した値に基づく値が所定の範囲内ないと判断された場合、記憶装置が記憶している複数の値の中から一の値を演算素子に設定することができるので、上記の複雑な条件を考慮しながら、演算素子が演算した値がシミュレーション結果として不要な値になった場合等において、適正な値を用いて再度シミュレーションを継続することができる。

【 発明の効果 】

10

【 0 0 1 6 】

本発明によれば、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ているときに、演算素子が演算した値を記憶する記憶装置が演算素子ごとに設けられているので、演算素子が演算した値を記憶装置に適宜記憶させ、必要に応じて記憶装置に記憶させている値を演算素子に再度設定することができ、シミュレーション対象が大規模な場合でも、シミュレーションデータを高速に再設定することができる。

【 発明を実施するための最良の形態 】

【 0 0 1 7 】

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。

20

【 0 0 1 8 】

図1は、本発明の第1の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、複数のカウンタ部C1～Cm（mは任意の正数）及び接続切り換え回路SWを備える。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、カウンタ部C1～Cmは、シミュレーションに使用される物質ごとに設けられる。

30

【 0 0 1 9 】

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。

【 0 0 2 0 】

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。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。

40

【 0 0 2 1 】

図2は、図1に示すカウンタ部C1の一例の構成を示すブロック図である。図2に示すカウンタ部C1は、物質カウンタC11、記憶装置C12及び転送制御部C13を備える。他のカウンタ部C2～Cmも同様に構成され、下記と同様に動作する。

【 0 0 2 2 】

物質カウンタC11は、例えば、バイナリカウンタ等から構成され、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に接続される。物質カウンタC11は、反応前の各物質の数、すなわち分子数又は原子数を初期カウント値として設定され、反応実行回路H1～Hn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。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

50

、シミュレーション対象物ごとに設けられ、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。

#### 【0023】

転送制御部C13は、外部から入力される転送制御信号に応じて、物質カウンタC11から記憶装置C12へのデータ転送及び記憶装置C12から物質カウンタC11へのデータ転送を制御する。具体的には、転送制御部C13は、物質カウンタC11から記憶装置C12へのデータ転送を指示する転送制御信号を受けた場合、物質カウンタC11のカウント値を記憶装置C12の所定のアドレスに記憶させる。また、転送制御部C13は、記憶装置C12から物質カウンタC11へのデータ転送を指示する転送制御信号を受けた場合、記憶装置C12の指定されたアドレスのデータを物質カウンタC11のカウント値として入れ替える。例えば、アドレスA1のデータD1を記憶装置C12から物質カウンタC11へ転送するように指示された場合、転送制御部C13は、記憶装置C12に対してアドレスA1のデータD1を物質カウンタC11へ転送するように指示し、記憶装置C12は、アドレスA1のデータD1を物質カウンタC11へ転送する。

#### 【0024】

記憶装置C12としては、上記のアドレス指定により動作するものに特に限定されず、種々の記憶装置を用いることができ、最後に転送されたデータが最初に取り出されるスタック型の記憶装置（LIFO）等を用いてもよい。また、アドレス部分をシミュレーション時間としてアドレスを使用する場合、連想メモリ（Content Addressable Memory）を用いることが好ましい。この場合、記憶装置のアドレス指定は、アドレス部分の内容を指定することになり、所望のデータを効率よく転送することができる。

#### 【0025】

再び、図1を参照して、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。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と複数の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。

#### 【0026】

乱数発生器R1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V1を介して反応実行回路H1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。

#### 【0027】

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。

#### 【0028】

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。

【0029】

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。

10

【0030】

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。

【0031】

このとき、接続切り換え回路SW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SW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。

20

【0032】

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。

30

【0033】

本実施の形態において、物質カウンタC 1 1が演算素子の一例に相当し、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SWが反応回路の一例に相当し、記憶装置C 1 2が記憶装置の一例に相当し、転送制御部C 1 3が転送制御回路の一例に相当する。

40

【0034】

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、各カウンタ部C 1～C mの物質カウンタC 1 1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C 1 1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C 1 1のカウント値を1だけ

50

増加させる。

【 0 0 3 5 】

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 C 1 1 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 C 1 1 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。

【 0 0 3 6 】

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ので、物質カウンタ C 1 1 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 とカウンタ部 C 1 ~ C m の物質カウンタ C 1 1 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。

【 0 0 3 7 】

また、上記のシミュレーション中に、物質カウンタ C 1 1 から記憶装置 C 1 2 へのデータ転送を指示する転送制御信号が時刻を表すアドレスとともに所定のタイミングで外部から順次入力され、各カウンタ部 C 1 ~ C m の転送制御部 C 1 3 は、物質カウンタ C 1 1 のカウント値を記憶装置 C 1 2 の転送制御信号が入力された時刻を表すアドレスに順次記憶させる。その後、シミュレーション動作を停止させ、シミュレーションをある特定の時点から再開する場合、当該時刻を表すアドレスとともに記憶装置 C 1 2 から物質カウンタ C 1 1 へのデータ転送を指示する転送制御信号をカウンタ部 C 1 ~ C m へ入力すると、各カウンタ部の転送制御部 C 1 3 は、記憶装置 C 1 2 の指定されたアドレスのデータを物質カウンタ C 1 1 のカウント値として入れ替える。

【 0 0 3 8 】

このように、カウンタ部 C 1 ~ C m の物質カウンタ C 1 1 のカウント値を記憶する記憶装置 C 1 2 が物質カウンタ C 1 1 ごとに設けられているので、物質カウンタ C 1 1 のカウント値を記憶装置 C 1 2 に適宜記憶させ、必要に応じて記憶装置 C 1 2 に記憶させているカウント値を物質カウンタ C 1 1 に再度設定することができ、シミュレーション対象が大規模な場合でも、シミュレーションデータを高速に設定することができる。

【 0 0 3 9 】

なお、本実施の形態では、すべてのカウンタ部 C 1 ~ C m において物質カウンタ C 1 1 のカウント値を記憶装置 C 1 2 に記憶しているが、この例に特に限定されず、一部のカウンタ部においてのみカウント値を記憶するようにしてもよく、また、記憶装置 C 1 2 に記憶するカウント値も複数記憶することなく、所定の値を一つのみ記憶するようにしてもよい。

【 0 0 4 0 】

図 3 は、図 1 に示すカウンタ部 C 1 ~ C m として使用可能な他のカウンタ部 C 1 a の構成を示すブロック図である。図 3 に示すカウンタ部 C 1 a と図 2 に示すカウンタ部 C 1 とで異なる点は、データ値範囲保持装置 C 1 4 及び比較器 C 1 5 が追加され、比較器 C 1 5 が出力する転送制御信号に応じて転送制御部 C 1 3 a が動作する点であり、その他の点は図 2 に示すカウンタ部 C 1 と同様であるので詳細な説明は省略する。

【 0 0 4 1 】

データ値範囲保持装置 C 1 4 は、所定のメモリ又はレジスタ等から構成され、物質カウンタ C 1 1 のデータ値範囲として、その最大値及び最小値を予め記憶している。比較器 C 1 5 は、データ値範囲保持装置 C 1 4 が保持している最大値及び最小値と物質カウンタ C 1 1 のカウント値とを比較し、データ値範囲保持装置 C 1 4 が保持している最大値と最小

10

20

30

40

50

値との間に物質カウンタC 1 1のカウンタ値が入っているか否かを判断する。例えば、化学反応シミュレーションを行い、ある現象の再現を試みる場合、対象とする現象において各物質カウンタC 1 1がシミュレーションしている物質の量は判明しているため、最大値と最小値とをデータ値範囲として設定することにより効率的なシミュレーションを行うことができる。また、ある物質と他の物質との関係がある程度わかっている場合に、他の物質をシミュレーションしている物質カウンタC 1 1のカウンタ値との関係を記述することができる。

#### 【0042】

ここで、最大値と最小値との間にカウンタ値が入っていない場合、比較器C 1 5は、記憶装置C 1 2が記憶している複数のカウンタ値の中から所定のカウンタ値を物質カウンタC 1 1に代入するように指示する転送制御信号を転送制御部C 1 3 aへ出力する。転送制御部C 1 3 aは、指定された記憶装置C 1 2のカウンタ値を物質カウンタC 1 1のカウンタ値として入れ替える。本例では、転送制御部C 1 3 aが転送制御回路の一例に相当し、データ値範囲保持装置C 1 4及び比較器C 1 5が判断回路の一例に相当する。

#### 【0043】

例えば、任意の時刻T 1において、物質カウンタC 1 1のカウンタ値を記憶装置C 1 2に記憶させ、その後、複数のパラメータセット1～Nを用いてシミュレーションを時刻T 2まで実行する。次に、時刻T 2において、パラメータセット3以外のパラメータセットを用いたシミュレーションにおいて特定の化学物質の量が想定されるデータ値範囲内になくなった場合、パラメータセット3以外のパラメータセットが間違っていることがわかる。したがって、時刻T 1において記憶装置C 1 2に記憶させたカウンタ値を物質カウンタC 1 1に設定し、別のパラメータセットを用いて時刻T 1からのシミュレーションを再開することができる。このように、シミュレーションを最後まで実行するのではなく、シミュレーションに使用されるパラメータの値を絞りながら効率よくシミュレーションを実行することができ、シミュレーション時間を大幅に短縮することができる。

#### 【0044】

図4は、図1に示すハードウェアシミュレータによるシミュレーションの例を説明するための模式図である。図4に示す例は、g l u c o s e（グルコース）を分解する代謝過程であるG l y c o l y s i s（解糖）を示しており、h e x o k i n a s e（ヘキソキナーゼ）が酵素となり、g l u c o s e及びA T P（アデノシン三リン酸）からg l u c o s e 6 P（グルコース-6-リン酸）、A D P（アデノシン二リン酸）及びH<sub>+</sub>が生成される。

#### 【0045】

この例では、まず、乱数発生器Rから所定の乱数が絞り回路Vへ入力される。このとき、酵素カウンタKには、h e x o k i n a s eの分子数がそのカウンタ値として設定され、h e x o k i n a s eの分子数に応じて絞り回路Vの出力が絞られ、乱数発生器Rの乱数及びh e x o k i n a s eの分子数に応じて反応実行回路HによるG l y c o l y s i sの実行及び不実行が制御される。

#### 【0046】

反応実行回路Hは、反応前の物質であるg l u c o s e及びA T Pの分子数を表す物質カウンタC 1 1 a、C 1 1 bと、反応後の物質であるg l u c o s e 6 P、A D P及びH<sub>+</sub>の分子数又は原子数を表す物質カウンタC 1 1 c、C 1 1 d、C 1 1 eとに接続切り換え回路（図示省略）により接続されている。

#### 【0047】

反応実行回路Hは、絞り回路Vを介して出力されるデータが“1”、すなわち反応を実行する場合、物質カウンタC 1 1 a、C 1 1 bにそのカウンタ値を1だけ減少するように指示するとともに、物質カウンタC 1 1 c、C 1 1 d、C 1 1 eにそのカウンタ値を1だけ増加するように指示し、物質カウンタC 1 1 a、C 1 1 bは、1だけカウンタ値を減少させ、物質カウンタC 1 1 c、C 1 1 d、C 1 1 eは、1だけカウンタ値を増加させる。

#### 【0048】

このようにして、図 1 に示すハードウェアシミュレータを用い、hexokinase を酵素として glucose 及び ATP から glucose 6 P、ADP 及び  $H_+$  を生成する Glycolysis による各物質の変化量をシミュレーションすることができる。

【0049】

このとき、時刻 T1 において、各物質カウンタ C11a ~ C11e から各記憶装置 C12a ~ C12e へのデータ転送を指示する転送制御信号が外部から転送制御部（図示省略）に入力され、各物質カウンタ C11a ~ C11e のカウント値 A ~ E が各記憶装置 C12a ~ C12e に記憶される。その後、時刻 T1 からシミュレーションを再開する場合、各記憶装置 C12a ~ C12e から各物質カウンタ C11a ~ C11e へのデータ転送を指示する転送制御信号が転送制御部に入力され、各記憶装置 C12a ~ C12e に記憶されているカウント値 A ~ E が各物質カウンタ C11a ~ C11e に設定され、時刻 T1 からシミュレーションを再開することができる。

10

【0050】

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 5 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。

【0051】

図 5 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 CE に空間分割し、セル CE 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。

20

【0052】

例えば、隣接する 2 つのセル C1, C2 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 C1, C2 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。

【0053】

図 6 は、図 5 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 6 に示すハードウェアシミュレータは、セル C1 用のハードウェアシミュレータ CB1、セル C2 用のハードウェアシミュレータ CB2 及び拡散回路 KC を備える。

30

【0054】

図 6 に示すハードウェアシミュレータ CB1 内の物質カウンタ C111 ~ C113 の各カウント値は、セル C1 内の物質 1 ~ 物質 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 CB2 内の物質カウンタ C111' ~ C113' の各カウント値は、セル C2 内の物質 1 ~ 物質 3 の分子数又は原子数を表し、各物質カウンタ C111 ~ C113, C111' ~ C113' は、拡散回路 KC を介して接続されている。

【0055】

拡散回路 KC は、物質カウンタ C111 ~ C113, C111' ~ C113' 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 C111 ~ C113, C111' ~ C113' のカウント値を制御する。例えば、物質カウンタ C111 のカウント値が物質カウンタ C111' のカウント値より大きい場合、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 C111 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 C111' のカウント値を順次増加させる。

40

【0056】

なお、図 6 では、セル C1, C2 用のハードウェアシミュレータ CB1, CB2 において物質カウンタ C111 ~ C113、C111' ~ C113' 及び記憶装置 C121 ~ C123、C121' ~ C123' のみを図示しているが、各ハードウェアシミュレータ CB1, CB2 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、

50

酵素カウンタ、絞り回路、反応実行回路、接続切り換え回路及び転送制御部（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、転送制御信号に応じて、物質カウンタC 1 1 1 ~ C 1 1 3, C 1 1 1' ~ C 1 1 3'のカウンタ値が記憶装置C 1 2 1 ~ C 1 2 3、C 1 2 1' ~ C 1 2 3'に記憶されるとともに、記憶装置C 1 2 1 ~ C 1 2 3、C 1 2 1' ~ C 1 2 3'に記憶されているカウンタ値が物質カウンタC 1 1 1 ~ C 1 1 3, C 1 1 1' ~ C 1 1 3'に設定される。

#### 【0057】

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。物質カウンタのカウンタ値を記憶装置に適宜記憶させ、必要に応じて記憶装置に記憶させているカウンタ値を物質カウンタに再度設定することができる。

10

#### 【0058】

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7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7に示すように、図5と同様に各細胞を複数のセルC E（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W C（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5及び図6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

#### 【0059】

また、細胞壁を表す細胞壁セルW C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。

#### 【0060】

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するとともに、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し、物質カウンタのカウンタ値を記憶装置に適宜記憶させ、必要に応じて記憶装置に記憶させているカウンタ値を物質カウンタに再度設定することができる。

30

#### 【0061】

次に、本発明の第2の実施の形態によるハードウェアシミュレータについて説明する。図8は、本発明の第2の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8に示すハードウェアシミュレータと図1に示すハードウェアシミュレータとで異なる点は、データ値範囲保持装置D H、比較器C M、演算装置C D及び反応条件検出ネットワーク回路S Nが付加された点であり、その他の点は図1に示すハードウェアシミュレータと同様であるので詳細な説明は省略する。なお、カウンタ部C 1 ~ C mは、図2に示すカウンタ部と同様に構成されている。

40

#### 【0062】

カウンタ部C 2 ~ C mは、自身の物質カウンタC 1 1（図2参照）のカウンタ値をネットワーク回路S Nへ出力する。反応条件検出ネットワーク回路S Nは、所定の論理回路等から構成され、カウンタ部C 2 ~ C mのカウンタ値を集計して所定の反応条件を満たしているか否かの判断を行い、反応条件を満たしていると判断した場合、反応可能信号を演算装置C Dへ出力する。反応条件検出ネットワーク回路S Nとして、例えば、平均経路長が短いというランダムネットワークの特徴とクラスター係数が大きいというレギュラーネットワークの特徴との双方を合わせ持つスモールワールドネットワークを用いることができ

50

るが、この例に特に限定されず、他のネットワークを用いてもよい。

【 0 0 6 3 】

カウンタ部 C 1 は、自身の物質カウンタ C 1 1 のカウント値を演算装置 C D へ出力する。演算装置 C D は、反応条件検出ネットワーク回路 S N から反応可能信号を受けた場合、カウンタ部 C 1 のカウント値に対して所定の演算を行い、カウント値から演算された演算値を比較器 C M へ出力する。なお、物質カウンタ C 1 1 のカウント値をそのまま用いる場合は、演算装置 C D は、物質カウンタ C 1 1 のカウント値をそのまま比較器 C M へ出力する。この場合、データ値範囲保持装置 D H は、カウンタ部 C 1 のカウント値のデータ値範囲を記憶している。

【 0 0 6 4 】

データ値範囲保持装置 D H は、カウンタ部 C 1 のカウント値から演算された値のデータ値範囲として、その最大値及び最小値を予め記憶している。比較器 C M は、データ値範囲保持装置 D H が保持している最大値及び最小値と演算装置 C D の演算値とを比較し、データ値範囲保持装置 D H が保持している最大値と最小値との間に演算装置 C D の演算値が入っているか否かを判断する。比較器 C M は、最大値と最小値との間に演算値が入っていない場合、カウンタ部 C 1 の記憶装置 C 1 2 ( 図 2 参照 ) が記憶している複数のカウント値の中から所定のカウント値を物質カウンタ C 1 1 に代入するように指示する転送制御信号を転送制御部 C 1 3 ( 図 2 参照 ) へ出力する。転送制御部 C 1 3 は、指定された記憶装置 C 1 2 のカウント値を物質カウンタ C 1 1 のカウント値として入れ替える。本実施の形態では、反応条件検出ネットワーク回路 S N が第 1 判断回路の一例に相当し、演算装置 C D 、データ値範囲保持装置 D H 及び比較器 C M が第 2 判断回路の一例に相当する。

【 0 0 6 5 】

上記のように、本実施の形態では、カウンタ部 C 2 ~ C m の物質量が所定の反応条件を満たすか否かを判断し、反応条件を満たす場合にカウンタ部 C 1 のカウント値から演算された値が想定されるデータ値範囲内にあるか否かを判断し、データ値範囲内になくなった場合、記憶装置 C 1 2 が記憶している所定時刻前のカウント値を物質カウンタ C 1 1 に設定しているので、複数の物質が所定の条件を満たすことを条件としてある物質が反応を行う場合等の複雑な条件を考慮しながら、カウンタ部 C 1 のカウント値から演算された値が想定されるデータ値範囲内になくなり、物質カウンタ C 1 1 のカウント値がシミュレーション結果として不要な値になった場合等において、適正なカウント値を再度設定してシミュレーションを再開することができる。

【 0 0 6 6 】

なお、本実施の形態では、カウンタ部 C 2 ~ C m のカウント値から反応条件を満たしているか否かを判断したが、この例に特に限定されず、他のカウンタ部のカウント値から判断してもよく、また、カウント値が設定されるカウンタ部も、カウンタ部 C 1 に特に限定されず、他のカウンタ部のカウント値を設定するようにしてもよい。

【 0 0 6 7 】

また、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。

【 図面の簡単な説明 】

【 0 0 6 8 】

【図 1】本発明の第 1 の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】図 1 に示すカウンタ部の一例の構成を示すブロック図である。

【図 3】図 1 に示すカウンタ部として使用可能な他のカウンタ部の構成を示すブロック図である。

【図 4】図 1 に示すハードウェアシミュレータによるシミュレーションの例を説明するための模式図である。

【図 5】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 6】図 5 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。

10

【図 7】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 8】本発明の第 2 の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。

【符号の説明】

【 0 0 6 9 】

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

20

H 1 ~ H n 反応実行回路

S W 接続切り換え回路

C 1 ~ C m , C 1 a カウンタ部

C 1 1 物質カウンタ

C 1 2 記憶装置

C 1 3 , C 1 3 a 転送制御部

C 1 4 , D H データ値範囲保持装置

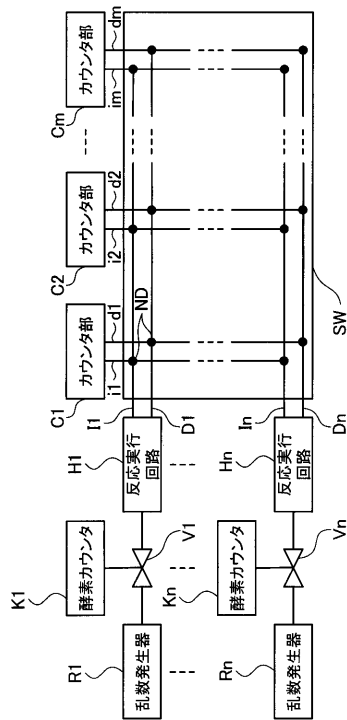
C 1 5 , C M 比較器

C D 演算装置

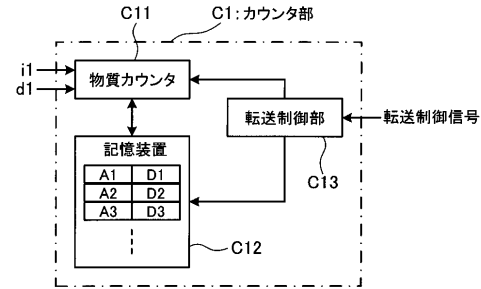
S N 反応条件検出ネットワーク回路

30

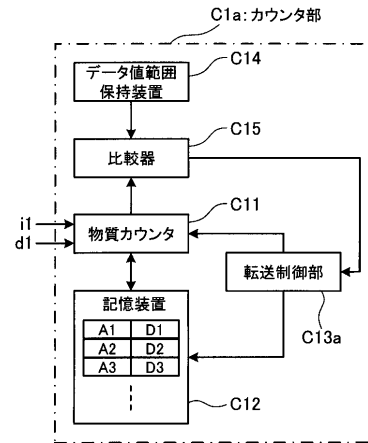
【図 1】



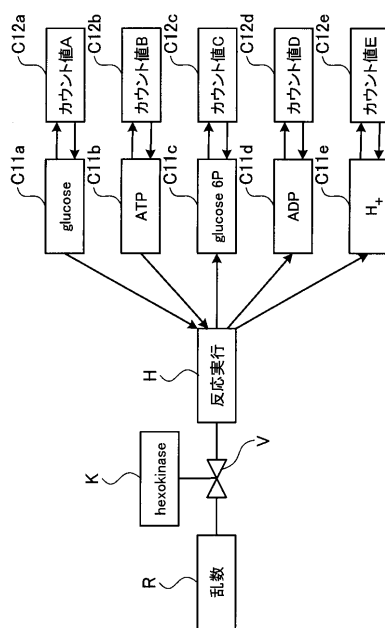
【図 2】



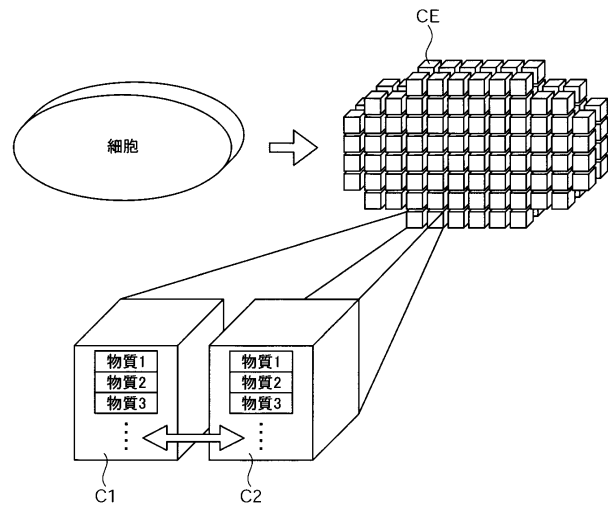
【図 3】



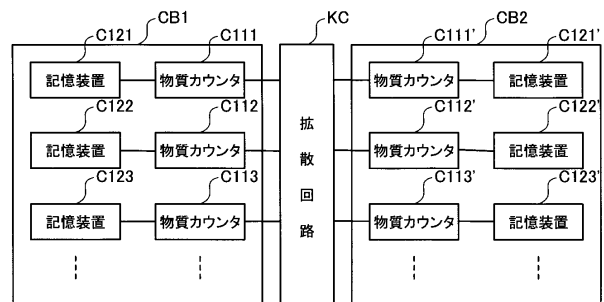
【図 4】



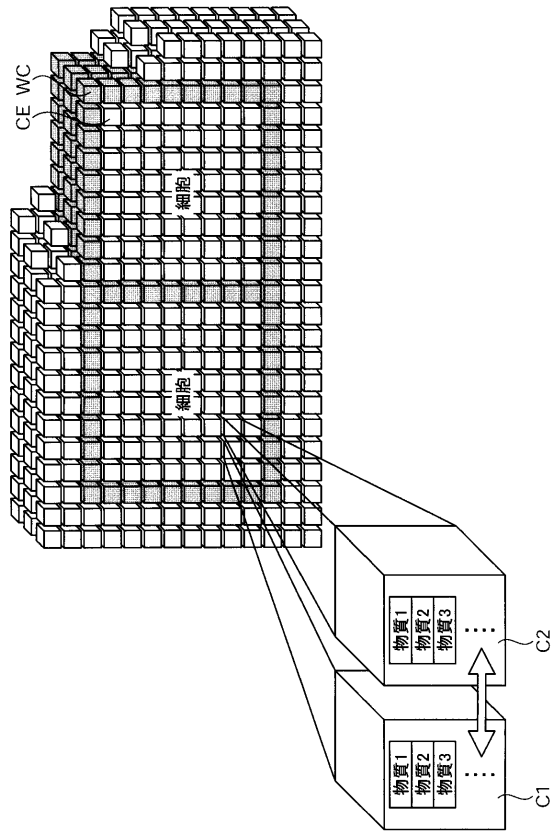
【図 5】



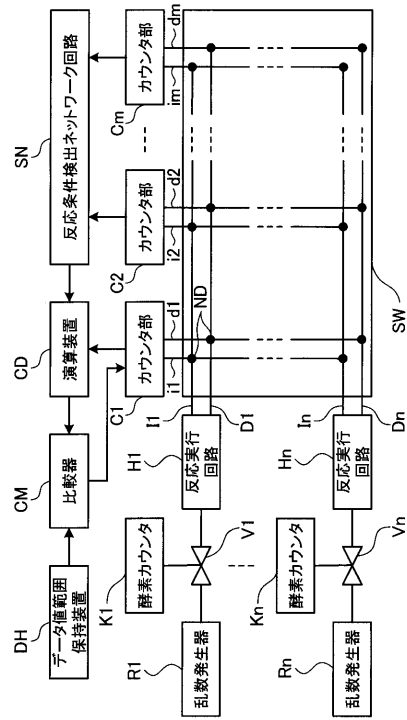
【図 6】



【図 7】



【図 8】



---

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)  
特開平09-179722(JP,A)  
特表2001-505223(JP,A)  
特開2002-126497(JP,A)  
特開2003-180400(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

B01J 19/00  
G06F 17/00 - 17/50  
G06F 19/00 - 19/28