

機関番号：51303

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2009～2010

課題番号：21700335

研究課題名(和文) 反応拡散場に基づく超並列分子コンピューティング

研究課題名(英文) Massively parallel molecular computing using reaction-diffusion dynamics

研究代表者

平塚 眞彦(HIRATSUKA MASAHIKO)

仙台高等専門学校・情報ネットワーク工学科・准教授

研究者番号：80331966

研究成果の概要(和文): 本研究では、無配線分子コンピューティングのモデルを提案し、次の2項目について検討を行った。

- (1) 本研究代表者が提案する人工触媒素子モデルに基づく無配線集積回路の原理をマイクロ電極アレー等の試作を通じて実験的に実証した。
- (2) 人工触媒素子によって制御される人工的な反応拡散場のパターン形成能力を利用した新しい信号処理パラダイムを提案し、画像復元や最適経路探索などの問題において有効性を示した。

研究成果の概要(英文): This study investigates a possibility of constructing massively parallel computing systems using molecular electronics technology. By employing the specificity of biological molecules, such as enzymes, new integrated circuit architectures that are free from interconnection problems could be constructed. To clarify the proposed concept, we present a functional model of an artificial catalyst device called an enzyme transistor. In this study, we develop artificial catalyst devices as basic building blocks for molecular computing integrated circuits, and explore the possibility of a new computing paradigm using reaction-diffusion dynamics induced by collective behavior of artificial catalyst devices.

交付決定額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,200,000	660,000	2,860,000

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

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。

各種の非線形結合振動子系を実現する人工触媒素子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搬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しばった検討を行う。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。

で検討した応用(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。デジタル反応拡散システム(DRDS)は多次元の非線形デジタルフィルタとしてモデル化されるため、その動作解析には膨大な計算量が要求される。そこで、計算量の削減ならびに並列シミュレーションについて検討を加える。

4. 研究成果

(1) 集積回路工学の観点から

マイクロ電極アレーによる人工的反応拡散場の実現

本研究で提案する無配線集積回路の概念を図1に示す。将来的には、図1に示すように、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)のメカニズムを利用した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人工触媒素子によって、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。この第一段階として、図2に示すように、人工触媒素子の機能を模擬する Pt 電極を集積化したマイクロ電極アレーを試作し、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を試みた。実験により、例えば、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ことに成功している。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)の発生も観測されている。以上の結果から、配線によらない集積回路の実現へ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

人工触媒素子ネットワークにおける反応拡散ダイナミクス

人工触媒素子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

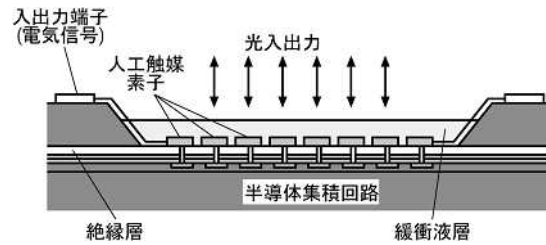


図1 人工触媒素子集積回路

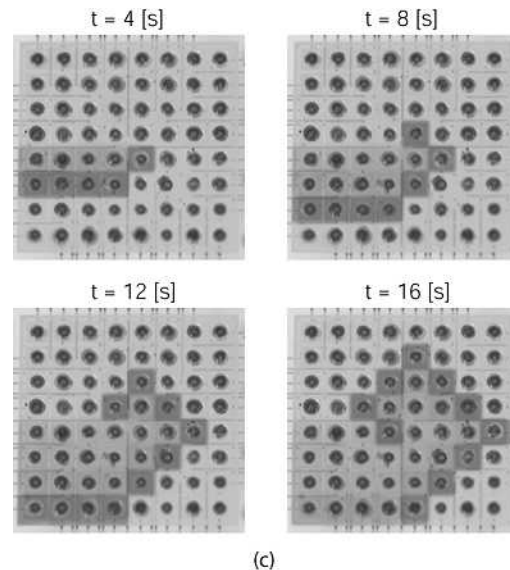
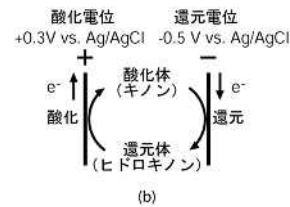
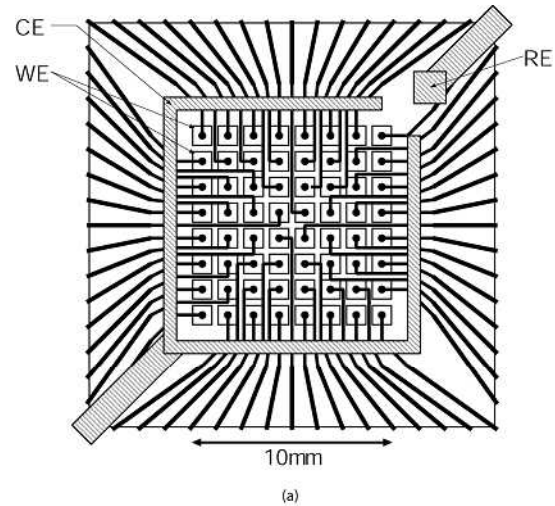


図2 マイクロ電極アレーによって制御された人工的反応拡散場の実現：
(a) マイクロ電極アレーのレイアウト、
(b) 酸化還元サイクル、(c) 電極表面の微量溶液中を伝搬する反応拡散波

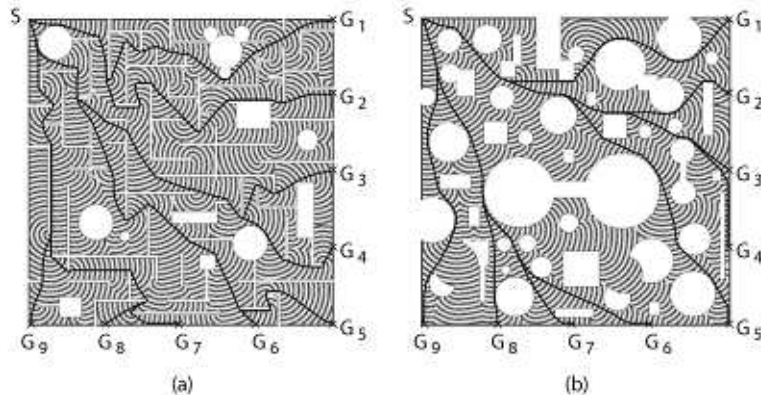


図3 興奮性反応拡散波による最適経路探索

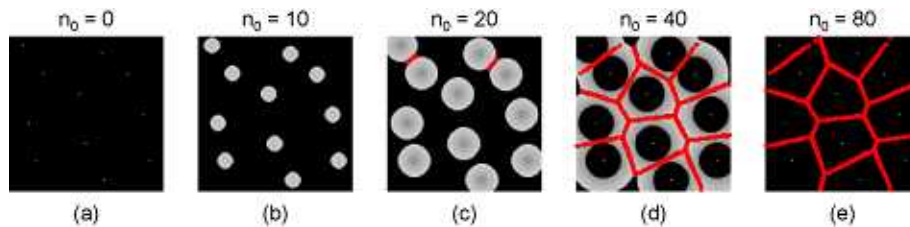


図4 興奮性反応拡散波によるポロノイ図生成

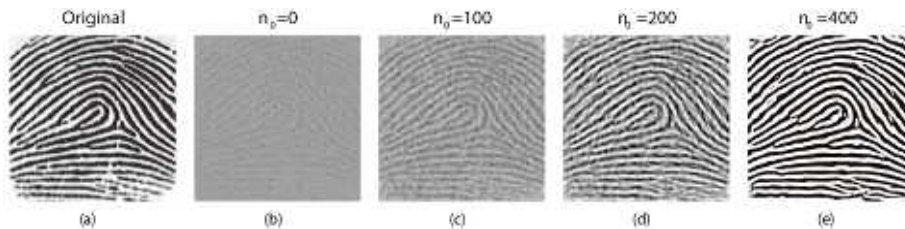


図5 チューリングのパターン形成原理を利用した指紋画像の復元

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、人工触媒素子の機能は、反応拡散ダイナミクスを合成するという観点からも、かなり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、興奮性反応拡散ダイナミクスを定性的に再現する人工触媒素子ネットワークをはじめ、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人工触媒素子ネットワークがシミュレーションにより確認されている。

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可能である。本研究では、上で述べた人工触媒素子ネットワーク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。

反応拡散ダイナミクスと並列コンピューティング

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。その応用へ向けて、本研究では、「デジタル反応拡散システム (DRDS: Digital Reaction-Diffusion System)」と呼ばれる離散時空間で定義された抽象的な反応拡散系のモデルを提案している。例えば、図3は、DRDSを用いて興奮性反応拡散系をシミュレートし、最適経路探索に応用した結果である。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搬させ、伝搬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4は、DRDSでシミュレートした興奮性反応拡散波をポロノイ図生成に応用した結果である。さらに、図5は、

デジタル反応拡散システム (DRDS) による指紋画像の復元の様子を示している。ここではチューリングの拡散不安定性のメカニズムを再現する DRDS が用いられている。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。DRDS を利用することにより、形態形成の数値モデルを多次元デジタル信号処理の立場から系統的に解釈することができ、さまざまな応用に適用することが可能となった。以上の結果から、人工的な反応拡散場のパターン形成能力を利用した新しい信号処理パラダイムの可能性を示すことができたと考えられる。

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1件)

M. Hiratsuka, K. Ito, T. Aoki and T. Higuchi, "Toward biomolecular computers using reaction-diffusion dynamics," International Journal of Nanotechnology and Molecular Computation, 査読有, Vol.1, No.3, 2009, pp.17 - 25

6. 研究組織

(1)研究代表者

平塚 眞彦 (HIRATSUKA MASAHIKO)
仙台高等専門学校・情報ネットワーク工学科・准教授
研究者番号：80331966

(2)研究分担者

(3)連携研究者