

平成22年 6月 9日現在

研究種目：基盤研究 (B)
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19300104
 研究課題名 (和文) 抽象化学系のシミュレーションのための形の言語の開発と専用計算機システムの制作

研究課題名 (英文) Developing Shape Language and Building a Special Purpose Computer for Simulating Abstract Chemical Systems
 研究代表者 池上 高志 (IKEGAMI TAKASHI)
 東京大学・大学院総合文化研究科・教授
 研究者番号：10211715

研究成果の概要 (和文)：セルオートマトンを使った、抽象化学システムを主とする人工生命研究のシミュレーションとそれを支援するタイル型の高速度整数演算プロセッサのチップデザインを行なった。成果として、2、3次元の原始細胞のシミュレーションとその発表を行い、生命システムにおけるロバストネスの議論を行なった。計算機制作としては、チップのデザインを完成させ、FPGA を使ってエミュレートすることに成功した。

研究成果の概要 (英文)：Based on Cellular automaton modeling, we studied artificial cell system and designed a high-speed tile integer processing circuit. As results, we reported simulations of proto-cell systems on 2 and 3 dimensions and argued robustness of living systems. As for the main result, we completed the logical design of the integer processor and emulated its performance on FPGA systems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	7,900,000	2,370,000	10,270,000
2008年度	4,900,000	1,470,000	6,370,000
2009年度	1,900,000	570,000	2,470,000
年度			
年度			
総計	14,700,000	4,410,000	19,110,000

研究分野：人工生命

科研費の分科・細目：情報学／感性情報学・ソフトコンピューティング

キーワード：専用計算機、人工生命、オートマトン、FPGA、タイルプロセッサ

1. 研究開始当初の背景

近年の生物学の知見から、細胞の中は分子が非常に混雑しているため、通常の化学反応のように濃度依存型の反応系ではないし、拡散プロセスでもない。またオートマトンのようにきちんと定まったルールをもとに動いているわけでもない。その結果、より現実的な

モデルを求めて分子動力的なアプローチなどを試すことになるが、これにはマシンパワーと生命とは何か？というイメージの欠如から自ずと限界が生まれてくる。特に化学反応を正しく扱うフレームは確立していないし、そもそも生命という状態を対象とし、進化というタイムスケールに関し、分子動力学なアプローチを行なうことは不向きであ

る。これらの問題を克服するために、われわれは、化学反応だけではなく、形を考慮した化学反応ということから始め、1) 新しいプロセッサの開発、2) 形と反応のからんだ原初細胞のシミュレーションモデル群を提案、することを発案するに至った。

2. 研究の目的

提案は3年計画であり、その後のより大きな計画に向けてのプロトタイプとして計画している。現在われわれが始めているモデルは、「形と形の相互作用」ということからみた細胞の抽象的なモデルである。ここでいう形とは、実空間の分子や膜の形だけではなく、抽象的な高次元空間の形も含んでいる。具体的に現在進めている研究は、膜の形がいろいろと変わりながら平面を動く細胞のモデル、ライフゲームを高次元空間に投影したモデル、反応場を表面に持つ細胞のモデル、ライフゲームを用いた自発運動の生成モデル、自己修復オートマトンの具体化などである。

そこで研究を進めるにあたって、次の項目を考えている。1つ目は高速チップデザインのプロトタイプの作成、2番めにそれを使った人工化学反応と細胞進化モデルのシミュレーションである。3番目に、それらをロバストネス(生物システムの頑強性)という観点から議論すること。これらは同時進行的に行う予定である。具体的な内容は研究計画と方法のところに記載するが、ここではそれを以下のようにまとめてある。

1) チップセットのプロトタイプを作製する。デザインに関しては、現在の準備段階で大学院生の Duraid Madina が中心となって設計がほぼ完成している。このデザインどおりにチップを2段階で完成させることを目標としている。初年度にはザイリンクスのエミュレータを使った32個のプロセッサを持つ、整数演算専用の超マルチスレッドのプロセッサチップをデザインする。それを次年度以降で、FPGA を使ってエミュレートして有効性を検証する。

2) 形を使った人工細胞モデルの進化シミュレーションとして、2次元の細胞膜がある拘束条件の下で形を変えて行くときの、形と運動とセンサーの進化に関して研究を進めている。センサーとは環境の温度勾配や化学勾配への鋭敏性を持つことである。膜がある形をとることでセンサーとして活用でき、それが細胞の運動の構造に反映され、細胞全体の形が変化して行く。つまり新しい細胞のモデルは、形とセンサーと運動の3つの関係のダ

イナミクスの分析である。

3) 生物システム由来のロバストネスを特に、オートマトンモデルにより調べる。特に、自律運動する原初細胞モデルの安定性を調べ、膜の形などからめて議論する。

3. 研究の方法

1) チップ開発: Verilog を使って、タイル型の整数演算プロセッサのデザインを行う。これを完成させて、FPGA を使って確かに正しく動いていることを証明する。ここまでが、チップ開発の80パーセントである。海外学振の大学院生として、当時池上研究室に在学中であった博士課程の Duraid Madina を中心に、理研ゲノムセンターの泰地真弘氏の協力を得てこのチップデザインの開発を進める。

チップデザインのアイデアとしては、通常チップがパイプラインの深さを稼いでいるのに対し、ここでは超並列型のプロセッサユニットのセットにし、パイプラインを短くしているので一回の分岐に対し無駄にする命令が少なくすむ。特にメモリースイッチのおかげで、ひとつのパイプラインが分岐命令を受けるとただちに別のパイプラインにスイッチできる。ことなどがあげられる。2) 人工生命系のシミュレーション: 膜を作ったの中で代謝系が働き膜を保ちつつ動く、原初細胞の2次元シミュレーションをオートマトンモデルを使って行う。特に膜の動きやすさをパラメータ化することで、走化性が生まれるか、などを調べて行く。また3次元の原初細胞のシミュレーションも行う。この研究を行って行く中で、生命システムの持つ持続性/ロバストネスを、オートマトンのモデルや、化学実験、ロボット実験をベースに議論し、ロバストネスを議論する理論的な構造を探っていく。

4. 研究成果

1) タイル型整数演算プロセッサのデザインとFPGAによる証明。

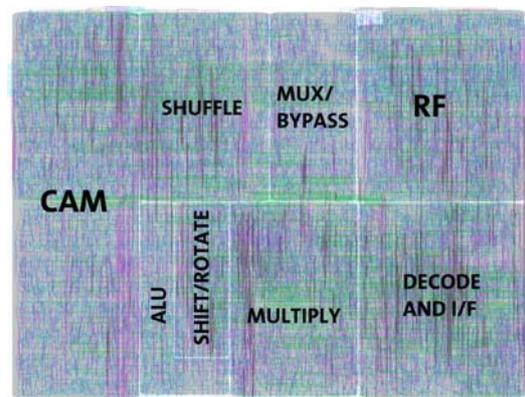
この整数演算専用のデザインは、複雑なパターンマッチングとコード制御のパフォーマンスをあげる一方、チップサイズを小さくすることを目的に設計された。完成したチップデザインは次のものである。

- i) 16ビットの整数演算のみのデータパス。
- ii) 低いレーテンシを持つメモリシステム
- iii) 明示的なCAM
- iv) LRU とハッシングのサポート
- v) プレディケーションの導入

vi) 圧縮された命令ストリーム

それぞれのコアは、3つの16ビットメモリーポートを持つ：2つが読み出し1つが書き出し。このうちの読み出しポートは通常は、命令フェッチにあてがわれるが、多重サイクル命令では、両方のポートを用いる。すべての命令が8ビット使って、2つか3つの演算を表し、6ビット使って命令のタイプ(opcode)を、2ビット使って追加のプレディケイトレジスターを表している。

コアのパイプラインは3つのステージを持ち、分岐命令が遅延を起こさないようになっている。



このプロトタイプ デザインの途中で、チップ上のプロセッサコア間でデータを効率よく移動するための3つの新しい技術が見つかった。それは、1) 4個の低速振幅 (low swing) リンクの発案。これは容量結合型のトランスミッターと新しい4つのセンスアンプおよび新しい解析技術からなり、これまでの技術に比べて約2倍以上エネルギー効率が良い。2) 容量結合型で、協調シグナル型のクロスバーデザインをした。これはオンチップワイヤーの密度が高く、アスペクト比も高い場合に、威力を発揮できる初めてのデザインである。3) 拡張されたマンハッタン型のトポロジーを使ったオンチップのバッファーを介さない“ホットポテト”ルーティングを用いる。これはパケット通信のレイテンシとエネルギー消費量の間の単純なトレードオフを可能にするもので、他の一般に使われるネットワークトポロジーより遥かに高いパフォーマンスを発揮する。この成果は研究協力者である, Duriad Madina 君の博士論文として出版する事が出来た。

2) 人工生命系のシミュレーション

i) 原初的な細胞のモデルをオートマトンを用いて設計し、代謝系が膜を作りながらその膜に包まれることで代謝系が反応をつける代謝系のモデルをデザインした。特に、この細胞が自発的に運動できる場合に、膜の自己維持と環境に反応する走化性のような性質を同時に持つシステムを設計することができた。

ii) ライフゲームを1層目のオートマトン、それにもう1層オートマトンを加えて、それらを相互作用させることにより、抽象的な細胞のような領域をつくることができた。与えられた領域のライフゲームの状態1の密度をある値に保つように制御したり、初期値の状態1の密度に応じて、その領域の密度を変化させるように、2層目のオートマトンを進化させることができた。

iii) ホメオダイナミクスという概念を提案した。これは、自律運動しながら自分の状態を環境によらないように保つ、ホメオスタシスの上位概念である。これをシミュレーションモデルによって示し、ロボットや油滴実験をもとに生命システムの持つロバストネスの概念を議論した。

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 17 件)

1. Matsuno, H., Hanczyc, M.M. and Ikegami, T. : Self-maintained Movements of Droplets with Convection Flow. ACAL 2007: 179-188.
2. Nakajima, K, Shinkai, S. and Ikegami, T. : Formal Model of Embodiment on Abstract Systems: From Hierarchy to Heterarchy. in the proceedings of ECAL (2007) Springer-Verlag New York I: pp. 1110-1119.
3. Narumi, T., Kameoka, S., Taiji, M., and Yasuoka, K. Accelerating molecular dynamics simulations on PlayStation 3 platform using virtual-GRAPe programming model, SIAM J. Sci. Comput. 30 (2008), 3108-3125.
4. Madina, D. and Taiji, M. Circuit and Physical Design of the MDGRAPE-4 on-chip network links, the proceedings of the SLIP' 08 (2008) pp. 59-63.

5. Ikegami, T and Suzuki, K From Homeostatic to Homeodynamic Self, *BioSystems* 9(2008) 1388-400.
 6. Kikugawa, G., Apostolov, R., Kamiya, N., Taiji, M., Himeno, R., Nakamura, H., and Yonezawa, Y. Application of MDGRAPE-3, a special purpose board for molecular dynamics simulations, to periodic biomolecular systems, *J. Comput. Chem.* 30 (2009), 110-118.
 7. Narumi, T., Yasuoka, K., Taiji, M., and Hoefinger, S. Current performance gains from utilizing the GPU or the ASIC MDGRAPE-3 within an enhanced Poisson Boltzmann approach, *J. Comput. Chem.* 30(14) (2009), 2351-2357.
 8. Suzuki, T. and Ikegami, T. Shapes and Self-Movements in Proto-Cell Systems, *Artificial Life* 15 (2009) pp.59-70.
 9. Madina, D, Computer Architecture for Compute-Limited Scientific Models, Ph.D. Thesis, University of Tokyo, 2009.
 10. Ikegami, T. Re Rehabilitating Biology as a Natural History, Adaptive Behavior, Aug 2009; vol. 17: pp. 325 - 328.
 11. Hamada, T., Nitadori, K., Benkrid, K., Ohno, Y., Morimoto, G., Masada, T., Shibata, Y., Oguri, K., and Taiji, M.) A novel multiple-walk parallel algorithm for the Barnes-Hut Treecode on GPUs -towards cost effective, high performance N-Body simulation, *Computer Science - Research and Development* 24(1-2) (2009), 21-31.
 12. Hanczyc, M. and Ikegami, T., Protocells as smart agents for architectural design, *Technoetic Arts* 7(2) (2009) pp. 117-120.
 13. Ikegami, T. and Hanczyc, M, The search for a first cell under the maximalism design principle. *Journal of Technoetic Arts*, 7(2):153-164.
 14. Aucouturier, J. J. and Ikegami, T., The Illusion of Agency: Two Engineering Approaches to Compromise Autonomy and Reactivity in an Artificial System Adaptive Behavior, Oct 2009;vol. 17: pp. 402 - 420.
 15. Silverman, E and Ikegami, T. Robustness in Artificial Life, *Int'l J. Bio-Inspired Computation* Vol.2 No.3 (2010) pp.197-203.
 16. Kei Kobayashi, Self-Movement of Oil Droplets sustained by Convection Flow, Mater thesis , University of Tokyo (2010).
 17. Hanczyc, M. and Ikegami, T. Chemical Basis for Minimal Cognition, *Artificial Life* (in press).
- [学会発表] (計 8件)
1. Suzuki, K. and Ikegami, T.: Membrane as an Interface in a Simple Metabolic Cell. International Conference on Morphological Computation (Venezia, Italy, 2007).
 2. Ikegami, T. International Conference on Morphological Computation (Venezia, Italy, 2007).
 3. Ikegami, T. From Chaos to Cosmos: Integration in Biological Systems : Yamada Science Foundation 3 (Shouna, Japan, 2007).
 4. Ikegami, T. “Artificial Life is Dead”, *Artificial Life XI* (Winchester, UK, 2008) keynote.
 5. Ikegami, T. “Homeodynamics, Shape and Motion dynamics in Self-Moving Oil Droplets” at “What is Evolution?” (Organized by Murase, Kyoto, Japan, 2009).
 6. Ikegami, T. “Is Life an Emergent property?” at “The Origin of Life” conference (organized by Luisi Luigi), (San Sebastian, Spain , 2009).
 7. Madina, D. Circuit and Physical Design of the MDGRAPE-4 on chip network links. At the International Workshop on System level Interconnect Prediction, (New Castle, UK, 2008).
 8. 池上高志、「生命とは何か、人とは何か」ダーウィン生誕 200 年記念ワークショップ、(奈良、2009)
- [図書] (計 1件)
1. Ono, N. Madina, D. and Ikegami, T. Origin of Life and Lattice Artificial Chemistry, in *Proto Cells*, ed. By S. Rasumussen et al. MIT press, (2009) pp. 197-212.
- [6. 研究組織]
- (1) 研究代表者
池上 高志 (IKEGAMI TAKASHI) 東京大学・大学院総合文化研究科・教授
研究者番号：10211715
 - (2) 連携研究者
泰地 真弘人 (TAIJI MAKOTO)
理化学研究所・ゲノム科学総合研究センター・チームリーダー 研究者番号:10242025