

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4803782号
(P4803782)

(45) 発行日 平成23年10月26日(2011.10.26)

(24) 登録日 平成23年8月19日(2011.8.19)

(51) Int.Cl. F I
G 0 6 F 19/00 (2011.01) G O 6 F 19/00 I I O
C O 7 B 61/00 (2006.01) C O 7 B 61/00 Z

請求項の数 2 (全 15 頁)

<p>(21) 出願番号 特願2004-89848 (P2004-89848)</p> <p>(22) 出願日 平成16年3月25日(2004.3.25)</p> <p>(65) 公開番号 特開2005-270868 (P2005-270868A)</p> <p>(43) 公開日 平成17年10月6日(2005.10.6)</p> <p>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 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</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 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、

前記反応回路において使用されるパラメータを変更する変更回路と、

前記変更回路に対してパラメータの変更を指示する指示回路とを備え、

前記変更回路は、

前記反応回路において使用されるパラメータを保持する保持回路と、

前記保持回路ごとに設けられ、前記保持回路が保持したパラメータを記憶する記憶装置と、

前記保持回路ごとに設けられ、前記保持回路が保持しているパラメータを前記記憶装置へ転送するように前記保持回路を制御する転送制御回路とを含み、

前記転送制御回路は、前記保持回路から前記記憶装置へのパラメータ転送を指示する変更制御信号と、前記変更制御信号が入力された時刻を表すアドレスとを前記指示回路から入力され、前記保持回路に保持されているパラメータを前記変更制御信号が入力された時刻を表すアドレスに記憶させ、その後、シミュレーション動作が停止され、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、前記記憶装置から

前記保持回路へのパラメータ転送を指示する変更制御信号とを前記指示回路から入力され、前記記憶装置の指定されたアドレスのパラメータを前記保持装置に保持させ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】

前記記憶装置は、前記保持回路が保持したパラメータを複数記憶し、

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パラメータの中から一のパラメータを前記保持回路へ転送するように前記記憶装置を制御す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】

10

【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。

20

【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、特定の時点のパラメータや別のパラメータを転送して再設定するためには、膨大な時間が必要となる。

30

【0004】

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、シミュレーションに使用するパラメ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、前記反応回路において使用されるパラメータを変更する変更回路と、前記変更回路に対してパラメータの変更を指示する指示回路とを備え、前記変更回路は、前記反応回路において使用されるパラメータを保持する保持回路と、前記保持回路ごとに設けられ、前記保持回路が保持したパラメータを記憶する記憶装置と、前記保持回路ごとに設けられ、前記保持回路が保持しているパラメータを前記記憶装置へ転送するように前記保持回路を制御する転送制御回路とを含み、前記転送制御回路は、前記保持回路から前記記憶装置へのパラメータ転送を指示する変更制御信号と、前記変更制御信号が入力された時刻を表すアドレスとを前記指示回路から入力され、前記保持回路に保持されているパラメータを前記変更制御信号が入力された時刻を表すアドレスに記憶させ、その後、シミュレーション動作が停止され、シミュレーショ

40

50

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、前記記憶装置から前記保持回路へのパラメータ転送を指示する変更制御信号とを前記指示回路から入力され、前記記憶装置の指定されたアドレスのパラメータを前記保持装置に保持させる。

【0006】

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、反応回路において使用されるパラメータを変更する変更回路が設けられているので、新たなパラメータを外部から転送することなく、反応回路において使用されるパラメータを変更して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

【0012】

また、保持回路が保持したパラメータを記憶する記憶装置が保持回路ごとに設けられているので、保持回路が保持したパラメータ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パラメータを保持回路に再度保持させることができ、反応回路において使用されるパラメータを過去に使用したパラメータに変更することができる。また、保持回路が保持しているパラメータを記憶装置へ転送するように保持回路を制御することができるので、反応回路において使用されたパラメータを記憶装置に適宜記憶させることができる。また、反応回路において使用されるパラメータを自動的に再設定することができる。

20

【0014】

前記記憶装置は、前記保持回路が保持したパラメータを複数記憶し、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パラメータの中から一のパラメータを前記保持回路へ転送するように前記記憶装置を制御することが好ましい。この場合、記憶装置が記憶している複数のパラメータの中から一のパラメータを保持回路へ転送することができるので、記憶装置に記憶させているパラメータを反応回路において使用されるパラメータとして必要に応じて再度設定することができる。

【発明の効果】

【0016】

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、反応回路において使用されるパラメータを変更する変更回路が設けられているので、新たなパラメータを外部から転送することなく、反応回路において使用されるパラメータを変更して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。

30

【発明を実施するための最良の形態】

【0017】

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。

40

【0018】

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、複数の物質カウンタB1～Bm（mは任意の正数）、変更指示回路C及び接続切り換え回路SWを備える。

【0019】

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、物質カウンタB1～Bmは、シミュ

50

レーションに使用される物質ごとに設けられる。

【0020】

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。

【0021】

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、各配線がマトリクス状に配置されている。

【0022】

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。

【0023】

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。

【0024】

物質カウンタB1~Bmは、例えば、バイナリカウンタ等から構成され、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、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。

【0025】

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。

【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。

【0027】

10

20

30

40

50

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。

10

【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】

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

【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。

30

【0032】

変更指示回路CCは、所定の論理回路等から構成され、シミュレーション中に、パラメータの変更及び切り替え（マルチタスク時）を指示するための変更制御信号を反応実行回路H 1～H nへ出力する。例えば、マルチタスクの場合、一定時間ごとにパラメータを切り替えたり、シミュレーションが所定の条件に達した場合にパラメータを切り替えるための変更制御信号が出力される。なお、変更制御信号の入力方法は、上記の例に特に限定されず、変更指示回路CCを省略して外部の所定の装置等から変更制御信号を適宜入力するようにしてもよい。

40

【0033】

図2は、図1に示す反応実行回路H 1の一例の構成を示すブロック図である。図2に示す反応実行回路H 1は、演算装置H 11、H 13及びパラメータ保持装置H 12を備える。他の反応実行回路H 2～H nも同様に構成され、下記と同様に動作する。

【0034】

パラメータ保持装置H 12は、演算装置H 11で使用されるパラメータを予め記憶している。演算装置H 11は、絞り回路V 1から出力された乱数に対してパラメータ保持装置

50

H 1 2 が保持しているパラメータを用いて所定の演算を行い、演算値に応じた反応速度となるように、増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。例えば、パラメータ保持装置 H 1 2 に “ 2 ” が記憶されている場合、演算装置 H 1 1 は、反応速度が 2 倍になるように増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。

【 0 0 3 5 】

演算装置 H 1 3 は、変更指示回路 C C から変更制御信号を受けると、パラメータ保持装置 H 1 2 に記憶されているパラメータを読み出し、読み出したパラメータに対して所定の演算を行ってパラメータを変更（増減）させ、演算値を新たなパラメータとしてパラメータ保持装置 H 1 2 に保持させる。例えば、パラメータ保持装置 H 1 2 に “ 2 ” が記憶されている場合、変更指示回路 C C から反応速度を 2 倍にすることを指示する変更制御信号を受けると、演算装置 H 1 3 は、反応速度がさらに 2 倍になるようにパラメータ（ “ 2 ” ）に “ 2 ” を乗算し、演算値 “ 4 ” を新たなパラメータとしてパラメータ保持装置 H 1 2 に保持させる。

10

【 0 0 3 6 】

その後、演算装置 H 1 1 は、絞り回路 V 1 から出力された乱数に対してパラメータ保持装置 H 1 2 が保持している新たなパラメータを用いて所定の演算を行い、演算値に応じた反応速度になるように、増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。上記の場合、パラメータ保持装置 H 1 2 に “ 4 ” が記憶されているので、演算装置 H 1 1 は、反応速度が 4 倍になるように増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。なお、パラメータ保持装置 H 1 2 が保持するパラメータは、上記の数値に特に限定されず、関数等を用いてもよく、また、パラメータは、一つの数値、複数の数値の組み合わせ等を含む。

20

【 0 0 3 7 】

本実施の形態において、物質カウンタ B 1 ~ B m が演算素子の一例に相当し、演算装置 H 1 1 が反応回路の一例に相当し、パラメータ保持装置 H 1 2 及び演算装置 H 1 3 が変更回路の一例に相当し、パラメータ保持装置 H 1 2 が保持回路の一例に相当し、演算装置 H 1 3 が演算装置の一例に相当し、変更指示回路 C C が指示回路の一例に相当する。

【 0 0 3 8 】

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 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。

30

【 0 0 3 9 】

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。

40

【 0 0 4 0 】

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

50

。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。

【0041】

また、上記のシミュレーション中に、変更指示回路CCからパラメータの変更を指示するための変更制御信号が反応実行回路H1～Hnへ入力されると、各反応実行回路H1～Hnの演算装置H13は、パラメータ保持装置H12に記憶されているパラメータを読み出し、読み出したパラメータに対して所定の演算を行い、演算値を新たなパラメータとしてパラメータ保持装置H12に保持させる。その後、各反応実行回路H1～Hnの演算装置H11は、各絞り回路V1～Vnから出力された乱数に対してパラメータ保持装置H12が保持している新たなパラメータを用いて所定の演算を行い、演算値に応じた反応速度になるように、増加指令用の入力配線I1～Inに増加指令をそれぞれ出力するとともに、減少指令用の入力配線D1～Dnに減少指令をそれぞれ出力する。

10

【0042】

このように、各反応実行回路H1～Hnにおいて使用されるパラメータが保持され、保持されているパラメータを用いて演算した演算値を新たなパラメータとしてシミュレーションに使用することができるので、各反応実行回路H1～Hnにおいて使用されるパラメータを種々の値に変更して再度設定することができる。したがって、新たなパラメータを外部から転送することなく、各反応実行回路H1～Hnにおいて使用されるパラメータを変更して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。

20

【0043】

なお、本実施の形態では、反応実行回路H1～Hnにおいて使用されるパラメータについて説明したが、この例に特に限定されず、乱数発生器R1～Rn、酵素カウンタK1～Kn、絞り回路V1～Vn又は接続切り換え回路SWにおいてパラメータが使用されている場合は、これらの各回路に本発明を同様に適用して同様の効果を得ることができる。

【0044】

図3は、図1に示す反応実行回路H1として使用可能な他の反応実行回路H1aの構成を示すブロック図である。図3に示す反応実行回路H1aと図2に示す反応実行回路H1とで異なる点は、演算装置H13に代えて変更制御回路H14及び記憶装置H15が追加された点であり、その他の点は図2に示す反応実行回路H1と同様であるので詳細な説明は省略する。

30

【0045】

変更制御回路H14は、変更指示回路CCから入力される変更制御信号に応じて、パラメータ保持装置H12aから記憶装置H15へのパラメータ転送及び記憶装置H15からパラメータ保持装置H12aへのパラメータ転送を制御する。具体的には、変更制御回路H14は、パラメータ保持装置H12aから記憶装置H15へのパラメータ転送を指示する変更制御信号を受けた場合、パラメータ保持装置H12aに保持されているパラメータを記憶装置H15の所定のアドレスに記憶させる。また、変更制御回路H14は、記憶装置H15からパラメータ保持装置H12aへのパラメータ転送を指示する変更制御信号を受けた場合、記憶装置H15の指定されたアドレスのパラメータをパラメータ保持装置H12aに保持させる。例えば、アドレスA1のパラメータD1を記憶装置H15からパラメータ保持装置H12aへ転送するように指示された場合、変更制御回路H14は、記憶装置H15に対してアドレスA1のパラメータD1をパラメータ保持装置H12aへ転送するように指示し、記憶装置H15は、アドレスA1のデータD1をパラメータ保持装置H12aへ転送する。

40

【0046】

記憶装置H15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、

50

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。具体的には、パラメータ保持装置H12aから記憶装置H15へのパラメータ転送を指示する変更制御信号が変更指示回路CCから時刻を表すアドレスとともに入力され、変更制御回路H14は、パラメータ保持装置H12aに保持されているパラメータを記憶装置H15の変更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H15からパラメータ保持装置H12aへのパラメータ転送を指示する変更制御信号が変更指示回路CCから入力され、変更制御回路H14は、記憶装置H15の指定されたアドレスのパラメータをパラメータ保持装置H12aに保持させる。本例では、パラメータ保持装置H12aが保持回路の一例に相当し、記憶装置H15が記憶装置の一例に相当し、変更制御回路H14が転送制御回路の一例に相当する。

10

【0047】

この場合、パラメータ保持装置H12aが保持したパラメータを記憶する記憶装置H15がパラメータ保持装置ごとに設けられているので、変更制御信号に応じて、パラメータ保持装置H12aが保持したパラメータを記憶装置H15に記憶させることができるとともに、記憶装置H15に記憶させている複数のパラメータの中から一のパラメータをパラメータ保持装置H12aに再度保持させることができ、反応回路において使用されるパラメータを過去に使用したパラメータに変更することができる。

20

【0048】

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、glucose(グルコース)を分解する代謝過程であるGlycolysis(解糖)を示しており、hexokinase(ヘキソキナーゼ)が酵素となり、glucose及びATP(アデノシン三リン酸)からglucose6P(グルコース-6-リン酸)、ADP(アデノシン二リン酸)及びH₊が生成される。

30

【0049】

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、hexokinaseの分子数がそのカウント値として設定され、hexokinase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hexokinaseの分子数に応じて反応実行回路HによるGlycolysisの実行及び不実行が制御される。

【0050】

反応実行回路Hは、反応前の物質であるglucose及びATPの分子数を表す物質カウンタBa, Bbと、反応後の物質であるglucose6P, ADP及びH₊の分子数又は原子数を表す物質カウンタBc, Bd, Beとに接続切り換え回路(図示省略)により接続されている。

40

【0051】

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Ba, Bbにそのカウント値を1だけ減少するように指示するとともに、物質カウンタBc, Bd, Beにそのカウント値を1だけ増加するように指示し、物質カウンタBa, Bbは、1だけカウント値を減少させ、物質カウンタBc, Bd, Beは、1だけカウント値を増加させる。このとき、反応実行回路Hは、パラメータ保持装置HPに保持されているパラメータAにより規定される反応速度Aで反応を進行させる。

【0052】

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

50

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。

【0053】

その後、シミュレーション中に、変更制御信号が変更制御回路（図示省略）から反応実行回路 *H* へ入力されると、演算装置 *HC* は、パラメータ保持装置 *HP* に保持されているパラメータ *A* から演算されたパラメータ *B* をパラメータ保持装置 *HP* に保持させ、反応実行回路 *H* は、パラメータ保持装置 *HP* に保持されているパラメータ *B* により規定される反応速度 *B* で反応を再開させる。

【0054】

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。

【0055】

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。

【0056】

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。

【0057】

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*、変更指示回路 *CC* 及び拡散回路 *KC* を備える。

【0058】

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 *B1* ~ *B3* 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 *B1'* ~ *B3'* 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 *B1* ~ *B3*、*B1'* ~ *B3'* は、拡散回路 *KC* を介して接続されている。

【0059】

拡散回路 *KC* は、物質カウンタ *B1* ~ *B3*、*B1'* ~ *B3'* 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 *B1* ~ *B3*、*B1'* ~ *B3'* のカウント値を制御する。例えば、物質カウンタ *B1* のカウント値が物質カウンタ *B1'* 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 *B1* 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 *B1'* のカウント値を順次増加させる。また、拡散回路 *KC* は、図2に示す反応実行回路 *H1* と同様に構成され、変更指示回路 *CC* からの変更制御信号に応じて拡散速度を規定するパラメータを変更する。

【0060】

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 *B1* ~ *B3*、*B1'* ~ *B3'* 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、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 *CB1*、*CB2* 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 *C1*、*C2* ごとに内部の生化学反応がシミュレーションされ、セル *C1*、*C2* 間の拡散速度が変更制御信号に応じて変更される。

10

20

30

40

50

【 0 0 6 1 】

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、変更制御信号に応じて反応速度及び拡散速度を規定するパラメータを変更して再度設定することができる。

【 0 0 6 2 】

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。

10

【 0 0 6 3 】

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 6 4 】

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、反応実行回路等において使用されるパラメータを種々の値に変更して再度設定することができる。

20

【 0 0 6 5 】

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主要部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、反応実行回路H1～Hnが反応実行回路H1b～Hnbに変更され、ネットワーク回路SN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し、本実施の形態の主要部である反応実行回路H1b～Hnb及びネットワーク回路SN以外の回路の図示を省略する。

30

【 0 0 6 6 】

図8に示す反応実行回路H2bは、演算装置H11、H13及びパラメータ保持装置H12bを備える。演算装置H11、H13は、図2に示す演算装置H11、H13同様に構成され、同様に動作する。パラメータ保持装置H12bは、図2に示すパラメータ保持装置H12と同様に動作するとともに、保持しているパラメータをネットワーク回路SNへ出力する。他の反応実行回路H3b～Hnbも同様に構成され、同様に動作する。

【 0 0 6 7 】

ネットワーク回路SNは、所定の論理回路等から構成され、各反応実行回路H2b～Hnbのパラメータ保持装置H12bのパラメータを集計して集計結果を反応実行回路H1bへ出力する。ネットワーク回路SN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。なお、パラメータの集計結果は、各パラメータをそのまま出力したり、所定の条件を満たすパラメータのみを出力したり、前記パラメータを用いて演算した演算値を出力する等の種々のデータを含む。また、ネットワーク回路SNが集計するデータは、パラメータに特に限定されず、演算装置H11の演算値等を併せて集計するようにしてもよい。

40

【 0 0 6 8 】

50

反応実行回路 H 1 b は、演算装置 H 1 1 a , H 1 3 a 及びパラメータ保持装置 H 1 2 を備える。パラメータ保持装置 H 1 2 は、図 2 に示すパラメータ保持装置 H 1 2 と同様に構成され、同様に動作する。演算装置 H 1 1 a は、絞り回路 V 1 から出力された乱数に対してパラメータ保持装置 H 1 2 が保持しているパラメータを用いて所定の演算を行い、演算値に応じた反応速度となるように、増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。また、演算装置 H 1 1 a は、演算値を演算装置 H 1 3 a へ出力する。

【 0 0 6 9 】

演算装置 H 1 3 a は、変更指示回路 C C (図示省略) から変更制御信号を受けると、パラメータ保持装置 H 1 2 に記憶されているパラメータと、演算装置 H 1 1 a の演算値と、ネットワーク回路 S N の集計結果とを用いて所定の演算を行い、演算値を新たなパラメータとしてパラメータ保持装置 H 1 2 に保持させる。その後、演算装置 H 1 1 a は、絞り回路 V 1 から出力された乱数に対してパラメータ保持装置 H 1 2 が保持している新たなパラメータを用いて所定の演算を行い、演算値に応じた反応速度になるように、増加指令用の入力配線 I 1 に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 に減少指令を出力する。本実施の形態では、演算装置 H 1 1 a が反応回路の一例に相当し、パラメータ保持装置 H 1 2 が保持回路の一例に相当し、ネットワーク回路 S N、演算装置 H 1 3 a が演算装置の一例に相当する。

【 0 0 7 0 】

上記のように、本実施の形態では、パラメータ保持装置 H 1 2 に保持されているパラメータと、反応実行回路 H 2 b ~ H n b のパラメータ保持装置 H 1 2 b のパラメータの集計結果と、演算装置 H 1 1 a の演算値とを用いて演算した演算値を新たなパラメータとしてシミュレーションに使用することができるので、複数の反応実行回路 H 2 b ~ H n b において使用されるパラメータをも考慮して反応実行回路 H 1 b においてシミュレーションに使用されるパラメータを種々の値に変更して再度設定することができる。

【 0 0 7 1 】

なお、本実施の形態では、反応実行回路 H 2 b ~ H n b のパラメータを用いて反応実行回路 H 1 b のパラメータを設定したが、この例に特に限定されず、パラメータを変更する反応実行回路とパラメータを出力する反応実行回路は種々の組み合わせを用いることができる。また、一の反応実行回路のパラメータの変更に用いるデータは、他の反応実行回路のパラメータに特に限定されず、反応実行回路 H 2 b ~ H n b の演算装置 H 1 3 の演算値等をも用いたり、種々の変更が可能である。

【 0 0 7 2 】

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 7 3 】

【 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 に示す反応実行回路の一例の構成を示すブロック図である。

【 図 3 】 図 1 に示す反応実行回路として使用可能な他の反応実行回路の構成を示すブロッ

10

20

30

40

50

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。

【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主要部の構成を示すブロック図である。

10

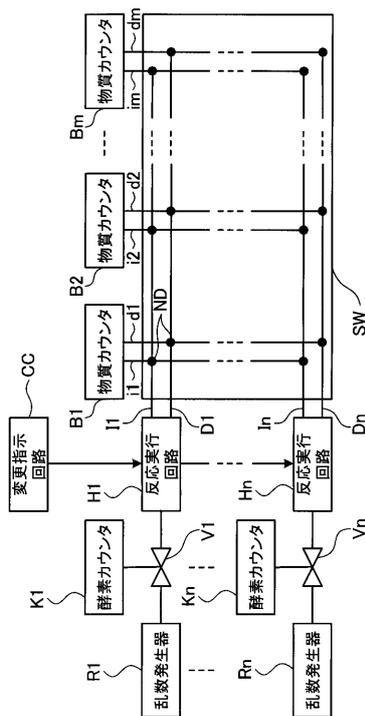
【符号の説明】

【0074】

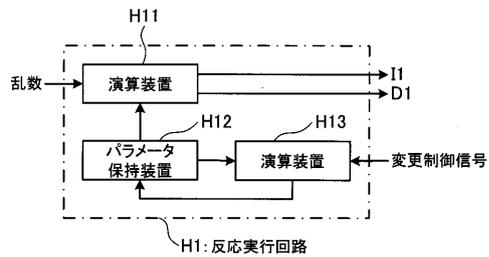
- R1 ~ Rn 乱数発生器
- K1 ~ Kn 酵素カウンタ
- V1 ~ Vn 絞り回路
- H1 ~ Hn, H1a, H1b ~ Hnb 反応実行回路
- B1 ~ Bm 物質カウンタ
- SW 接続切り換え回路
- CC 変更指示回路
- SN ネットワーク回路
- H11, H11a, H13, H13a 演算装置
- H12, H12a, H12b パラメータ保持装置
- H14 変更制御回路
- H15 記憶装置

20

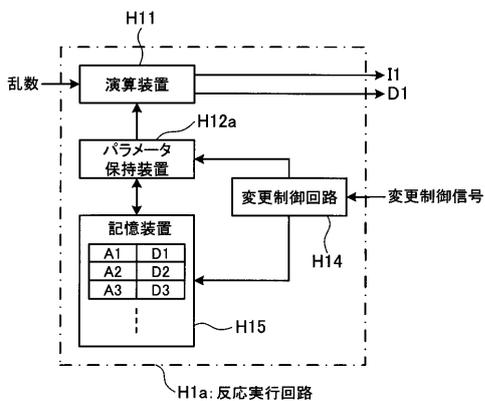
【図1】



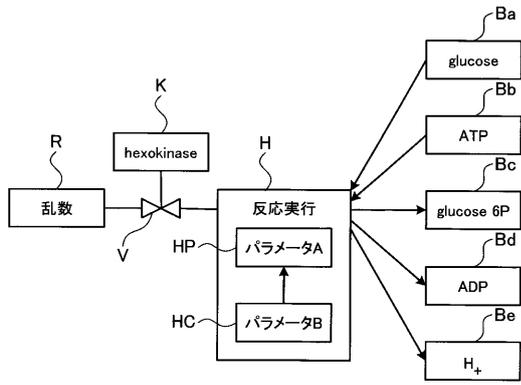
【図2】



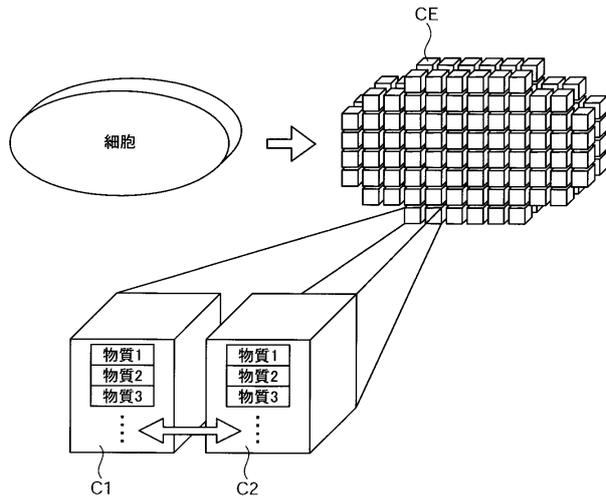
【図3】



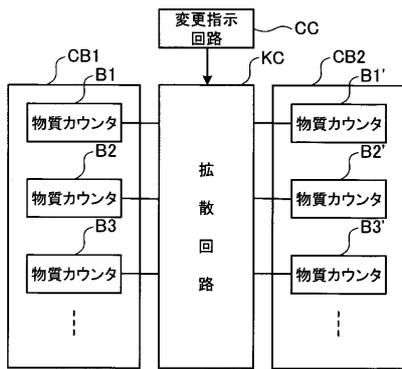
【図4】



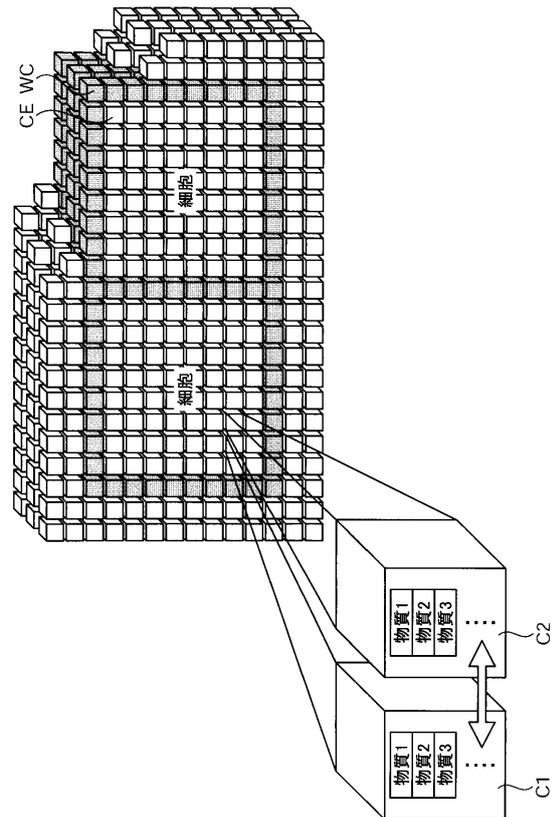
【図5】



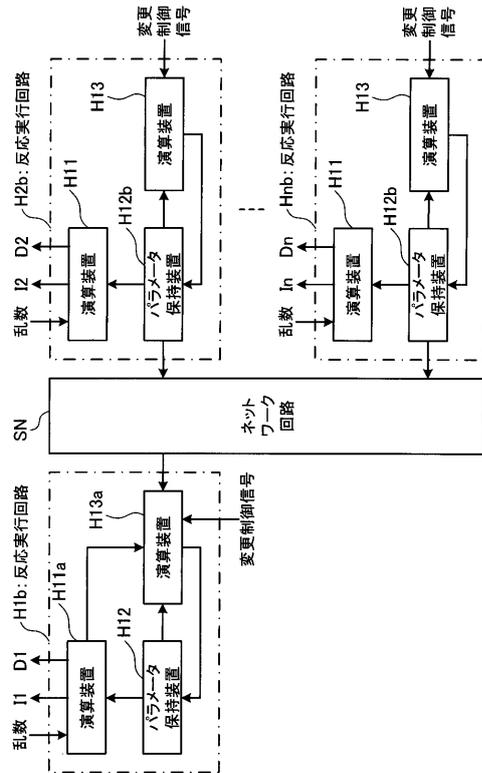
【図6】



【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2002-126497(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G06F 19/00

B01J 19/00

C07B 61/00