

平成21年 4月27日現在

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2007～2008

課題番号：19700282

研究課題名（和文） 超並列分子コンピューティングシステムに関する研究

研究課題名（英文） A study on a massively parallel molecular computing system

研究代表者

平塚 眞彦（HIRATSUKA MASAHIKO）

仙台電波工業高等専門学校・情報通信工学科・准教授

研究者番号：80331966

研究成果の概要：

近年、VLSI（超大規模集積回路）システムの大規模並列化に伴い、配線の複雑さに起因する性能限界が深刻な問題になっている。本研究代表者は配線に制限されない高並列集積システムの実現を目的として、生体の細胞内部に存在する高密度な反応回路網の原理に着目し、生体分子の分子識別能力に基づく無配線分子コンピューティングシステムのモデルを提案すると共に、実験を通してその基本原理を実証した。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,000,000	0	1,000,000
2008年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,900,000	270,000	2,170,000

研究分野： 計算機科学

科研費の分科・細目： 情報学・生体生命情報学

キーワード： 計算機システム、生体生命情報学、分子コンピューティング

1. 研究開始当初の背景

現在の VLSI（超大規模集積回路）技術は、その大規模並列化に伴い、配線の複雑さに起因する性能限界が深刻になりつつある。また、極限的集積化が進行した分子スケールのデバイス技術においては、配線による情報伝達自体が原理的に困難になると予想されている。一方、生体の細胞内部では、酵素の分子識別能力に基づいて高密度な生化学反応ネットワークが形成されており、現在の VLSI をはるかに凌駕する集積度が実現されている。本研究代表者は、このような生体分子シ

ステムの原理が配線に制限されない高並列計算の観点からも有用な概念を含むことに着目し、酵素トランジスタなどに代表される人工触媒素子に基づく無配線分子コンピューティング（Interconnection-Free Biomolecular Computing）のモデルを世界に先駆けて提案してきた。これまでの理論的・実験的取り組みを通して、多数の人工触媒素子の協調動作によって創出される人工的な反応拡散場を、無配線集積回路を実現するための計算機構として利用する着想を得るに至った。

2. 研究の目的

本研究課題では、無配線分子コンピューティングの可能性を総合的に検証するために、下記の2項目を目的とする。

(1) 集積回路工学の観点から

分子回路の構成に関して機能的に完全な人工触媒素子の機能モデルを定式化する。また、この人工触媒素子をマイクロ電極デバイスとして実現し、これを2次元配列状に集積化した人工触媒素子チップを開発する。マイクロ電極の協調動作により、チップ上の微量溶液中に人工的に制御された2次元反応拡散場を創出することを試み、無配線集積回路の動作原理の実証を目指す。

(2) 計算機科学の観点から

人工的な反応拡散場を利用した新しいコンピューティング/信号処理モデルを検討する。これは究極的には人工触媒素子チップにおいて完全並列に実現することを想定するが、用途によっては本研究代表者らのグループが提案する「デジタル反応拡散システム (DRDS: Digital Reaction-Diffusion System)」と呼ぶ非線形多次元フィルタの枠組みを利用して、シグナルプロセッサ上で実現することも可能である。DRDSを用い、(i)生物系テクスチャ画像の生成、(ii)指紋画像の復元、(iii)2次元経路探索、(iv)ポロノイ図生成などのアルゴリズムを開発する。

3. 研究の方法

(1) 集積回路工学の観点からの取り組み

① 本研究で提案する人工触媒素子は、溶液中の特定の反応を選択的に触媒し、その触媒活性は特定のエフェクターに依存して変化する。このような活性制御可能な触媒をトランジスタとして用いることにより、現在のVLSIと質的に等価な回路機能を実現可能である。今回の計画では、人工触媒素子そのものを化学修飾されたマイクロ電極デバイスによって実現する方式を検討する。まず可逆な酸化還元分子(キノン/ヒドロキノン等)を情報担体として、その生成・消滅をチップ上に集積化された多数のマイクロ電極デバイス(Pt)で制御することにより、目的に応じた反応拡散場をチップ上の微量溶液中に人工的に形成できることを実験的に検証する。すでに人工触媒素子の1次元/2次元配列の基礎実験などを完了しており、今回はこの結果を発展させ、64個程度の人工触媒素子を2次元配列状に集積化した人工触媒素子チップを試作し、それぞれの素子を外部からプログラム制御するインターフェースを実装する。

② 各種の非線形結合振動子系を実現する人

工触媒ネットワークを設計するとともに、試作した2次元人工触媒素子チップをプログラムすることにより、その動作を確認する。特に、FitzHugh-南雲方程式に代表される興奮場の反応拡散ダイナミクスをチップ上で再現し、Belousov-Zhabotinski反応のような動的に伝播する反応拡散波の発生を確認する。また、チップ上で発生する反応拡散波の可視化や、これを用いた最適経路探索の実現などを含め、説得力のあるデモンストレーションを試みる。

(2) 計算機科学の観点からの取り組み

将来的には、人工触媒素子を集積化し、配線によらない超並列処理を実行する新しい集積回路が実現できると考えられる。人工触媒素子による無配線集積回路は、物質濃度の時空間パターンに情報をコーディングするとともに、反応拡散ダイナミクスのパターン形成能力を利用することによって、ある種の問題を超並列的に解くことが可能である。しかしながら、このような分子のダイナミクスを利用したアルゴリズムの系統的な設計法や計算能力は明らかになっていない。そこで、反応拡散ダイナミクスをテクスチャ生成や画像復元のための多次元フィルタとして利用することに焦点を絞った検討を行う。本研究代表者らのグループは、すでにこのような理論展開のために「デジタル反応拡散システム (DRDS: Digital Reaction-Diffusion System)」と呼ぶ枠組みを提案している。DRDSを用い、(i)生物系テクスチャ画像の生成、(ii)指紋画像の復元、(iii)2次元経路探索、(iv)ポロノイ図生成などのアルゴリズムを検討する。検討した応用(i)~(iv)のアルゴリズムを数値解析用ソフトウェアMATLAB上において実装し、総合的な評価を行う。

4. 研究成果

(1) 集積回路工学の観点から

① 人工触媒素子(酵素トランジスタ)のモデル

現在のVLSI(超大規模集積回路)においては、チップ面積の70~80%以上が配線で占められており、次世代のマイクロエレクトロニクス技術の開発は、配線の複雑さとの戦いであるといっても過言ではない。これに対して、生体の内部では、ミクロンオーダーの微細な空間において膨大な種類の物質が存在しており、大規模な生化学反応回路が形成されている。このメカニズムの中核は、酵素などの生体分子の分子識別能力にある。生体内で使用される触媒の重要な性質の1つは、ある特定の物質(基質)のみに選択的に働くことであり、それぞれの分子の選択性が、反応ネットワークのトポロジーを決定している。

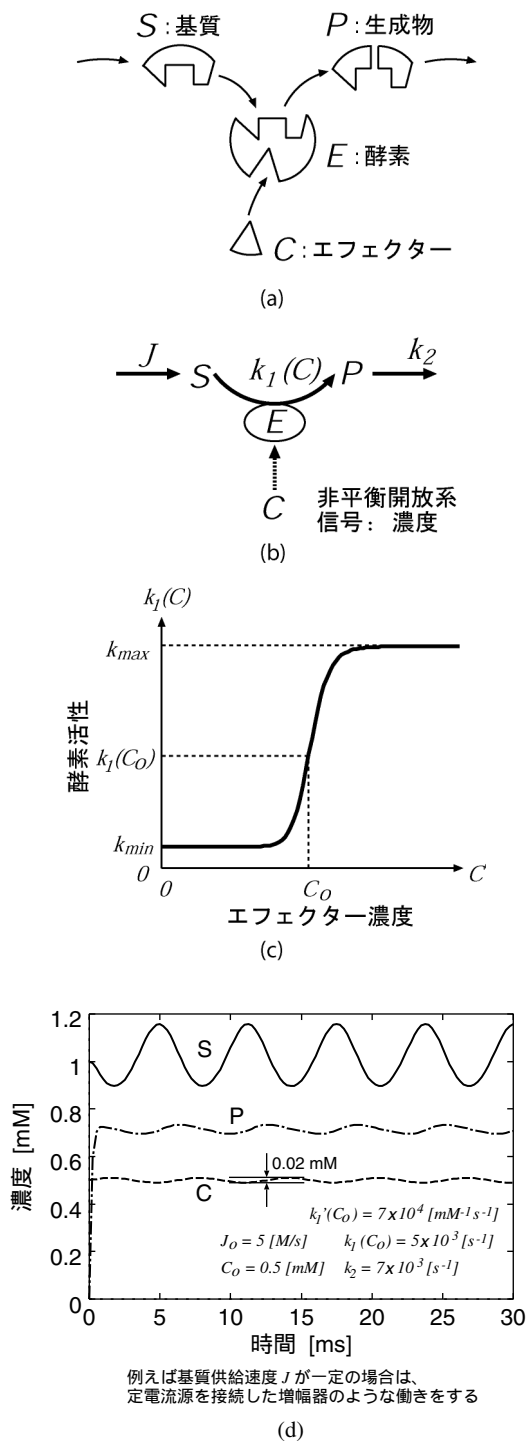


図1 酵素トランジスタのモデル：
(a) 模式図、(b) 記号、(c) 活性調節メカニズム、(d) 動作波形の例

それでは、生体分子システムの原理をヒントとして、まったく配線を用いない集積回路を実現することができないだろうか。本研究では、このような無配線集積回路実現のための基本素子モデルとして、「酵素トランジスタ (Enzyme Transistor)」と呼ぶ人工触媒のモデルを提案している。酵素トランジスタは、

図1のように、ある種のエフェクターによりその活性が制御される酵素をモデルにした分子素子である。ここで、SとPはそれぞれ基質および生成物（の濃度）を表し、Jは基質の供給速度を表す。酵素トランジスタEの活性はエフェクター濃度Cにより制御される。生体内部においても、酵素活性の直接的あるいは間接的な調節が、高機能な反応ネットワークを構築する上で、本質的に重要な役割を果たしている。酵素トランジスタは、「活性調節のメカニズム」を最も単純化された形で抽象化したモデルということができる。

このように定義された酵素トランジスタの動作は、微分方程式モデルを用いてシミュレートすることが可能である。このシミュレーションを通して、分子の濃度により信号を表現するようなさまざまな分子回路（増幅回路や論理回路など）が酵素トランジスタを用いて構成可能であることが判明している。酵素トランジスタによって、現在のVLSIと質的に等価な機能を実現できることが明らかになった。

② 電気化学的手法に基づく酵素トランジスタの実現

酵素トランジスタを完全な分子素子として実現するためには、活性が調節可能な酵素分子を人工的に合成することが必要になる。しかしながら、現在の技術レベルでも、酵素トランジスタを図2に示すような電気化学的デバイスとして実現することが可能である。この場合、酵素トランジスタは、溶液中の特定のエフェクター分子を検出するディテクタ電極とその結果に応じてある特定の酵素の活性を制御するモジュレータ電極を結合することにより実現される。このような電気化学的手法による酵素トランジスタを実現する場合には、モジュレータ電極上に固定化された酵素の活性をいかにして電気的に制御するかということが鍵となる。これは、実際には、酸化還元酵素と呼ばれるクラスの酵素を用いて実現可能であることが判明している。すなわち、酸化還元酵素は基質との間での電子授受による酸化還元反応を触媒する酵素であり、この電子の流れを電極デバイスで制御することにより、等価的に反応速度を制御することが可能である。

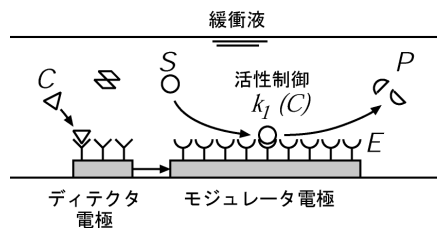


図2 電気化学的手法に基づく酵素トランジスタ

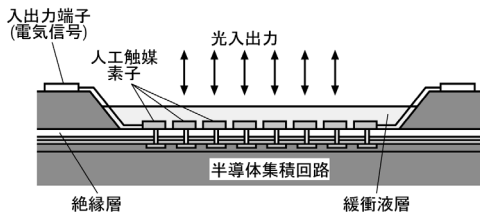


図3 人工触媒素子集積回路

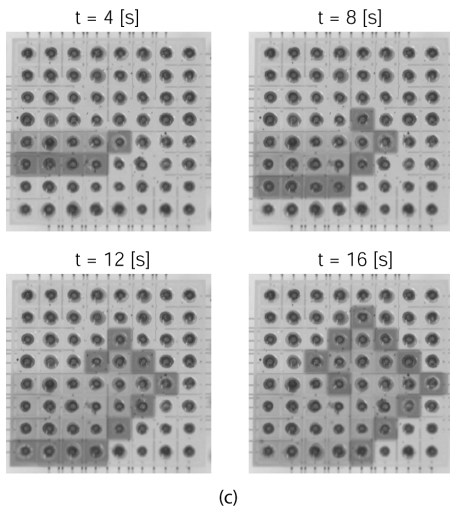
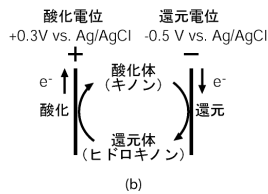
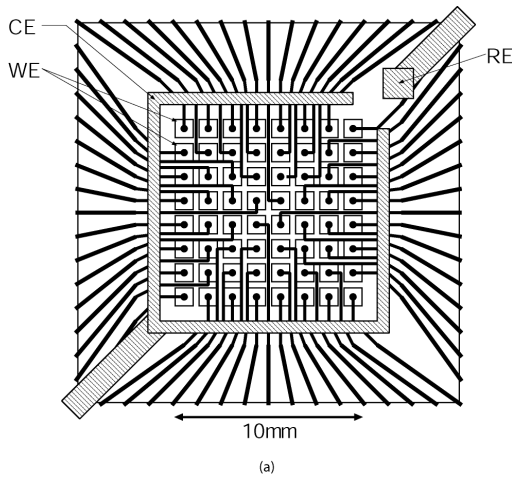


図4 マイクロ電極アレーによって制御された人工的反応拡散場の実現：
(a) マイクロ電極アレーのレイアウト、
(b) 酸化還元サイクル、(c) 電極表面の微量溶液中を伝播する反応拡散波

③ マイクロ電極アレーによる人工的反応拡散場の実現

将来的には、図3に示すように、酵素トランジスタに代表される人工触媒素子を基板上に集積化し、配線によらない並列処理を実行する集積回路が実現できると考えられる。このような“wet”な系を利用する集積回路の本質的な特徴は、次節で述べるように溶液という連続媒体中の物質濃度の時空間パターンに情報をコーディングすることにより、いわゆる反応拡散 (Reaction-Diffusion) のメカニズムに基づく情報処理が可能になる点にある。

そこで、基板上に集積化された酵素トランジスタによって、さまざまな目的に応じて制御された反応拡散場が形成できることを実験的に検証することが今後の重要な課題になる。本研究では、この第1段階として、図4に示すように酵素トランジスタの機能を模倣する集積化マイクロ電極アレー (Pt 電極) を試作し、これを用いて電極表面の微量溶液中に溶存するキノン/ヒドロキノンの酸化還元サイクルを制御することにより、人工的な反応拡散場を創出することに成功した。この実験では、酵素トランジスタの機能をコンピュータ上でエミュレートしてマイクロ電極アレーを制御することにより、伝播性の反応拡散波を発生する反応拡散場を微量溶液中に実現することに成功した。以上の結果から、配線によらない集積回路の実現に向けた第一歩を踏み出すことができたと考えられる。

(2) 計算機科学の観点から

① 酵素トランジスタネットワークにおける反応拡散ダイナミクス

酵素トランジスタに基づく無配線集積回路の本質的な特徴は、溶液という連続媒体中の物質濃度の時空間パターンに多次元信号を適切にコーディングすることにより、いわゆる反応拡散のメカニズムを利用した高並列コンピューティング/信号処理が可能になる点にある。これまでの研究で、酵素トランジスタの機能は、反応拡散ダイナミクスを合成するという観点からもユニバーサルなものであることが判明している。典型的な例として、図5 (a)にFitzHugh-南雲方程式の系で見られるような興奮性反応拡散ダイナミクスを定性的に再現する2次元拡散結合酵素トランジスタネットワークのシミュレーションを示す。本ネットワークは、3種類の酵素トランジスタを2次元平面に配置した構成をとっており、興奮性反応拡散場で見られる典型的な反応拡散波 (物質濃度の波) を発生する。また、図5 (b)は生物の形態形成の数理モデルとして知られるチューリングの拡散不安定性のメカニズムを再現する酵素トランジスタネットワークのシミュレーションである。

これらの反応拡散ダイナミクスは、いずれも顕著なパターン形成能力を有しており、この性質を利用してある種の複雑な問題を超並列的に解くことが可能である。本研究では、上で述べた反応拡散のメカニズムを利用した経路探索アルゴリズムや画像強調アルゴリズムなどを提案している。無配線集積回路では、このような自然のアルゴリズムを積極的に活用できるものと期待される。

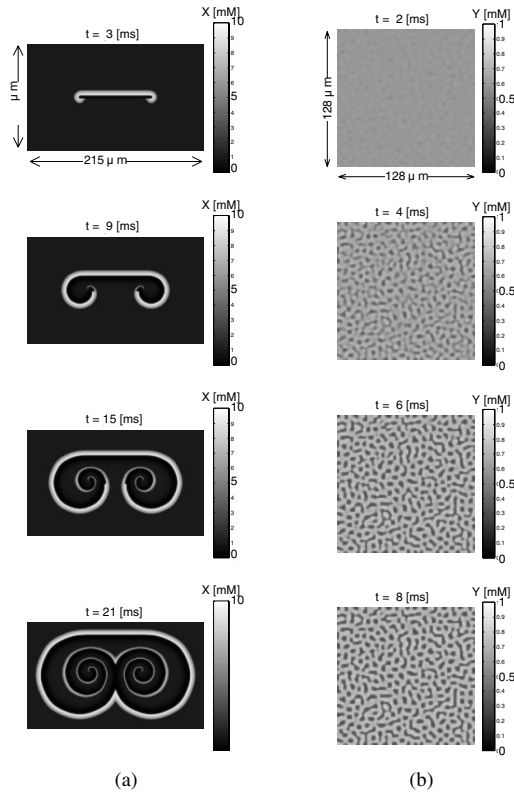


図5 酵素トランジスタネットワークで実現される反応拡散ダイナミクス：
(a) 興奮性反応拡散波の発生、
(b) チューリングパターンの発生

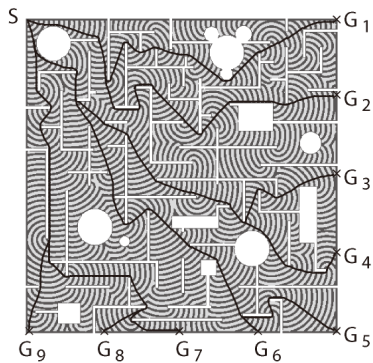


図6 興奮性反応拡散波による最適経路探索

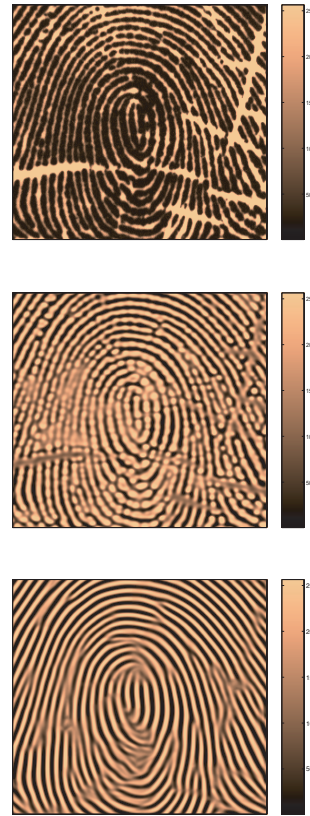


図7 チューリングのパターン形成原理を利用した指紋画像の復元
(処理の流れは、上から下へ進む)

② 現在の技術への応用

本研究で見出された反応拡散現象のパターン形成能力を利用する新しいアルゴリズムは、用途によっては、現在のコンピュータ上に実装して有効に利用することが可能である。本研究では、この原理をデジタル信号処理理論に沿って再構築した「デジタル反応拡散システム (DRDS: Digital Reaction-Diffusion System)」と呼ばれる枠組みを提案している。例えば、図6は DRDSを用いて、図5 (a)に示した興奮性反応拡散場をシミュレートし、最適経路探索に応用した例である。境界条件を適切に設定した2次元空間で反応拡散波を伝播させ、伝播経路をバックトラックすることにより、自由空間における最適経路を導出することが可能である。また、図5 (b)に示すパターン形成能力を有する反応拡散ダイナミクスは、優れた画像復元アルゴリズムとして利用することができる。図7は、傷のついた指紋画像を DRDSによって修復している様子を示している。このアルゴリズムは、そのパターン形成能力を利用して、不完全に撮像された指紋画像を復元することが可能である。これを本研究者のグループがすでに実用化しているセキュリティ用途向け指紋照合装置などに応用し

た場合、大幅な認識率の向上が期待できる。
現在、実用化に向けて具体的な検討を行っている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

- ① M. Hiratsuka, K. Ito, T. Aoki and T. Higuchi, "Toward biomolecular computers using reaction-diffusion dynamics", International Journal of Nanotechnology and Molecular Computation, 採録決定, (2009), 査読有
- ② M. Hiratsuka, K. Ito, T. Aoki and T. Higuchi, "Shortest path search using a reaction-diffusion processor", International Journal of Unconventional Computing, Vol. 4, No. 2, pp. 113-123, (2008), 査読有

[学会発表] (計0件)

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

平塚 眞彦 (HIRATSUKA MASAHIKO)

仙台電波工業高等専門学校・情報通信工学科・准教授

研究者番号：80331966

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし