

# 無配線コンピュータを創る

青木 孝文

## ■研究のねらい

現在の VLSI (超大規模集積回路) 技術は、その大規模化に伴い、配線の複雑さに起因する性能限界が深刻化している。また、極限的微小化が進行した分子デバイスの領域では、配線による信号伝達自体が原理的に困難になるといわれている。このため、素子を配線で結合するという既存の概念にとらわれない新しい集積システムの探索が必要になると考えられる。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、VLSI をはるかに凌駕する集積度が実現されている。本研究では、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、無配線分子コンピューティングのモデルを提案し、以下の 2 項目に関して検討を行った。

1. 【集積回路工学 (ハードウェア) の立場から】本研究で提案する「酵素トランジスタ」と呼ばれる分子素子モデルに基づく無配線集積回路が原理的に実現可能であることを電気化学やマイクロ加工技術等を駆使して実証する。
2. 【計算機科学 (ソフトウェア) の立場から】無配線集積回路によって実現される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/信号処理パラダイムを検討する。可能であれば現在の情報処理へのスピノフをねらう。

## ■研究成果

### 1. 酵素トランジスタに基づく無配線集積回路の実現に向けて: 集積回路工学の立場から

#### 1.1 酵素トランジスタのモデル

現在の VLSI 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。

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

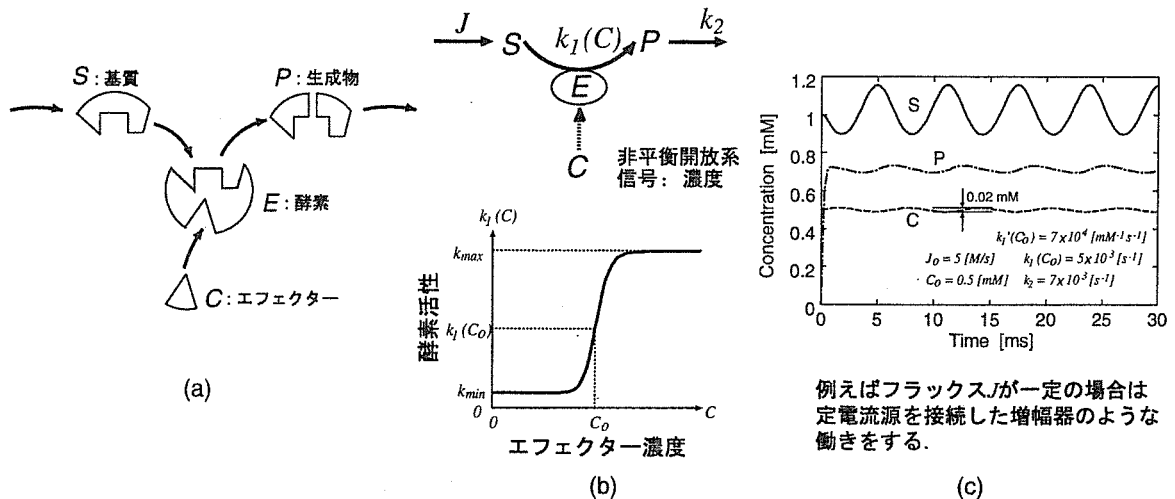


図 1 酵素トランジスタのモデル: (a)模式図, (b)記号, (c)動作波形の例

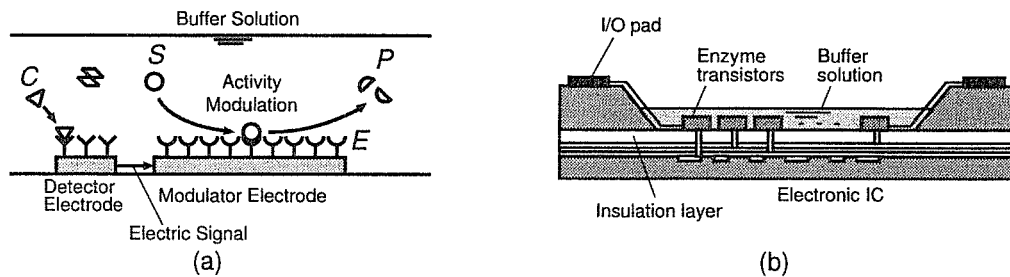


図 2 電気化学的手法に基づく酵素トランジスタ: (a)単体の素子, (b)無配線集積回路

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することができる。

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、現在までに、分子の濃度により信号を表現するよう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。

## 1.2 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氣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

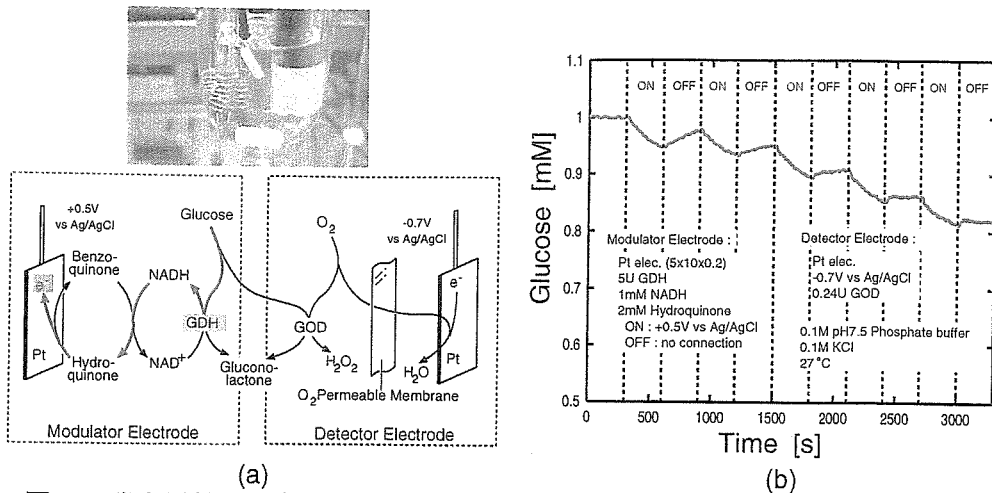


図3 酵素活性の電気的制御に関する実験： (a)実験システム, (b)活性の変調に伴う基質濃度の変動

により、等価的に反応速度を制御することが可能である。この原理を実証する実験システムを図3に示す。本実験では、NADを電子受容体とするグルコースデヒドロゲナーゼ酵素 (GDH) を取り上げ、キノン/ヒドロキノンを電子授受のメディエータとして Pt 電極とカップルさせることにより活性制御を実現し、酵素トランジスタの動作原理を初めて確認した。

### 1.3 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、酵素トランジスタ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

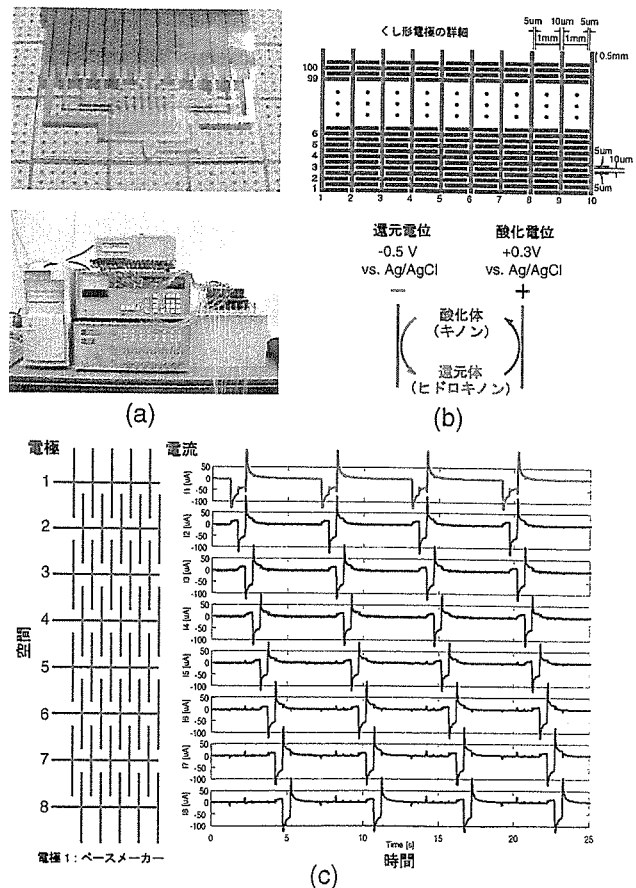


図4 マイクロ電極アレーによって制御された人工的反応拡散系の実現： (a)実験システム, (b)マイクロ電極の構成, (c)電極表面の微量溶液中を伝播する反応拡散波

を模擬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/ヒドロキノンのレドックス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やチューリングパターンのような静止パターンを生成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. 反応拡散系のパターン形成能力を利用した新しいコンピューティングパラダイム:

計算機科学の立場から

### 2.1 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 (FHN) 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、興奮性反応拡散系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値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可能である。本研究では、上で述べた酵素トランジスタ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。

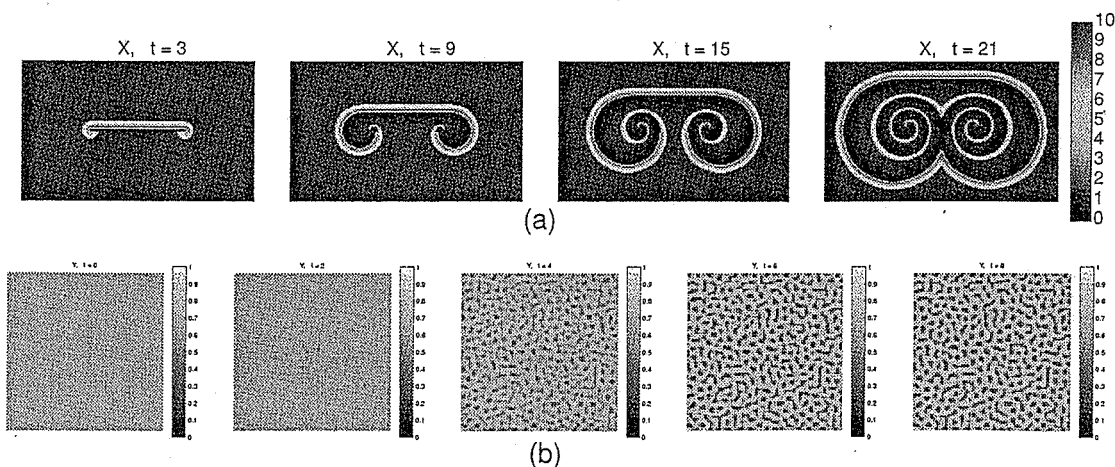


図 5 酵素トランジスタネットワークで実現される反応拡散ダイナミクス:

(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

## 2.2 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。例えば、図6はセルオートマトン法を用いて、図5(a)に示した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。本研究では、すでに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」と呼ばれる枠組みを提案するとともに、これに基づく指紋画像復元アルゴリズムの実用化を検討している。図7は、デジタル反応拡散システムによる傷のついた指紋画像の修復の様子を示している。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。これを本研究者ら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、実用化に向けた具体的な検討を開始している。

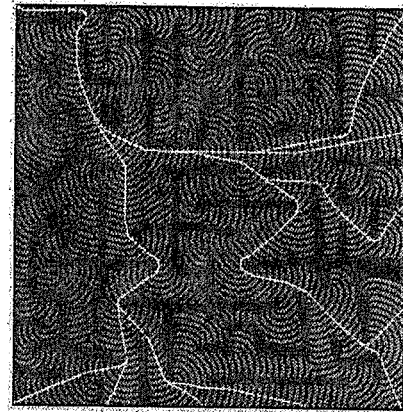


図6 興奮性反応拡散波による最適経路探索

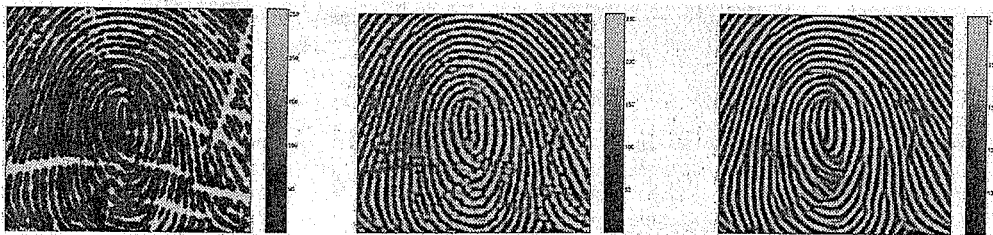


図7 チューリングのパターン形成原理を利用した指紋画像の復元（処理の流れは、左から右へ進む）

### ■今後の展開

以上のように、さきがけ研究21では、集積回路工学（ハードウェア）と計算機科学（ソフトウェア）の両面からの学際的な挑戦を行い、無配線コンピュータを実現するための第一歩となる成果が得られた。今後は、2次元マイクロ電極アレーを開発し、実際のデバイス上で、画像処理や経路探索などの応用をデモンストレーションするとともに、反応拡散系のパターン形成能力を利用したコンピューティングの理論的な体系化を進める。また、研究成果については、たとえ中間的な段階でも、できる限り実際の応用に適用し、工学分野にフィードバックしていくことが重要であると思われる。

### ■成果リスト

#### 論文

- ・ T. Aoki, M. Hiratsuka and T. Higuchi, "Enzyme transistor circuits," IEE Proceedings - Circuits, Devices and Systems, Vol. 145, No. 4, pp. 264—270, Aug. 1998 (IEE

MOUNTBATTEN PLEMIUM AWARD 受賞).

- M. Hiratsuka, T. Aoki and T. Higuchi, "Enzyme transistor circuits for reaction-diffusion computing," IEEE Transactions on Circuits and Systems – I, Vol. 46, No. 2, pp. 294–303, Feb. 1999.
- M. Hiratsuka, T. Aoki and T. Higuchi, "Pattern formation in reaction-diffusion enzyme transistor circuits," IEICE Transactions on Fundamentals, Vol. E82-A, No. 9, pp. 1809–1817, Sept. 1999.

口頭発表 (国際)

- M. Hiratsuka, T. Aoki, and T. Higuchi, "Enzyme transistor circuits for biomolecular computing," Proc. the 27th IEEE Int. Symp. on Multiple-Valued Logic, pp. 47--52, May 1997.
- T. Aoki, M. Hiratsuka, and T. Higuchi, "A model for biomolecular computing," 1998 Int. Workshop on Advanced LSIs, pp. 39--44, July 1998 (招待講演) .
- M. Hiratsuka, T. Aoki, and T. Higuchi, "Pattern formation in enzyme transistor circuits with diffusive coupling," Proc. 1998 Int. Symp. on Nonlinear Theory and its Applications, Vol. 1, pp. 351--354, September 1998.
- W. Fujita, T. Aoki, and T. Higuchi, "A digital reaction-diffusion system for texture image processing," 1999 IEEE International Symposium on Intelligent Signal Processing and Communication Systems, December 1999.

口頭発表 (国内)

- 平塚眞彦, 青木孝文, 樋口龍雄, "酵素トランジスタによる興奮性反応拡散場," 信学技報, CAS97-52, NLP97-78, pp. 1--8, September 1997.
- 平塚眞彦, 青木孝文, 樋口龍雄, "拡散で結合された酵素トランジスタ回路における不安定化とパターン形成," 信学技報, NLP98-23, pp. 7--14, June 1998.
- 藤田渉, 青木孝文, 樋口龍雄, "デジタル反応拡散システムとその応用," 信学技報, NLP98-37, pp. 51--58, June 1998.
- 藤田渉, 青木孝文, 樋口龍雄, "デジタル反応拡散システムに関する基礎的検討," 平成10年度電気関係学会東北支部連合大会, 2G23, p. 285, August 1998.
- 藤田渉, 青木孝文, 樋口龍雄, "指紋画像処理のためのデジタル反応拡散システムの設計," 信学技報, NLP98-79, pp. 9--16, November 1998.
- 藤田渉, 青木孝文, 樋口龍雄, "デジタル反応拡散システムに基づく指紋画像の復元," 第38回計測自動制御学会学術講演会, 114C-5, pp. 313--314, July 1999.
- 平塚眞彦, 青木孝文, 樋口龍雄, "反応拡散酵素トランジスタネットワークとその応用," 平成11年度電気関係学会東北支部連合大会, 2G5, p. 222, August 1999.
- 山口剛, 青木孝文, 樋口龍雄, "反応拡散コンピューティングモデルに基づく経路探索アルゴリズム," 平成11年度電気関係学会東北支部連合大会, 1B12, p. 45, August 1999.

その他

- 電子情報通信学会論文賞および猪瀬賞受賞 (1997年5月17日)
- IEE MOUNTBATTEN PLEMIUM AWARD 受賞 (1999年10月13日)

特許 2件申請中。