



Title	脳の形態学・計算論に基づく柔らかな導電性ポリマーネットワークの構成論に関する研究
Author(s)	萩原, 成基
Citation	北海道大学. 博士(情報科学) 甲第16008号
Issue Date	2024-03-25
DOI	10.14943/doctoral.k16008
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/92217
Type	theses (doctoral)
File Information	Naruki_Hagiwara.pdf



[Instructions for use](#)

博士論文

脳の形態学・計算論に基づく
柔らかな導電性ポリマーネットワークの
構成論に関する研究

Research on Construction of
Flexible Conductive Polymer Networks
Based on Neuromorphic and Computational Approaches

2024年

博士(情報科学)

北海道大学
大学院情報科学院
萩原 成基

脳の形態学・計算論に基づく 柔らかな導電性ポリマーネットワークの 構成論に関する研究

論文要旨

本研究は、次世代の人工知能 (Artificial intelligence: AI) 処理を担うマテリアル知能の構築に向け、材料科学の観点に基づく化学実験と情報科学の観点に基づく理論研究を組み合わせた基礎研究と位置付けられる。

脳内情報処理を計算機上でシミュレートする従来の AI 研究のアプローチに対し、材料固有の物性を巧みに利用することで人工脳が物理的にエミュレートされた「マテリアル知能」の実現に関する試みは近年数多くなされている。例えば応用研究のレベルでは、半導体や有機材料ベースで構成される抵抗変化メモリが、これまで AI 技術の発展に大きく貢献してきた人工ニューラルネットワーク (Artificial neural network: ANN) の物理実装の枠組みにシナプス素子として組み込まれることで、AI 処理の高速化や省電力化を可能としてきた。また基礎研究のレベルでは、分子ネットワーク内部の非線形な電気伝導ダイナミクスを利用したリザバー計算や神経スパイク模倣素子など、多岐にわたる材料の脳型計算への利用可能性が見出されつつある。

マテリアル知能の実現に向けた従来のアプローチにおける大きな課題として、(1) 必要な材料及びデバイスを予め作り込んでおく必要があること、(2) その応用が ANN の物理実装という工学的な枠組みに留まっていること、の2点が挙げられる。これを踏まえ本研究では、外部刺激を通じてその場形成可能な導電性ポリマーネットワークに着目し、発達過程における脳神経系の形態に学んだ3次元ネットワークのその場成長・学習を実験的に試みた。回路を予め作り込んでおくのではなく、材料の自己組織的な成長を通じて真に必要な情報処理回路のみをその場で形成させる点において既存研究と一線を画しており、回路の実装面積や形成プロセスの簡略化といった工学的な有用性も期待できる。また、本研究では既存の ANN に代わる AI フレームワークとして、計算論的神経科学の分野で近年大きな盛り上がりを見せている自由エネルギー原理を採用し、脳の計算機構により即した高次の知覚演算システムをマテリアル知能として実現できないか検討した。これらの形態学的及び計算論的アプローチの融合を図り、生体へ貼り付けたり埋め込んだりすることのできる有機材料特有の物理的なフレキシビリティに加え、脳のように柔軟に知覚や学習を行いながら周囲の環境に適応できる柔

らかなマテリアル知能の実現可能性を見出すことを本研究の目的とする。

脳の形態に学ぶアプローチとして、脳の発達過程においてみられる軸索誘導と呼ばれる脳神経ネットワークの形成過程に着目し、モノマー前駆体溶液中での電解重合成長により得られる導電性ポリマー細線の電極間配線を用いて、これに学んだ脳神経様ネットワークのその場形成を実験的に実現できないか検討した。その足掛かりとしてまず、マイクロ電極ギャップ間への1次元的なポリマー細線の液中配線を用いた電極間抵抗制御によるシナプス機能模倣を試みた。細線の配線本数や径、導電性といった物理化学的变化を外部電圧制御によって誘起し、長期増強及び短期可塑性といったシナプス機能を電極間抵抗変化により模倣し得ることを示した。

続いて、脳内で無数の神経細胞が織りなす階層的な3次元近傍結合構造に学び、導電性ポリマー細線の複数電極間高次元配線を試みた。2次元平面及び3次元立体空間上へ複数の電極を液中配置し、これらへ印加する重合電圧を制御することで所望の電極間へのみ選択的に細線を配線する技術を初めて確立した。これにより、情報処理に必要なネットワークを軸索誘導のごとく一からその場形成し得ることを示した。また、ネットワーク形成後の電極へ外部電圧を印加することでゲート効果による細線の導電性変化が誘起され、電圧スパイク印加に伴う側抑制的な抵抗変化やリザーバー計算等に利用可能な非線形応答が観測された。これらの発見は、形成されたネットワークが生理学的にも妥当な情報処理能力を有していることを示唆している。

脳の計算論に学ぶアプローチとして、脳機能を変分自由エネルギー最小化の観点で統一的に記述可能な自由エネルギー原理に着目し、知覚や学習を本原理に基づき実行可能なマテリアル知能の理論モデルを構築した。脳の計算論的なモデルとして古くから知られる予測符号化を変分自由エネルギー最小化の観点からネットワークグラフの形で再記述し、近年のニューロモルフィック工学において提案されているリザーバーや拡張 Direct feedback alignment といった、生理学的にも妥当なモデル及びアルゴリズムをこれに適用することで、マテリアル知能としての実装にも適した予測符号化ネットワークを構築した。入力された感覚信号に対する予測タスクを通じ、系全体の変分自由エネルギーを最小化しながら内部の信念を更新することで予測信号を生成可能な知覚演算システムを、マテリアル知能として実現し得ることが示された。また、変分自由エネルギーが定性的には予測の不確実さを表していることに着目し、これを異常検知のような弁別課題における尺度として用いることで工学的な応用が可能であることも示された。

目次

第1章 序論	4
1.1 はじめに	4
1.2 研究背景	6
1.2.1 マテリアル知能研究における課題	6
1.2.2 柔らかなマテリアル知能	7
1.3 研究目的と論文構成	7
参考文献	10
第2章 導電性ポリマー細線を用いた配線可能なシナプス素子	12
2.1 諸言	12
2.2 導電性ポリマーファイバーとそのシナプス素子応用	13
2.2.1 導電性ポリマーファイバー	13
2.2.2 配線可能なシナプス素子としての応用	17
2.2.3 シナプス可塑性と記憶の多重貯蔵モデル	19
2.3 実験方法	21
2.3.1 化学材料の調合・作製	21
2.3.2 マイクロ電極ギャップの作製	21
2.3.3 実験システム構成	22
2.4 実験結果	23
2.4.1 後天的細線径増加によるシナプス長期増強の模倣	23
2.4.2 可逆的導電性変化によるシナプス短期可塑性の模倣	26
2.4.3 制御電圧の導入による忘却特性の制御	31
2.4.4 複数電極ギャップの並列抵抗制御	33
2.5 結言	33
参考文献	36

第3章 高次元配線された導電性ポリマーネットワークによる物理演算システムの構築	39
3.1 諸言	39
3.2 分岐ポリマー配線を利用した脳型情報処理	40
3.2.1 電極作製及び分岐ポリマー配線の制御	40
3.2.2 電圧スパイク印加に伴う相対コンダクタンスの制御	41
3.2.3 物理実装された ANN による論理和・論理積の学習	44
3.2.4 オートエンコーダによる特徴抽出の物理実装	48
3.2.5 ヘテロシナプス可塑性の模倣	49
3.2.6 物理リザバー計算への応用に向けた非線形信号の獲得	52
3.3 立体分岐ポリマー配線を利用した3次元ネットワークの形成・学習	55
3.3.1 脳の3次元形態に学ぶ新規脳型回路アーキテクチャ	55
3.3.2 立体ポリマー配線用立体電極の作製	61
3.3.3 実験システム構成	63
3.3.4 立体分岐ポリマー配線による電極間抵抗制御	64
3.3.5 3次元ポリマーネットワークの学習	68
3.3.6 スパイク電圧印加に伴う側抑制の模倣	72
3.4 結言	78
参考文献	79
第4章 自由エネルギー原理に基づくマテリアル知能の構成論	82
4.1 諸言	82
4.2 自由エネルギー原理に基づく脳の計算論	83
4.2.1 変分ベイズ脳仮説	83
4.2.2 予測符号化における知覚	84
4.2.3 学習の計算論	85
4.2.4 能動的推論	86
4.3 自由エネルギー原理のマテリアル知能への適用	87
4.3.1 提案アプローチ	87
4.3.2 勾配降下法による VFE 最小化過程の定式化	88
4.4 アナログ等価回路による線形予測器の実装	90
4.5 自由エネルギー原理に基づく予測符号化ネットワークとその応用	92
4.5.1 順伝播型階層的予測符号化ネットワーク	92

	3
4.5.2 訓練外データ検出への応用	95
4.6 マテリアル知能としての実装に向けたモデル構成	99
4.6.1 知覚過程における Direct feedback alignment 法の適用	99
4.6.2 リザーブ層と拡張 DFA 法の導入による動的予測	101
4.7 結言	105
参考文献	108
第5章 総括	111
謝辞	114
本研究に関する発表・業績	116

第1章 序論

1.1 はじめに

我々の脳は神秘に満ちている。その実体は無数の神経細胞 (ニューロン) が複雑に結合することでできた巨大なニューラルネットワークであり、ニューロン単体やそれらをつなぐシナプス自体の仕組みや機能は近年の脳神経科学の発展によって明かされつつあるものの、それらがどのようにして高次な脳機能を生み出しているのかは依然として謎に包まれている。特に、我々が普段視覚や聴覚、触覚等を通じて体験する主観的な知覚体験 (現象) や意識経験 (クオリア) が、脳内においてどのようにして生み出されているのかは哲学や認知科学の分野で古くから度々議論されてきた。例えば近代哲学では、人間の精神は脳という物質の働きに還元できるとする唯物論 [1] が展開された一方で、昨今の認知科学では意識体験が脳というハードウェアから生み出されるメカニズムを還元主義的に解明することは不可能であるとする、いわゆる「意識のハードプロブレム」を支持する立場もしばしばとられる [2]。

脳の認知機構解明に対する還元主義的なアプローチが限界を迎えつつある一方、ある入力に対して出力を返すソフトウェアのような情報処理装置に脳を見立て、その機能全体を構造化・定式化する計算論的神経科学のアプローチが近年興隆を見せている。視覚研究において独創的な理論を繰り広げた Marr は、脳研究は計算理論、表現とアルゴリズム、ハードウェアという3つのレベルで理解する必要があると唱えた [3]。最も抽象度の高い計算理論のレベルにおいて脳の機能や関数を明らかにし、これを実現するためのアルゴリズム、さらにそれを創発しているハードウェア構造をトップダウン的に調べる立場を今日の計算論的神経科学はとっており、生物が自己への損益をもとに行動パターンを最適化する過程を理論づけた強化学習や、生物の外環境への適応過程を変分自由エネルギー最小化で記述する自由エネルギー原理 [4] などがこれに該当する。このような計算論的アプローチは今日の人工知能 (Artificial intelligence: AI) の発展にも大きく貢献している [5]。

神経科学の分野で脳の認知機構に対するトップダウン的な理解が進む一方で、物理

化学の分野では脳をソフトウェアではなくハードウェアとみなし、実体としての人工脳をボトムアップ的に構成する試みもこれまでなされてきた。ニューロンやシナプスといった脳の構成要素をハードウェアとして模倣して脳神経様ネットワークを構築し、そこから創発される脳型情報処理をボトムアップ的に獲得することで、脳の認知機構解明に迫る新たな理学的知見が得られてきた。材料科学の分野でも近年、分子材料固有の物性を巧みに利用することで実現可能な神経スパイク模倣素子やシナプス素子といったニューロモルフィックデバイスが数多く提案されており、これらを用いたボトムアップ的な「マテリアル知能」の実現が期待されている。例えば、確率共鳴や自己組織化臨界といった脳内で実際に観測されるような物理現象を分子デバイス上で再現することで、神経スパイクのような電気信号を生成する試みが報告されている [6, 7]。また、シナプスのごとくコンダクタンスを自在に増減可能な不揮発性アナログ抵抗変化メモリはシナプス素子として応用されており、広く認知されつつある [8–10]。

近年のマテリアル知能研究の傾向としては、脳内情報処理に着想を得て工学的なモデルとして近年大きく発展してきた人工ニューラルネットワーク (Artificial neural network: ANN) が担う演算の一部をニューロモルフィックデバイスで代替することで、AI 処理の高速化や省電力化を図るアプローチが主流である。ところが工学的目的達成のために独自の進化を遂げてきた昨今の ANN は実際の脳の仕組みとはもはや大きく乖離しているため、実体としての人工脳創出という理学的目標を達成するためのマテリアル知能実装に向けたフレームワークとしては不十分である。最近では可塑性を持たない小脳のダイナミクスに着目してこれをマテリアルで模倣するマテリアルリザーバーコンピューティングに関する研究が人気を博すなど、より生理学的妥当性を備えた新たな実装フレームワークの需要が高まりつつある [11, 12]。

そこで本研究では、マテリアルでボトムアップ的に知能を構成するアプローチに加え、脳が従うとされる計算理論からマテリアル知能に必要なハードウェア構成をトップダウン的に導出するアプローチを新たに提案する。脳の計算論に従ってトップダウン的に知能を構成するアプローチは、得られるハードウェア構成が実際の脳形態と乖離する結果に帰結する可能性が考えられるが、これを本研究では真に必要な脳の本質要素のみが抽出された結果であると捉える。例えば我々の脳はスパイク信号に基づいて情報処理を行っているが、これはノイズに対してロバストな信号伝達方法を脳が進化の過程で獲得した結果であると考えられ、脳と同等の情報処理を獲得するためにスパイクでの情報伝達が必須であるかどうかは議論の余地がある。一方で我々の脳は非常によくできたハードウェアであり、効率よく情報処理を行うために参考とするべき

部分がその形態に詰まっていることもまた事実である。こうした脳の形態に学ぶ還元主義的なボトムアップ的アプローチと、脳の計算論に学ぶトップダウン的なアプローチを組み合わせることで、脳の高次な認知機能と効率性を兼ね備えた次世代マテリアル知能の創出を本研究では目指した。

1.2 研究背景

1.2.1 マテリアル知能研究における課題

従来のマテリアル知能研究における課題として、本研究では大きく分けて以下の2点を挙げる。

1. マテリアル知能を実現するために必要な材料及びデバイスを予め人の手で作り込んでおく必要がある。(工学的課題)
2. ANNの物理実装という工学的なフレームワークを軸とした研究に限定されてしまっている。(理学的課題)

近年精力的な研究がなされてきたニューロモルフィックデバイスは、予め作製及び加工がなされたものがチップ上へ作り込まれてAIチップとして出荷されることで、AI処理のアクセラレータとしての貢献を目指すものが主流であった。一方で、歩留まりの低下やデバイス間での性能ばらつきによる信頼性の低下は大きな課題である。特に、AI処理に適用した際に十分な性能が得られるケースは少なく、ソフトウェアによるシミュレーション結果よりも性能が劣化してしまうのが一般的である。例えば、不揮発性アナログ抵抗変化メモリシナプスを用いて重み行列が物理実装されたANNは、素子の非理想的な書き込み特性や歩留まりに性能が大きく左右されることが指摘されている[13]。また、近年多数報告されている物理リザーバーは選択する物理系のダイナミクスに依存して性能が決まるため、偶発形成されたランダム分子ネットワークを物理リザーバーとして用いる場合、所望のダイナミクスを内部に持つ試料の作製が大きな課題となる。適用するタスクによって要求されるリザーバー特性が異なるため、試料の内部構造を適用タスクに応じて後天的に制御できることが望まれる。

2つ目の課題は、マテリアル知能の実現に向けたアプローチがANNの物理実装に限定されており、その有用性が工学的な観点に留まっている点である。脳神経系の情報処理をモデル化したANNはこれまで、工学的な目的を達成するために独自の発展を遂

げ、今や実際の脳とは大きく乖離した複雑なモデルへと進化を遂げた。ところがそういった複雑なモデルを脳型ハードウェアとして実装することは依然として困難であり、多層パーセプトロンやリザバーコンピューティングといった比較的シンプルなモデルの実装に留まっている。それらはいずれも実タスク応用を前提としており、AI処理の高速化や省電力化といった工学的な目的に根ざしている。理学的な立場から研究がなされているものとして、ニューロンのスパイク発火イベントに基づいて処理を行うスパイクニューラルネットワーク (Spiking neural network: SNN) モデルの物理実装に関する研究が挙げられるが、SNN のモデル自体が未だ発展途上であり、またスパイク発火ベースの情報処理の有用性は依然として懐疑的である [14].

1.2.2 柔らかなマテリアル知能

以上の背景を踏まえ、本研究では「柔らかな」マテリアル知能の構成論を探求する。ここでいう「柔らかな」とは、我々の脳が有している以下の2つの性質を意味している。1つは物理的な柔らかさである。脳はニューロンという柔らかい有機単体同士が液中でネットワークを形成することでできた「ウェットウェア」である。その柔軟さ故に、ニューロンは液中で自らの軸索を伸長させて遠く離れた他ニューロンとシナプス結合を形成することができ、3次元的かつ高密度なネットワーク構造を脳にもたらしている。

2つ目は機能面での柔らかさであり、これはいわゆる「頭が柔らかい」や「柔軟な思考」といったことに対応する。ANN という工学的目的に根ざすフレームワークの物理実装に限定されてきた従来のマテリアル知能とは異なり、より広く脳機能を統一的に説明可能な計算論的フレームワークに基づきながら外環境へ柔軟に適応可能なマテリアル知能をここに提案する。予めデバイスをチップ上へ作り込んでおくのではなく、外環境との相互作用を通じてマテリアルネットワークがチップ上でその場成長しながら、自己を最適化していくような次世代マテリアル知能を提案する (図 1.1).

1.3 研究目的と論文構成

本研究では脳の形態 (モルフォロジー) に学んでマテリアル知能の実験的な創出を目指すアプローチと、脳の計算論からマテリアル知能の実装に適したモデルを理論的に構築するアプローチの両方を図る。脳の形態に学ぶアプローチとして、軸索誘導のご

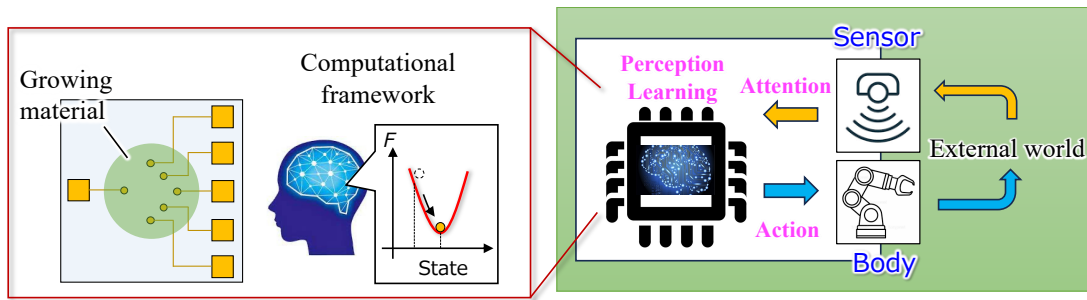


図 1.1 柔らかなマテリアル知能の概念図. 外環境に置かれたマテリアル知能はセンサーを通じて感覚信号を受け取り, その中から選択的の注意を向けた情報のみを知覚する. また, 身体を用いた行為を通じて外環境の状態を操作し, 変化した外環境の状態を再度知覚する. このような外環境との循環を通じて内部のマテリアルを成長させながら計算論的フレームワークに基づいて自己を最適化し, 外環境へ柔軟に適応していく.

とく液中でファイバー状にその場合成長可能な導電性ポリマーを用いた3次元脳型情報処理ネットワーク回路の実験的構築を試みた. これは分子ネットワークを偶発的に形成するのではなく, 目的とする情報処理に必要なとされるネットワーク回路を分子材料のその場成長を通じてボトムアップ的に獲得する点において既存の類似研究と一線を画す. 脳の計算論に学ぶアプローチとして, 自由エネルギー原理と呼ばれる脳の計算論に基づく予測符号化ネットワークのモデル構築を行い, 生理学的に妥当でありかつマテリアル知能としての実装にも適したモデルを開拓した. これらのアプローチを通じ, 有機材料特有の物理的なフレキシビリティに加え, 脳のごとく知覚や学習を行いながら周囲の環境へ柔軟に適応できる柔らかなマテリアル知能の実現可能性を見出すことを本研究の目的とした.

Marrの視覚計算理論に基づき, 本研究ではマテリアル知能の実現に向けた研究レベルを, 抽象度別に3段階で分けた(図1.2). 最も抽象度の低いレベルはハードウェアによる表現であり, ニューロンやシナプスといった脳を構成するハードウェアの機能やモルフォロジーをマテリアルによって模倣する研究レベルである. 本論文では第2章と第3章の一部がこれに該当する. 具体的には, 脳の構成単位であるニューロンやシナプスのモルフォロジーや機能を, 液中での重成長によって空間的に離れた電極間を配線可能な導電性ポリマーファイバーを用いて模倣できないか試みた. 抵抗変化メモリを用いた従来のアナログ脳型ハードウェアのように予めシナプ素子が配置されているのではなく, 軸索誘導のごとくポリマーファイバーがその場合成長することで必要な回路が自己組織的に形成されていくようなマテリアル知能の実現可能性を模

索した。ファイバーというモルフォロジーや導電性ポリマーとしての物性を巧みに利用することで、脳の発達過程において見られる軸索誘導や可塑的なシナプス効率変化、その他様々な生理学的現象を物理的に模倣し得ることを示す。また、本材料を用いて新たに実現可能な、実際の脳形態に学ぶ3次元脳型回路アーキテクチャを提案し、その工学的有用性についても言及する。

ハードウェアから創発される脳型情報処理アルゴリズムに関する研究はより抽象度の高いレベルである。本論文では主に第3章がこれに該当する。ここではまず、平面及び立体空間上に配置された複数電極間へ導電性ポリマーファイバーを密に配線することで、脳内ネットワークのモルフォロジーがエミュレートされた高次元脳型情報処理回路ネットワークを構築した。ファイバーの電極間配線により、回路ネットワーク全体の学習が可能であることを示す。また、ネットワーク内部の電気化学的なダイナミクスがもたらす側抑制的なコンダクタンス変化や非線形な電気化学応答が、Winner-take all 型情報処理やリザーブコンピューティングといった脳型情報処理アルゴリズムを創発し得ることも示す。

最も抽象度の高いレベルとして脳の計算理論に関する研究があり、従来のマテリアル知能研究では未開拓の研究レベルである。本論文では主に第4章がこれに該当する。ここでは自由エネルギー原理を基本動作原理とする次世代マテリアル知能の新たな構成論を展開した。我々生物が環境に適応しながら知覚や学習、行動する過程を変分自由エネルギーと呼ばれる情報量の最小化のみで記述できる点に着目し、これをマテリアル知能としていかに実装するかを本章で論じた。また、変分自由エネルギーを最小化しながら知覚及び学習可能な脳神経ネットワークモデルとして、予測符号化ネットワークモデルを先行研究に基づき構築した。勾配降下法により導出されたパラメータ更新式に基づいてニューロン状態やシナプス結合重みを局所的に更新することで、ネットワーク全体の予測誤差として与えられる変分自由エネルギーを最小化しながら知覚や学習を実行可能なモデルを示す。本モデルへ、物理リザーブや拡張 Direct feedback alignment 法といった、近年のニューロモルフィック工学において提案されているモデルやアルゴリズムを適用することで、マテリアル知能としての実装に適した予測符号化ネットワークの構築を図った。

第5章では最後に本研究の総括を行う。各章で得られた結果と残された課題をもとに、柔らかな次世代マテリアル知能を築き上げるための今後の指針を述べる。

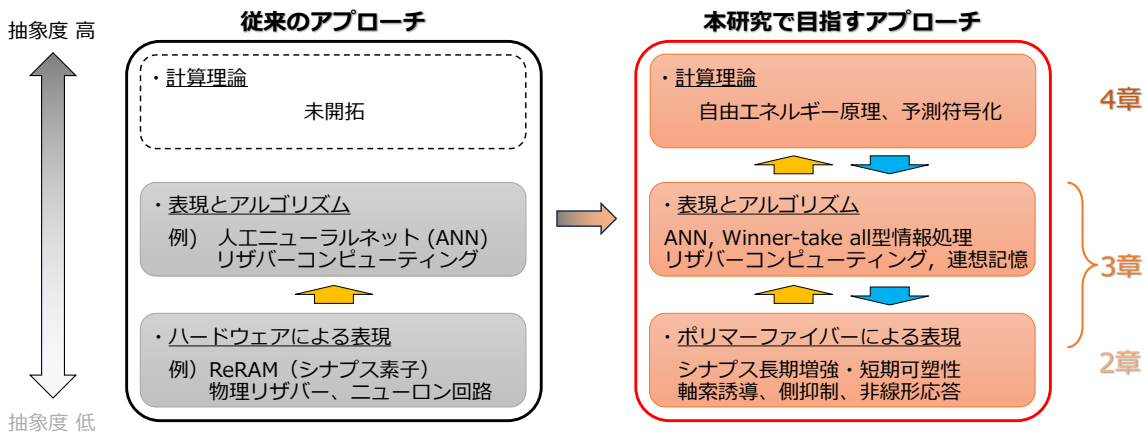


図 1.2 マテリアル知能の実現に向けた従来のアプローチ及び、本研究で目指すアプローチ。

参考文献

- [1] 米沢克夫. 科学的唯物論と意識. 科学基礎論研究, Vol. 12, No. 2, pp. 71–78, 1975.
- [2] D.J. Chalmers. 3Facing Up to the Problem of Consciousness. In *The Character of Consciousness*. Oxford University Press, 2010.
- [3] D. Marr. *Vision: A Computational Investigation into the Human Representation and Processing of Visual Information*. The MIT Press, 2010.
- [4] K. Friston. Friston, k.j.: The free-energy principle: a unified brain theory? *nat. rev. neurosci.* 11, 127-138. *Nature reviews. Neuroscience*, Vol. 11, pp. 127–38, 2010.
- [5] 川人光男. 人工知能 (AI) と計算論的神経科学. 学術の動向, Vol. 21, No. 4, pp. 70–73, 2016.
- [6] A. Setiadi, H. Fujii, S. Kasai, K. Yamashita, T. Ogawa, T. Ikuta, Y. Kanai, K. Matsumoto, Y. Kuwahara, and M. Akai-Kasaya. Room-temperature discrete-charge-fluctuation dynamics of a single molecule adsorbed on a carbon nanotube. *Nanoscale*, Vol. 9, pp. 10674–10683, 2017.
- [7] M.D. Pike, S.K. Bose, J.B. Mallinson, S.K. Acharya, S. Shirai, E. Galli, S.J. Weddell, P.J. Bones, M.D. Arnold, and S.A. Brown. Atomic scale dynamics drive brain-like avalanches in percolating nanostructured networks. *Nano Letters*, Vol. 20, No. 5, pp. 3935–3942, 2020.

- [8] S. Park, M. Chu, J. Kim, J. Noh, M. Jeon, B.H. Lee, H. Hwang, B. Lee, and B.G. Lee. Electronic system with memristive synapses for pattern recognition. *Scientific Reports*, Vol. 5, No. 1, p. 10123, 2015.
- [9] S.H. Jo, T. Chang, I. Ebong, B.B. Bhadviya, P. Mazumder, and W. Lu. Nanoscale memristor device as synapse in neuromorphic systems. *Nano Letters*, Vol. 10, No. 4, pp. 1297–1301, 2010.
- [10] M. Prezioso, F. Merrih-Bayat, B. D. Hoskins, G. C. Adam, K. K. Likharev, and D. B. Strukov. Training and operation of an integrated neuromorphic network based on metal-oxide memristors. *Nature*, Vol. 521, No. 7550, pp. 61–64, 2015.
- [11] H.O. Sillin, R. Aguilera, H. Shieh, A.V. Avizienis, M. Aono, A.Z. Stieg, and J.K. Gimzewski. A theoretical and experimental study of neuromorphic atomic switch networks for reservoir computing. *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 38, p. 384004, 2013.
- [12] Y. Usami, B. Ven, D.G. Mathew, T. Chen, T. Kotooka, Y. Kawashima, Y. Tanaka, Y. Otsuka, H. Ohoyama, H. Tamukoh, H. Tanaka, W.G. Wiel, and T. Matsumoto. In-materio reservoir computing in a sulfonated polyaniline network. *Advanced Materials*, Vol. 33, No. 48, p. 2102688, 2021.
- [13] M. Zhao, B. Gao, J. Tang, H. Qian, and H. Wu. Reliability of analog resistive switching memory for neuromorphic computing. *Applied Physics Reviews*, Vol. 7, No. 1, p. 011301, 2020.
- [14] P. Diehl and M. Cook. Unsupervised learning of digit recognition using spike-timing-dependent plasticity. *Frontiers in Computational Neuroscience*, Vol. 9, No. 1, 2015.

第2章 導電性ポリマー細線を用いた 配線可能なシナプス素子

2.1 諸言

脳は無数のニューロン同士が互いの軸索を伸長させることで形成された3次元的なネットワークである。生後8~12ヶ月頃の発達過程において顕著に見られるこの軸索誘導と呼ばれる現象を通じ、脳内では無数のシナプス結合が形成される [1]。一方、脳型ハードウェアでは、予めシナプスに対応する素子や回路を大量に作り込んでおく必要がある。例えば、シナプス素子に対応する抵抗変化メモリ素子が予めクロスバー状に作り込まれたクロスバーアレイはアナログ脳型ハードウェアの基本構造として広く認知されているが、実装するモデルに依ってはその実装効率が大きく低下する [2]。

我々のグループは過去に、その場成長可能な分子材料として導電性ポリマー細線に着目し、これを用いて軸索誘導のごとく一から情報処理回路ネットワークを形成し得ることを示した [3]。モノマー前駆体溶液中での電解重合によって細線状に成長する導電性ポリマーの電極間配線に着目し、その配線本数を制御することでシナプスのごとく回路内の各電極間コンダクタンスを独立に制御でき、回路全体を自己組織的に学習できることが示された (図 2.1)。これは所望とする情報処理に必要な部分へのみ細線が成長して回路が形成されていくという点において、従来の脳型ハードウェアの学習方式とは大きく異なる。有機材料ベースであることからフレキシビリティや透明性、生体適合性の面でも優位性があり、また溶液に浸漬して電圧を印加するだけで回路が学習できるという手軽さにも本手法の強みがある。

一方で、細線の配線本数制御によるシナプス機能の模倣には以下のような課題がある。

1. 配線本数を増やすことはできるが減らすことはできないため、コンダクタンス変化が一方向的であり、書き込み回数や表現可能な重みの値に多くの制約がある。
2. 重合成長による電極間配線は秒スケールで非常にゆっくりと進行するため、コンダクタンスの書き込み速度が遅く、回路全体の学習に時間がかかる。

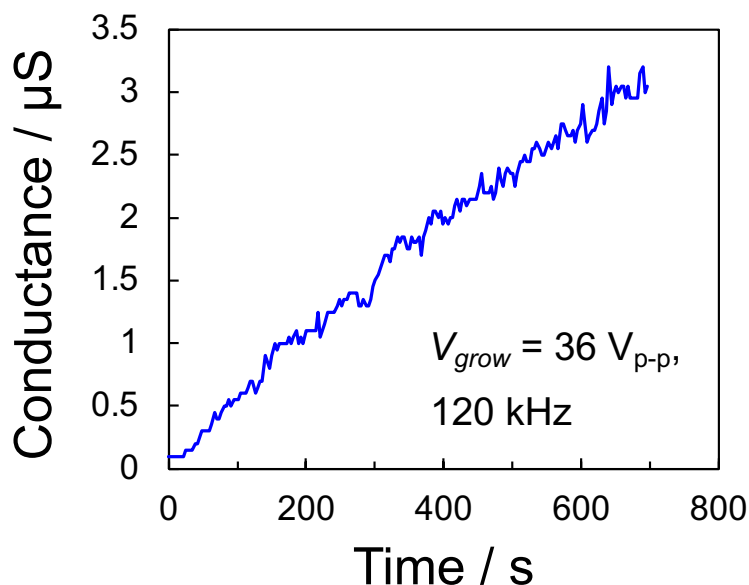


図 2.1 電極ギャップ間へ配線する導電性ポリマー細線の本数制御による電極間コンダクタンス制御. 時間に比例して配線本数が増加し, コンダクタンスもそれに比例して上昇している.

そこで本研究では, 導電性ポリマー細線を利用した新たなコンダクタンスの書き込み手法を2つ提案した. 1つは配線した細線の径を, 電圧スパイクの印加によって後天的に局所増加させる手法であり, これにより僅か数ミリ秒で電極間コンダクタンスを増加させることが可能となる. もう1つは導電性ポリマーという材料物性を利用し, 細線自体の導電性を電圧スパイクの印加によって可逆的に制御する手法であり, これにより高速かつ双方向的で, 連続的なコンダクタンス制御が実現できる. 本章ではこれらの書き込み手法を採用した際のコンダクタンス変化挙動を観察し, シナプス素子としての有用性を評価した.

2.2 導電性ポリマーファイバーとそのシナプス素子応用

2.2.1 導電性ポリマーファイバー

ポリマー(重合体)とは複数のモノマー(単量体)が重合してできた有機高分子化合物である. 自由電子を持たない従来のポリマーは基本的に絶縁性を示すことが通説であったが, 1977年に白川らにより発見された導電性ポリマーはドーピング効果による特異的な高導電性を示し, 多岐にわたる応用がなされている [4]. 例えば, 図 2.2 に示すポリ(3, 4-エチレンジオキシチオフェン):ポリスチレンスルホン酸 (PEDOT:PSS) は最も

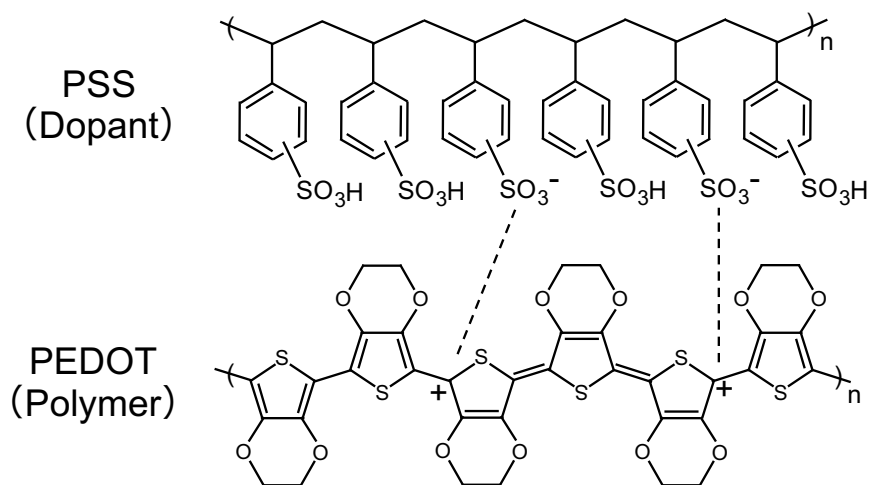


図 2.2 ポリ(3, 4-エチレンジオキシチオフエン):ポリスチレンスルホン酸 (PEDOT:PSS) の構造式.

産業応用に成功した導電性ポリマーの1つであり、ドーパントの PSS がポリマーである PEDOT へ正のキャリア (バイポーラロン) を注入 (ドーピング) することで非常に高い導電性を示す。またその高い透明性とフレキシブル性や、熱や酸、紫外線に対する安定性から、フレキシブル透明電極や電解コンデンサなど、今日におけるその応用は多岐にわたる [5-7]。

PEDOT:PSS に代表される導電性ポリマーは、モノマー前駆体溶液中での電解重合によって得られる。モノマーである 3, 4-エチレンジオキシチオフエン (EDOT) の酸化重合が陽極表面で進行するとともに、ドーパントである PSS による自己ドーピングが進行することで導電性ポリマーが堆積する。一般的に重合生成される導電性ポリマーの形態として、直流電圧印加による電解重合を通じて得られる薄膜状のものが広く用いられている。一方、交流電圧により得られるファイバー状の PEDOT も報告されている [8,9]。前駆体溶液に浸された電極へ矩形波の交流電圧を印加すると、電極表面において局所的に電解重合が進行し、電界に沿って PEDOT のファイバーが成長する様子が観察される。図 2.3 は kHz オーダーの矩形波交流電圧 (重合電圧) を電極へ印加することで導電性ポリマーが細線状に重合成長する様子を捉えたものである。対極を接地しながら作用極へ重合電圧を与えると陽極が周期的に切り替わり、ポリマーの酸化重合反応が各電極表面で交互に進行して「芽」が形成され、これを起点に細線が成長する。電界が集中している細線先端において電解重合が連鎖的に進行することで、両電極から細線が交互に成長し、やがてそれらが静電気力によって結合して電極間が物理的及

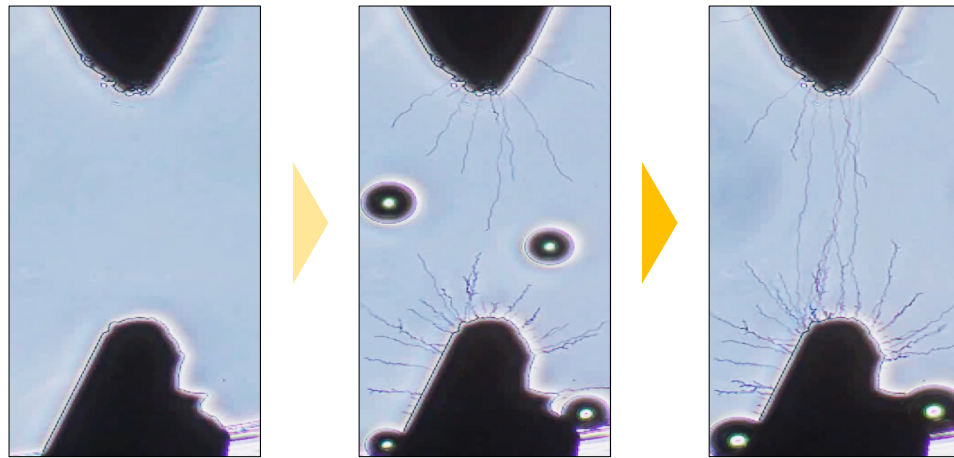


図 2.3 重合成長し 2 電極間へ配線を形成する導電性ポリマー細線の光学顕微鏡像。

び電氣的に配線される。

導電性ポリマーファイバーの重合成長に関して現時点で明らかとなっている、主に重要な性質を以下に列挙する。

1. 重合成長の有無や成長方向は重合電圧波形に依存する。
2. ファイバー径及び成長速度は、重合電圧周波数やオフセットに依存する。
3. 継続的な重合成長に必要な重合電圧振幅は、重合電圧周波数に依存する。
4. 重合成長には十分な電界強度が必要である。

1. は、用いる重合電圧の波形に依存してファイバー成長の有無や成長方向を制御できることを表している。例えば図 2.4 に示すように、波形として矩形波を用いると作用極と対極の両方からファイバーが成長するが、鋸歯状波(のこぎり波)を印加するとそのデューティー比に応じて片方からのみ成長が進行する。また、正弦波を印加してもファイバーの成長は観測されない。これらの事実は、ファイバーの成長条件として電極界面における急激なポテンシャル変化が必要であることを示唆している。本研究で行う以降の実験では全て矩形波重合電圧を用いてファイバーを重合成長させており、その際用いた振幅及び周波数はその都度記載していく。

2. に関してはいくつかの先行研究で統計的な測量を通じて明らかにされており、また理論的な説明もなされている [3, 10, 11]。具体的には、オフセット 0 V の矩形波交流電圧印加を通じて得られるファイバー径 d 及び成長速度 v は重合矩形波交流電圧の周波数 f_s に依存し、 $d \propto 1/v \propto 1/\sqrt{f_s}$ の関係が成り立つことが実験的及び理論的に明らか

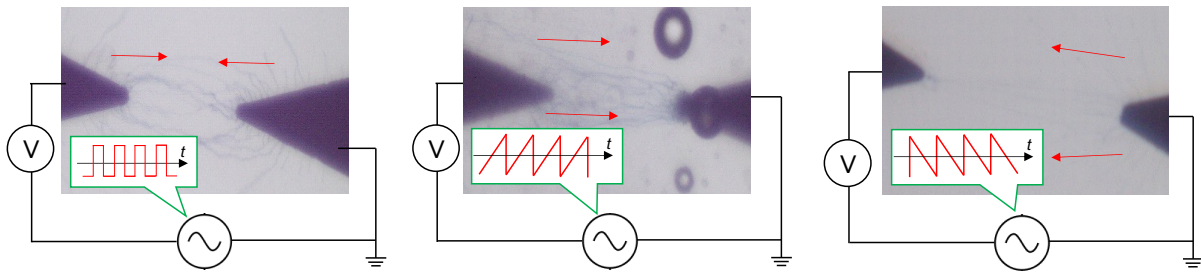


図 2.4 導電性ポリマー細線成長の重合電圧波形依存性. 赤矢印は細線の成長方向を示しており, 矩形波交流電圧を印加した際は作用極と対極の両側から, 鋸歯状波を印加した際はそのデューティー比に応じてどちらか片方からのみ成長することを表している.

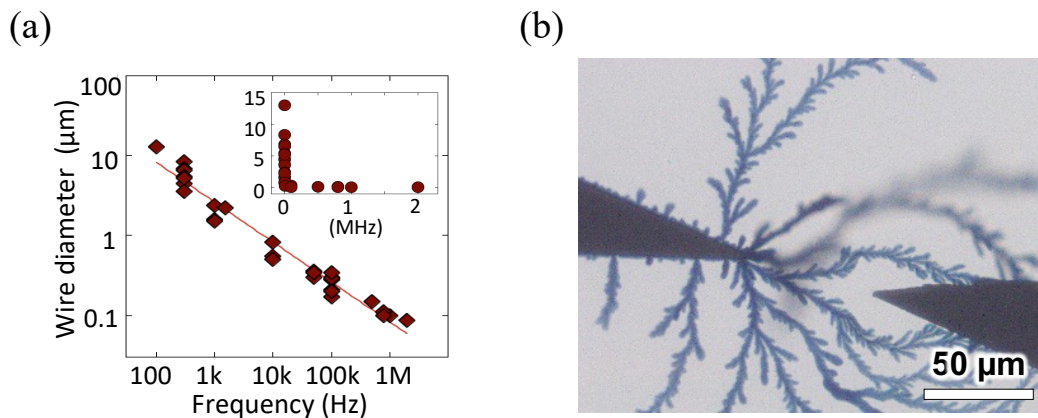


図 2.5 (a) 導電性ポリマー細線径の重合電圧周波数依存性. (b) オフセット電圧印加により重合されたポリマーデンドライトの光学顕微鏡像.

にされている. 実際, 本研究でファイバー径の重合電圧周波数依存性を調査したところ, $d \approx 98/\sqrt{f_s}$ の関係式が成り立つことが確かめられた (図 2.5a). また, 数 kHz 程度の高周波数帯においては分岐が少なく直線的な細線が比較的素早く成長する一方で, 数 Hz 程度の低周波数帯においてはより多くの分岐を有する太いファイバーが比較的ゆっくりと生成される. これは, 周波数に依存してファイバーと溶液と間の界面におけるモノマーの濃度勾配が変化し, 重合成長の平均速度に影響を及ぼすためであると説明される. 更に, 正のオフセットを重合電圧へ加えると, デンドライト状のファイバーが作用極側からのみ素早く成長する現象も観察されている (図 2.5b). こうしたファイバー形態の重合電圧条件依存性は, 用途に応じた適切なモルフォロジーの制御を可能とする. 本研究では電極間配線の指向性の観点から, kHz オーダーの高周波数帯で生成された分岐の少ないポリマー細線を主に用いた.

ファイバーを成長させるのに必要な電圧振幅の閾値は、その周波数が高くなるほど大きくなる点について言及しているのが3.であり、Jiらはこれを以下のように説明している [12]. まず、重合電圧が印加された電極と前駆体溶液との界面では電気二重層が形成されており、界面に電場が集中して大きな電圧降下が生じている。電極界面に形成されるこの急激な電位変化が駆動力となって電極表面でポリマーの重合反応が進行するが、その電圧降下量は印加交流電圧の周波数に依存するため、反応進行の有無も周波数に依存する。例えば、高周波の重合電圧を印加すると電気二重層のインピーダンスが減少し、電気二重層による電圧降下量も減少するが、これがPEDOTの核形成ポテンシャルを下回ると重合が進行しなくなる [13]. 従って、核形成ポテンシャルを上回る電圧降下量を電気二重層へ与えるためには重合電圧振幅をより大きく設定する必要がある。その結果、重合電圧の周波数が高くなるほど重合成長に必要な電圧振幅も大きくなる傾向が得られる。

核形成に十分な大きさの電圧印加に加え、電極表面への十分なモノマー供給はファイバーの重合成長を開始するための必要条件である。Jiらは、前駆体溶液中における電場分布が電極表面へのモノマー供給に大きく影響すると説明している [12]. 溶液中のモノマー分子は外部電場によって分極し、電場強度の勾配に比例した静電気を駆動力としてより電場強度の大きい電極先端へと泳動する。これにより電場強度のより大きな反応サイトへ集中的なモノマー供給がなされ、ファイバーの重合成長を促進する。従って、十分な強度の電界が生じていない領域ではモノマー供給が乏しく、ファイバーの重合成長が起こりにくい傾向がある。そのため重合成長を低電圧で行うためには、用いる電極の先端曲率半径を小さくして電界集中を促すといった工夫が必要である。また逆に、不要な重合成長を抑制するためには曲率半径を大きくすれば良いことから、適切な電極形状を選択することで重合成長開始位置の局所的な制御が可能となる。

その他、溶媒の粘度や重合電圧振幅、電極の金属種等も得られるファイバーのモルフォロジーに寄与することが先行研究により示唆されている [12, 14].

2.2.2 配線可能なシナプス素子としての応用

近年、抵抗値を自在に書き込むことができ、その値を長期間保持可能な不揮発性アナログ抵抗変化メモリ素子をシナプス素子として用いた脳型ハードウェアが精力的に研究されている。シナプス素子のコンダクタンスはシナプス結合強度、すなわち人工ニューラルネットワーク (Artificial neural network: ANN) における重みに対応しており、

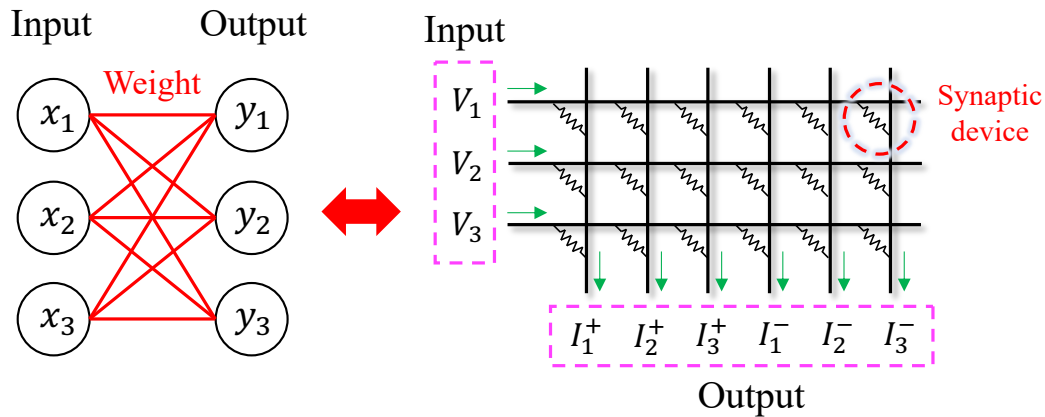


図 2.6 クロスバーアレイによる人工ニューラルネットワーク (ANN) モデル実装の概念図.

ノードに対応する電極間へ流れる電流値を調節する役割を担う. 複数のシナプス素子がワード線とビット線の交点へ格子状に配列されたクロスバーアレイ (図 2.6) は非常に単純な構造であり, かつ既存の微細化技術を用いて容易に高集積化できることから, アナログ脳型ハードウェアの基本アーキテクチャとして定着しつつある [15–17]. ワード線へ入力データを電圧値として入力し, シナプス素子を介してビット線へ流れる電流値を読み出すことで ANN の並列積和演算を物理的に実行することが可能となる. 代表的なシナプス素子として, 絶縁層中における金属フィラメントを電圧印加により形成・分解することで電極間抵抗値を可逆的に制御可能なフィラメント型抵抗変化メモリが主流である. 各シナプス素子のコンダクタンスを書き込むことで, ネットワーク全体の学習を行うことが可能となる.

ところがこのクロスバーアレイは, 莫大な数の近傍ニューロン同士が局所的に結合してできた実際の脳構造と大きくかけ離れており, これにより畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional neural network: CNN) に代表される様な非全結合型ネットワークの実装効率が低下する点が課題として指摘されている. 図 2.7 はクロスバーアレイによる非全結合型ネットワーク実装の概念図であり, ネットワークの学習に寄与しない不使用シナプス素子がアレイ内で大量に生じていることが分かる. ネットワークの複雑大規模化に伴い不要なシナプス素子数が増加してアレイ内を空間的に圧迫するため, 回路面積の肥大化や不要素子に流れるリーク電流による消費電力の増大が懸念される. また, クロスバーアレイによる CNN の実装には複雑な外部制御が必要となるため, より実装効率の高い新規アーキテクチャが強く求められている [18].

クロスバーアレイに代わる新たな CNN 向け回路アーキテクチャとして, 導電性フィ

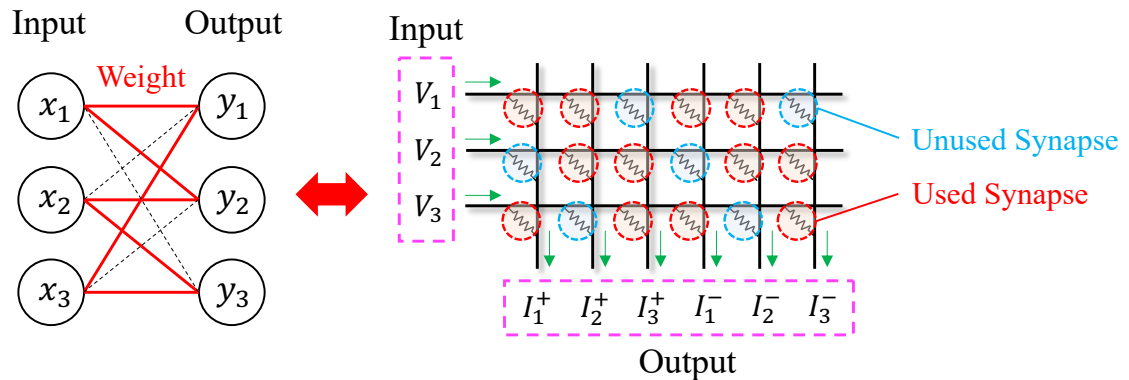


図 2.7 クロスバーアレイによる非全結合型ネットワーク実装の概念図. 不使用シナプス素子がアレイ内で大量に生じ, 実装効率が低下してしまう.

ラメントを所望の電極間へ立体的に配線可能な抵抗変化メモリ素子を用いたものが提案されている [19,20]. 図 2.8 にその概念図を示す. 上部電極と下部電極が絶縁層を介して高さ方向に積層されており, 各電極が CNN におけるノードに相当する. 畳み込みフィルタは, 近傍電極間の導電性フィラメント配線により物理実装されており, 各電極間のコンダクタンスがフィラメントの形成・分解を通じて最適化されることでフィルタが学習される. 高さ方向への電極積層によって高い面積効率を実現可能な本アーキテクチャは, 特徴抽出器として応用することで高精度の画像分類精度を達成し得ることがシミュレーションにより示唆されている. ところが, 従来の抵抗変化メモリ素子はフィラメント成長の制御性が低く, またフィラメント成長を起こすために必要なフォーミングと呼ばれる前処理に大電圧が必要となるといった技術的な課題から, 前述のアーキテクチャを実現可能なメモリ素子は未報告である. そこで本研究では, 液中での配線性能に富んだ導電性ポリマー細線を配線材料として用いることで上述の提案回路アーキテクチャを実現し得ると考え, ポリマー細線の「配線可能なシナプス素子」としての応用を試みた.

2.2.3 シナプス可塑性と記憶の多重貯蔵モデル

Hebb は, シナプス前ニューロン (プレニューロン) とシナプス後ニューロン (ポストニューロン) が高頻度で連続発火するとそれらの間の信号伝達効率が增強され, 逆に低頻度の連続発火によって信号伝達効率が低下することを見出した [21]. これは Hebb の学習則と呼ばれ, シナプスの可塑性に基づく脳の基本学習機構として知られる. シナ

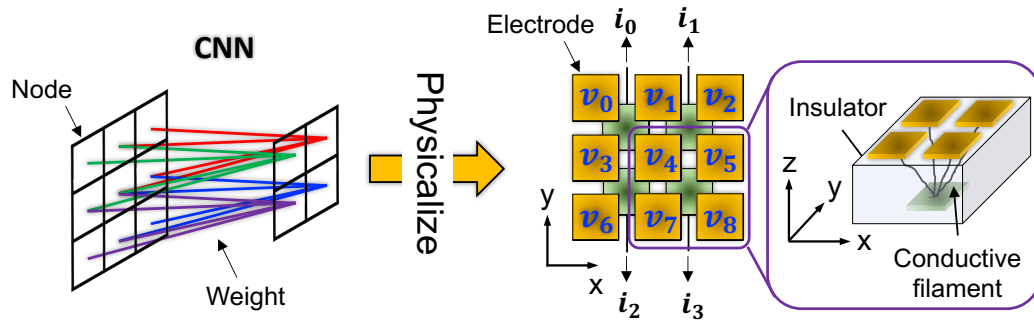


図 2.8 導電性フィラメントの電極間立体配線を用いた畳み込みニューラルネットワーク (CNN) ベースの新規回路アーキテクチャの概念図。

プスの結合強度を強めて信号伝達効率を高める働きはシナプス増強 (Potentiation) と呼ばれ、反対に弱める働きはシナプス抑制 (Depression) と呼ばれる。我々の脳内ネットワークは外部から受け取った情報を基に各シナプスが増強と抑制を行うことで局所的に学習し、情報を分散記憶として保持していると考えられる。

脳の記憶形成メカニズムは未だ完全には理解されておらず、今もなお多くの研究がなされているが、記憶の多重貯蔵モデルは最も基本的な記憶形成メカニズムとして受け入れられている [22]。本モデルでは、記憶を感覚記憶、短期記憶、長期記憶の3つに大別している。五感によって知覚した全ての刺激はまず感覚記憶として各感覚器官にごく僅かの間保持されるが、それらのうち選択的注意が向けられた情報だけが脳へ送られ、短期記憶として保持される。ここでいう選択的注意とは、感覚器官で知覚した外的環境の一部だけを選択して注意を向けるという認知機能のことを指す。例えばカクテルパーティーのように、沢山の人がそれぞれに雑談しているなかでも自分が興味のある人の会話、自分の名前などは自然と聞き取ることができる (カクテルパーティー効果) [23]。このように、人間には興味や関心が向いた情報だけを選択して注意を向ける機能が備わっている。短期記憶は 15 ~ 30 秒間だけ保持されてから自然に消滅し、これが人間の持つ忘却機能に対応する。ところが高頻度で刺激入力が続行われた場合、脳は記憶と忘却を繰り返しながら徐々に記憶レベルを高め、ある一定のレベルを超えると忘却しづらくなり、長期記憶として半永久的に貯蔵される。

このような長期・短期記憶の形成はシナプスの増強または抑制を通じて変調された信号伝達効率の保持時間に起因すると考えられている。情報が入力されるとシナプス効率が一時的に変化し、次第に元の効率へ還るような短期可塑性 (Short-term plasticity: STP) により、短期記憶が形成される。一方、入力が高頻度で繰り返されると増強された

シナプス効率が長期的に維持されるようになり、あるところで STP からシナプス長期増強 (Long-term potentiation: LTP) へ移り変わる。このように STP から LTP へシナプス効率が変化の様子はニューロモルフィック工学においても模倣がなされており、銀原子スイッチにおける原子架橋の安定化を利用したもの等が報告されている [24]。本研究ではこれらの可塑的シナプス効率変化を、導電性ポリマー細線の物理化学的形質変化を通じたコンダクタンス変化により模倣し得ることを示す。

2.3 実験方法

2.3.1 化学材料の調合・作製

本実験で使用されるモノマー前駆体溶液は、0.135 M の EDOT (Sigma-Aldrich 社製) と 0.020 M の PSS (Sigma-Aldrich 社製) を、アセトニトリルと超純水が 1:1 で混合された溶媒に溶解することで調合された。また、前駆体溶液を封入するために用いられたポリジメチルシロキサン (PDMS) 膜は、主剤と硬化剤 (The Dow Chemical Company 社製) を 10:1 の比率で混合してこれを真空脱気した後、80 °C で 2 時間加熱することで作製された。

2.3.2 マイクロ電極ギャップの作製

レジスト (クリーンサーフェステクノロジー社製, AZP1350) を 24 mm × 24 mm ガラス基板上へスピンコート (3000 rpm, 60 秒間) して 95 °C で加熱したのち、レーザー描画装置 (HEIDELBERG 社製, DWL2000GS) を用いてマイクロ電極ギャップパターンを露光した。現像してレジストマスクパターンを形成したのち、金属薄膜 Cr (5 nm)/Au (400 nm) をヘリコンスパッタ装置 (ULVAC 社製, MPS-4000C1/HC1) でスパッタ成膜した。成膜後の基板をアセトンに浸漬し、超音波洗浄機でリフトオフすることでマイクロ電極ギャップをガラス基板上へ作製した。

本章内の実験は全て、ギャップ長 50 μm 、先端曲率半径 45 μm の電極ギャップを用いて行われた。図 2.9 に作製した電極基板の外観を示す。また、電極ギャップのモノマー前駆体溶液への浸漬は、円筒状にくり抜いた PDMS を封入容器として用い、ガラス基板に接着された本容器内へ溶液を滴下することで行われた。

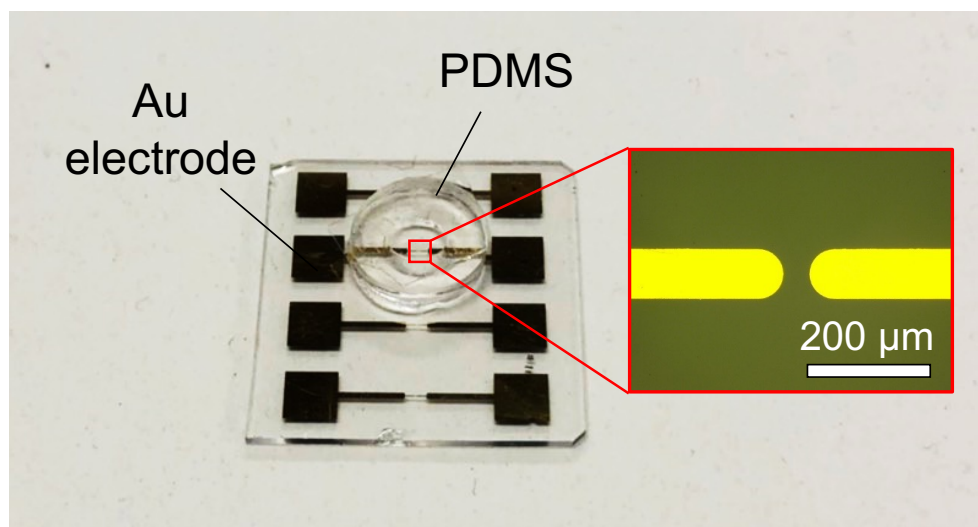


図 2.9 電極基板の外観.

2.3.3 実験システム構成

図 2.10 に実験システムの概念図を示す．本実験は大きく分けて，導電性ポリマー細線の電極間重合配線と電圧スパイク印加という 2 つのフェーズから成る．細線の重合配線フェーズでは，モノマー前駆体溶液に浸された電極ギャップ間へ重合電位差 (50 kHz, 20 V_{p-p}) を印加することで，細線が電極間へ数本程度配線された．その際，3.5 秒間の重合電圧印加と 0.5 秒間の電極間コンダクタンスの読み出しが交互に繰り返されることで，電極間コンダクタンス推移がリアルタイム観察された．任意波形生成器 (NF 社製，WF1973) から生成された矩形波交流電圧を作用極へ印加し，対極を接地することで電極ギャップ間へ重合電位差を印加した．電極間コンダクタンスは，作用極へ -0.1 V の直流電圧を印加し，その際対極に流れる電流値を反転増幅回路 (増幅率 2×10^6) で増幅してアナログ-デジタル変換回路 (Analog-digital convertor: ADC) で読み出された．これらの切り替えは，マイクロコントローラ (Arduino S.R.L. 社製，Arduino DUE) で制御されるメカニカルリレーにより行われた．また，電極間の様子は倒立顕微鏡 (Olympus 社製，IX73) を用いてその場観察された．溶液乾燥後における細線の様子は光学顕微鏡 (KEYENCE 社製，VHX-500) 及び原子間力顕微鏡 (Atomic force microscopy: AFM) (SII Nano Technology 社製，SPA400) を用いて観察された．

細線の電極間配線が完了した後，デジタル-アナログ変換回路 (Digital-analog convertor: DAC) から生成された電圧スパイク (振幅 V ，幅 W ，間隔 T) を作用極へ連続印加した際のコンダクタンス変化を観察した．作用極へ電圧スパイク印加がなされている間，対

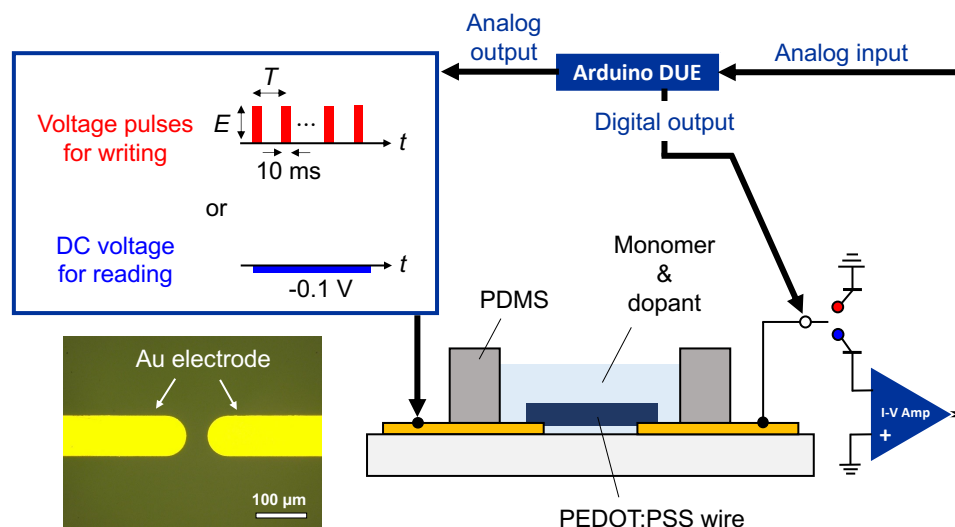


図 2.10 実験システム概念図.

極は接地された。スパイク印加とコンダクタンス読み出しを交互に繰り返し行うことで、コンダクタンス変化の推移がリアルタイムで観察された。

2.4 実験結果

2.4.1 後天的細線径増加によるシナプス長期増強の模倣

図 2.11a に、重合直後の導電性ポリマー細線の光学顕微鏡像を示す。直径数百 nm 程度の細線が数本ほど電極間を架橋している様子が見てとれる。また、この時の電極間コンダクタンスは $1.45 \mu\text{S}$ であった。ポリマー配線後の作用極へ、 $V = 2.5 \text{ V}$, $W = 10 \text{ ms}$, $T = 5 \text{ s}$ の条件下にて電圧スパイクを 30 回ほど連続印加した際のコンダクタンス推移を図 2.11b に示す。スパイク印加直後に現れるコンダクタンスのピークは電気二重層の形成に伴う充電電流によるものであり、その後数秒間かけて収束する値が正味の電極間コンダクタンスを示している。なお、電極間を流れるイオン電流は、細線を通じて流れる電流に比べて無視できるほど小さい。 $1.45 \mu\text{S}$ の初期コンダクタンスは、第 1 スパイク印加直後に $0.15 \mu\text{S}$ にまで減少した。一時的に減少したコンダクタンスはその後、電圧スパイクの印加が進むにつれて次第に増強され、30 回目のスパイク印加後のコンダクタンスは $3.45 \mu\text{S}$ にまで到達した。増強されたコンダクタンスは長期間保持され、試料乾燥後に大気中で 1 日中放置してもコンダクタンスの変化は観察されなかった。この性質は、シナプスが結合強度を長期的に増強させて長期記憶を形成す

る LTP の機能に対応づけられる。対照実験としてポリマー配線がなされていない電極ギャップを用いて同様の実験を行ったところ、以上のようなコンダクタンス増強は観測されなかった(図 2.11b 挿入図)。

第 1 スパイク印加直後の急激なコンダクタンス減少は、陰極である対極近傍の細線中で進行した脱ドーピングに起因していると考えられる。このようなポリマー配線された電極への電圧印加に伴う低導電化は先行研究でも報告されており、Petrauskas らはこれを自己ゲート効果として説明している [25]。溶液中に含まれる負の電荷を持った PSS^- イオンはクーロン力によって陽極側へドリフトし、陽極近傍でのドーピング反応及び PEDOT:PSS の重合反応に寄与するが、これと同時に陰極側ではドリフトしてきたカチオンが PSS^- イオンを補償して脱ドーピング反応が進行する。重合されたポリマー細線は高濃度で自己ドーピングされているが、電圧スパイクが印加されると陰極側での脱ドーピング反応によって低導電化が進行し、コンダクタンスの急激な減少が観察されたと考えられる。また、その後の連続スパイク印加に伴うコンダクタンス増強は、陽極近傍の細線表面で電解重合が進行し、新たな PEDOT:PSS の膜が細線側壁上へ堆積して細線径が局所的に増加したことに起因すると考えられる。図 2.11c, d は連続スパイク印加前後における細線の光学顕微鏡像及び、AFM を用いて取得した陽極及び陰極近傍における細線の断面プロファイルである。連続スパイク印加前の細線はほぼ一様な径分布を示したのに対し、印加後の細線は陽極近傍において著しい径増加がみられ、非対称な径分布を示した。このような局所的径増加により細線全体の抵抗値が減少し、長期的なコンダクタンス増強が発現したと考えられる。

次に、電圧スパイクの連続印加間隔 T を変えて同様の実験を行った。図 2.12a, b に $T = 2, 60 \text{ s}$ の条件下で実験を行った際に観測された電極間コンダクタンス推移をそれぞれ示す。 $T = 2 \text{ s}$ の条件下で高頻度に電圧スパイクを連続印加すると、より急激なコンダクタンス増強が観測された。一方、 $T = 60 \text{ s}$ の条件下にて低頻度で印加すると、コンダクタンスは一貫して小さな値を示し、増強は観測されなかった。こうしたスパイク印加頻度に依存した LTP の起こりやすさは、高頻度で入力された情報のみが長期記憶として保持される記憶の多重貯蔵モデルに対応づけられる。図 2.12c, d に、各条件下で電圧スパイクを連続印加した後における細線の倒立顕微鏡像を示す。スパイク間隔が $T = 2 \text{ s}$ と比較的小さい時、陽極近傍の細線の径のみが局所的に増加していることが分かる。一方、スパイク間隔が $T = 60 \text{ s}$ と比較的大きい時、細線全体の径が増加していることが分かる。これらの違いは、スパイク印加頻度に応じて溶液内への PSS^- イオン濃度分布が変化することに起因すると考えられる。まず、溶液中で電極ギャップ

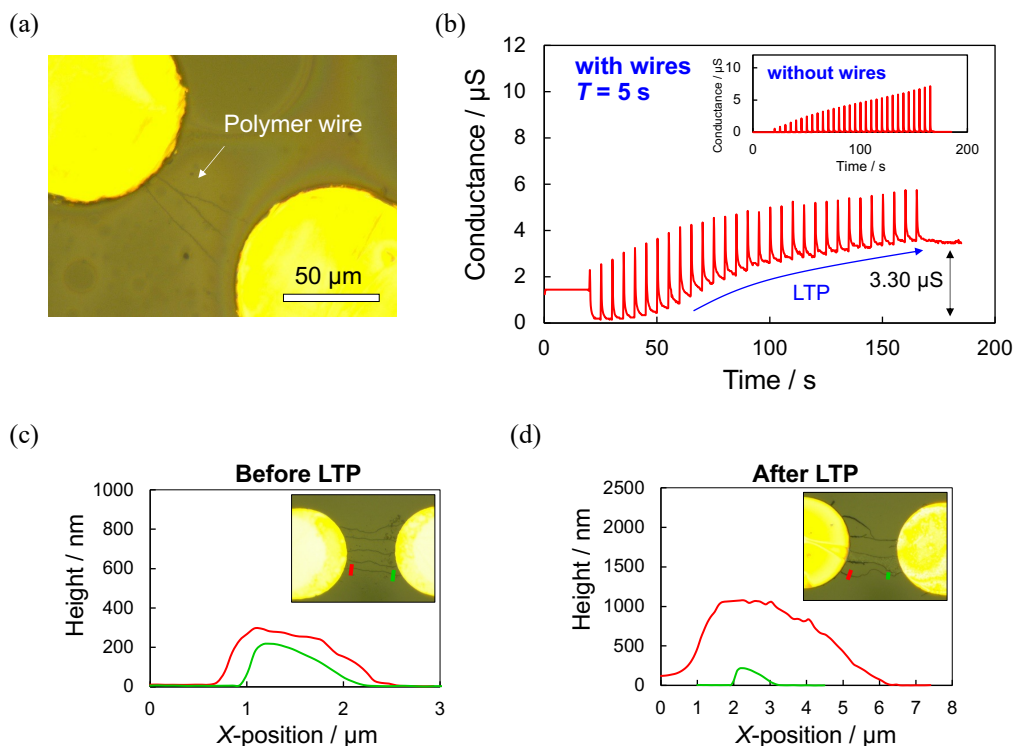


図 2.11 (a) 電圧スパイク連続印加前の導電性ポリマー細線の光学顕微鏡像。(b) ポリマー配線された電極ギャップ及びポリマー配線の無い電極ギャップへ周期的電圧スパイク ($V = 2.5 \text{ V}$, $W = 10 \text{ ms}$, $T = 5$) を連続印加した際の電極間コンダクタンス推移。(c,d) 電圧スパイク連続印加前後におけるポリマー細線の光学顕微鏡像及び、原子間力顕微鏡により取得された細線断面プロファイル。

へ電圧スパイクを印加すると、液中に生じた電場によって PSS^- イオンが陽極側へドリフトし、陽極近傍の PSS^- イオン濃度が増加する。その後スパイク印加を止めると、次のスパイク印加時まで PSS^- イオンが低濃度側へ比較的ゆっくりと拡散する。スパイクを高頻度で印加する場合、拡散よりもドリフトが支配的に起こるため、陽極近傍における PSS^- イオンの高濃度化が進行する。その結果、スパイク印加時に高濃度の PSS が自己ドーピングされた PEDOT 膜が、陽極近傍の細線側壁上へ局所的に重合堆積し、コンダクタンス増強に寄与したと思われる。信号の入力頻度に依存してコンダクタンス増強の度合いが変化する本傾向は、記憶の多重貯蔵モデルを再現可能なニューロモルフィックデバイスとしての応用が期待できる。

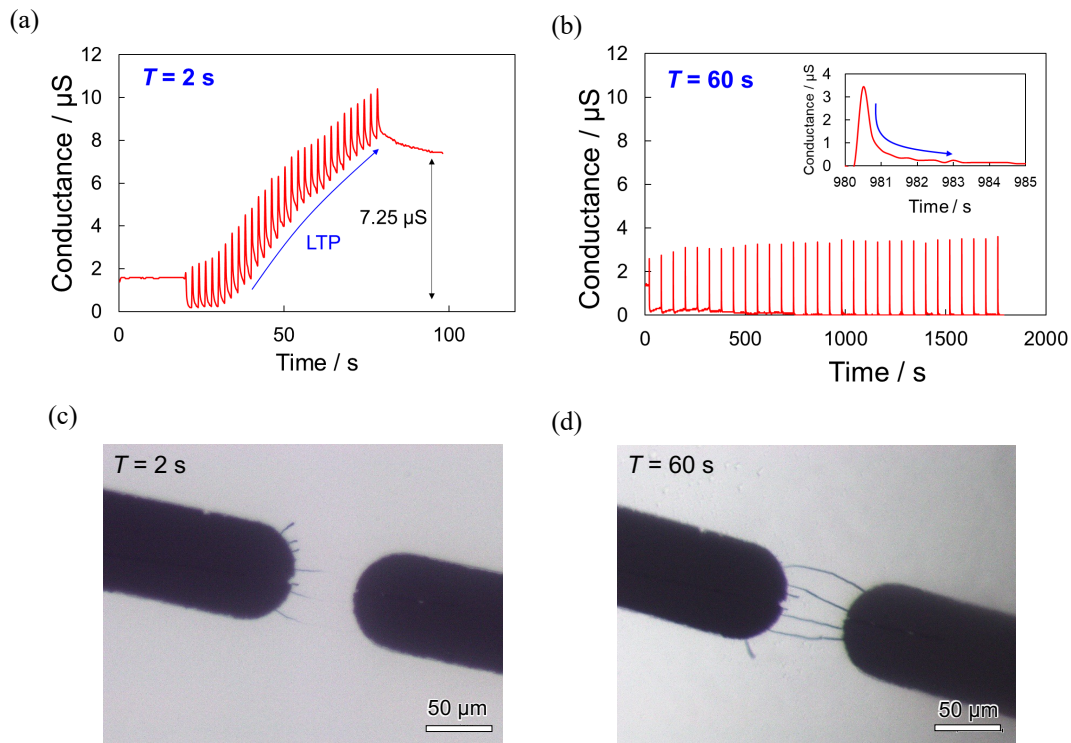


図 2.12 (a, b) $T = 2, 60$ s の間隔で電圧スパイクを連続印加した際の電極間コンダクタンス推移. (c, d) $T = 2, 60$ s の間隔で電圧スパイクを連続印加した後に取得された導電性ポリマー細線の倒立顕微鏡像.

2.4.2 可逆的導電性変化によるシナプス短期可塑性の模倣

他の一般的なアナログ抵抗変化メモリ素子のように、電圧スパイクの印加回数及び極性を制御することで、電極間コンダクタンスの連続的かつ双方向的な制御を実現できないか検討した. 図 2.13a に、ポリマー配線直後の電極ギャップへ ± 1.5 V の比較的小さな電圧スパイクを、200 回毎に極性を変えながら連続印加した際のコンダクタンス変化を示す. 本結果より、スパイク印加に伴うコンダクタンス変化はほとんど観測されなかったことが分かる. 一方で、前項で得られた LTP 発現後の電極ギャップへ同様に電圧スパイクを印加すると、スパイクの極性に応じてコンダクタンスが僅かに増減することが新たに見出された. 大きさ $V = 2.5$ V の電圧スパイクを間隔 $T = 2$ s で連続印加することで LTP が誘起された電極ギャップへ、 $V = 0.9$ V または -1.5 V の電圧スパイク (以下スイッチングスパイクと呼ぶ) を、200 回おきに極性を変えながら $T = 0.5$ s の間隔で連続印加した際のコンダクタンス変化を図 2.13b に示す. 本結果より、正のスイッチングスパイクを印加する度にコンダクタンスが僅かに増加しており、続けて印

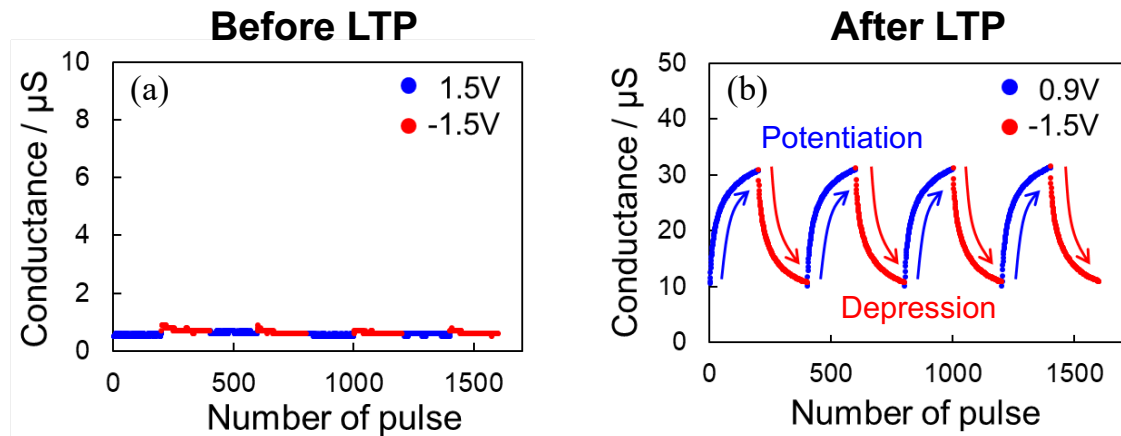


図 2.13 (a) LTP 発現前及び (b) LTP 発現後の電極ギャップへそれぞれ正負の電圧スパイクを 200 回おきに極性を変えながら連続印加した際のコンダクタンス推移。

加することで連続的なコンダクタンス増強を実現できていることが分かる。また、負のスイッチングスパイクを連続印加すると今度はコンダクタンスが連続的に減少した。この結果は LTP 発現後の電極ギャップがシナプス増強とシナプス抑制をどちらも再現できるような、可塑性を持ったシナプス素子として機能し得ることを示している。以降、一般的なフィラメント型抵抗変化メモリ素子になぞらえ、 $V = 2.5 \text{ V}$ の電圧スパイクを連続印加して以上の様な可逆的コンダクタンススイッチングが可能な状態にする操作のことをフォーミングと呼ぶこととする。

次に、スイッチングにより得られたコンダクタンスの保持性能を示すリテンション特性を取得した。まず、正のスイッチングスパイクを連続印加して電極ギャップを低抵抗状態 (Low-resistive state: LRS) にした。その後スパイク印加を止めて放置し、電極間コンダクタンスの時間経過を観察した。負のスイッチングスパイクを連続印加して得られた高抵抗状態 (High-resistive state: HRS) の電極ギャップについても同様の観察を行った。得られた各状態のリテンション特性を図 2.14 に示す。LRS と HRS はどちらも時間の経過とともに減衰し、初期値から大きく外れた平衡コンダクタンスへと収束する様子が観察された。このようなコンダクタンスの減衰は、脳に蓄積された情報が時間の経過とともに忘却されていくような忘却特性に対応づけられる。従って、本実験により得られたスイッチングは短期的にのみ増強及び抑制できる STP のような性質を有していると言える。STP に対応する忘却特性を有するメモリ素子は報告例がいくつかあり、物理リザーブコンピューティング等への応用が盛んに研究されている [26, 27]。

発現した STP 的なコンダクタンススイッチングの原理解明に向け、以下のような追

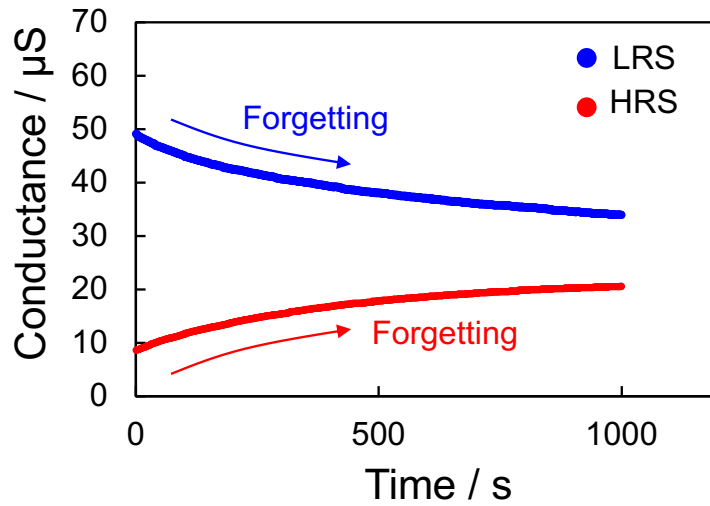


図 2.14 低抵抗状態 (LRS) 及び高抵抗状態 (HRS) において得られたリテンション特性.

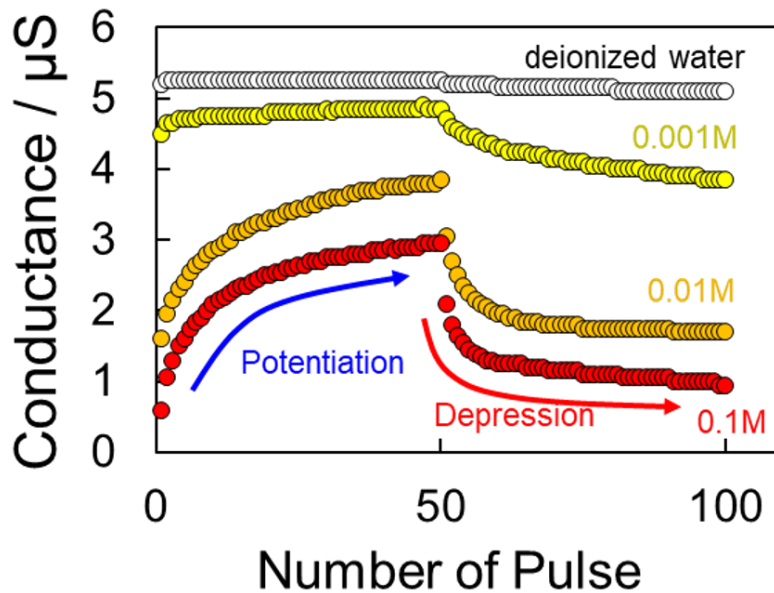


図 2.15 コンダクタンススイッチングの PSS 濃度依存性.

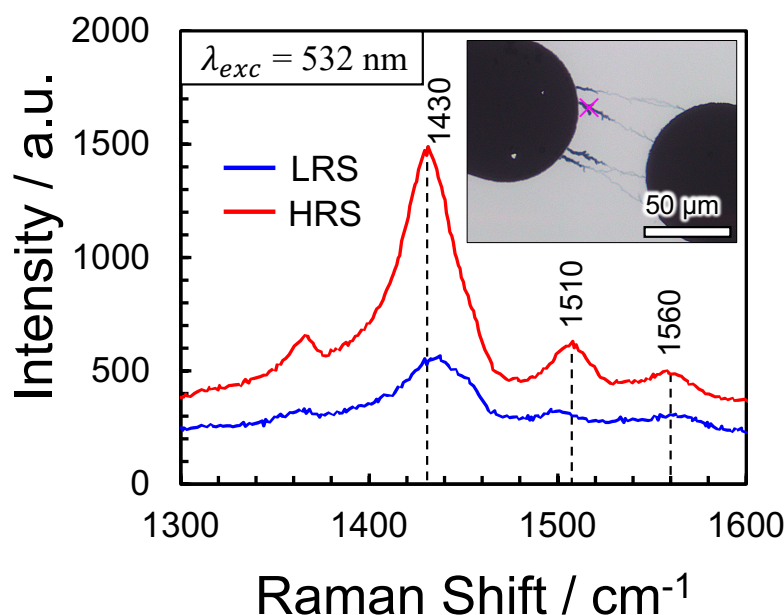


図 2.16 HRS, LRS において取得されたラマン散乱光強度分布. 光学顕微鏡像中に示す位置へ 532 nm 波長のグリーンレーザー光を入射することで得られた.

加実験が行われた. まず, ポリマー細線が架橋された電極ギャップ間へフォーミング処理を施した後, ホットプレートでガラス基板を 10 分間, 120 °C で加熱することでモノマー前駆体溶液を蒸発させ, 加熱乾燥させた. その後, 脱イオン水または PSS 水溶液を電極ギャップに滴下し, スwitching が同様に観測されるか検証した. 図 2.15 に, 脱イオン水及び PSS 水溶液 (0.001, 0.010, 0.100 M) 中でのコンダクタンス推移を示す. なお, フォーミングが施されたされた細線は全て同一のものを使用しており, 加熱乾燥と溶液滴下を繰り返すことでデータを取得した. また, 加熱乾燥時における残留 PSS の影響を最小限に留めるため, 低濃度の水溶液から検証を行った. 本結果より, PSS 濃度が高濃度であるほど顕著なスitching が発現することが明らかとなった. このことは, 発現したスitching が溶液中のカチオン X^+ と細線との間で起こる以下のドーピング・脱ドーピング反応に起因していることを示唆している.



左辺から右辺への反応はカチオンによる PSS イオンの補償に伴う脱ドーピング反応を表している. また, 右辺から左辺への反応はその逆反応であるドーピング反応を表している.

表 2.1 PEDOT のラマンバンドピーク位置と振動モードの割り当て.

バンド位置 [cm^{-1}]	振動モード
1,430	$C_\alpha = C_\beta$ 対称伸縮振動
1,510	$C_\alpha = C_\beta$ 非対称伸縮振動
1,560	$C_\alpha = C_\beta$ 非対称伸縮振動

次に、0.100 M の PSS 水溶液中でスイッチングスパイク (± 1.5 V) を連続印加することで電極ギャップを LRS または HRS へセットした直後に、ポリマー細線のラマンスペクトルを液中で取得した (図 2.16). レーザラマン顕微鏡 (ナノフォトン社製, RAMAN touch) を用いて、図 2.16 中の光学顕微鏡像内に示された位置へ 532 nm 波長のグリーンレーザー光を入射することでスペクトルを取得した. LRS と HRS で得られたスペクトルはどちらも典型的な PEDOT のスペクトル分布を示し、各バンドピークは PEDOT のチオフェン環が持つ炭素二重結合の振動モードに割り当てられる (表 2.1). 一方、2 つのスペクトルには顕著な散乱光強度の違いが見られ、HRS で取得したスペクトルは LRS で取得したものに比べてスペクトル全体で高強度を示した. この顕著な散乱光強度の差異は次のように説明される. まず、ラマン散乱光強度は測定試料の吸収波長帯に大きく依存し、入射した励起レーザー光波長が試料の吸収波長帯に近づくほど散乱光強度は増強される (共鳴ラマン効果). 先行研究によれば、脱ドーピング反応によって PEDOT のドーピングレベルが低下するにつれて PEDOT の吸収波長帯がブルーシフトし、今回用いた励起レーザー光源の波長である 532 nm の波長帯において吸収率が高くなる [28]. 従って、HRS と LRS の間に見られた散乱光強度の顕著な違いは、スイッチングスパイクの連続印加に伴う細線のドーピングレベル変化を示している.

続いて、フォーミング時に電圧スパイクが連続印加される作用極と、接地されている対極の近傍でそれぞれポリマー細線のラマンスペクトルを取得し、比較した. 図 2.17a はフォーミング後における細線の光学顕微鏡像であり、フォーミング時に作用極近傍の細線側壁上で新たな PEDOT の重合反応が進行してこれが膜状に堆積した結果、局所的に径が増加したことが分かる. 作用極と対極近傍で取得したラマンスペクトルにおいて見られた 1,510 及び 1,560 cm^{-1} のラマンバンドの半値幅及び相対ピーク強度を図 2.17b に示す. なお、半値幅はラマンバンドをガウシアンフィッティングすることで求められた. また相対ピーク強度はそれぞれ、1,430 cm^{-1} に現れる $C_\alpha = C_\beta$ 対称伸縮振動由来のラマンピークで正規化することで求められた. 本結果から分かる通り、作用極側における細線のラマンスペクトルから得られたバンドはいずれも、対極側よりも

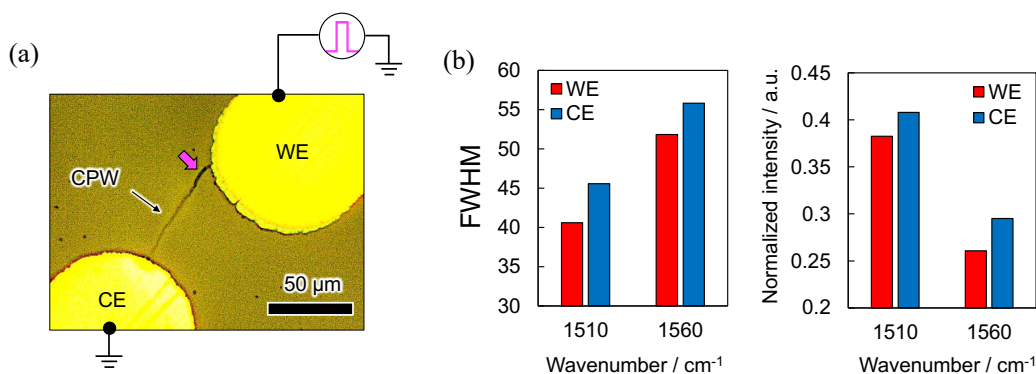


図 2.17 (a) フォーミング後における導電性ポリマー細線の光学顕微鏡像。対極 (CE) 側に比べて作用極 (WE) 側の細線が局部的に径増加している様子を捉えている。(b) WE と CE 側の細線上で得られたラマンバンド (1,510 及び 1,560 cm⁻¹) の半値幅 (FWHM) 及び相対ピーク強度。

小さな半値幅と相対ピーク強度を示している。これらの結果から、作用極近傍の細線側壁上へ新たに膜として堆積した PEDOT はポリマー鎖中の構造欠陥がより少なく、より高いキャリア移動度を有していることが先行研究のもと示唆される [12]。電気伝導度がキャリア密度と移動度の積に比例することから、新たに堆積した PEDOT 膜の電気伝導度はドーピング及び脱ドーピング反応によるキャリア密度変化に対してより敏感であると考えられる。従って今回得られたコンダクタンススイッチングは、フォーミングの結果作用極近傍の細線側壁上へ新たに堆積した PEDOT 膜の導電性変化に起因すると結論づけられる。すなわち、作用極へ正のスイッチングスパイクを印加すると作用極は陽極として働き、新たに堆積した膜上ではドーピング反応 ($\text{PEDOT}^0 + \text{X}^+ : \text{PSS}^- \rightarrow \text{PEDOT}^+ : \text{PSS}^- + \text{X}^+ + \text{e}^-$) が進行して高導電化する。逆に作用極へ負のスイッチングスパイクを印加すると作用極は陰極として働くため、膜上では脱ドーピング反応が進行して低導電化する。ポリマー細線の重合成長からフォーミング、そしてスイッチングに至るまでのこれらの過程を概念図 2.18 にまとめた。

2.4.3 制御電圧の導入による忘却特性の制御

より幅広いアプリケーションの開拓に向け、前項にて得られた忘却特性の制御を試みた。図 2.19a は、図 2.14 と同様に取得されたコンダクタンススイッチング後のリテンション特性である。スパイク印加を通じたスイッチングによって初期値が与えられると電極間コンダクタンスはゆっくりと変動し、ある平衡状態へと収束していく様子が観察された。また、初期値に依存して変化の時定数が変化することも示唆された。こ

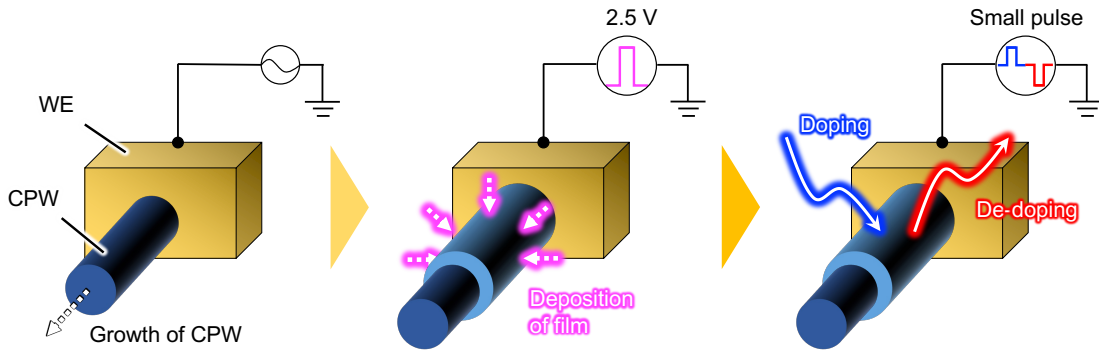


図 2.18 導電性ポリマー細線の重合成長からフォーミングによる局所的径増加，電圧スパイク印加に伴うドーピング及び脱ドーピングに起因するコンダクタンススイッチングまでの過程を表した概念図。

のようなコンダクタンスの変動は，スパイク印加に伴うドーピングまたは脱ドーピング反応によって一時的に得られた非平衡状態が，平衡状態へ向かって自発的に変化することに起因すると考えられる。

忘却特性の制御に向けたアプローチとして，本研究では平衡状態の電気化学的な制御を試みた．読み出しインターバル間に，対極を接地しながら作用極へ大きさ $V_c = 0.0 \sim 0.7$ V の制御電圧を印加した際のリテンション特性を取得した． -0.1 V の読み出し電圧印加 (450 ms)，大きさ V_c の制御電圧印加 (500 ms)，作用極と対極がどちらも浮遊された待ち時間 (50 ms) から成る 1 秒間の測定ステップを 100 回繰り返して取得したリテンション特性を図 2.19b に示す．本実験結果より，制御電圧に応じて平衡状態が大きく変化することが明らかとなった．

このような忘却特性の可制御性は，情報処理に応用した際に適用可能なアプリケーションの範囲を大きく広げることができる．例えば，忘却特性を有するシナプス素子は入力情報がある一定期間のみ保持できることから，短期記憶を有するリザーバー素子として用いることで物理リザーバーコンピューティングへと応用できる．要求される忘却時定数は適用するアプリケーションによって異なるため，忘却特性の可制御性は幅広いタスクへ柔軟に適用可能な物理リザーバーをもたらす．バイオセンシング応用を例に挙げると，脈拍パターンの異常検知といった比較的高速なリアルタイム処理が要求される場合は忘却特性の時定数を数ミリ秒から数秒スケールに設定する必要がある．一方で，血糖値のように時間をかけてゆっくりと変化するような生体データを予測する場合は，分スケールの時定数で忘却するような短期記憶性が要求される．アプリケーションに応じて適切な制御電圧を導入することで，幅広いアプリケーションに対して

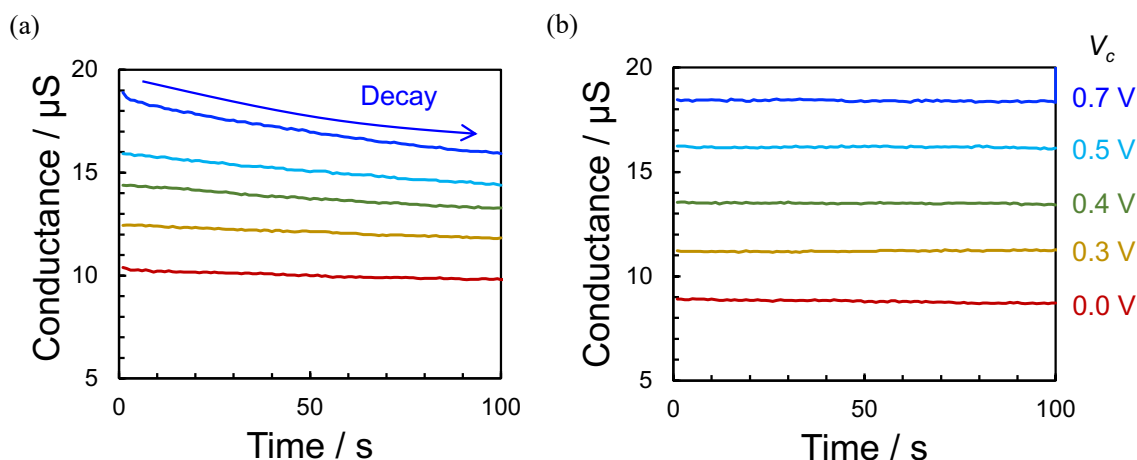


図 2.19 (a) スwitchングにより得られた初期コンダクタンスのリテンション特性. (b) 制御電圧 V_c の導入により制御されたリテンション特性.

柔軟に適用可能なカスタマイズ性の高い AI システムの構築が可能となる.

2.4.4 複数電極ギャップの並列抵抗制御

フォーミング処理がなされた電極ギャップを3つ用いてこれらを並列接続し、スイッチングによる各電極ギャップ間コンダクタンス G_1 , G_2 , G_3 の独立制御を試みた. 実験の概念図を図 2.20a に示す. 各電極ギャップはそれぞれ別々のモノマー前駆体溶液に浸されており, 対極は全て接地された. 各作用極の電位 V_1 , V_2 , V_3 には ± 1 V の電圧スパイクを与え, その際の各電極間コンダクタンス推移を取得した. 各コンダクタンス推移及び, 各エポックにおいて印加される電圧スパイクの極性を表すタイミングチャートを図 2.20b に示す. 各コンダクタンス G_i ($i = 1, 2, 3$) は, V_i に電圧スパイクとして +1 V が印加されている間は増強され, -1 V が印加されている間は抑制されていることが分かる. 従って電極ギャップを複数用いることで ANN における複数の重みを物理実装することができ, 各重みはそれぞれ並列かつ独立に学習可能であることが示された.

2.5 結言

本章では, 2 電極間へ 1 次元的に配線された導電性ポリマー細線の物理化学的形質変化を利用した種々のシナプス機能発現を試みた. 先行研究では 2 電極間へ配線させる

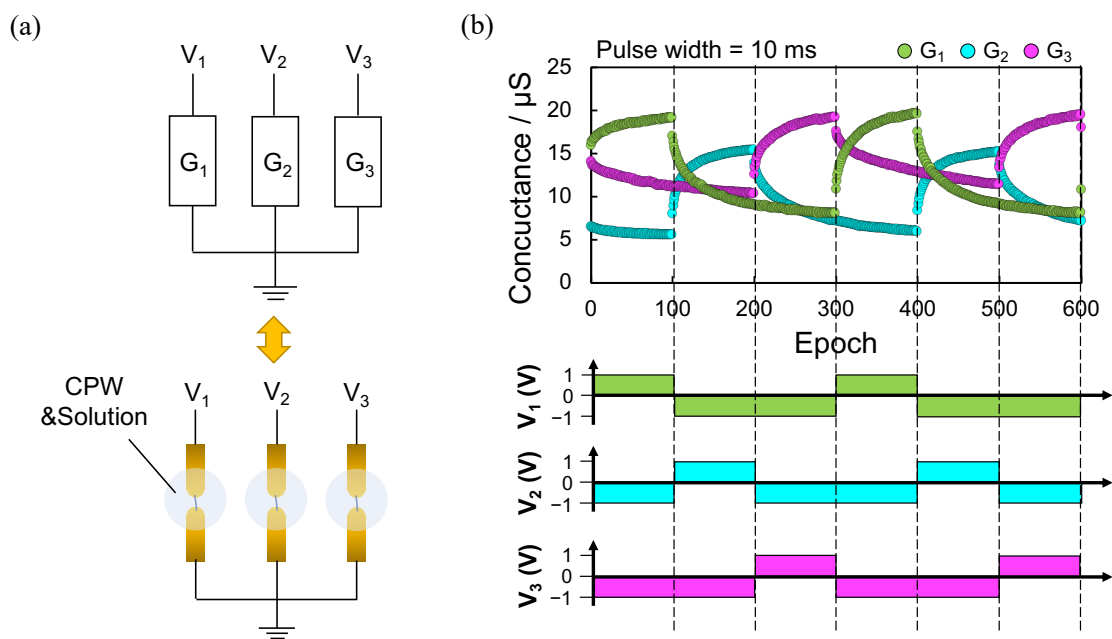


図 2.20 (a) 導電性ポリマー細線 (CPW) が配線された複数電極ギャップへの印加電圧スパイク制御による並列コンダクタンススイッチングの概念図. (b) (上段) 各電極ギャップ間コンダクタンス G_1 , G_2 , G_3 の推移. (下段) 各エポックにおいて印加される ± 1 V の電圧スパイク V_1 , V_2 , V_3 の極性を示すタイミングチャート.

細線の本数を重合電圧印加時間制御によって調節し、LTPに対応する電極間コンダクタンス増強を誘起することに成功した。本研究ではより高速なコンダクタンス書き込み手法として、ポリマー配線がなされた電極ギャップへの電圧スパイク印加によるコンダクタンス制御を検討した。その結果、比較的大きな電圧スパイクを連続印加することで細線の局所的な径増加が誘起され、LTPに対応する電極間コンダクタンス増強が観測された。これらの結果は、ポリマー配線がなされた電極ギャップが入力データを長期記憶として保持可能なシナプス素子として機能し得ることを示している。

また、LTP的なコンダクタンス変化が発現した後の電極ギャップへ正負の小さな電圧スパイクを印加することで、電極間コンダクタンスを連続的かつ双方向的に変化させることにも成功した。電圧スパイクの極性や印加回数を制御することで、コンダクタンスを高速かつ繰り返し書き込める本手法は、高い制御性を備えたより実用的な可塑的シナプス素子を提供する。更に、得られたコンダクタンスは時間の経過と共にゆっくりと変化していくような忘却特性を示すことが見出され、入力情報を短期記憶として保持可能なSTP型シナプス素子としての応用が期待できる。対照実験やラマン分光法による解析を通じ、これらの可塑的コンダクタンス変化及び忘却特性が電圧スパイク印加に伴うPEDOTのドーピング及び脱ドーピング反応に起因することが明らかにされた。制御電圧の導入による平衡状態制御によって忘却特性を制御できることが見出され、素子の持つ短期記憶を巧みに利用した物理リザーブコンピューティング等への応用可能性が示された。

本研究は、軸索誘導による神経回路ネットワークの形成からシナプス可塑性による学習に至るまでの過程を、導電性ポリマー細線のその場配線及びその物理化学的形質変化によって模倣できる点において、従来のシナプス素子を用いた脳型ハードウェアの学習方式とは一線を画す。従来のアプローチではシナプス素子が回路内へ予め大量に配置されており、必要な素子へのみ書き込みを行うことで回路全体を学習させるのに対し、本研究で提案するアプローチでは必要な部分のみをポリマー配線することで、情報処理回路ネットワークが自己組織的に形成されて学習する。新生児の発達過程に見られるような脳内ネットワーク形成過程をマテリアルで再現することで、外環境へ適応しながら成長可能なマテリアル知能の実現を将来可能とする。また工学的には、予めシナプス素子を作り込んでおく必要がない上、溶液に浸漬した電極間へ重合電圧を印加するだけで配線を形成することができるというプロセスの簡便さから、必要な箇所のみ配線された無駄のないネットワーク回路を小面積かつ低コストで構築できるという点に優位性を持つ。本章では、対向する2電極間への1次元的なポリマー配線の

みを用いてシナプス特性の発現を試みたが、次章ではこれを複数電極間への2次元または3次元的な配線へと拡張する。

参考文献

- [1] P. R. Huttenlocher, C. Courten, L. J. Garey, and H. V. Loos. Synaptogenesis in human visual cortex—evidence for synapse elimination during normal development. *Neuroscience letters*, Vol. 33, No. 3, pp. 247–252, 1982.
- [2] S. Mittal. A survey of reram-based architectures for processing-in-memory and neural networks. *Machine Learning and Knowledge Extraction*, Vol. 1, No. 1, pp. 75–114, 2019.
- [3] M. Akai-Kasaya, N. Hagiwara, W. Hikita, M. Okada, Y. Sugito, Y. Kuwahara, and T. Asai. Evolving conductive polymer neural networks on wetware. *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 59, No. 6, p. 060601, 2020.
- [4] H. Shirakawa, E.J. Louis, A.G. MacDiarmid, C.K. Chiang, and A.J. Heeger. Synthesis of electrically conducting organic polymers: Halogen derivatives of polyacetylene, (ch)_x. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, Vol. 16, , 1977.
- [5] H. Cui, W. Song, B. Fanady, R. Peng, J. Zhang, J. Huang, and Z. Ge. Flexible ito-free organic solar cells over 10% by employing drop-coated conductive pedot:pss transparent anodes. *Science China Chemistry*, Vol. 62, No. 4, pp. 500–505, 2019.
- [6] V. Jain, H.M. Yochum, R. Montazami, and J.R. Heflin. Millisecond switching in solid state electrochromic polymer devices fabricated from ionic self-assembled multilayers. *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 3, p. 033304, 2008.
- [7] D.K. Taggart, Y. Yang, S. Kung, T.M. McIntire, and R.M. Penner. Enhanced Thermoelectric Metrics in Ultra-long Electrodeposited PEDOT Nanowires. *Nano Letters*, Vol. 11, No. 1, pp. 125–131, 2011.
- [8] M. Eickenscheidt, E. Singler, and T. Stieglitz. Pulsed electropolymerization of PEDOT enabling controlled branching. *Polymer Journal*, Vol. 51, No. 10, pp. 1029–1036, 2019.

- [9] P.S. Thapa, B.J. Ackerson, D.R. Grischkowsky, and B.N. Flanders. Directional growth of metallic and polymeric nanowires. *Nanotechnology*, Vol. 20, No. 23, p. 235307, 2009.
- [10] S.B. Thourson and C.K. Payne. Modulation of action potentials using pedot:pss conducting polymer microwires. *Scientific Reports*, Vol. 7, No. 1, p. 10402, 2017.
- [11] B. Ozturk, I. Talukdar, and B.N. Flanders. Directed growth of diameter-tunable nanowires. *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 36, p. 365302, 2007.
- [12] J. Ji, M. Li, Z. Chen, H. Wang, X. Jiang, K. Zhuo, Y. Liu, X. Yang, Z. Gu, S. sang, and Y. Shu. In situ fabrication of organic electrochemical transistors on a microfluidic chip. *Nano Research*, Vol. 12, No. 8, pp. 1943–1951, 2019.
- [13] H. Randriamahazaka, G. Sini, and F. Tran Van. Electrodeposition mechanisms and electrochemical behavior of poly(3,4-ethylenedithiathophene). *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 111, No. 12, pp. 4553–4560, 2007.
- [14] G. Ciccone, M. Cucchi, Y. Gao, A. Kumar, L. M. Seifert, A. Weissbach, H. Tseng, H. Kleemann, F. Alibart, and K. Leo. Growth and design strategies of organic dendritic networks. *Discover Materials*, Vol. 2, No. 7, pp. 2–7, 2022.
- [15] S. Park, M. Chu, J. Kim, J. Noh, M. Jeon, B.H. Lee, H. Hwang, B. Lee, and B.G. Lee. Electronic system with memristive synapses for pattern recognition. *Scientific Reports*, Vol. 5, No. 1, p. 10123, 2015.
- [16] S.H. Jo, T. Chang, I. Ebong, B.B. Bhadviya, P. Mazumder, and W. Lu. Nanoscale memristor device as synapse in neuromorphic systems. *Nano Letters*, Vol. 10, No. 4, pp. 1297–1301, 2010.
- [17] M. Prezioso, F. Merrih-Bayat, B. D. Hoskins, G. C. Adam, K. K. Likharev, and D. B. Strukov. Training and operation of an integrated neuromorphic network based on metal-oxide memristors. *Nature*, Vol. 521, No. 7550, pp. 61–64, 2015.
- [18] 秋永広幸, 浅井哲也. アナログ抵抗変化素子を用いた脳型回路. *応用物理*, Vol. 89, No. 1, pp. 41–45, 2020.

- [19] P. Achararit, I. Hida, T. Marukame, T. Asai, and Y. Hara-Azumi. Structural exploration of stochastic neural networks for severely-constrained 3d memristive devices. *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, Vol. 9, No. 4, pp. 466–478, 2018.
- [20] N. Hagiwara, T. Asai, K. Ando, and M. Akai-Kasaya. Fabrication and training of 3d conductive polymer networks for neuromorphic wetware. *Advanced Functional Materials*, Vol. 33, No. n/a, p. 2300903.
- [21] M. Tessier-Lavigne and C. S. Goodman. The molecular biology of axon guidance. *Science*, Vol. 274, No. 5290, pp. 1123–1133, 1996.
- [22] R.C. Atkinson and R.M. Shiffrin. Human memory: A proposed system and its control processes. Vol. 2, pp. 89–195, 1968.
- [23] O. M. Mracek Mitchell, Carolyn A. Ross, and G. H. Yates. Signal Processing for a Cocktail Party Effect. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Vol. 50, No. 2B, pp. 656–660, 2005.
- [24] T. Ohno, T. Hasegawa, T. Tsuruoka, K. Terabe, J. Gimzewski, and M. Aono. Short term plasticity and long term potentiation mimicked in single inorganic synapses. *Nature materials*, Vol. 10, pp. 591–5, 2011.
- [25] L. Petrauskas, M. Cucchi, C. Grüner, F. Ellinger, K. Leo, C. Matthus, and H. Kleemann. Nonlinear behavior of dendritic polymer networks for reservoir computing. *Advanced Electronic Materials*, Vol. 8, No. 3, p. 2100330, 2022.
- [26] C. Du, F. Cai, M.A. Zidan, W. Ma, S.H. Lee, and W.D. Lu. Reservoir computing using dynamic memristors for temporal information processing. *Nature Communications*, Vol. 8, No. 1, p. 2204, 2017.
- [27] Y. Zhong, J. Tang, X. Li, B. Gao, H. Qian, and H. Wu. Dynamic memristor-based reservoir computing for high-efficiency temporal signal processing. *Nature Communications*, Vol. 12, p. 408, 2021.
- [28] S. Garreau, G. Louarn, J. P. Buisson, G. Froyer, and S. Lefrant. In situ spectroelectrochemical raman studies of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (pedt). *Macromolecules*, Vol. 32, No. 20, pp. 6807–6812, 1999.

第3章 高次元配線された導電性 ポリマーネットワークによる 物理演算システムの構築

3.1 諸言

従来のアナログ脳型ハードウェアは主に、クロスバーアレイと呼ばれる基本アーキテクチャを中心に発展してきた。クロスバーアレイは、垂直に交差する複数のビット線とワード線を用いて、それらの交点へ予め配置されたシナプス素子への書き込み及び読み出しを行うといった非常に単純なアーキテクチャであり、全結合型人工ニューラルネットワーク (Artificial neural network: ANN) の並列積和演算を容易に物理実装できる。また、既存の集積化技術を用いて大量のシナプス素子を2次元平面内へ高集積に作り込めるため、アナログ脳型ハードウェアの基本アーキテクチャとして定着しつつある。

一方で、我々の脳は発達過程においてニューロン同士が軸索を3次元的に伸長させて形成された複雑な3次元ネットワークである。軸索誘導による3次元神経ネットワークの形成は、大脳皮質にみられる階層的な神経構造を形成するための重要なプロセスであると考えられており [2,3]、自閉症や統合失調症などといった精神疾患とも密接に関連している [4,5]。大脳皮質の神経回路ネットワークは局所的な3次元結合を持ち、主に空間的距離の近いニューロン同士間でシナプス結合を形成している。また、1つのニューロンは自らの樹状突起を3次元空間的に拡げることで、数千～数万個もの膨大な数のニューロンと結合することを可能にしている。このような近傍結合の重要性は近年、深層学習の分野でも注目されており、畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional neural network: CNN) は近傍結合型モデルの最たる例である。

このように、クロスバーアレイを基本アーキテクチャとする従来のアナログ脳型ハードウェアは、実際の脳の3次元形態と大きく乖離しており、これは以下に挙げるような工学的ボトルネックを招いている。

1. CNNのように近傍結合を有するモデルを実装しようとするすると実装効率が低下し、実装面積に見合う性能を引き出せない。また、リーク電流の増加や複雑な外部制御により、消費電力も増加する。
2. クロスバーアレイを高さ方向に積層して3次元集積化しようとするするとシリコン貫通電極 (Through-silicon via: TSV) 等が必要となるため、製造コストがかかる。また、一般的に TSV は基板鉛直方向にしか形成できないことから自由度が低く、3次元空間上の任意の節点同士を密に接続することが難しい。

1.については2.2.2項にて既に詳述された。2.はクロスバーアレイの3次元集積化に関する課題であり、TSVによる基板鉛直方向の配線だけではなく、高い自由度で任意の点同士を電氣的に接続する技術が要求されていることを示している。特に近年では、脳の3次元構造に着目した研究が、脳型ハードウェアやマテリアル知能の分野で多く為されていることから、3次元集積化の要素技術は今後強く求められるようになると思われる。例えば、従来2次元平面的に形成されたランダムネットワークのトポロジーを3次元へと拡張することでより複雑なネットワークダイナミクスが発現し、これを物理リザバーとして応用した際の性能が向上した例が近年報告されている [1]。

以上の背景を踏まえ、本章では第2章で行った導電性ポリマーファイバーの電極ギャップ間1次元配線を、複数電極間への高次元配線へと拡張し、これを応用した3次元脳型回路アーキテクチャを検討する。クロスバーアレイのように予めシナプス素子が配置されているのではなく、必要な部分へのみ細線が成長し、全体が自己組織的に学習していくような3次元ネットワークの実現可能性を示すことを本章の主旨とする。

3.2 分岐ポリマー配線を利用した脳型情報処理

3.2.1 電極作製及び分岐ポリマー配線の制御

本章ではまず、ガラス基板上へ成膜された同一溶液中の複数電極間へ導電性ポリマー細線を分岐的に配線する技術の確立及び、これを応用した複数電極間の同時コンダクタンス制御を試みた。前章で用いたものと同じプロセスで作製した電極の外観を図3.1aに示す。4つのAu電極が先端間距離 $50\ \mu\text{m}$ で向かい合って配置されており、各電極はAuパッドを通じて外部電源に接続された。今回、4つの電極のうち1つを作用極、3つを対極とし、作用極へ重合矩形波交流電圧を印加した。作用極との間へ細線の配線を所望する対極を接地することで、作用極から複数の対極への分岐的なポリマー配線を

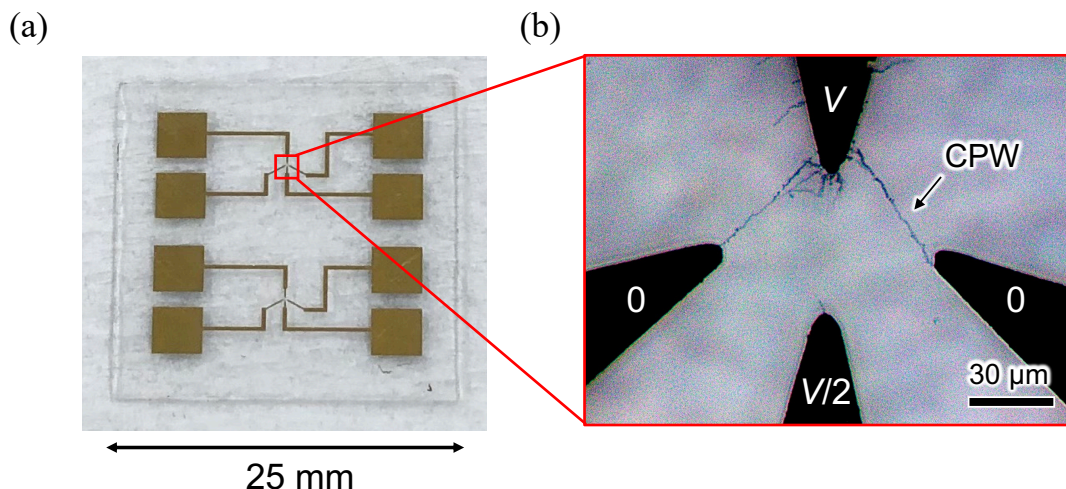


図 3.1 分岐ポリマー配線に使用された電極基板の外観及び、電極先端付近の倒立光学顕微鏡像。作用極へ振幅 V の重合電圧を印加し、所望の電極を接地することで導電性ポリマーワイヤー (CPW) の配線がなされた。逆に配線を所望しない電極には振幅 $V/2$ で重合電圧と同位相の抑制電圧を印加することで、不要な配線が抑制された。

試みた。また、配線を所望しない対極には重合電圧の半分の振幅を持ち、かつ重合電圧と同位相の抑制電圧を導入することで、不要なポリマー配線の抑制を図った。抑制電圧の導入により選択的に配線された細線の倒立光学顕微鏡像を図 3.1b に示す。重合電圧 (50 kHz , $24 \text{ V}_{\text{p-p}}$) が印加された作用極と接地された 2 つの対極間には細線が成長してポリマー配線された。一方、抑制電圧 (50 kHz , $12 \text{ V}_{\text{p-p}}$) が印加された対極との間には細線がほとんど成長せず、不要な配線も起こらなかった。これは、抑制電圧の印加により電極界面において電解重合に必要な電位差が印加されなかったためであると考えられる。また、重合成長時における細線は酸化重合によって正の電荷を帯びていることから、陰極からのクーロン引力を受けながら電場に沿って成長していく。今回、重合電圧と同位相の抑制電圧を印加することで、作用極から成長した細線との間に電気的な反発が起こり、不要な配線が抑制されて配線精度が向上したと考えられる。

3.2.2 電圧スパイク印加に伴う相対コンダクタンスの制御

先行研究では、導電性ポリマー細線の分岐配線本数制御による複数電極間コンダクタンス比の制御に成功している [2]。そこで本研究では前章と同様に、電圧スパイク印加による細線の局所的径増加を利用することで、分岐配線後における電極間のコンダ

クタンスを後天的に制御できないか新たに検討した。図 3.2a のように 1 つの作用極と 3 つの対極間を分岐配線したのち、作用極を接地しながら対極電位 V_1, V_2, V_3 として 0 V またはスパイク (1.9 V, 幅 10 ms) を与えた際の各作用極-対極間コンダクタンス G_1, G_2, G_3 の推移を調べた。今回、コンダクタンス比は $G_1 : G_2 : G_3 = 1 : 2 : 3$ を目標値として定めた。 V_1 は常に接地されており、30 s おきに読み出したコンダクタンス比に基づき V_2, V_3 をフィードバック制御した。具体的には、 $G_i/G_1 (i = 2, 3)$ を 30 秒毎に計算し、 $G_i/G_1 < i$ の場合は V_i としてスパイクを印加して径増加を促し、 $G_i/G_1 \geq i$ の場合は既に目標値へ到達しているため接地された。実際に V_2, V_3 へ印加されたスパイクパターン及び G_1, G_2, G_3 の時間推移を図 3.2b に示す。まず V_2 と V_3 のいずれかにスパイクが印加されると、その直後に全てのコンダクタンスが急激に減少した。その後各コンダクタンスは次のスパイクが印加されるまでの間指数関数的にゆっくりと増加してある平衡値へと漸近した。図 3.2c に、30 秒毎に取得されたコンダクタンス比 $G_i/G_1 (i = 1, 2, 3)$ の推移を示す。スパイク印加が進むにつれて各コンダクタンス比が目標比へと近づいていることが分かる。以上の結果は、スパイク印加に伴う細線の局所的径増加によって、将来的に得られるコンダクタンスの平衡値が増強されることを示しており、この様子はシナプス長期増強 (Long-term potentiation: LTP) に対応づけられる。

スパイク印加直後に見られたコンダクタンス $G_i (i = 1, 2, 3)$ の減少は大別して 2 つの効果に分けられる。まず、 V_i へスパイクが印加された際の G_i の減少は自己ゲート効果によるものである (2.4.1 項参照)。一方、 $V_j (j \neq i)$ へスパイクが印加された際の G_i の減少は、電気化学トランジスタの枠組みでしばしば説明されるゲート効果によるものであると考えられる [3]。近傍電極へ正の電圧スパイクを印加すると溶液中のカチオンが細線側へドリフトし、これが細線内へ注入されて PSS⁻ イオンを補償することで脱ドーピング反応が進行し、細線が低導電化する。このように、同一溶液中ではゲート効果を通じた近傍電極電位からの影響を受けるため、複数コンダクタンスの変化に相関が生じる。後述する 3.3 節ではこのようなゲート効果を、脳内で見られる側抑制と呼ばれる機構の模倣に応用しており、より生理学的にも妥当な情報処理への応用が期待される。また、いくつかの先行研究では以上の原理に基づき、PEDOT ファイバーと多数の電極から構成されるポリマーネットワークが電解質溶液中で示す非線形な時空間ダイナミクスを利用した物理リザバーコンピューティングを報告している [3, 4]。

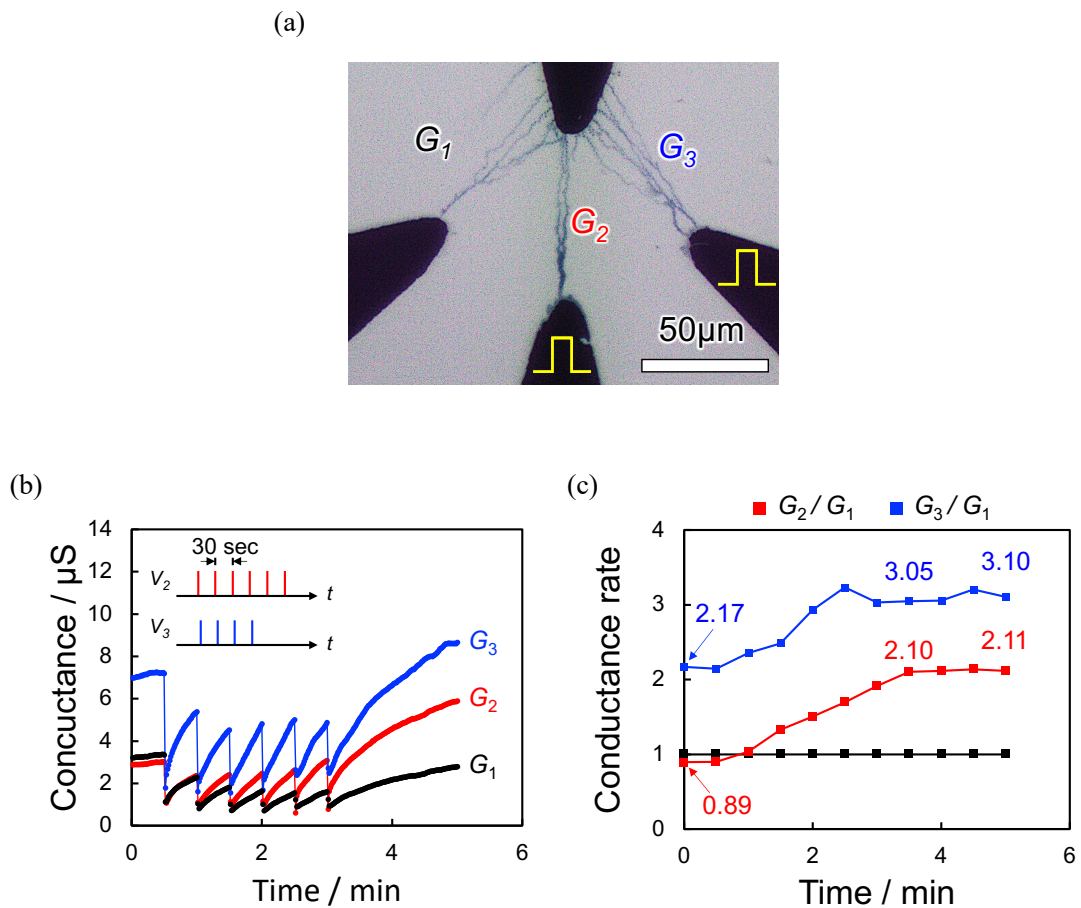


図 3.2 (a)分岐ポリマー配線された Au 電極の倒立光学顕微鏡像. (b) 電圧スパイク印加に伴う電極間コンダクタンス G_1 , G_2 , G_3 の推移. $G_1 : G_2 : G_3 = 1 : 2 : 3$ の目標比に近づくよう, スパイク印加は 30 秒毎に読み出したコンダクタンスに基づいてフィードバック制御された. (c) G_1 に対する G_2 , G_3 の比の時間推移. 最終的に目標比である $G_1 : G_2 : G_3 = 1 : 2 : 3$ に近い比が得られた. © 2022 IEEE

3.2.3 物理実装された ANN による論理和・論理積の学習

分岐ポリマー配線及び、電圧スパイク印加に伴う相対コンダクタンス変化を利用した簡単な機械学習の物理実装を試みた。実装モデルとして、2入力1出力のバイアス付き単純パーセプトロン (Simple perceptron: SP) が採用された。図 3.3 に実験概念図を示す。実装する SP は、 ± 1 のいずれかの値をとる x_1, x_2 及びバイアス“-1”を入力として受け取り、これらの重み付き線形和を符号関数に通すことで、 $y = \pm 1$ の2値出力を得る。すなわち、出力 y は以下のように記述される。

$$y = \text{sgn}(x_1 w_1 + x_2 w_2 - w_0) \quad (3.1)$$

ここで、 w_1, w_2, w_0 はそれぞれ x_1, x_2 及びバイアスノードと出力ノードとの間の結合重みであり、本研究では電極間コンダクタンスで表現される学習パラメータである。また $\text{sgn}(\cdot)$ は、入力が正の時は 1 を、負の時は -1 を返す符号関数を表している。本研究ではこのバイアス付き 2 入力 1 出力 SP を、前項で作製した 3 つの入力端子と 1 つの出力端子から成る電極対を用いて物理実装した。入力として電圧を入力端子へ印加し、出力端子に流れる電流値を読み出すことで、積和演算による推論の並列実行を試みた。SP における重みは負の値を取ることができないのに対し、コンダクタンスは正の値しか取り得ないため、ここでは電極対を 2 つ用いた。2 つの電極対へ共通の入力電圧を印加し、その際各出力端子に流れる電流値 I^+, I^- の差を取ることで、負の重みを仮想的に再現した。以上を定式化すると、物理実装された SP の出力 y は以下のように表される。

$$y = \text{sgn}(I^+ - I^-) = \text{sgn}\{V_1(G_1^+ - G_1^-) + V_2(G_2^+ - G_2^-) - V_0(G_0^+ - G_0^-)\} \quad (3.2)$$

$G_i^+, G_i^- (i = 0, 1, 2)$ はそれぞれ正重みと負重みに対応する電極間コンダクタンスである。 $x_i = 1$ の時は $V_i = 50 \text{ mV}$ が、 $x_i = -1$ の時は $V_i = -50 \text{ mV}$ が入力端子へ印加されることで推論が実行された。

次に、学習の実装概念を図 3.4 に示す。まず、正及び負重みに対応する 2 つの電極対において 3 つの入力端子と出力端子との間にポリマー細線を分岐配線させた。その後推論を実行して出力 y を得たのち、教師信号 t との誤差を計算して重みの更新量を計算した。SP における重み w_i の更新量 Δw_i は以下の式で与えられる。

$$\Delta w_i = (t - y)x_i \quad (3.3)$$

Δw_i の正負に応じて電圧スパイク (1.9 V, 10 ms) の印加を制御し、電極間の相対コンダクタンスを制御した。例えば図 3.4 の例では、入力として $(x_0, x_1, x_2) = (-1, 1, -1)$ を

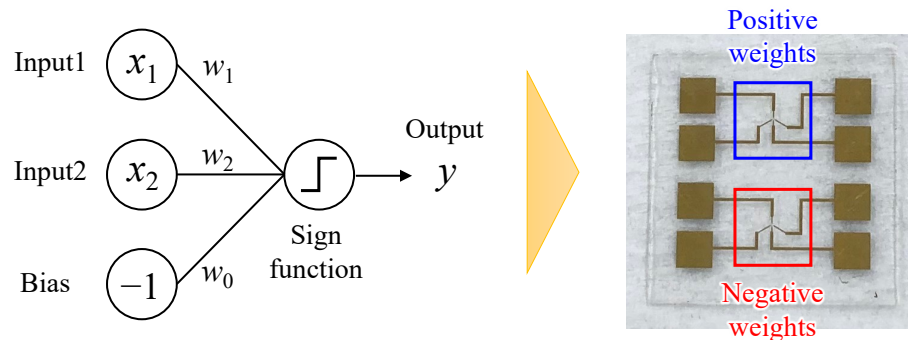


図 3.3 分岐ポリマー配線により物理実装される単純パーセプトロン (SP) の概念図及び使用電極チップ外観. チップ上に形成された2つの電極対はそれぞれ正重みと負重みに対応している.

受け取ると SP は推論結果として $y = -1$ を出力したが、教師信号は $t = 1$ が与えられているため、誤差計算による重み更新が発生している. 式 (3.3) を用いて各重みの更新量を計算すると、 $(\Delta w_0, \Delta w_1, \Delta w_2) = (-2, 2, -2)$ と求められる. 従って、正重みに対応する電極間コンダクタンスに関しては、 G_1^+ のみスパイク印加により増強し、逆に負重みに対応するコンダクタンスに関しては G_0^- と G_2^- のみを増強させて重みの抑制を再現する. 出力が教師と完全に一致するまで、以上のような学習エポックを繰り返した.

まず、SP による AND ゲートと OR ゲートの学習を物理実装した. 各ゲートの学習時には x_1, x_2 へ $2^2 = 4$ 通りの入力を与えられ、それぞれ真理値表に従って教師が与えられた. 各エポック毎に4通りの入力を与え、その際得られた出力の正答率を記録した. 図 3.5 は各ゲートの学習結果であり、読み出された出力電流値の差 $I^+ - I^-$ 及び正答率の推移を表している. なお、学習は正答率 100% を累計 5 回達成するまで行われた. これらの結果より、各ゲートの学習が正しく実行されて正答率が次第に向上していることが分かる. 例えば、AND ゲートの学習時には入力が $x_1 = x_2 = 1$ の時のみ $y = 1$ を出力するよう学習され、実際に出力端子へ流れる電流値は $x_1 = x_2 = 1$ の時のみ負の値を取るよう推移している. OR ゲートの学習時も同様に、入力が $x_1 = x_2 = -1$ の時のみ $y = -1$ を出力するよう電極間コンダクタンスが最適化された. これらの結果は、分岐ポリマー配線及び電圧スパイク印加により、ANN の推論及び学習を物理実装できることを示唆しており、従来のクロスバーベースのハードウェアアーキテクチャとは全く異なる新たな実装方式を本分野へ提供する.

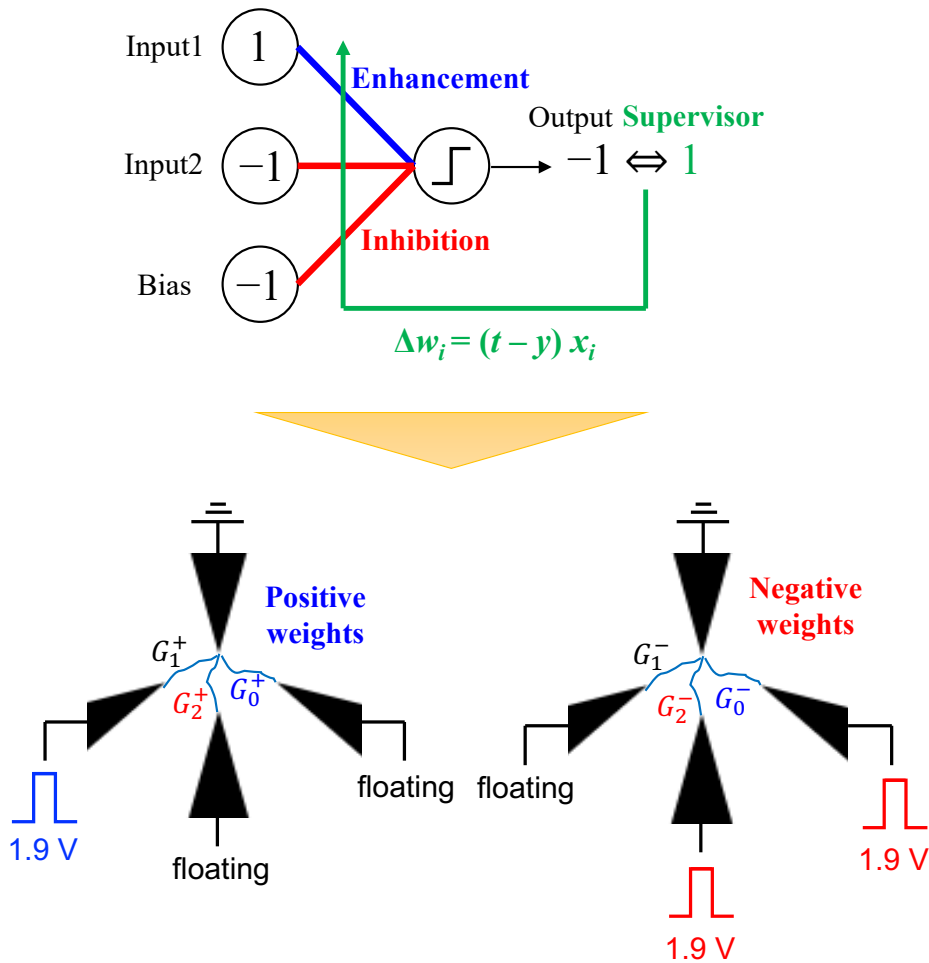


図 3.4 SP による学習の、分岐ポリマー配線を用いた物理実装の概念図 ($x_1 = 1, x_2 = -1, y = -1$, $t = 1$ の時の例).

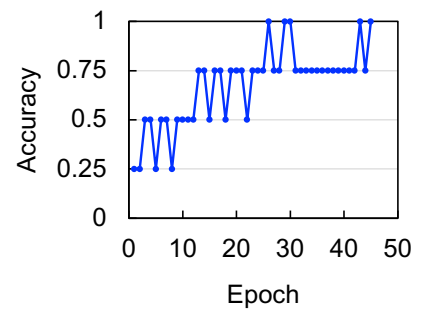
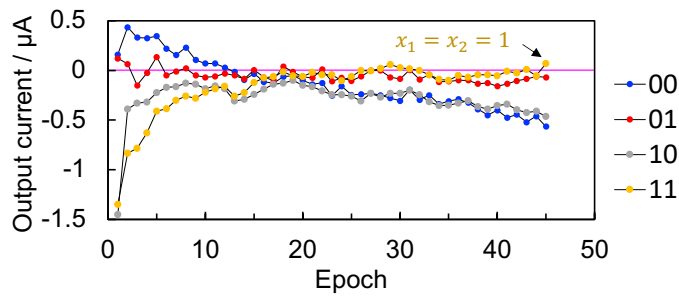
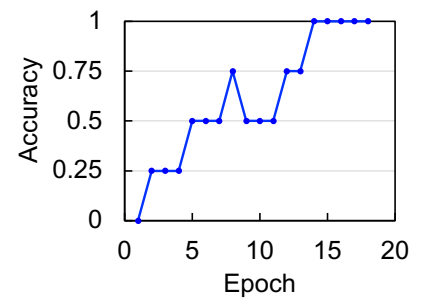
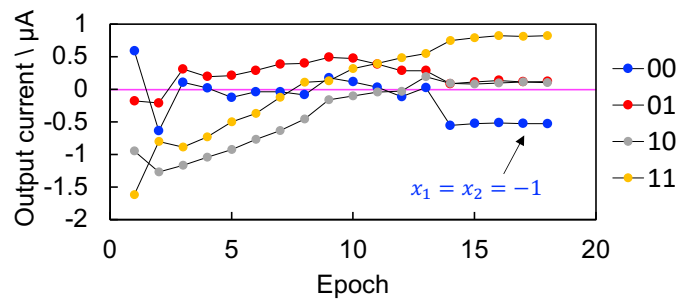
AND gate**OR gate**

図 3.5 分岐ポリマー配線を用いて物理実装された SP による AND・OR ゲートの学習結果. それぞれ, 入力 (00 ~ 11) に対する出力電流値の差 $I^+ - I^-$ と正答率の推移を示している. なお, 入力の “-1” は表記上, “0” としている. © 2022 IEEE

3.2.4 オートエンコーダによる特徴抽出の物理実装

本研究ではより発展的な ANN の実装例として、オートエンコーダによる特徴抽出の物理実装を試みた。オートエンコーダは 2006 年に Hinton によって考案された ANN の一種であり、昨今の深層学習ブームの火付け役となったモデルである [5]。オートエンコーダは可視層と隠れ層から構成されており、可視層へ入力されたデータを重みづけして隠れ層へ圧縮 (エンコード) することで入力データの特徴抽出や次元削減が可能となる。また、隠れ層から可視層へ逆向きに推論処理を行うことで、圧縮された特徴量を復元 (デコード) することができる。推論時におけるこれらの挙動を式で表すと以下の通りになる。

$$h_j = \text{sgn}\left(\sum_{i=0} w_{ij}x_i\right) \quad (3.4)$$

$$x'_i = \text{sgn}\left(\sum_{j=0} w_{ij}h_j\right) \quad (3.5)$$

ここで、 x_i , h_j はそれぞれ可視層、隠れ層のノードを表しており、 w_{ij} はそれらの間の重みである。また、 x'_i は可視層へ返されるデコード結果である。

オートエンコーダは教師なし学習により重み w_{ij} を自己組織的に学習させることができる。まず入力データをエンコードした後、更にこれをデコードし、デコードされたデータが入力データに一致するよう重みを学習させる。これを定式化すると以下のよう書ける。

$$\Delta w_{ij} = (x_i - x'_i)h_j \quad (3.6)$$

今回、3つのノードから成る可視層と、2つのノードから成る隠れ層で構成された 3×2 オートエンコーダの物理実装を試みた (図 3.6)。本モデルの可視層には 3 bit の入力 (全 8 通り) が与えられ、これが 2 bit の特徴量に圧縮される。図に示すように、本モデルは 4つの電極対を用いて物理実装された。前項と同様に、各電極対間へポリマー細線を分岐的に配線したのち、1.9 V の電圧スパイク印加に基づく相対コンダクタンスの後天的制御による学習を試みた。また、局所解へ陥ることを防ぐため、学習は式 (3.7) で表されるバッチ学習によって行われた。ここで、 k は入力データのインデックスである。

$$\Delta w_{ij} = \frac{1}{8} \sum_{k=1}^8 (x_i^k - x'_i{}^k)h_j \quad (3.7)$$

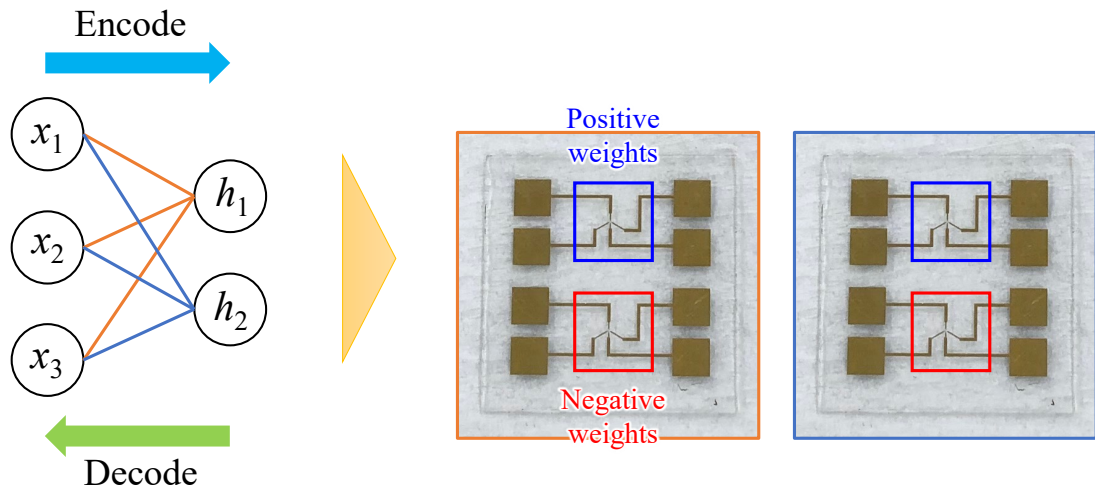


図 3.6 分岐ポリマー配線による 3×2 オートエンコーダの物理実装概念図。

3 bit の各入力に対してエンコードされた 2 bit の特徴量及び、各電極間コンダクタンス (全 12 個) の学習時における推移を図 3.7 に示す。学習が進むにつれてエンコードパターンが変遷し、最終的にある一定の状態へと収束した。また、学習が進むと全 8 通りの入力は 4 パターンの特徴量へそれぞれ 2 つずつ均等にエンコードされており、更にこれらをよく観察すると、下 2 桁が等しい入力パターンが同じ特徴量へエンコードされていることが分かる。これは、オートエンコーダが入力データから下 2 桁を特徴として抽出するよう学習されたことを示している。

3.2.5 ヘテロシナプス可塑性の模倣

これまで見てきたように、ポリマー配線された電極への電圧スパイク印加はポリマー細線の物理的及び化学的形質変化をもたらし、電極間コンダクタンス変化に寄与する。本研究ではスパイク印加時における近傍電極電位がもたらす影響を調査し、これをヘテロシナプス可塑性の模倣に応用できないか検討した。まず作用極と対極の間へ細線を配線したのち、作用極へ大きさ 1.9 V、幅 10 ms の電圧スパイクを 20 回連続印加して作用極-対極間のコンダクタンス推移を観察した。その際、電圧スパイクの印加と同時に近傍電極へ ± 0.5 V の電圧を印加し、コンダクタンス変化の近傍電極電位依存性を調査した。図 3.8 の倒立顕微鏡像は連続スパイク印加後における細線の様子を捉えており、近傍電極へ -0.5 V を与えるとより著しい径増加が観察された。また、それぞれ 5 つのサンプルを用いて連続スパイク印加前後のコンダクタンス比 $G_{\text{after}}/G_{\text{before}}$ の平均

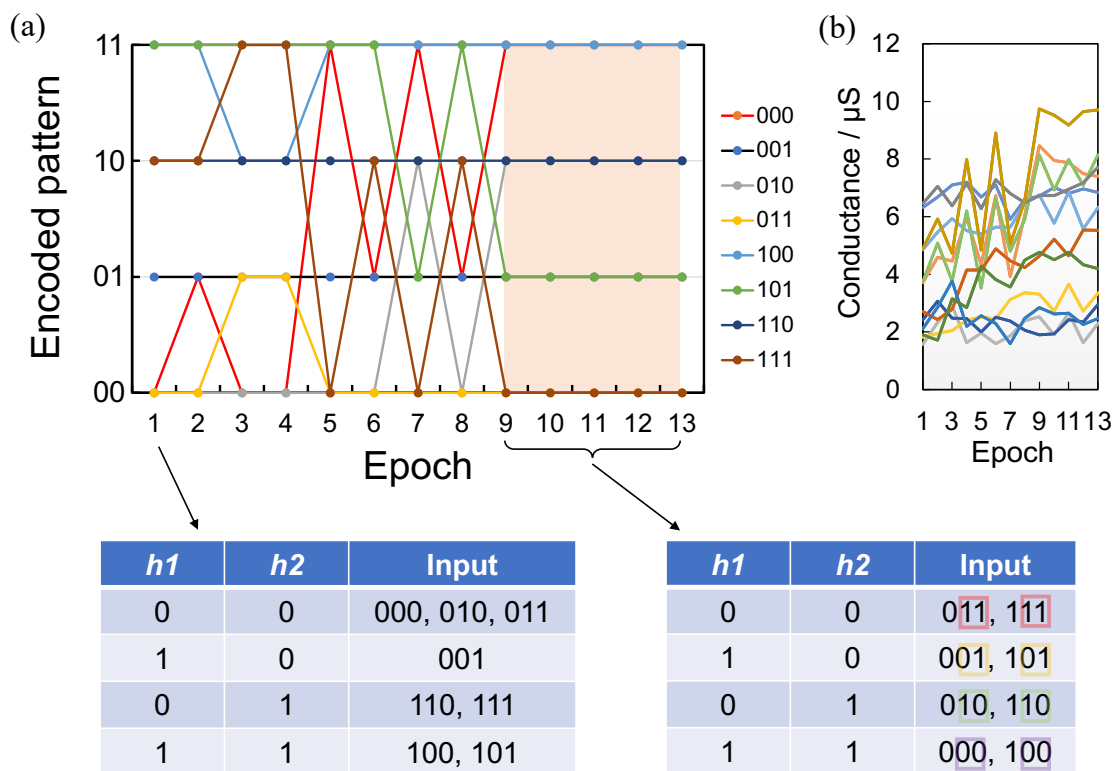


図 3.7 分岐ポリマー配線を用いて物理実装されたオートエンコーダの学習結果. (a) 3 bit の各入力 (000 ~ 111) に対するエンコード結果 (00 ~ 11) の推移. (b) 各電極間コンダクタンスの推移.

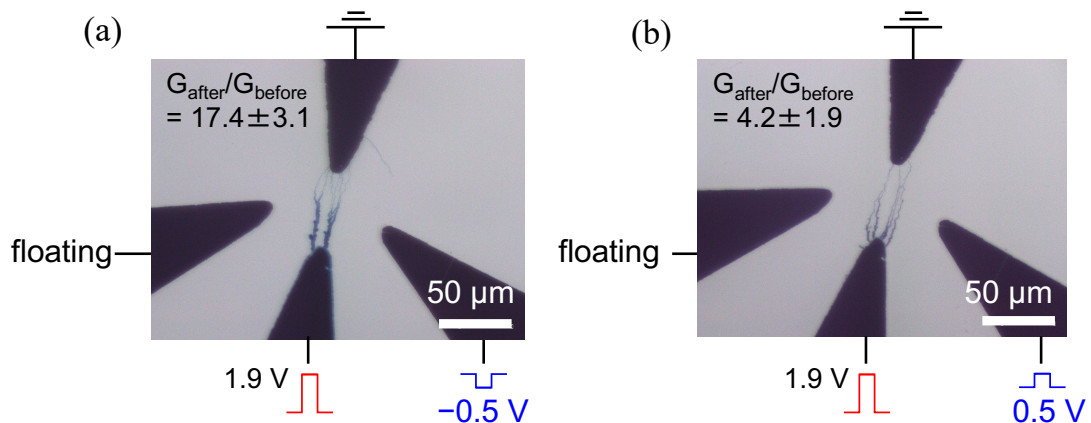


図 3.8 電圧スパイクの連続印加後における導電性ポリマー細線の倒立顕微鏡像. スパイク印加前後のコンダクタンス比の平均値及び標準誤差は 5 つの試料を用いて算出された. 近傍電極電位は (a) -0.5 V (b) 0.5 V に設定された. © 2022 IEEE

値を取得したところ, 近傍電極へ 0.5 V を印加した際は $G_{\text{after}}/G_{\text{before}} = 4.2 \pm 1.9$ であったのに対し, -0.5 V を印加した際は $G_{\text{after}}/G_{\text{before}} = 17.4 \pm 3.1$ と著しいコンダクタンス増強が見られた. これは, 近傍電極電位が作用極-対極間コンダクタンスの増強度合いを制御していると捉えられる. これに類似した脳内現象として, ヘテロシナプス可塑性と呼ばれる機構が知られている [6]. すなわち, シナプス効率はその前後のニューロンだけでなく, その近傍に位置する介在ニューロンの発火活動にも依存して変化する. 近年のニューロモルフィック工学においてもこのヘテロシナプス可塑性を模した多端子型抵抗変化メモリ素子が提案されている [7]. 本研究で見出されたコンダクタンス増強度の近傍電極電位依存性もまた, ヘテロシナプス可塑性に対応づけることができ, より生理学的妥当性を有する発展的な情報処理アルゴリズムへ応用できる可能性を有している.

このようなコンダクタンス増強の近傍電極電位依存性は大きく分けて 2 つの要因で説明できると考えられる. 1 つ目は 3.2.2 項にて述べられた, ゲート効果によるポリマー細線の導電性変化に起因するものである. 近傍電極電位へ高電位を与えると, 細線内部へのカチオン注入と PSS^- イオンの補償が起り, 脱ドーピング反応が進行して導電性が低下する. 逆に近傍電極電位へ低電位を与えるとドーピング反応が進行し, 細線が高導電化する. 実際, 図 3.8 に示されたポリマー細線はそれぞれ, ドーピングレベルの違いに起因した異なる色を呈しており, 近傍電極へ -0.5 V を印加した際は高導電化時に見られる紺色を呈したのに対し, 0.5 V を印加した際は低導電化時に見られる赤紫

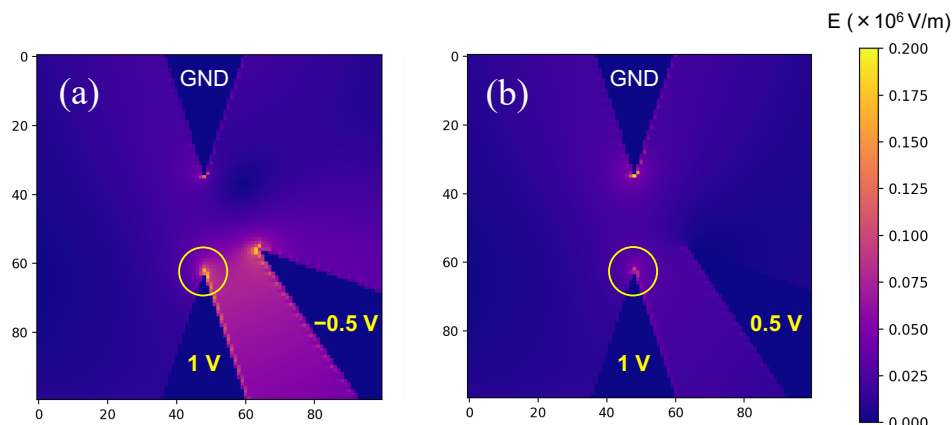


図 3.9 電界シミュレーションにより計算された電場強度分布. 近傍電極電位は (a) -0.5 V (b) 0.5 V に設定された.

色を呈している [8]. 近傍電極がゲート電極として働いた結果, 作用極-対極間を配線する細線の導電性が変化し, 計測されたコンダクタンスの顕著な違いに影響したのと思われる.

2つ目は近傍電極電位がもたらす電場強度分布の変化に起因するものであり, 細線径の変化度の違いはこれによって説明できる. 図 3.9 は対極を接地しながら作用極へ 1 V , 近傍電極へ $\pm 0.5\text{ V}$ の電圧を印加した際の電場強度分布をシミュレートした結果である. なお, シミュレーションはガウス-ザイデル法によるラプラス方程式の近似的な求解により行われ, Python 上で実装された. 本結果より, 近傍電極へ低電位を与えると, 高電位を与えた場合に比べて作用極先端における電場強度が増強されていることが分かる. これにより, 電圧スパイク印加に伴うポリマーの重合反応が作用極先端近傍において促進され, 径増加がより顕著に進行して著しいコンダクタンス増強が発現されたと考えられる.

3.2.6 物理リザバー計算への応用に向けた非線形信号の獲得

導電性ポリマーファイバーの複数電極間分岐配線を利用した情報処理として, 物理リザバーコンピューティングへの応用に向けた入力信号の非線形変換を先行研究 [4] に基づき行なった. リン酸緩衝生理食塩水中で物理リザバーとして振る舞う従来のファイバーネットワークを固体電解質中での動作へと拡張し, より安定的な動作を獲得することを目的とした.

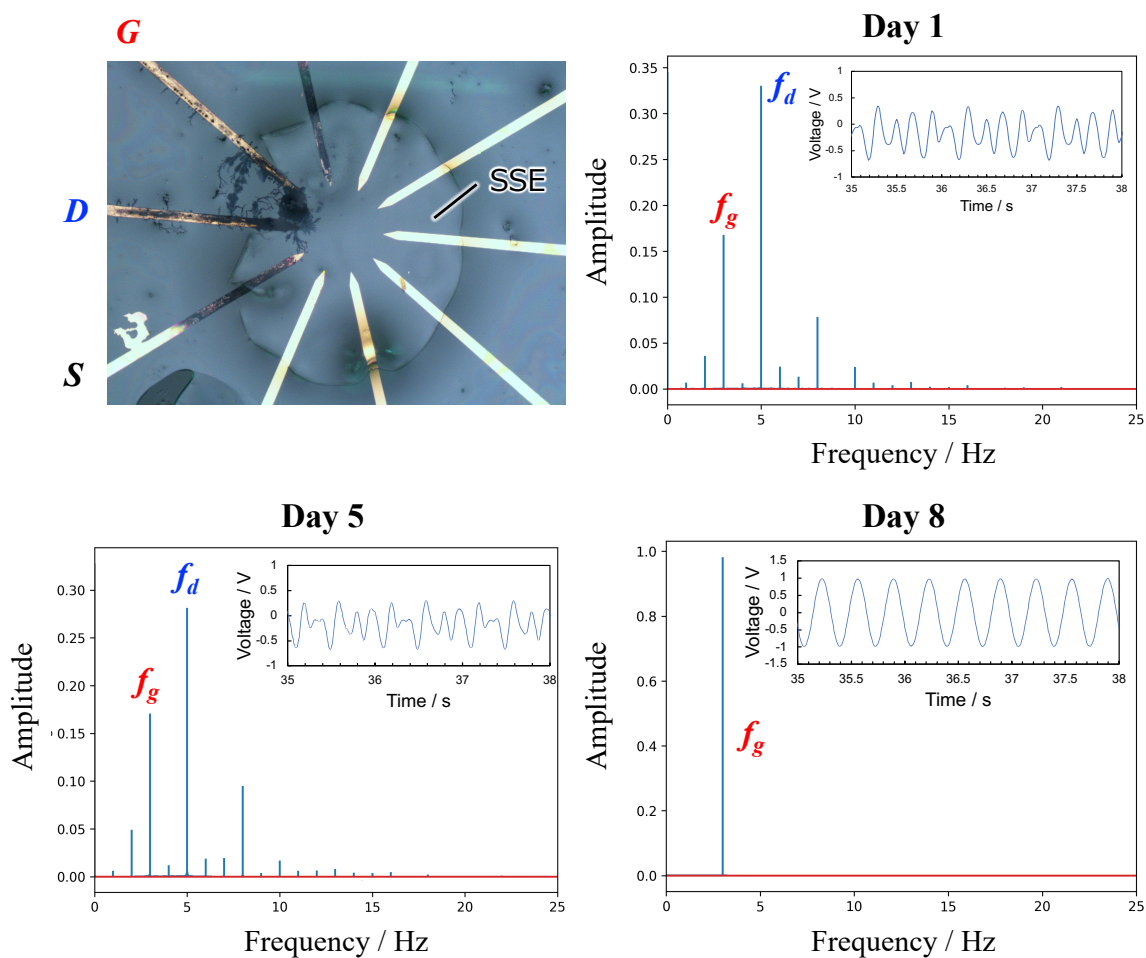


図 3.10 固体電解質 (SSE) 中の導電性ポリマーファイバーネットワークが示す非線形応答. ゲート (G), ドレイン (D) 電極へそれぞれ $f_g = 3$ Hz, $f_d = 5$ Hz の正弦波電圧を印加し, ソース (S) 電極の電位推移が高速フーリエ変換により解析された. 試料作製初日及び 5 日目にかけて見られた高次の周波数成分が 8 日目には観測されなくなった.

まず、先端が円環状に向かい合って配置された電極をガラス基板上へ10個形成した。0.050 MのEDOTと0.001 Mのテトラブチルアンモニウムヘキサフルオロホスファートがアセトニトリル溶媒に溶解した前駆体溶液を電極先端へ滴下し、100 Hz, 8 V_{p-p}の矩形波交流電圧を印加することで、太い径を有する樹状のポリマーファイバーをいくつかの電極間へ形成した。ここで低周波の重合電圧を用いた理由は、枝分かれの多い樹状のファイバーを形成することでネットワークの複雑さが増し、物理リザバーとしての性能向上が期待できるためである。ファイバーネットワーク形成後の試料から前駆体溶液を取り除き、インクジェットプリンター(富士フイルム社製, Dimatix)を用いてファイバー上へ固体電解質の前駆体溶液を滴下した。20秒間紫外線露光して硬化させることで、固体電解質をネットワーク上へ堆積した。ここで用いた固体電解質は先行研究[9]で示されているイオン液体ベースのものであり、良好なイオン伝導性を示す。

10個の電極の内、ファイバーが配線された3つの電極をゲート、ドレイン、ソース電極に割り当て、ゲート、ドレイン電極へそれぞれ3, 5 Hzの正弦波電圧が振幅2 V_{p-p}で印加された。ソース電極は1 MΩの抵抗を介して接地されており、ソース電極の電位推移が持つ周波数成分が高速フーリエ変換(Fast Fourier transform: FFT)により解析された。図3.10に、電極先端近傍の外観及び、試料作製初日、5日目、8日目におけるソース電極電位推移のFFT解析結果をそれぞれ示す。試料作製初日において、ソース電極電位はゲートとドレインに印加された正弦波電圧の周波数のみならず、その倍音や和、差の成分を含んでいることが分かる。このことは、ゲート及びドレイン電極へ印加された電圧信号が、高次の非線形性を持った出力信号へと変換されたことを示しており、物理リザバーとしての要求を一部満たしていることが示唆された。また、試料作製から5日目において同様の解析を行ったところ同様の非線形信号が出力され、高い安定性を有していることも示唆された。ある入力に対して常に同じ出力を返すこのリザバー特性はコンシステンシーと呼ばれ、物理リザバーに求められる要素の1つとして知られている。ところが、試料作製から8日目において同様の解析を行ったところ、得られた出力信号はゲート電圧信号の線形応答を示し、ドレイン電圧信号の周波数成分及び高次の周波数成分が消失していることが明らかとなった。この原因に関しては機械的な応力によるファイバーの断裂や、固体電解質中でのファイバーの導電性が不活性化されたといった様々な原因が考えられるが、その詳細原理解明及び安定性の向上は今後の課題として残った。

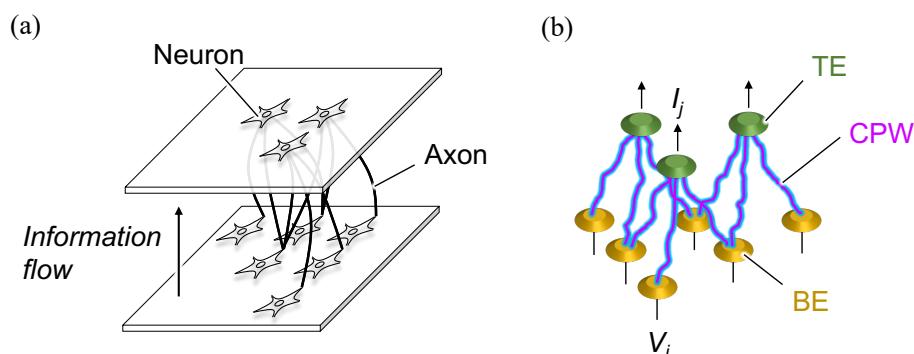


図 3.11 (a) 脳が持つ 3 次元畳み込み構造の模式図. (b) 上部電極 (TE) と下部電極 (BE) 間への導電性ポリマー細線 (CPW) 配線により脳構造を忠実に模倣可能な 3 次元脳型アーキテクチャの概念図.

3.3 立体分岐ポリマー配線を利用した 3 次元ネットワークの形成・学習

3.3.1 脳の 3 次元形態に学ぶ新規脳型回路アーキテクチャ

第 2 章で述べられた導電性ポリマー細線の電極ギャップ間配線を, 3.2 節では 2 次元平面内へ形成された複数電極間への分岐配線に拡張し, シナプス素子応用まで発展させた. これを踏まえ, 本節では更にポリマー配線を 3 次元的なものへと拡張し, より実際の脳構造を忠実に反映した新たな脳型アーキテクチャの創出を試みた. 実際の脳は模式図 3.11a のように, ニューロンが他の近傍ニューロンへ軸索を 3 次元的に伸長させて形成された階層的な畳み込み構造をとっている. 本研究ではこの 3 次元畳み込み構造を図 3.11b のように, 3 次元的に配置された上部電極とその近傍にある下部電極との間の立体ポリマー配線により物理模倣できないか検討した.

脳の 3 次元形態に学んだ回路アーキテクチャを採用することで, 脳型ハードウェアを高い実装効率で実現できる (2.2.2 項参照). ここではまず, 上部電極と下部電極をどのように配置するのが最適であるか, ソフトウェアシミュレーションを通じて調査した. 今回採用されたネットワークモデル (図 3.12a) は入力層と畳み込み層から成る. 入力層には入力電極が, 畳み込み層には興奮性及び抑制性電極が格子状に配列しており, 空間的に距離の近い入力電極と興奮性または抑制性電極のみが局所的に結合重みを有している. 入力層へ電圧として入力された信号はこの局所的なコンダクタンス重みを通じて畳み込み層へ伝播し, 興奮性及び抑制性電極に流れる電流値の差分をとって活

活性化関数に渡すことで、推論処理が実行される。この局所的なコンダクタンス重みは、入力電極に対応する下部電極と興奮性または抑制性電極に対応する上部電極との間を3次元的にポリマー配線することで表現され、学習を通じて最適化される。本研究では先行研究で既に提案されている局所畳み込み CNN モデル [10] に基づき、図 3.12b に示すようなポリマー細線同士の空間的な交差が生じない電極配置パターン 3 種を検討した。これらは下部電極が三角、正方、または六角格子状に配置されており、各格子の中央直上に上部電極が配置されたパターンである。これらのパターンを採用することで、細線間の交差を回避しながら電極間を配線でき、高い制御性でコンダクタンス重みを制御できる。これらの電極配置パターンを用いて局所畳み込みオートエンコーダ (Locally-connected auto encoder: LC-AE) のモデルをソフトウェア上で構築し、MNIST 手書き画像データセットを用いた画像再構成タスクによるモデルの評価を行った。入力層には 28×28 の入力電極アレイが並べられ、0 ~ 1 の値へ正規化された画像データが電圧値として本アレイに入力された。常に正の値を取るコンダクタンス重みを採用し、活性化関数は正規化線形ユニット (Rectified linear unit: ReLU) 関数が用いられた。図 3.12c に、入力画像及び学習済み LC-AE によるデコード画像の例、そしてそれらの間の平均二乗誤差を示す。最も小さな誤差を示した三角格子状の電極配置パターンが最適であることが本結果により示唆され、これは三角格子が最密に電極を配置できることに起因していると考えられる。

次に、最適化された三角格子状の電極配置パターンから構成される局所畳み込みネットワークを特徴抽出器として用い、手書き数字画像の分類タスクを実行した。入力画像データは特徴抽出器を通じてより低次元の特徴量へと圧縮されたのち、活性化関数としてソフトマックス関数を持つ分類器を通じて 0 ~ 9 のいずれかのクラスに分類された。学習は 60,000 枚の MNIST 画像データを用いて行われ、10,000 枚のテスト用データを用いて分類精度を取得した。分類器のみで構成されるモデル及び、特徴抽出器と分類器から成るモデルの、学習時における分類精度推移を図 3.13 に示す。分類器のみで学習した場合は 92 % 程度の分類精度しか獲得し得なかったのに対し、特徴抽出器を組み合わせることで、20 回学習後の分類精度が 96 % 程度まで飛躍的に向上したことから、特徴抽出器としての有効性が確認された。

また、本特徴抽出器は転移学習 [11] の枠組みを応用することで、内部の重みを固定したまま他の類似タスクへと使い回せることを明らかにした。まず、MNIST 画像データセットのうち奇数画像のみを用いて、特徴抽出器及び分類器を 100 回ほど分類学習させた。次に学習後の特徴抽出器を再利用し、新たに生成した未学習の分類器と組み

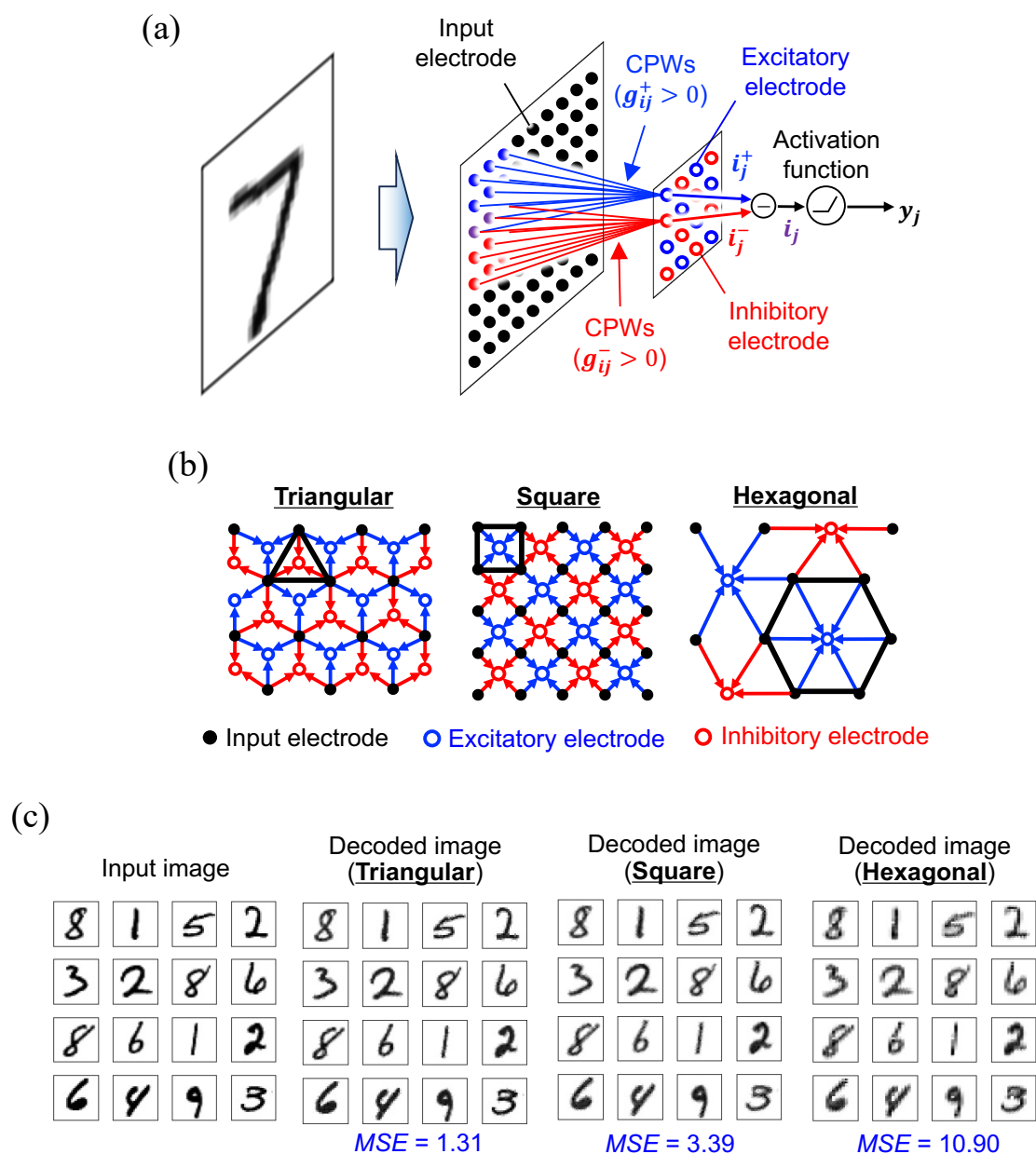


図 3.12 (a) 導電性ポリマー細線 (CPW) の立体配線によって物理実装される局所畳み込みニューラルネットワークモデルの概念図。(b) 検討された入力電極及び興奮性または抑制性電極の配置パターン (左から三角, 正方, 六角格子状)。(c) 各電極配置パターンから成る局所畳み込みオートエンコーダ (LC-AE) への入力画像及びデコード結果の例, 及びそれらの間の平均二乗誤差 (MSE).

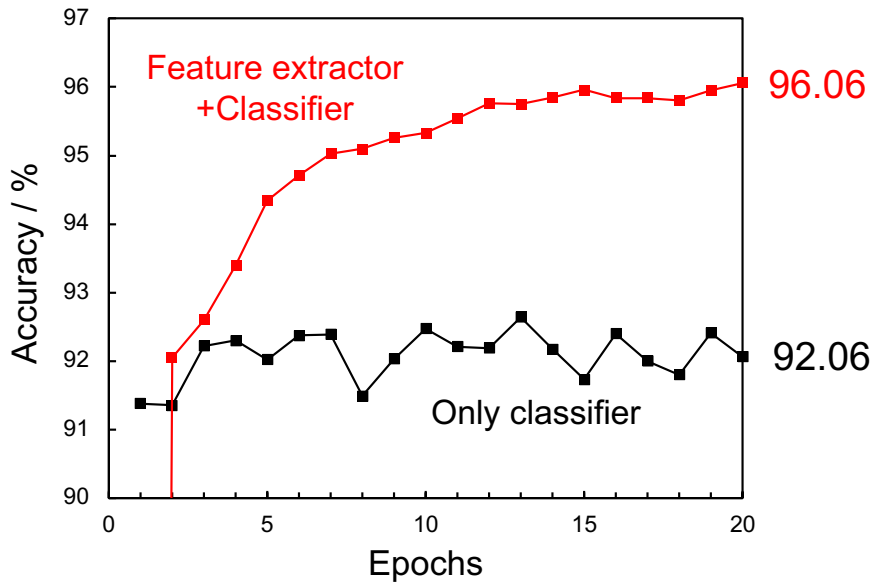


図 3.13 学習時における分類精度推移比較 (黒線: 分類器のみのモデル, 赤線: 分類器に特徴抽出器を組み合わせたモデル).

合わせ, 奇数または偶数画像のみを用いて分類器のみを再学習させた. 奇数または偶数画像のみを用いて分類器を再学習させた際の分類精度推移及び, 100 回学習させた後に得られた分類精度を図 3.14, 表 3.1 に示す. 特徴抽出器にとって未学習の偶数画像についても, 奇数画像に比べて学習速度が遅いものの, 10 回程度の学習で奇数画像と同等な 97 % 以上の分類精度が達成された. このことは, 特徴抽出器が奇数画像を用いた学習を通して特徴抽出のコツを学習し, これを偶数画像分類にも応用できたことを示しており, 転移学習によるカスタマイズ性の高いフレキシブルな AI システムを実現できる可能性を示唆している. また, 分類器のみで学習させた場合の分類精度が, 奇数及び偶数画像のいずれも 95 % 程度に留まっていることから, 学習済み特徴抽出器使用の有効性が見て取れる.

3 次元的な局所畳み込み構造を有する本特徴抽出器は, 従来のクロスバーアレイに基づくハードウェアよりも高い実装面積効率を有する. 図 3.15a, b の模式図で表されるクロスバーアレイ及び提案特徴抽出器の回路面積 S_{CA} , S_{FE} はそれぞれ, 電極間ピッチ長 d を用いて次のように表される.

$$S_{CA}(d) = 2(X - 1)(H - 1)d^2 \quad (3.8)$$

$$S_{FE}(d) = 3\sqrt{3}(M_{in} - 1)(N_{in} - 1)d^2/2 \quad (3.9)$$

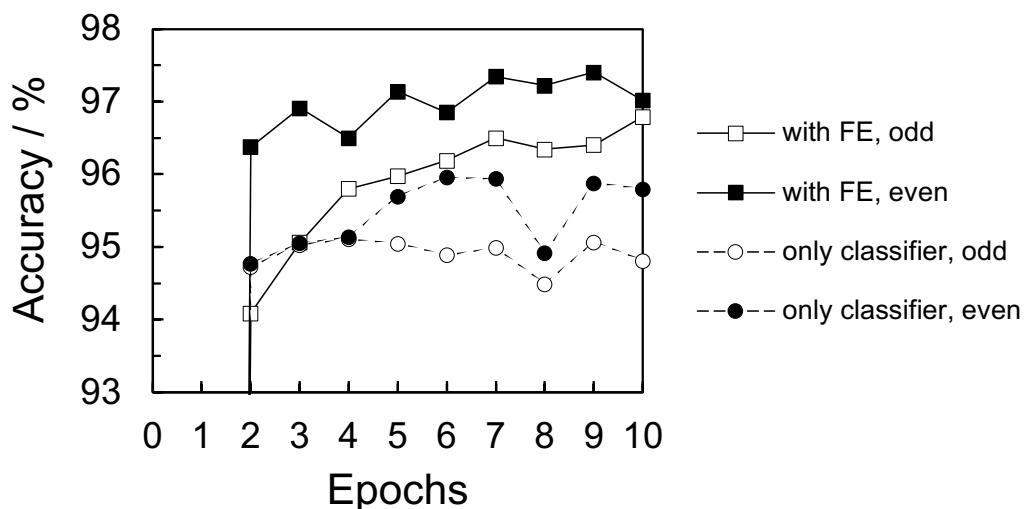


図 3.14 MNIST データセットの奇数画像または偶数画像学習時における分類精度の推移. 奇数画像のみを用いて学習させた特徴抽出器 (FE) を組み合わせて分類器のみを学習させることで, 分類器のみで学習させる場合よりも分類精度が向上した.

表 3.1 100 回学習させた後の分類精度比較 [%].

	奇数	偶数
特徴抽出器あり	97.37	97.15
分類器のみ	95.19	95.54

ここで, X, H はクロスバーアレイで実装される全結合型ネットワークの入力層, 隠れ層内のノード数であり, M_{in}, N_{in} はそれぞれ特徴抽出器へ入力される 2 次元データの行数と列数である. MNIST 画像データを入力として与える場合, $X = 784, M_{in} = 28, N_{in} = 28$ となる. 特筆すべき点は, クロスバーアレイの回路面積が入力層と隠れ層の両方のノード数に比例して増大するのに対し, 提案特徴抽出器は畳み込み層が高さ方向に積層されるような 3 次元構造を取るため, 回路面積が入力層のサイズのみ依存する点である. 例えば, 同じ電極間ピッチ d で作製できると仮定した場合, 隠れ層に $H = 50$ 個のノードを持つような全結合型ネットワークをクロスバーアレイで実装する場合に比べ, 提案特徴抽出器は僅か 40 分の 1 程度の回路面積で実装できる (図 3.15c).

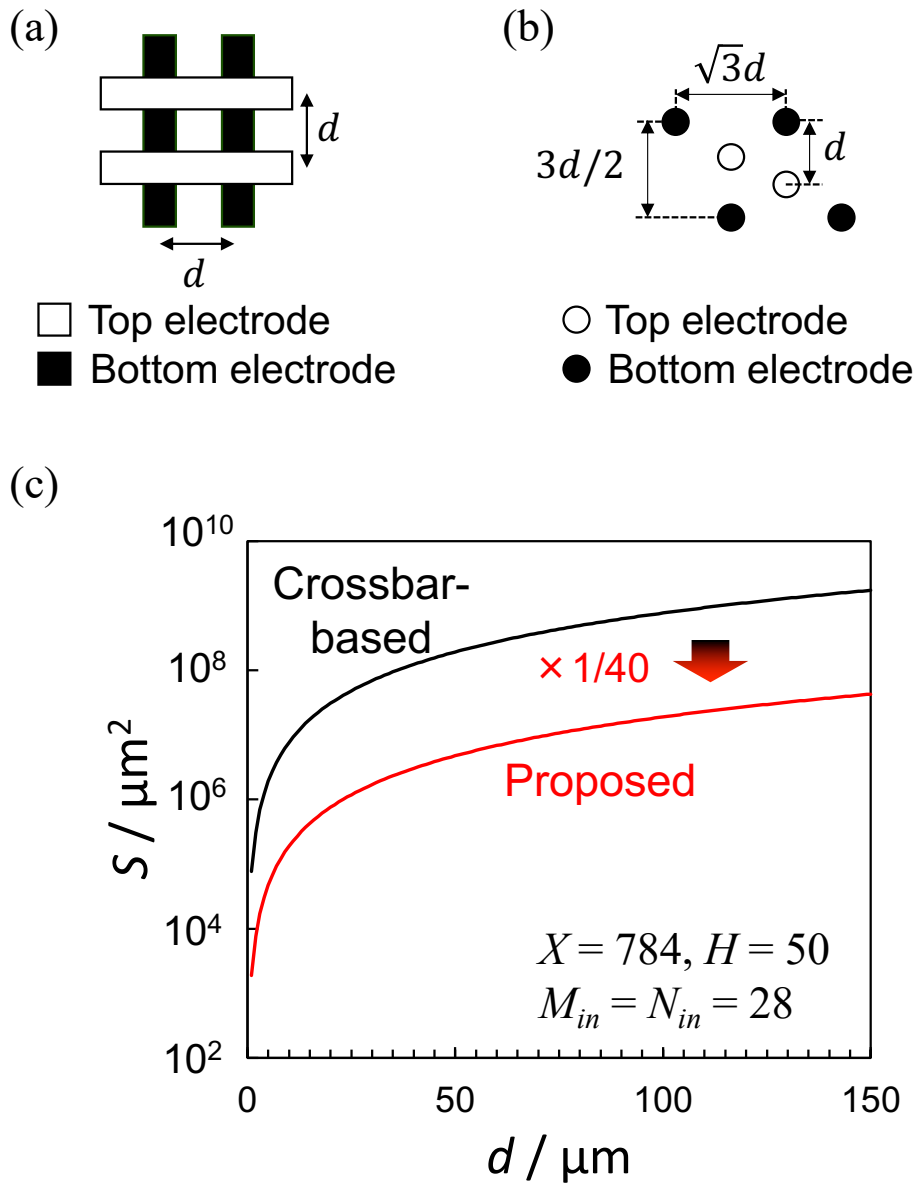


図 3.15 (a) クロスバーアレイ及び (b) 提案アーキテクチャの模式図. (c) クロスバーアレイと提案アーキテクチャにおける回路面積の理論値.

3.3.2 立体ポリマー配線用立体電極の作製

前項の内容を踏まえ、本研究では三角格子状に配列した3つの下部電極と、その格子中央直上に配置された上部電極を作製し、これらの間への導電性ポリマー細線の立体配線及び電極間抵抗制御技術の確立に取り組んだ。本ポリマー細線の立体配線はこれまで報告がなされておらず、3次元的な電場分布に従って細線が成長する点や、細線の自重によって配線難易度が高くなる点において、従来の2次元平面内でのポリマー配線とは性質が大きく異なる。立体配線を実現するための試みとして、本研究ではまず専用立体電極の設計及び作製を行った。立体電極に求められる要件として、以下の点が挙げられる。

1. ポリマー細線の重合成長に必要な電場強度が得られるよう、電界を集中させることのできる鋭利な立体形状を有していること。
2. 集積可能な程度に微小な大きさであること。
3. 作製プロセスが簡便であり、所望の位置へ高精度に形成できること。

これらの要件を満たす立体電極として、通常フリップチップボンディングに用いられるAuスタッドバンプに本研究では着目した。本Auスタッドバンプは、スパークによって金線先端へAuボールを形成してこれを形成箇所へ押しつけた後、金線を破断させることで容易に形成することができる。金線破断時に形成される鋭利な先端形状は電界の集中を可能とし、これを避雷針のように用いることでバンプ先端における細線の重合成長を促進できると考えた。また、これらのバンプは直径30~50 μm 程度の径を有しており、形成時の押し付け応力を調整することで径及び高さを容易に制御できる。これらの性質を有するAuスタッドバンプの形成を函館電子株式会社へ委託し、本研究ではこれを下部電極として応用した。まず、ガラス基板上へ金属薄膜Cr(5 nm)/Au(400 nm)のパターンを成膜したのち、Auスタッドバンプ(直径50 μm 、高さ約40 μm)を所望の位置へ形成した。図3.16に示す走査型電子顕微鏡像から分かるように、形成されたAuスタッドバンプは曲率半径の小さな先端形状を有しており、下地の金属薄膜を通じて電圧を印加することで、先端近傍へ高強度の電界が生成される。本スタッドバンプを140 μm 間隔で三角格子状に配列し、3つの下部電極をガラス基板状へ形成した(図3.17)。なお、バンプ周り以外での不要な細線成長やイオン電流を抑制するため、バンプ形成が施されている部分以外の金属薄膜は、プラズマ化学気相堆積により成膜された厚さ300 nmのSiO₂膜で被覆されている。

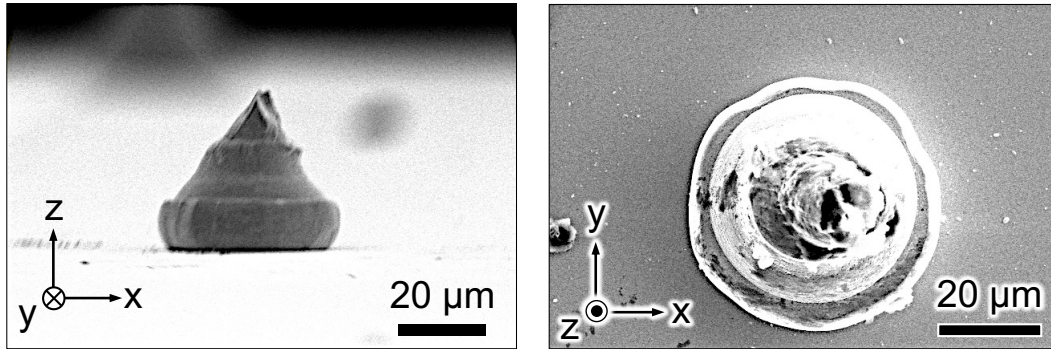


図 3.16 Au スタッドバンプの走査型電子顕微鏡像.

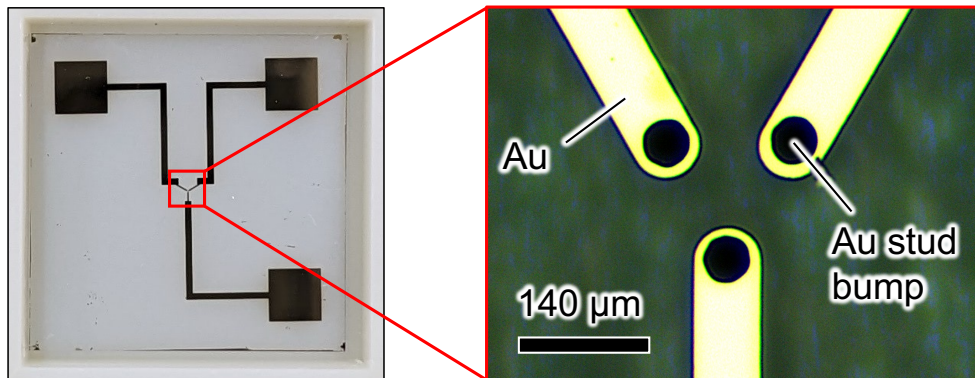


図 3.17 下部電極としてガラス基板上へ形成された Au スタッドバンプの光学顕微鏡像.



図 3.18 上部電極として用いた Au 探針先端の光学顕微鏡像及び走査電子顕微鏡像.

上部電極として今回，電解研磨法を用いて作製した先端曲率半径 $1\ \mu\text{m}$ 以下の Au 探針 (図 3.18) を用いた．先行研究を元に，12 M の塩酸 (富士フィルム和光純薬工業株式会社製) とエタノールの 1:1 混合溶媒に金線 (ニラコ社製，直径 0.25 mm，純度 99.99 %) とタングステン線 (ニラコ社製，直径 0.90 mm，純度 99.95 %) を浸し，これらの間に 2.8 V の直流電圧を印加して金線を電解研磨することで，鋭利な先端を有する Au 探針を得た [12]．作製探針をエタノールでリンスして窒素ガンで乾燥させたのち，3 軸マイクロマニピュレータ (アポロウェーブ社製，M40) の探針ホルダーに固定してこれを上部電極とした．

3.3.3 実験システム構成

構築した立体ポリマー配線システムの概念図及び外観を図 3.19 に示す．本システムは，下部電極が作り込まれたガラス基板と，上部電極として用いる Au 探針及びその位置を制御するためのマイクロマニピュレータ，電極近傍の様子をその場観察するための倒立顕微鏡から構成された．まず，三角格子状に配列した 3 つの下部電極は全て，PDMS の封入容器内に満たされたモノマー前駆体溶液に浸漬された．次に，開口している PDMS 容器の上部から，上部電極として用いる Au 探針をアプローチして溶液に浸漬させた．下部電極が形作る三角格子の中心直上に探針先端が配置されるよう，倒立顕微鏡でその位置を観察しながら，探針先端の水平位置をマイクロマニピュレータで調節した．ガラス基板表面からの距離 z は，倒立顕微鏡の焦点を $2\ \mu\text{m}$ 精度で調整することにより測定された．本実験では探針先端位置が $z = 100\ \mu\text{m}$ の高さになるよう，マイクロマニピュレータで位置調節された．コアキシャルプローブを通じ，各電極は図 3.20 に示す電圧制御プリント基板の各ポートへ接続された．本プリント基板は重合電圧，読み出し電圧，抑制電圧といった印加電圧種の切り替えや電流値の読み出し，接

続端子の接地や浮遊といった電氣的接続の切り替えをメカニカルリレー制御により行うことができる。

3.3.4 立体分岐ポリマー配線による電極間抵抗制御

全ての下部電極を接地しながら，上部電極へ重合電圧 (50 kHz, 24 V_{p-p}) を数秒間印加し，ポリマー細線の立体配線を試みた。図 3.21a, b は，重合電圧印加後に $z = 0$ 及び 100 μm の高さへ焦点を合わせてそれぞれ撮影された倒立光学顕微鏡像である。上部電極と 3 つの下部電極 BE₁, BE₂, BE₃ の間を立体的に配線する細線の様子が初めて観測された。

続いて，細線の重合成長制御による 2 秒間のコンダクタンス書き込みと 0.5 秒間の読み出しを繰り返しながら各電極間を配線する細線本数を制御し，LTP のごとく各コンダクタンスを増強して所望の値へとそれぞれフィードバック制御できないか試みた。今回，上部電極と 3 つの下部電極 BE₁, BE₂, BE₃ との間の各コンダクタンス G_1 , G_2 , G_3 について，目標値をそれぞれ $T_1 = 3.00$, $T_2 = 6.00$, $T_3 = 9.00 \mu\text{S}$ に設定した。読み出し時には上部電極へ -50 mV の直流電圧が印加され，下部電極はそれぞれ反転増幅回路に接続された。反転増幅された電圧信号を ADC で読み出し， G_1 , G_2 , G_3 が並列的に読み出された。書き込み時には，上部電極へ重合電圧 (50 kHz, 22 V_{p-p}) を常に印加し，一方で下部電極は読み出したコンダクタンスに基づいて以下のように接続先をスイッチングすることで，細線の重合成長を制御した。読み出されたコンダクタンスが $G_i < T_i$ の場合，書き込み時には下部電極 BE_{*i*} が接地されることで，上部電極との間に重合電位差が印加されて細線の重合配線によるコンダクタンス増強が促進された。一方 $G_i \geq T_i$ の場合，書き込み時に BE_{*i*} は抑制電圧 (50 kHz, 11 V_{p-p}) へ接続され，細線の重合配線によるコンダクタンス増強が抑制された。以上の操作を繰り返しながら細線の電極間配線をフィードバック制御した結果，各コンダクタンス G_i を目標値 T_i へと高精度に制御することに成功した (図 3.21c)。各電極電位を制御することで，3 次元溶液空間内に置かれた複数電極間コンダクタンスをシナプス増強のごとく独立に制御できることが示された。

興味深いことに，図 3.21c に見られたコンダクタンス増強は全コンダクタンスで同時に起こったわけではなく，逐次的に生じた。すなわち，あるコンダクタンス G_i が目標値 T_i に達して増強が起こらなくなった後，別のコンダクタンス G_j が増強され始める様子が観測された。このことは，ある時刻におけるポリマー細線の重合成長は局所的にしか起こらないことを示している。この現象は，あたかも細線同士が競合し，勝者のみ

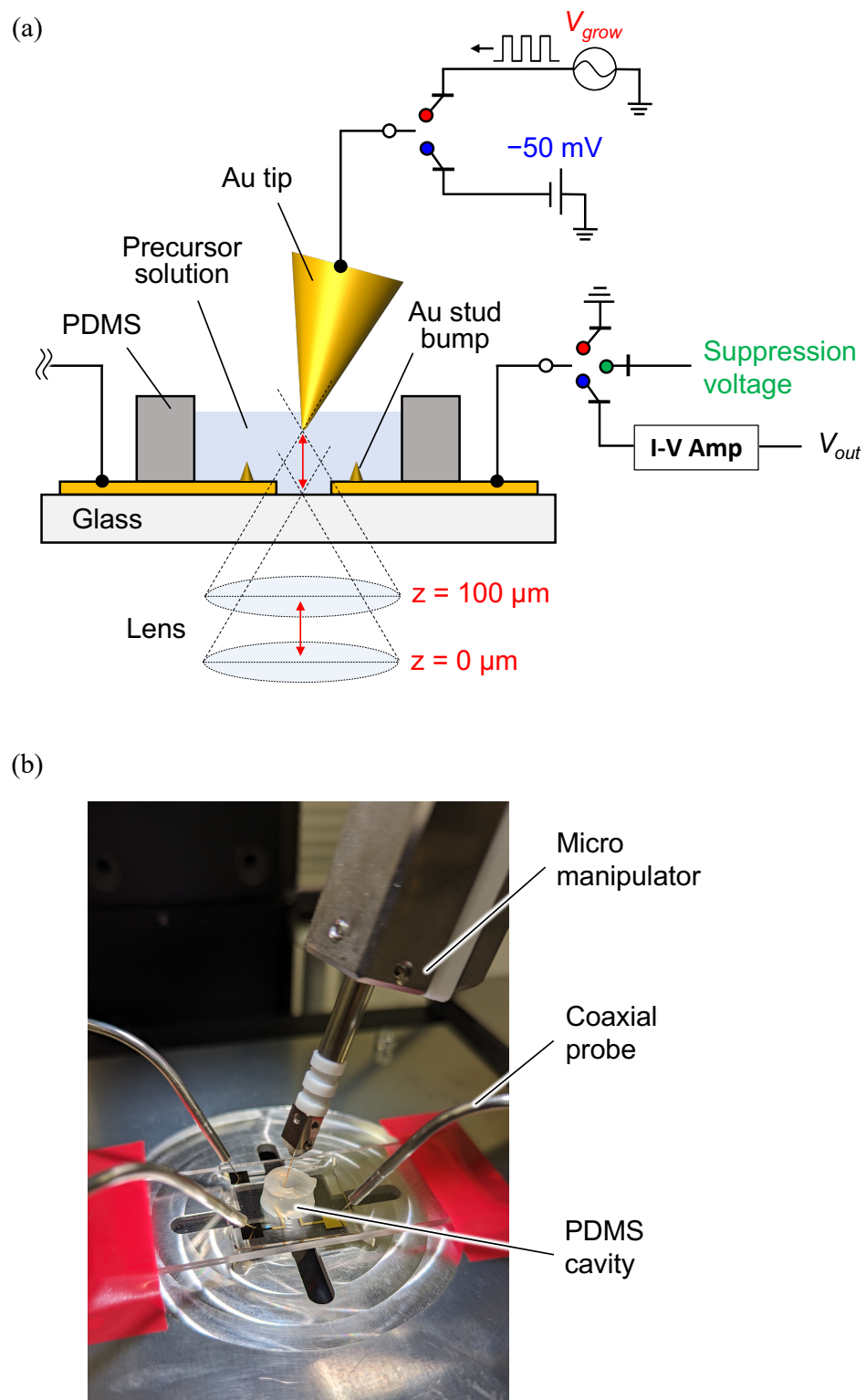


図 3.19 立体ポリマー配線システムの (a) 概念図及び (b) 外観.

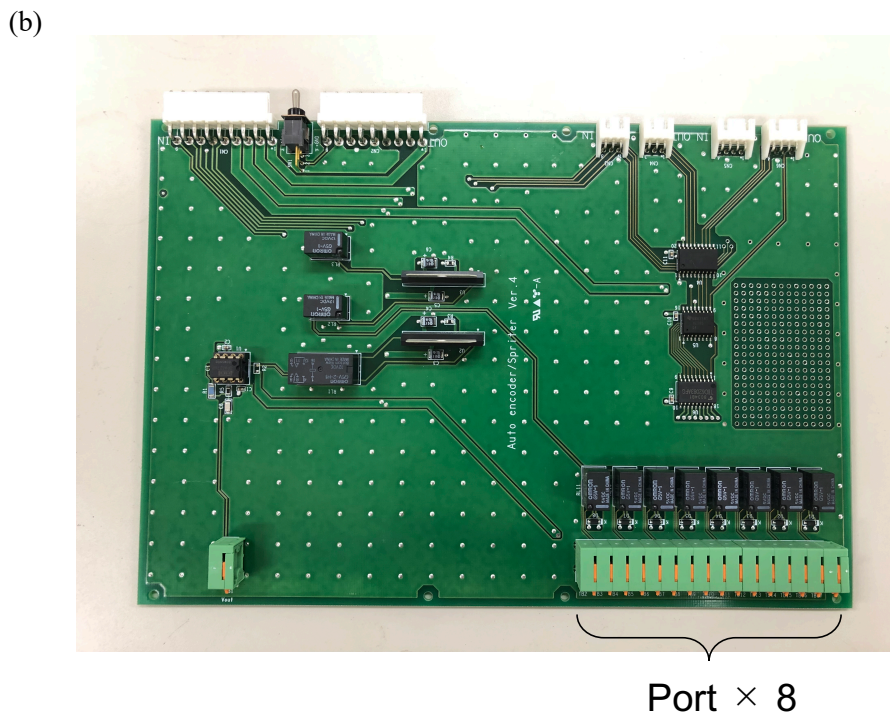
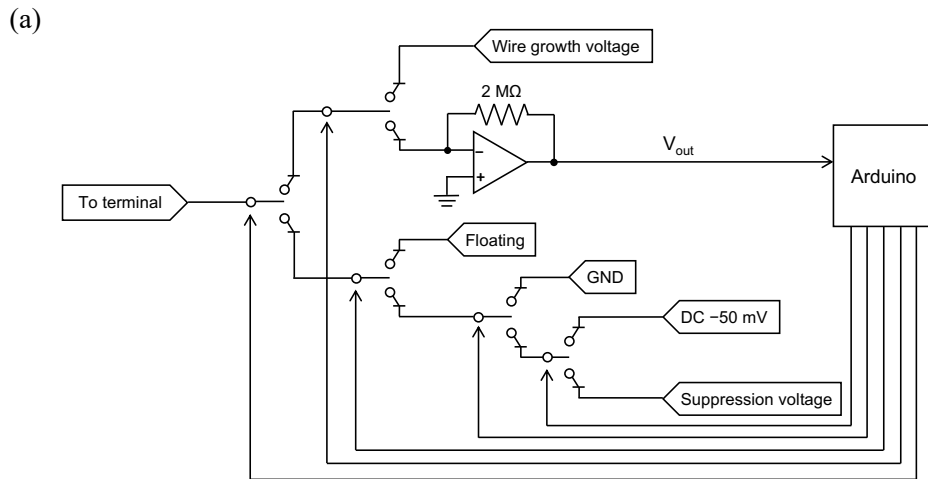


図 3.20 電圧制御プリント基板の (a) 簡易回路図及び (b) 外観.

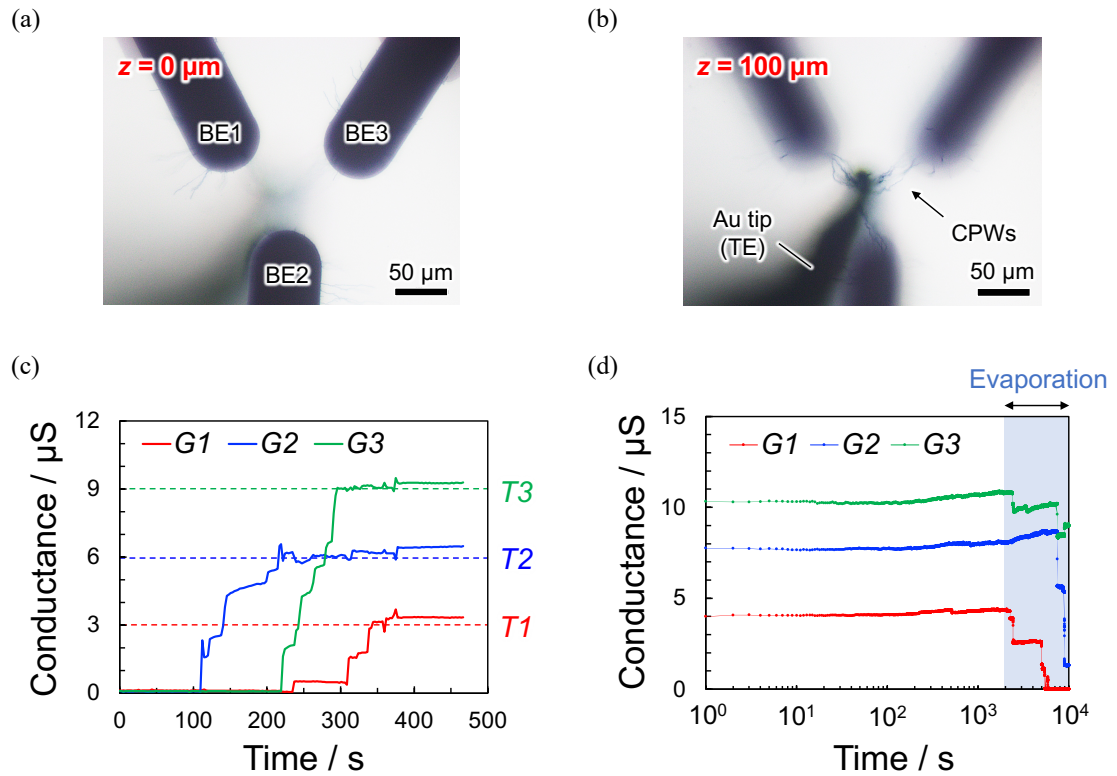


図 3.21 (a,b) 基板表面からの高さ $z = 0$ および $100 \mu\text{m}$ の位置へ焦点を合わせて撮影された、上部電極 (TE)-下部電極 (BE) 間へ立体的に配線された導電性ポリマー細線 (CPW) の光学顕微鏡像. (c) 立体ポリマー配線による TE-BE 間コンダクタンス (G_1 , G_2 , G_3) の推移. 各コンダクタンスの目標値はそれぞれ $T_1 = 3$, $T_2 = 6$, $T_3 = 9 \mu\text{S}$ に設定された. (d) 立体ポリマー配線により得られたコンダクタンスの保持特性. ポリマー細線が溶液に浸漬されている間は比較的安定したコンダクタンスを示したが、溶液の蒸発とともに不安定な挙動を示した.

が成長するかのようであり、脳内で見られる Winner-take-all (WTA) 型の情報処理を彷彿とさせる [13]. こうしたポリマー細線の局所的な重合成長は過去にも報告例があり、Ciccone らはシミュレーションを通じてこれを電場分布がもたらす局所的なモノマー供給によるものと結論づけている [14]. 複数電極間へ電位差が印加されると、分極したモノマーは電場に沿ってドリフトし、細線先端の反応サイトに到達して重合反応に寄与する. また、細線先端において重合が進行するとモノマーが消費されて濃度勾配が生じ、モノマーの拡散が生じる. これらが連鎖的に起こった結果、電場強度の最も大きな反応サイトへのみ局所的にモノマー供給が起こり、細線の局所的な重合成長が観測されたのだと考えられる.

液中での立体分岐ポリマー配線を通じて所望のコンダクタンスを獲得したのち、得られた値がどれくらいの時間保持されるのかを表すリテンション特性を取得した (図 3.21d). 得られた初期コンダクタンスは 10 分ほど経過しても安定な値を示した. このことは、ポリマー細線と電極表面との間に安定した接合が形成されており、細線の自重による剥離等が生じていないことを示している. ところが、より長時間放置すると各コンダクタンスは不安定に減少する傾向が見られた. これは、PDMS の開口部から溶液が蒸発して乾燥し、細線が浮力による支えを失い断線したことや、細線自体の導電性が変化したことが原因であると考えられる. 今回用いた実験システムでは Au 探針をアプローチするために PDMS 上部を常に開口しておく必要があるため、溶液の蒸発を防ぐことは困難であった. 将来的には上部電極も微細加工により作り込み、マイクロ流路等を用いて溶液を完全に密閉して蒸発を防ぐような構造にすることで、より長時間安定したリテンション特性の取得が期待できる. また、溶液の蒸発によるコンダクタンス減少はリフレッシュ機構にも応用することができると考えられる. 溶液を取り除くことで配線済みの細線も機械的に取り除けるため、ネットワークの学習を一からやり直すことができ、より柔軟な学習システムを構築することが可能となる.

3.3.5 3次元ポリマーネットワークの学習

構築した立体ポリマー配線システムを用いた機械学習実装のデモンストレーションとして、ポリマーネットワークの教師なし Hebb 型学習を試みた. 本研究で採用した ANN モデルを図 3.22a に示す. 本モデルでは「リンゴ」、「バナナ」、「赤」、「黄」の刺激に反応するニューロンに対応する 4 つのユニットが重みによって相互結合されている. Hopfield モデル [15] に代表される連想記憶モデルに着想を得て今回提案された本モデルは、適切な重みを与えることで連想記憶をネットワークへ付与することができ

る。例えばリンゴから赤、バナナから黄色のように、果物情報から色情報を連想することができる。

従来のクロスバーアレイでこのような相互結合型ネットワークモデルを物理実装する場合、ユニット数分のワード線とビット線が必要となるため、 4×4 のアレイが必要となる。すなわち、 ${}_4C_2 = 6$ 個の重みをコンダクタンスで表現するために $4 \times 4 = 16$ 個ものシナプス素子分の面積を要するため、実装効率が大幅に低下してしまうという課題がある。また、本来不要な素子に流れる漏れ電流により、消費電力増大が懸念される。そこで本研究では、4つの電極とポリマー配線を用いてネットワークのトポロジーをそのまま物理的にエミュレートし、各電極間コンダクタンスを制御することでネットワークを学習させる新たなアプローチを試みた。ところが、2次元平面内へ形成された通常の電極を用いてこれを実行すると細線同士の混線が生じてしまい、各電極間コンダクタンスを正確に制御してネットワークを正しく学習させることは困難であった(図 3.22b)。

そこで図 3.22c に示すように、従来の2次元平面内でのポリマー配線と、今回新たに実現された3次元的な配線を組み合わせることで、混線の回避が可能になると考えた。上部電極と3つの下部電極 BE_1 , BE_2 , BE_3 はそれぞれ「リンゴ」、「赤」、「バナナ」、「黄」ニューロンとして割り当てられた。発火ニューロンに対応する電極間へ重合電位差 (50 kHz, 22 V_{p-p}) を2秒間印加してポリマー配線を促すことで、Hebb 則に従って発火ニューロン間のコンダクタンス重みが増強された。一方、非発火ニューロンに対応する電極へ抑制電圧 (50 kHz, 11 V_{p-p}) を印加することで、発火-非発火ニューロン電極間へのポリマー配線が抑制された。

まず第1ステップとして、「リンゴ」と「赤」のニューロンに対応する電極が発火ニューロンとして割り当てられ、その結果、両者間のコンダクタンス重みが増強された。第2ステップでは、「バナナ」と「黄色」ニューロンの間の重みが同様に増強された。これら2つのステップから成る学習エポックを繰り返すことで、ネットワーク全体の学習が進行した。発火ニューロンの割り当てと電圧供給は、マイクロコントローラによって自動的に行われた。各学習エポック終了後に、果物(「リンゴ」または「バナナ」)ニューロンへ割り当てられた電極へ 50 mV の電圧を刺激として印加し、他の電極に流れる電流値を測定した。図 3.23 の実験結果は、刺激された果物の色に対応する電極へ流れる電流値のみが、学習が進むにつれて著しく増加しており、果物種とその色の対応関係が Hebb 型学習を通じて正しく学習されたことを示している。立体ポリマー配線により増強された「リンゴ-赤」電極間のコンダクタンス重みが、2次元ポリ

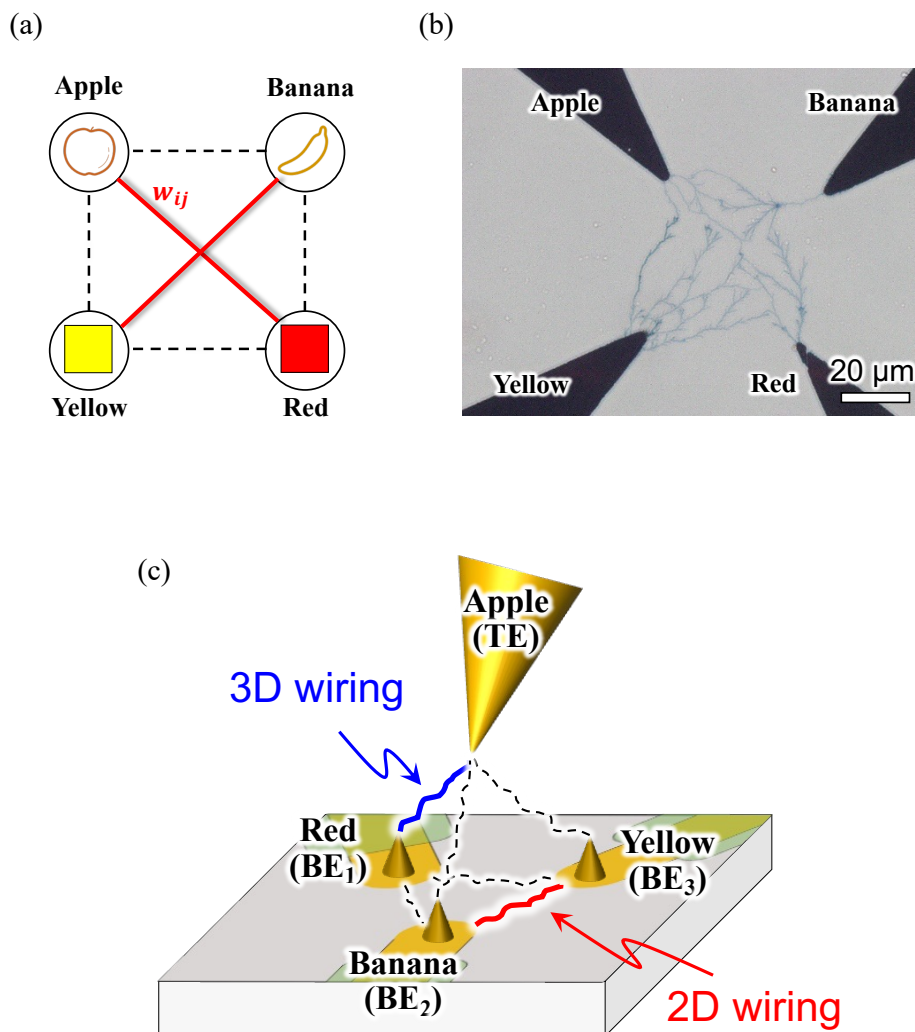


図 3.22 (a) ポリマーネットワークの Hebb 型学習に用いられたネットワークモデル。「リンゴ」、「バナナ」、「黄色」、「赤色」の刺激にそれぞれ反応する4つのニューロンに対応するユニットが重みを通じて相互結合している。(b) 2次元平面内へ形成された4つの電極間へのポリマー配線を通じて Hebb 型学習を試みた際の光学顕微鏡像。細線同士の混線が生じており、学習に失敗してしまっている。(c) 構築した立体配線システム上での Hebb 型学習の概念図。下部電極間での2次元平面内におけるポリマー配線と、上部-下部電極間への3次元的な配線を組み合わせることで、混線を回避できる。

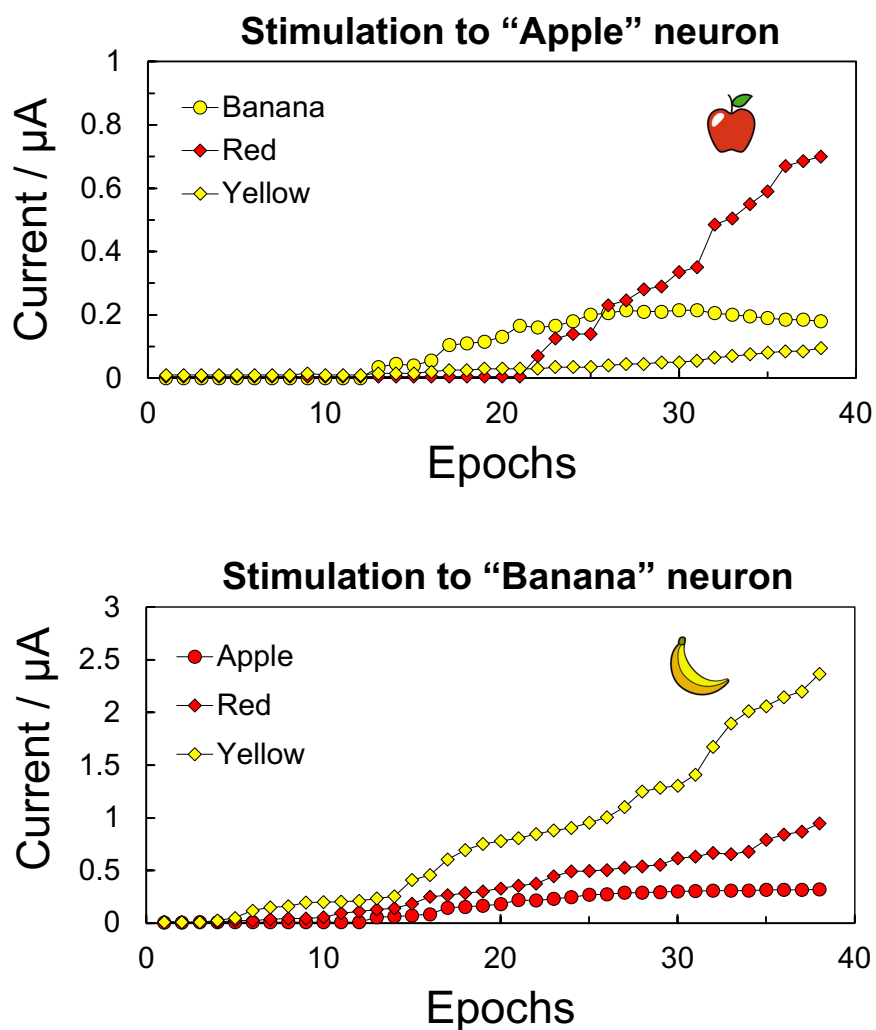


図 3.23 「リンゴ」または「バナナ」電極へ 50 mV の電圧を印加した際、各電極へ流れる電流値の学習時における推移。それぞれ「赤」、「黄」電極に流れる電流値のみが著しく増加しており、果物情報と色情報の対応関係をネットワークが正しく学習できていることを表している。

マー配線により増強された「バナナ-黄」電極間のコンダクタンス重みと同様に増強されたことは、立体ポリマー配線が2次元平面内での配線と同じようにネットワークの学習へ寄与し得ることを証左している。

3.3.6 スパイク電圧印加に伴う側抑制の模倣

シナプスは発達過程において軸索誘導を通じて形成され、その後可塑的なシナプス効率の変化を通じて脳全体の学習に寄与する。シナプスの結合強度は主にシナプス前後のニューロン、あるいは介在ニューロンのスパイク発火活動に依存する。例えば、スパイクタイミング依存性可塑性 (Spike-timing-dependent plasticity: STDP) として知られるスパイク発火タイミングに基づく局所学習則の存在が明らかになっている [16, 17]. STDP はニューロモルフィック工学においても抵抗変化メモリ素子や回路で模倣されており、これを用いたスパイクニューラルネットワーク (Spiking neural network: SNN) の物理実装に関する研究が精力的になされている [18, 19].

本研究では3.2節にて行ったような電圧スパイク印加によるコンダクタンス制御を、構築した立体ポリマー配線システム上でも試み、これをスパイクベースの情報処理に応用できないか検討した。まず、ポリマー細線の配線数を制御することで3つのコンダクタンス G_1 , G_2 , G_3 を設定した後、 BE_2 , BE_3 を接地しながら大きさ 2.5 V, 幅 10 ms の電圧スパイクを BE_1 へのみ 1 秒毎に 20 回ほど連続印加した際の各コンダクタンスの推移を観察した。観測されたコンダクタンス推移を図 3.24a に示す。最初のスパイク印加直後には全てのコンダクタンスが急激に減少し、その後徐々に上昇した。注目すべき点は、スパイクの連続印加中 ($t = 30 \sim 50$ s), G_1 のみが著しく二次関数的に増強され、 G_2 , G_3 は弱く線形的に増強されたことである (図 3.24b)。また、興味深いことに G_1 は連続スパイク印加前よりも高い値へシフトして低抵抗化し、逆に G_2 , G_3 は低い値へシフトして高抵抗化した。すなわち、スパイク印加はある1つのコンダクタンスを増強する一方で、他のコンダクタンスを抑制する様子が観測された。この特異的なコンダクタンス変化挙動は、脳内でみられる WTA 型情報処理の基本原理である側抑制 [20] に対応づけられる。このような挙動は、 BE_2 または BE_3 へ後続的にスパイク印加した際も観察され、コンダクタンス間の相対的な大小関係をスパイク印加により制御できることが示された (図 3.24c)。

これらの結果は、スパイク発火に基づく生理学的な法則に即した情報処理へと本ポリマーネットワークを応用できることを示唆している。得られた側抑制的なコンダクタンス変化をモデル化し、これを SNN の局所学習に応用できないかシミュレーション

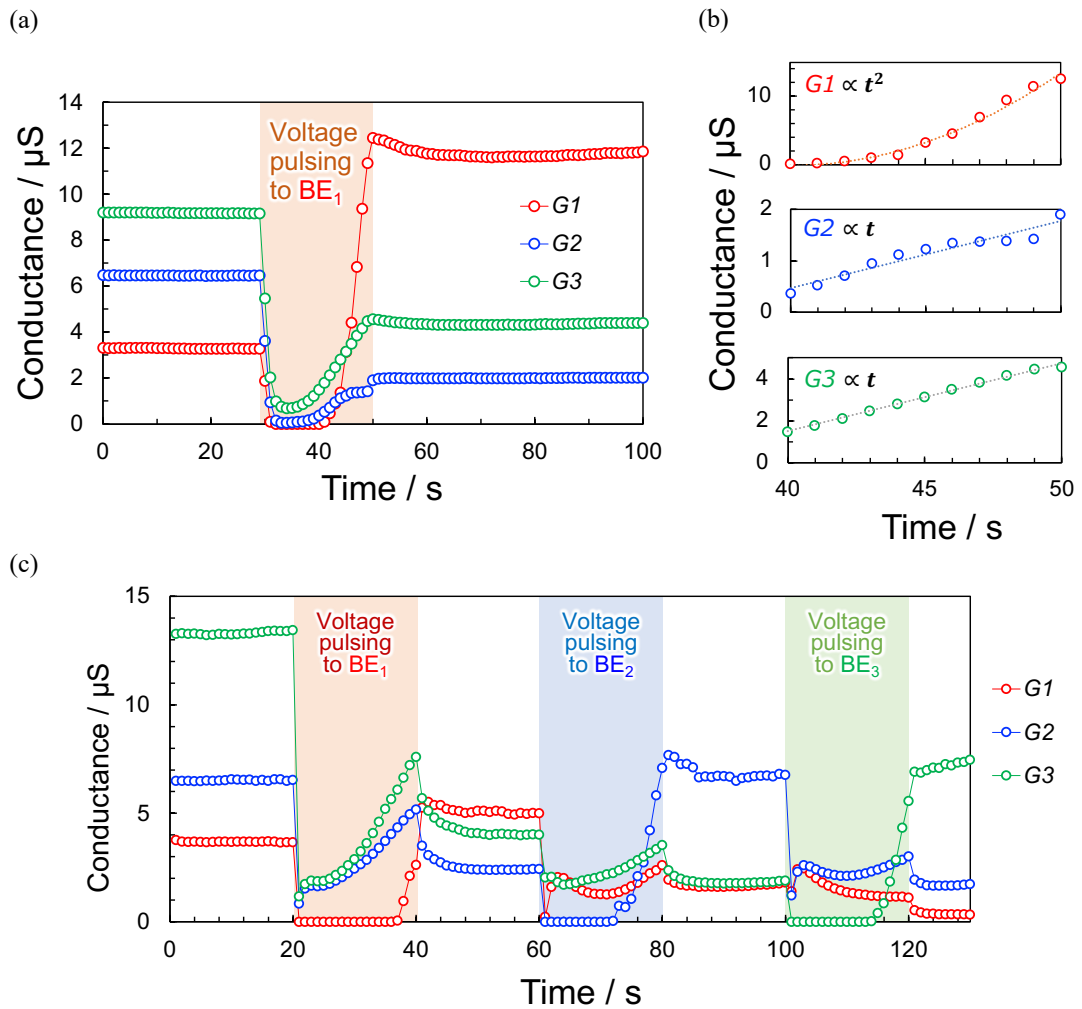


図 3.24 (a) 下部電極 BE_1 へ振幅 2.5 V, 幅 10 ms の連続電圧スパイクを 1 秒間隔で印加した際の, 上部電極と 3 つの下部電極 (BE_1 , BE_2 , BE_3) 間のコンダクタンス (G_1 , G_2 , G_3) 推移. (b) (a) における $t = 40 \sim 50$ s の間のコンダクタンス推移. G_1 が二次関数的に増強され, G_2 および G_3 が直線的に増強された. (c) 電圧スパイク印加による相対コンダクタンス制御. 印加電極を切り替えることでコンダクタンス間の相対的な大小関係を制御することができた.

を通じて検討した。用いた SNN モデルは、1つの入力ニューロンと3つの出力ニューロンから構成された簡易的なものであり、 i 番目の出力ニューロンはコンダクタンス重み $G_i (i = 1, 2, 3)$ を通じて入力ニューロンと結合している (図 3.25a)。あるタイムステップに入力ニューロンへ電位 V_{in} が与えられると、各出力ニューロンはコンダクタンス重みを通じて電流値 $V_{in}G_i$ を受け取る。出力ニューロンは積分発火モデルであり、入力された電流値を時間的に積分し、これが閾値 θ に達した時に発火して膜電位 $V_{mem} = 1$ を、それ以外の時は 0 を出力する。 V_{mem} が θ に達すると、 V_{mem} は 0 にリセットされた。まず、 $G_1 = 5.9$, $G_2 = 6.0$, $G_3 = 6.1 \mu S$ に重みを固定して、出力ニューロンの発火活動をシミュレートした結果を図 3.25b に示す。なお、パラメータとして $V_{in} = 1.0$, $\theta = 5.0$ を用い、断続的に V_{in} を与えながら 225 タイムステップにわたって計算した。その結果、全ての出力ニューロンは周期的に発火し、僅かな重みの値の違いによってその周期も僅かに変化した。

次に、出力ニューロンのスパイク発火に伴う側抑制の効果を取り入れて計算を行った。重みを常に固定するのではなく、あるタイムステップにおいて i 番目の出力ニューロンが発火すると重み G_i は 1 だけ増加し、その他の重み $G_j (i \neq j)$ は逆に 1 だけ減少するような、側抑制による動的な重み変化を取り入れて同様のシミュレーションを行ったところ、図 3.25c-e に示すような結果が得られた。図 3.25c に示す発火パターンは、タイムステップを重ねるにつれてある 1つのニューロン発火のみが支配的となり、その他のニューロン発火が抑制されていく様子を捉えている。図 3.25d, e はコンダクタンス重みの推移を示しており、初期値として最も大きな値を持つ G_3 のみが次第に増強されていき、 G_1 , G_2 が抑制されていく様子が分かる。シミュレーション開始初期において、僅かながら最も発火が起りやすいニューロンが勝者 (Winner) として生き残ったという点で、これらの挙動は典型的な WTA 型情報処理であるといえる。このように、側抑制は入力刺激に対するニューロン発火の選択性を高める上で重要な役割を担っている。従来のシナプス素子は 1つの重みを 1つのコンダクタンスで表現し、それぞれが独立に制御されるのに対し、今回発現された側抑制的なコンダクタンス変化はシナプス素子間の空間的相互作用によるものであり、ニューロンやシナプスの空間的位置関係を反映しているという点でより生理学的妥当性を有している。

発現した側抑制的コンダクタンスの原理検証に向け、以下の追加実験が行われた。追加実験の概念図を図 3.26a に示す。本実験は $50 \mu m$ の先端間距離でガラス基板上に形成された 3つの Au 電極を用いて行われ、各電極はそれぞれプレ (Pre)、ポスト (Post)、介在ニューロン (Mod) 電極に割り当てられた。全電極をモノマー前駆体溶液に浸し、

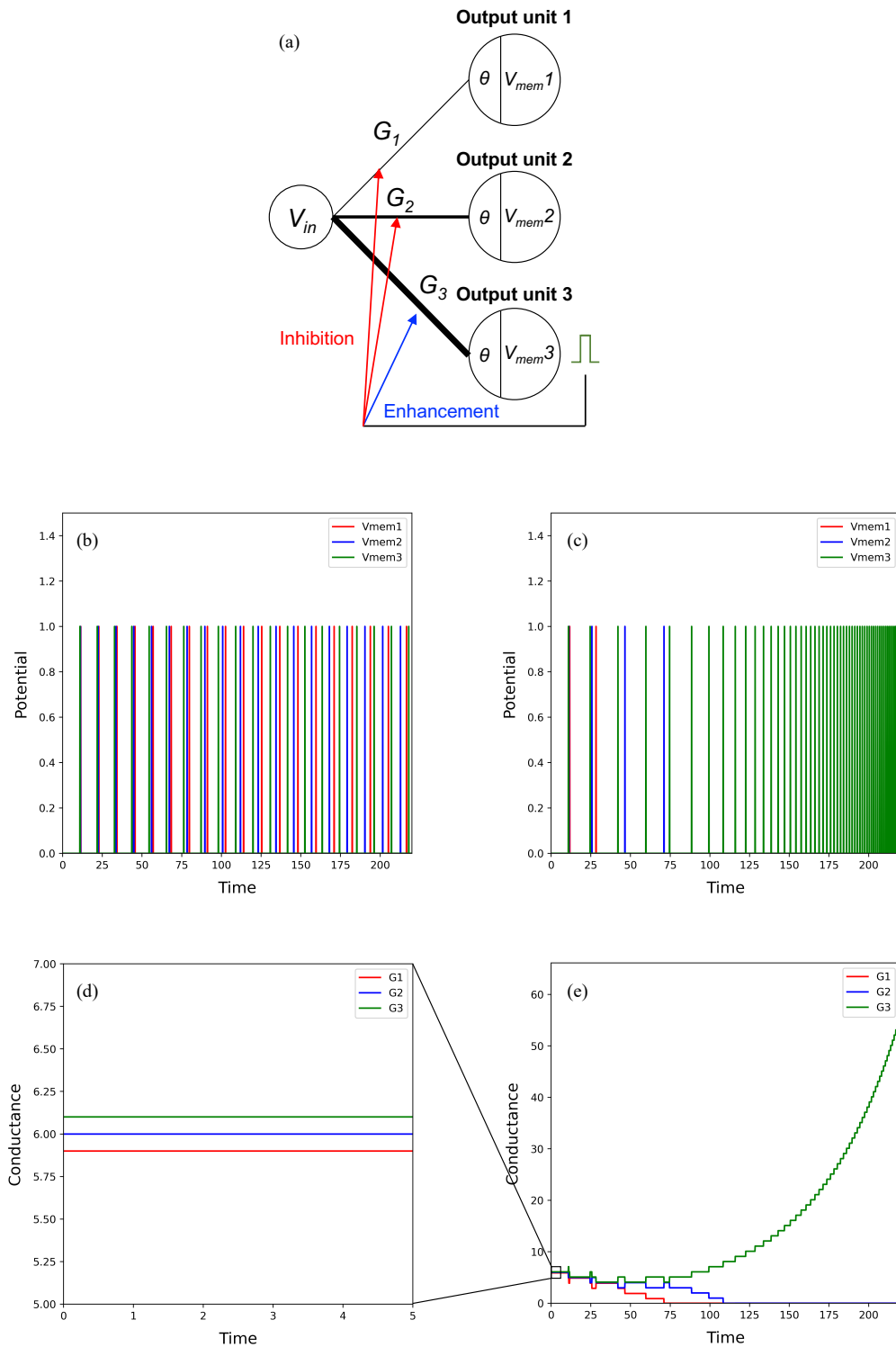


図 3.25 (a) 用いられた簡易スパイクニューラルネットワーク (SNN) モデル. (b) $G_1 = 5.9$, $G_2 = 6.0$, $G_3 = 6.1 \mu S$ の固定コンダクタンス重みを用いて得られたスパイク発火パターン. (c) 側抑制による動的コンダクタンス変化を考慮して得られたスパイク発火パターン. タイムステップが進行するにつれて G_3 の発火が支配的になる様子が観測された. (d,e) 側抑制により変化したコンダクタンスの推移. G_3 のみが強く増強され, G_1 , G_2 は抑制された.

Pre-Post 電極間へのみ重合電位差を印加してポリマー配線を形成した。その後、大きさ 2.5 V、幅 10 ms の電圧スパイクを Pre 電極へ 300 秒毎に計 9 回ほど印加した。その際、他電極は全て接地された。各電圧スパイク印加後の Pre-Post 電極間コンダクタンス推移を図 3.26b に示す。なお、コンダクタンスは各電圧スパイク印加直後の時刻を $t = 0$ s としてプロットされた。各スパイク印加直後はコンダクタンスが急激に減少し、その後徐々に増加してある平衡値へと収束していく様子が観察された。以降、 $t < 300$ s 及び $t = 300$ s におけるコンダクタンスをそれぞれ非平衡コンダクタンス、平衡コンダクタンスと呼ぶこととする。 $t = 1$ s における非平衡コンダクタンスのスパイク印加回数依存性を図 3.26c に示す。スパイク印加の合計回数 N が増えるにつれて、 $t = 1$ s における非平衡コンダクタンスが 2 次関数的に増加していることが分かる。これは、図 3.24b にて見られた G_1 の 2 次関数的なコンダクタンス増強に対応している。また、 $t = 300$ s における平衡コンダクタンスの N 依存性を示す図 3.26d は、 N が増えるにつれて平衡コンダクタンスが線形的に増強されていく様子を捉えており、その様子はシナプス効率の LTP に対応づけられる。このような LTP 的挙動は、図 3.24a で見られた連続スパイク印加後における G_1 の低抵抗化に対応している。

続いて、電圧スパイクの印加電極を Mod 電極に切り替え、同様のスパイク印加と Pre-Post 電極間コンダクタンス測定を行った。図 3.26b-d と同様に取得された、Pre-Post 電極間のコンダクタンス推移及び、 $t = 1, 300$ s におけるコンダクタンスの N 依存性を図 3.26e-g に示す。Pre 電極へのスパイク印加時と同様、各スパイク印加直後の急激なコンダクタンス減少が見られた一方で、 $t = 1$ s における非平衡コンダクタンスは線形的に増加する様子が観測された。これは、図 3.24b で見られた G_2, G_3 の線形的なコンダクタンス増強に対応している。また図 3.26d で見られた LTP とは対照的に、平衡コンダクタンスはシナプス長期抑圧 (Long-term depression: LTD) のごとく、 N が増えるにつれて抑制されていく様子が観察された。これは図 3.24a 中の G_2, G_3 で見られた、連続スパイク印加後における高抵抗化に対応している。

Post 電極との間にポリマー配線がなされた Pre 電極への電圧スパイク印加は、シナプスの LTP に対応づけられるような Pre-Post 電極間の平衡コンダクタンス増強をもたらした。これは、スパイク印加に伴いポリマー細線側壁上へ新たなポリマーが膜状に重合堆積し、細線径が局所的に増加したためであると考えられる。一方で Mod 電極へ正の電圧スパイクを印加すると、溶液中のカチオンが Pre-Post 電極間を配線するポリマー細線内へ注入されて PSS⁻ イオンを補償し、脱ドーピング反応が引き起こされてコンダクタンスが急激に減少した。注入されたカチオンがポリマー細線から自発的に脱

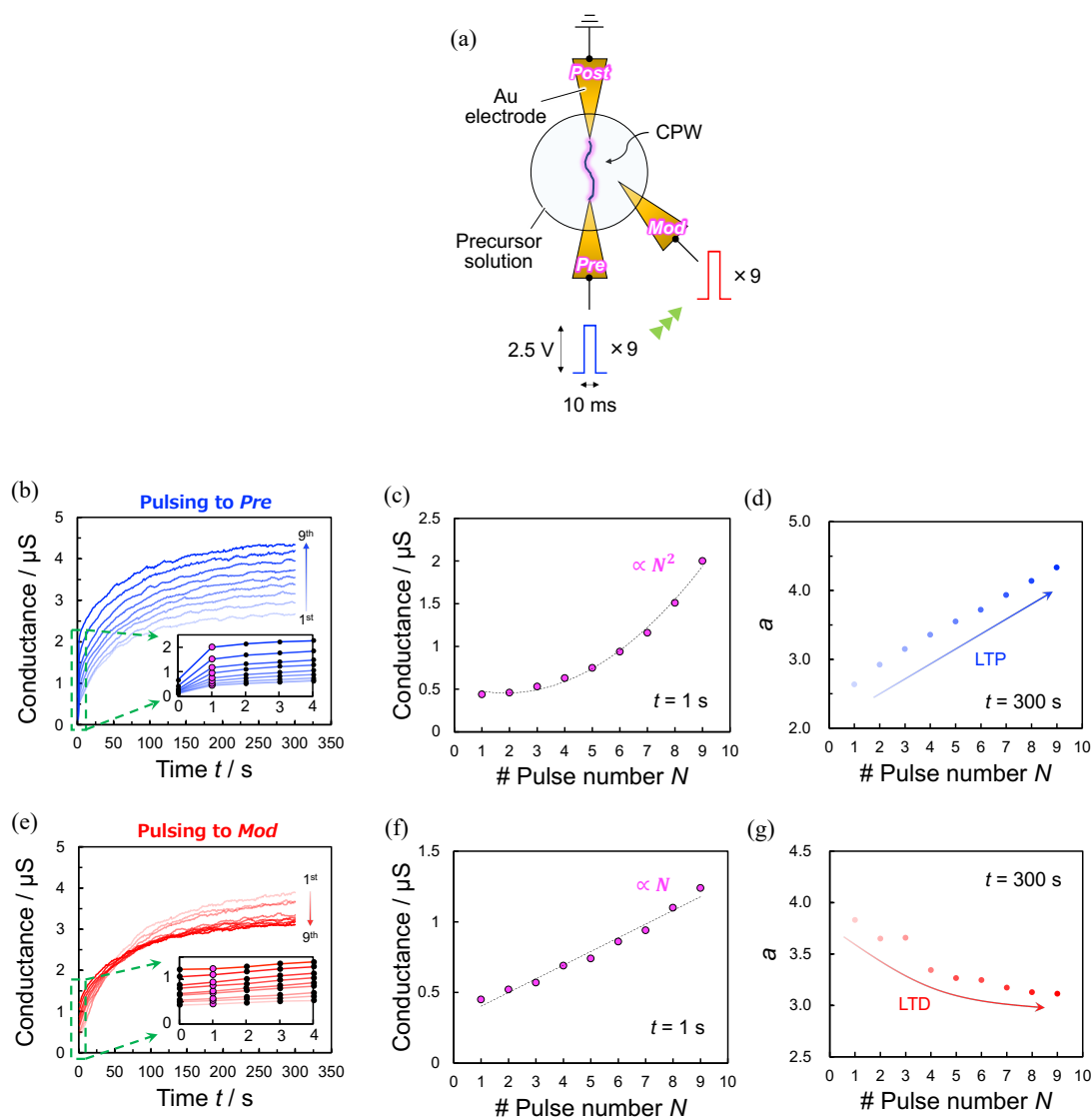


図 3.26 (a) 追加実験の概念図. プレニューロン (Pre) 電極とポストニューロン (Post) 電極が導電性ポリマー細線により液中配線された後, Pre または介在ニューロン (Mod) 電極へ電圧スパイクが連続的に印加され, Pre-Post 電極間コンダクタンス変化が記録された. (b, e) Post 及び Mod 電極へスパイク印加した直後から 300 秒後にかけてのコンダクタンス推移. 印加直後の時刻を $t = 0$ s としてプロットされており, スパイクは各電極へ 9 回ずつ印加された. (c, f) $t = 1$ s 及び (d, g) $t = 300$ s におけるコンダクタンスのスパイク印加回数 N 依存性.

離して電解質溶液中へ還ることで、ドーピング反応がゆっくりと進行してコンダクタンスは平衡値へと収束する様子が観測された。特筆すべき点は、連続スパイク印加により平衡コンダクタンスが減少し、LTDのような性質が現れた点である。これは、スパイク印加によって細線内へ注入されたカチオンが脱離し切らず、連続印加によってメモリのように蓄積された結果であると考えられる。同様の現象はPEDOT:PSSをチャンネルとして用いた有機電気化学トランジスタでも先行研究にて観測されており、このメモリ特性を利用することでpaired-pulse depressionと呼ばれるシナプス機構を模倣し得ることが示されている [21]。

3.4 結言

本章では第2章で行った導電性ポリマー細線の2電極間配線を拡張し、複数電極間への高次元配線及び脳神経ネットワーク様回路の構築を図った。まず、ガラス基板上へ形成された複数電極間へ細線を分岐的に配線する技術を確立した。抑制電圧の導入により、所望の電極間のみを選択的に配線し、電氣的に接続することで必要な回路ネットワークをボトムアップ的に形成することに成功した。また、ネットワーク形成後において電極へ電圧スパイクを印加することにより、シナプス可塑性のごとく電極間コンダクタンスが変化することが見出された。この変化はヘテロシナプス可塑性のように異なるコンダクタンス間での相関を伴っており、同一溶液内でのゲート効果に起因すると考えられる。スパイク印加がもたらすコンダクタンス変化を利用したSPやオートエンコーダの物理実装、物理リザーバーへの応用を検討し、脳型情報処理への応用可能性が拓かれた。

上部電極と下部電極を立体ポリマー配線することで実現される、3次元的な脳形態がより忠実に反映された新規脳型回路アーキテクチャを提案し、その工学的有用性を示した。提案アーキテクチャの実験的な実現に向け、ポリマー細線の立体配線に適した上部電極と下部電極を複数作製し、溶液空間内へ3次元的に配置されたそれらの電極間を分岐ポリマー配線することに初めて成功した。重合電圧の印加時間制御により配線本数を制御することで、複数コンダクタンスを独立に制御することに成功し、自由配線可能なシナプス素子や、電極間を3次元的に配線するための要素技術としての利用価値を見出した。また、電圧スパイク印加に伴う側抑制的なコンダクタンス変化が観測され、WTA型情報処理のような生理学的妥当性を備えた脳型情報処理アルゴリズムを本ネットワークが創発し得る可能性が示唆された。

参考文献

- [1] S. Azhari, D. Banerjee, T. Kotooka, Y. Usami, and H. Tanaka. Influence of junction resistance on spatiotemporal dynamics and reservoir computing performance arising from an swnt/pom 3d network formed via a scaffold template technique. *Nanoscale*, Vol. 15, pp. 8169–8180, 2023.
- [2] M. Akai-Kasaya, N. Hagiwara, W. Hikita, M. Okada, Y. Sugito, Y. Kuwahara, and T. Asai. Evolving conductive polymer neural networks on wetware. *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 59, No. 6, p. 060601, 2020.
- [3] L. Petrauskas, M. Cucchi, C. Grüner, F. Ellinger, K. Leo, C. Matthus, and H. Kleemann. Nonlinear behavior of dendritic polymer networks for reservoir computing. *Advanced Electronic Materials*, Vol. 8, No. 3, p. 2100330, 2022.
- [4] M. Cucchi, C. Gruener, L. Petrauskas, P. Steiner, H. Tseng, A. Fischer, B. Penkovsky, C. Matthus, P. Birkholz, H. Kleemann, and K. Leo. Reservoir computing with biocompatible organic electrochemical networks for brain-inspired biosignal classification. *Science Advances*, Vol. 7, No. 34, p. eabh0693, 2021.
- [5] G. E. Hinton and R. R. Salakhutdinov. Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science*, Vol. 313, No. 5786, pp. 504–507, 2006.
- [6] C.H. Bailey, M. Giustetto, Y.Y. Huang and R.D. Hawkins, and E.R. Kandel. Is heterosynaptic modulation essential for stabilizing hebbian plasticity and memory? *Nature Reviews Neuroscience*, Vol. 1, No. 1, p. 7847, 11–20.
- [7] Y. Yang, B. Chen, and W.D. Lu. Memristive physically evolving networks enabling the emulation of heterosynaptic plasticity. *Advanced Materials*, Vol. 27, No. 47, pp. 7720–7727, 2015.
- [8] S. Garreau, G. Louarn, J. P. Buisson, G. Froyer, and S. Lefrant. In situ spectroelectrochemical raman studies of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (pedt). *Macromolecules*, Vol. 32, No. 20, pp. 6807–6812, 1999.

- [9] A. Weissbach, L.M. Bongartz, M. Cucchi, H. Tseng, K. Leo, and H. Kleemann. Photopatternable solid electrolyte for integrable organic electrochemical transistors: operation and hysteresis. *J. Mater. Chem. C*, Vol. 10, pp. 2656–2662, 2022.
- [10] P. Achararit, I. Hida, T. Marukame, T. Asai, and Y. Hara-Azumi. Structural exploration of stochastic neural networks for severely-constrained 3d memristive devices. *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, Vol. 9, No. 4, pp. 466–478, 2018.
- [11] S.J. Pan and Q. Yang. A survey on transfer learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, Vol. 22, No. 10, pp. 1345–1359, 2010.
- [12] S. Chaunchaiyakul, T. Yano, P. Krukowski, and Y. Kuwahara. Effect of surface tension on self-termination in au tip fabrication for tip-enhanced raman spectroscopy. *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 55, No. 9, p. 098003, 2016.
- [13] S. Kaski and T. Kohonen. Winner-take-all networks for physiological models of competitive learning. *Neural Networks*, Vol. 7, No. 6, pp. 973–984, 1994.
- [14] G. Ciccone, M. Cucchi, Y. Gao, A. Kumar, L. M. Seifert, A. Weissbach, H. Tseng, H. Kleemann, F. Alibart, and K. Leo. Growth and design strategies of organic dendritic networks. *Discover Materials*, Vol. 2, No. 7, pp. 2–7, 2022.
- [15] J.J. Hopfield. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 79, No. 8, pp. 2554–2558, 1982.
- [16] H. Markram, J. Lübke, M. Frotscher, and B. Sakmann. Regulation of synaptic efficacy by coincidence of postsynaptic apss and epsps. *Science (New York, N.Y.)*, Vol. 275, pp. 213–5, 1997.
- [17] S. Song and L.F. Abbott. Cortical development and remapping through spike timing-dependent plasticity. *Neuron*, Vol. 32, No. 2, pp. 339–350, 2001.
- [18] Z. Wang, S. Joshi, S.E. Savel' ev, H. Jiang, R. Midya, P. Lin, M. Hu, N. Ge, J.P. Strachan, Z. Li, Q. Wu, M.D. Barnell, G. Li, H.L. Xin, R.S. Williams, Q. Xia, and J.J. Yang. Memristors with diffusive dynamics as synaptic emulators for neuromorphic computing. *Nature materials*, Vol. 16 1, pp. 101–108, 2017.

- [19] S.H. Jo, T. Chang, I. Ebong, B.B. Bhadviya, P. Mazumder, and W. Lu. Nanoscale memristor device as synapse in neuromorphic systems. *Nano Letters*, Vol. 10, No. 4, pp. 1297–1301, 2010.
- [20] R.M. Fitzsimonds, H. Song, and M. Poo. Propagation of activity-dependent synaptic depression in simple neural networks. *Nature*, Vol. 388, pp. 439–448, 1997.
- [21] T.N. Mangoma, S. Yamamoto, G.G. Malliaras, and R. Daly. Hybrid 3d/inkjet-printed organic neuromorphic transistors. *Advanced Materials Technologies*, Vol. 7, No. 2, p. 2000798, 2022.

第4章 自由エネルギー原理に基づく マテリアル知能の構成論

4.1 諸言

計算論的神経科学は近年大きな盛り上がりを見せており、これには Friston が提唱した自由エネルギー原理の目覚ましい発展による影響も大きい。我々の脳が行う知覚や注意、学習、行為、意思決定といった様々な脳機能から、シナプス可塑性やスパイク発火といった神経機構、生命の進化過程、更には自閉症やアルツハイマー病といった精神疾患まで、非常に多岐にわたる現象を「変分自由エネルギーの最小化」のみで統一的に説明可能な本原理は、認知科学や行動科学、精神科学といった諸学問を橋渡す強力な理論として大きな注目を集めている。

我々の脳が変分自由エネルギーを最小化するよう設計されているという考え方は、これからのマテリアル知能に明確な設計指針を与えている。従来の機械学習では学習のみを目的関数の最小化過程と捉えるが、計算論的には脳が行う推論と学習はどちらも変分自由エネルギーを最小化するためのパラメータ更新であるという点で本質的に等価であり、更新パラメータの違いとその変化の時定数、すなわち物理現象とその変化の時間スケールのみが異なる。これまで明確に区別されてきた推論や学習といった処理を、ある1つの状態量の最小化のみで説明できるよう設計することが、脳の本質を忠実に捉えたマテリアル知能を創り出す上で肝要であると考えられる。

そこで本章ではまず本研究の肝である自由エネルギー原理について概説したのち、変分自由エネルギーまたはこれに対応する1つの情報量の最小化のみを基本原理として脳の諸機能を再現可能なマテリアル知能の構成論を展開する。数値計算による実験では、変分自由エネルギーを最小化しながら知覚と学習を実行可能なモデルを勾配降下法から導出し、これをマテリアル知能としての実装に適した形で表現できないか検討した。

4.2 自由エネルギー原理に基づく脳の計算論

4.2.1 変分ベイズ脳仮説

我々は普段当たり前のように外界を認識しているが、実際のところ脳は外界の状態を直接知ることはできず、視覚や聴覚といった感覚信号をもとに推論することしかできない。脳にとって直接知り得ない外環境の隠れ状態 \mathbf{v} を、受け取った感覚信号 \mathbf{u} から推論する過程は、確率統計の分野におけるベイズ推論に対応する。我々の脳がベイズ推論をしているというベイズ脳仮説は、今日の脳神経科学や認知科学等に多大な影響を与えており、感じ方の個人差や錯視のメカニズム等をうまく説明できる。数学的には、我々の脳はある感覚信号 \mathbf{u} が得られた際、隠れ状態が \mathbf{v} である条件付き確率 $P(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ を計算していると捉えられ、これは一般的にベイズの定理を用いて式 (4.1) のように計算できる。

$$P(\mathbf{v}|\mathbf{u}) = \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{P(\mathbf{u})} = \frac{P(\mathbf{u}|\mathbf{v})P(\mathbf{v})}{P(\mathbf{u})} \quad (4.1)$$

すなわち、隠れ状態 \mathbf{v} から感覚信号が \mathbf{u} が得られる尤度確率 $P(\mathbf{u}|\mathbf{v})$ と、状態が \mathbf{v} である事前確率 $P(\mathbf{v})$ が既知であれば、事後分布 $P(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ を計算できる。尤度と事前確率の積である同時確率 $P(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ は生成モデルと呼ばれ、観測された感覚信号がどのような因果によって隠れ状態から生成されたかを記述する脳内の順方向モデルである。我々の脳内では発達と共に適切な順方向モデルが形成され、これをもとに逆推論を行うことで外界を認識していると捉えられる [1]。

ところが、式 (4.1) 右辺における分母 $P(\mathbf{u})$ を求めるためには、考え得る全ての \mathbf{v} について $P(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ を積分して周辺化を行う必要があり、一般的には膨大な計算量を要するため、脳内でこのベイズの定理を用いた計算を行っているとは考えにくい。そこで近似事後確率として認識分布 $Q(\mathbf{v})$ を導入し、これを真の事後確率分布 $P(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ へ近づくよう最適化することで、脳はベイズ推論を近似的に行なっているものとみなす (変分ベイズ推論)。認識分布 $Q(\mathbf{v})$ と真の事後確率分布 $P(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ の乖離度合いを表す尺度としてカルバック・ライブラー (Kullback–Leibler: KL) 情報量を導入すると、これは式 (4.2) のように展開できる。

$$D_{KL}[Q(\mathbf{v})|P(\mathbf{v}|\mathbf{u})] = \int Q(\mathbf{v}) \ln \frac{Q(\mathbf{v})}{P(\mathbf{u}, \mathbf{v})} d\mathbf{v} - (-\ln P(\mathbf{u})) \quad (4.2)$$

左辺は $Q(\mathbf{v})$ と $P(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ の間の KL 情報量であり、これら2つの分布が近づくほど小さな

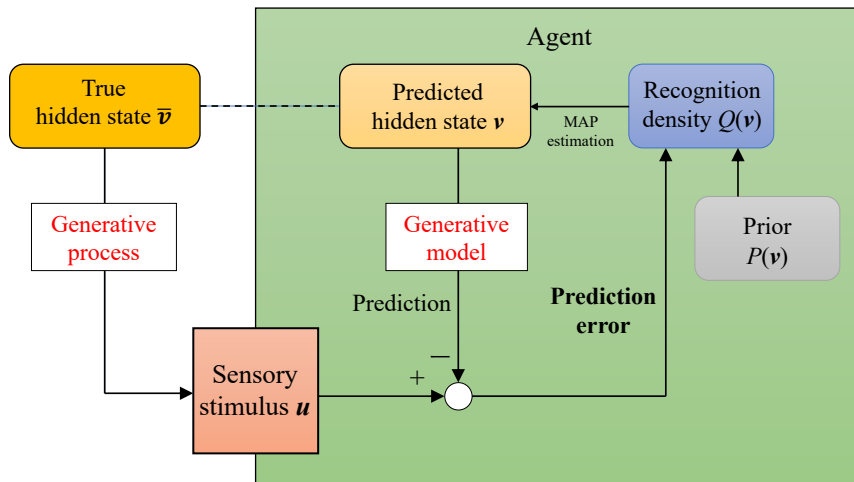


図 4.1 予測符号化の概念図. システムは感覚信号 u に基づいて外界にある真の隠れ状態 \bar{v} を逆推論することで知覚する. 信念 $Q(v)$ から予測信号が生成され, 感覚信号と予測信号との間の誤差 (予測誤差) が小さくなるよう繰り返し信念を更新することで知覚が実行される.

正の値を取る. 従って, 脳はこれを最小化する $Q(v)$ を求めることで事後分布を近似的に求めていると捉えられる. また, 右辺第 2 項は $Q(v)$ に依存しない正の定数であることから, 左辺を最小化するためには右辺第 1 項を最小化するような $Q(v)$ を求めれば良い. この右辺第 1 項を変分自由エネルギー (Variational free energy: VFE) と呼び, 脳の知覚推論過程は $Q(v)$ の最適化による VFE 最小化に帰着できる. このように, VFE の最小化を基本原理とする脳の計算理論が自由エネルギー原理 (Free-energy principle: FEP) であり, 以下に記すように知覚や学習, 行動といった多岐にわたる脳機能, 更には精神疾患までも本原理で説明できることから, 脳の大統一理論として近年注目を集めている [2].

4.2.2 予測符号化における知覚

脳が VFE 最小化を実現するための機構として, 予測符号化との繋がりが近年示唆されている [3]. 予測符号化の簡単な概念は図 4.1 のように表される. 本枠組みにおいて, 我々の脳は前項における認識分布 $Q(v)$ を「信念」として保有していると考えられる. 信念は隠れ状態に関する事後確率分布を表しており, これをもとに直接知り得ない真の隠れ状態 \bar{v} に対する推定 v が得られる. また予測符号化の枠組みでは, 各個体ごとに学習された生成モデルが内部に存在しており, これは推定された隠れ状態から予測信号を生成する関数として捉えられる. すなわち, 我々の脳は得られた感覚信号に対する予測信

号を、生成モデルを通じて信念から絶えず生成している予測器とみなせる。予測符号化理論では、我々の脳は感覚信号とこの予測信号との誤差 (予測誤差) が小さくなるよう信念を繰り返し更新し、隠れ状態に関する推定精度を高めることで知覚を実行していると考えられる。これらは神経発火活動の遷移を通じて行われていると考えられ、生理学的妥当性が示されつつある。例えば、単純な特徴を処理する低次の階層と、複雑な特徴や概念を処理する高次の階層との間で予測信号がトップダウン的に伝達され、予測誤差信号がボトムアップ的に伝達されていく様子が脳内で実際に観察されている [4].

予測符号化による信念の更新は、VFE が最小となるような認識分布 $Q(\mathbf{v})$ の最適化問題に帰着できる。これは、VFE が式 (4.3) のように展開できることから直観的に理解できる。

$$F = -\mathbb{E}_Q[\ln P(\mathbf{u}|\mathbf{v})] + D_{KL}[Q(\mathbf{v})|P(\mathbf{v})] \quad (4.3)$$

左辺は VFE であり、以降 VFE を記号 F で表すものとする。対数尤度の期待値をとって負数が乗じられた右辺第 1 項は損失関数であり、信念に相当する $Q(\mathbf{v})$ 及び内部モデルから生成された、感覚信号に対する予測信号の正確さを表す予測誤差項である。右辺第 2 項は正則化項に対応しており、 $Q(\mathbf{v})$ と事前分布 $P(\mathbf{v})$ の乖離度合い、すなわち $Q(\mathbf{v})$ がどれだけ更新されたかを表す情報利得に相当する。つまり VFE を最小化することは、事前分布 $P(\mathbf{v})$ との乖離を極力抑えながら、予測誤差が小さくなるよう認識分布 $Q(\mathbf{v})$ を最適化することに他ならない。

4.2.3 学習の計算論

学習は生理学的には、シナプス結合強度変化による脳神経ネットワーク内での信号伝達強度変化に対応づけられる。一方、計算論的にはこれは、生成モデルを特徴づける脳内パラメータ w の調節による対数尤度の最大化過程、すなわち得られた感覚信号 u に対する適応過程であり、以下のように書ける。

$$\mathbf{w}^* = \arg \max_w \log P(\mathbf{u}|\mathbf{w}) \quad (4.4)$$

これは、得られたデータ u を説明するのに尤もらしい最適パラメータ \mathbf{w}^* の推定と捉えられる (最尤推定)。対数尤度の最大化によるパラメータの学習はベイズ機械学習の分野でよく用いられ、例えば Expectation–Maximization (EM) アルゴリズムは対数尤度を最大化する手法として広く知られている [5]。我々の脳も同様に、得られた感覚信号 u

を最も正確に予測可能な生成モデル $P(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ の学習を、計算論的には対数尤度の最大化を通じて実現していると考えられる。実際、局所的教師なし学習の基本メカニズムとして知られているスパイクタイミング依存シナプス可塑性 (Spike-timing-dependent plasticity: STDP) が EM アルゴリズムを近似し、これを通じて脳が対数尤度の最大化を実現している可能性が示唆されている [6]。

対数尤度に負数を乗じたものは式 (4.2) 右辺第 2 項と等しく、これは VFE に下限を与えるサプライズと呼ばれる情報量である。従って、学習による対数尤度の最大化 (サプライズの最小化) もまた、VFE 最小化の枠組みで理解できる。このように、知覚だけでなく学習やその他様々な過程を VFE の最小化 1 つで統一的に説明できる点が FEP の強みである。

4.2.4 能動的推論

予測符号化における知覚の枠組みでは、我々生物は信念を繰り返し更新することで感覚信号に合致するような予測信号が生成され、予測誤差が減少する。一方、能動的推論の枠組みでは、予測信号に合致するような感覚信号を「行為」を通じて自ら能動的に取得しに行くことで予測誤差の減少を図る。例えば、我々は普段眼球を高速運動 (サッカード) させて視線を動かし、視覚情報の曖昧さを低下させて正しい認識を得ようと無意識のうちに行っているが、これはサッカードという行為を通じて受け取る感覚信号を変化させ、予測誤差を減少させる過程であるとみなせる [7]。他の例では、我々は目の前にある物体が何であるのかを視認する際、見る角度を変えたり手に取って見やすいよう物体を動かしたりすることで視認精度を高めようとする。このように、我々生物は曖昧な感覚信号に対して多大なエネルギーと時間を伴う学習ばかりを行って適応するのではなく、身体的行為を通じてより明瞭な感覚信号を能動的に受け取り、極力計算コストのかからない効率的な推論処理を行っているのである (能動的推論)。AI による身体性認知の必要性は度々議論の的になるが、工学的な観点においてはソフトウェア実装された従来の推論と学習のみに頼るのではなく、ロボットハンドのような身体に対応するハードウェアを用いた能動的推論が今後、エネルギー効率等の面で重要性を帯びてくると考えられる。

能動的推論の枠組みにおいて、脳は将来得られる VFE の期待値 (期待自由エネルギー) が最小となるような行為を選択していると考えられる [8]。知覚や学習とともに行為や意思決定をも統一的に説明可能な理論として FEP は注目を集めている。

4.3 自由エネルギー原理の MATERIAL 知能への適用

4.3.1 提案アプローチ

前述したように、知覚や学習、行為といった様々な脳機能は VFE 最小化のみで統一的に説明できる。そこで本研究では、VFE の最小化という単一の基本原理のみでこれらの機能を表現可能な、FEP に基づく MATERIAL 知能を提案する。単一の動作原理のみで諸脳機能を実現できるため、ハードウェア構成を単純化できるといった効果が期待される。具体的な構成論として、以下2つのアプローチを新たに提唱する。

1. 数学的に導出された VFE 最小化の等価ダイナミクスをハードウェアで表現する。
2. エネルギー最小化に伴う物理系の状態遷移を用いて、VFE 最小化の過程を模倣する。

本研究では主に 1. のアプローチを用いて MATERIAL 知能の構成論を展開する。ここではまず、VFE を最小化するためのダイナミクスを記述する連立微分方程式を勾配降下法により導出する。得られた微分方程式を物理演算的に解くアプローチとして今回、アナログ等価回路による求解 (4.4 節) 及び、予測符号化ネットワークによる求解 (4.5 節) を検討した。

2. は、VFE の最小化に伴う脳の状態遷移を、ギブズの自由エネルギーや静電エネルギーといった物理量の最小化に伴う物理系の状態遷移で模倣するアプローチである。この方式では、センサ等を介して収集された感覚信号に基づいて物理系の全エネルギーが決定され、系の状態がそのエネルギーを最小化するよう自発的に遷移する過程を知覚や学習とみなす。また、物理系が持つエネルギーの大きさが VFE にある程度対応していなければならない。これらの条件を満たす物理系の探索は大きな課題であるが、材料科学や電子工学をはじめとする幅広い分野への展開が大いに期待できる。例えば、回路全体の静電エネルギーが最小となるよう単電子トンネリングが次々に進行していくような単電子回路 [9] は、有力な物理系の 1 つである。トンネル接合の端子間電位差を予測誤差や情報利得として扱うことで回路全体の静電エネルギーを VFE に対応づけ、単電子トンネリングを通じた回路の状態遷移により VFE の最小化を達成できる。また、VFE を熱力学の枠組みで捉え直し、物理系との接点を見出す試みもなされつつある [1]。理論科学から物理工学に至る幅広い分野の融合により、本アプローチによる MATERIAL 知能の実現が今後より一層期待される。

4.3.2 勾配降下法による VFE 最小化過程の定式化

VFE を最小化するためのダイナミクスを記述する微分方程式を勾配降下法から導出し、これを表現可能な予測符号化ネットワークグラフを構築した。まず、式 (4.3) で与えられる VFE を、先行研究 [10] に基づいて扱いやすい単純な形へ近似した。今回、認識分布 $Q(\mathbf{v})$ に最大値を与えるような確率変数 \mathbf{v} を脳が推定値として用いている (最大事後確率推定を行なっている) という前提のもと、 $Q(\mathbf{v}) \equiv \delta(\mathbf{v} - \boldsymbol{\phi})$ と近似した。ここで $\delta(\mathbf{v} - \boldsymbol{\phi})$ はディラックのデルタ関数であり、 $\boldsymbol{\phi}$ は推定された隠れ状態に相当する。また、尤度及び事前分布を式 (4.5)、式 (4.6) のように多変量正規分布でそれぞれ近似した (ラプラス近似)。

$$P(\mathbf{u}|\mathbf{v}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Sigma_u} \exp\left(-\frac{(\mathbf{u} - g(\mathbf{v}))^2}{2\Sigma_u}\right) \quad (4.5)$$

$$P(\mathbf{v}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Sigma_p} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{v}_p)^2}{2\Sigma_p}\right) \quad (4.6)$$

式 (4.5) は、隠れ状態 \mathbf{v} が観測モデル $g(\mathbf{v})$ によって変換されたのち、分散 Σ_u の観測ノイズが加わることで感覚信号 \mathbf{u} が生成されることが経験的に既知であることを表している。同様に、式 (4.6) は隠れ状態 \mathbf{v} が平均 \mathbf{v}_p 、分散 Σ_p に従うことを、脳が事前知識として有していることを示している。分散 Σ_p 、 Σ_u は精度行列と呼ばれ、「注意」に関して論じる際の重要なパラメータである [11] が、本研究では以降、単純化のためこれらを単位行列でおいた。ここで、 $\mathbf{u} - g(\boldsymbol{\phi})$ 、 $\mathbf{v} - \mathbf{v}_p$ はそれぞれ予測誤差と情報利得に関する情報を有していることから、これらを誤差変数 $\boldsymbol{\varepsilon}_u$ 、 $\boldsymbol{\varepsilon}_p$ とおいた。

$$\boldsymbol{\varepsilon}_u \equiv \mathbf{u} - g(\boldsymbol{\phi}), \boldsymbol{\varepsilon}_p \equiv \boldsymbol{\phi} - \mathbf{v}_p \quad (4.7)$$

以上の式を式 (4.3) へ代入すると、デルタ関数の性質によって積分が消え、VFE は以下のように単純化された。

$$F \approx \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon}_u^T \boldsymbol{\varepsilon}_u + \boldsymbol{\varepsilon}_p^T \boldsymbol{\varepsilon}_p) + C \quad (4.8)$$

第1項は予測誤差、第2項は情報利得をそれぞれ表しており、その他の定数項は C としてまとめられている。

式 (4.8) で与えられる VFE を最小化するような知覚パラメータ $\boldsymbol{\phi}$ 、 $\boldsymbol{\varepsilon}_u$ 、 $\boldsymbol{\varepsilon}_p$ の更新式を勾配降下法から導出した。パラメータ \mathbf{w} で規定される観測モデルを $g(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{w})$ と置き、勾配降下法から式 (4.9) ~ 式 (4.11) が得られた。ここで、 η は知覚パラメータの更新率

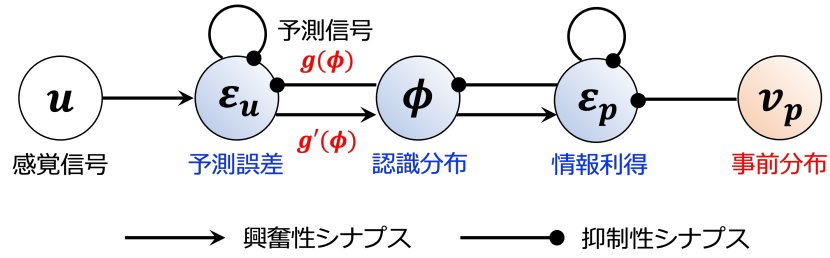


図 4.2 勾配降下法により導出された予測符号化ネットワークグラフ。

であり、適宜設定されるハイパーパラメータである。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\eta \frac{\partial F}{\partial \phi} = \eta \{ \epsilon_u \frac{\partial}{\partial \phi} g(\phi, \mathbf{w}) - \epsilon_p \} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial \epsilon_p}{\partial t} = -\eta \frac{\partial F}{\partial \epsilon_p} = \eta (\phi - v_p - \epsilon_p) \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \epsilon_u}{\partial t} = -\eta \frac{\partial F}{\partial \epsilon_u} = \eta \{ u - g(\phi, \mathbf{w}) - \epsilon_u \} \quad (4.11)$$

式 (4.10)、式 (4.11) をもとに各変数間の関係をグラフ化したものを図 4.2 に示す。認識分布を表すノードが、予測誤差と情報利得を表すノードから興奮性または抑制性の信号を受け取ることで状態を逐次的に更新し、知覚が実行される。すなわち、知覚過程における認識分布や予測誤差、情報利得の更新は、これらを表現するニューロンの発火活動遷移という形で表現できる。また、式 (4.9) で表される知覚時における認識分布の更新式は予測誤差の逆伝播を示しており、機械学習における誤差逆伝播 (Backpropagation: BP) 法と類似した形式をとっていることから、FEP の枠組みにおける知覚と学習の本質的な等価性が伺える。

最終的に得られる知覚パラメータの定常状態は、固定された事前分布パラメータ v_p と、予測信号を生成する観測モデル $g(\phi, \mathbf{w})$ を規定するパラメータ \mathbf{w} によって決まるが、これらは脳の発達過程において後天的に調節される学習パラメータであり、知覚よりも大きなタイムスケールで変化する。4.2.3 節で説明されたように、FEP の枠組みではこれら学習パラメータの更新も VFE の最小化により説明できる。知覚の時と同様に、勾配降下法による VFE の最小化から導出された学習パラメータ v_p 、 \mathbf{w} の更新式を以下に示す。ここで、ハイパーパラメータとして与えられる学習率を γ と置いた。

$$\frac{\partial v_p}{\partial \tau} = -\gamma \frac{\partial F}{\partial v_p} = \gamma \epsilon_p \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \tau} = -\gamma \frac{\partial F}{\partial \mathbf{w}} = \gamma \epsilon_u \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} g(\phi, \mathbf{w}) \quad (4.13)$$

4.4 アナログ等価回路による線形予測器の実装

本節では、前節にて導出された知覚ダイナミクスを表現可能なアナログ等価電子回路を提案し、回路シミュレーションによる実装を行った。今回、知覚パラメータ ϕ , ε_u , ε_p を電圧値で表現できないか検討した。各パラメータは知覚過程における更新式 (4.9) ~ 式 (4.11) の両辺を時間積分することで得られる。従って、各パラメータは積分器の出力電圧として表現することができ、式 (4.9) ~ 式 (4.11) の右辺は積分器へ入力される電流値と捉えることができる。今回、1次元の感覚信号 u から1次元の認識分布パラメータ ϕ への符号化を行う最も単純な予測符号化ネットワークのアナログ等価回路を設計した (図 4.3)。また、ここでは観測モデルを単純な線形関数 $g(\phi, w) = w\phi$ で定義している。本回路のダイナミクスは以下のように記述される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{CR_3}(w\varepsilon_u - \varepsilon_p) - \frac{\phi}{CR_2} \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t} = \frac{1}{CR_3}(\phi - v_p - \varepsilon_p) - \frac{\varepsilon_p}{CR_2} \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_u}{\partial t} = \frac{1}{CR_3}(u - w\phi - \varepsilon_u) - \frac{\varepsilon_u}{CR_2} \quad (4.16)$$

ここで、 C は積分器内コンデンサの静電容量、 R_1 はゲイン1倍の反転増幅回路内抵抗器の抵抗値、 R_2 は積分器の発振を抑えるための帰還抵抗、 R_3 は各積分器へ入力される電流値を規定する抵抗器の抵抗値である。また、学習パラメータ w は R_3/w の抵抗値を持つ抵抗器で表現されている。 $R_3 \ll R_2$ とすることで、式 (4.14) ~ 式 (4.16) は右辺第2項が無視でき、式 (4.9) ~ 式 (4.11) とほぼ等価となる。表 4.1 に示す条件下にて、ngspice 上で回路シミュレーションを行った結果を図 4.4a に示す。今回、学習パラメータである v_p , w は学習済みのものとして与え、知覚過程における回路の動作のみをシミュレートした。また、 ϕ の初期値として v_p を与えた。3つの知覚パラメータはいずれも知覚開始初期段階において振動し、 $10 \mu\text{s}$ 程度経過したところである定常解へと収束した。 ϕ は 0.8 付近へ収束し、これは受け取った感覚信号 $u = 4$ と観測モデル $u = w\phi = 5\phi$ から逆推論した結果であると捉えられる。また、図 4.4(b) は VFE の解析値を示しており、 $\phi = 0.8$ が VFE に最小値を与えていることから、提案回路が VFE を最小化しながら正しく逆推論できていることが分かる。その他のパラメータは $\varepsilon_u \rightarrow 0$, $\varepsilon_p \rightarrow 0.2$ へとそれぞれ収束し、これは感覚信号 $u = 4$ と予測信号 $w\phi$ の誤差がほぼ 0 となり、また事前分布 v_p と逆推論結果 ϕ の差として情報利得 0.2 が得られたことを表している。

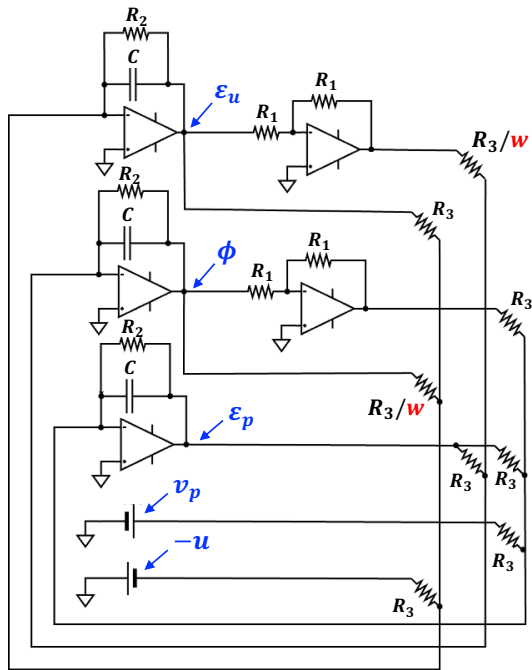


表 4.1 回路シミュレーション条件.

V_{dd}	5 V	C	1 nF
u	4 V	R_1	10 k Ω
v_p	1 V	R_2	10 M Ω
w	5	R_3	1 M Ω

図 4.3 変分自由エネルギー (VFE) を最小化しながら知覚を実行可能なアナログ回路.

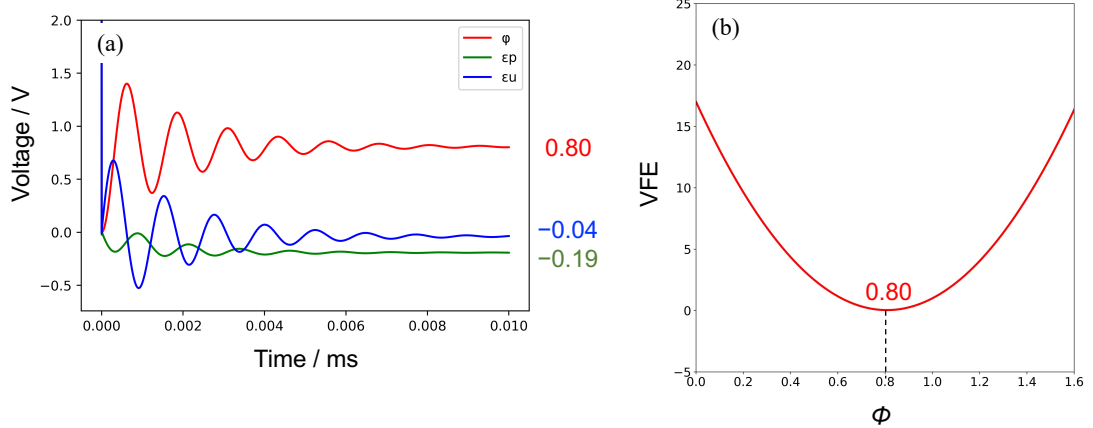


図 4.4 (a) 回路シミュレーション結果. (b) 変分自由エネルギー (VFE) の解析値.

4.5 自由エネルギー原理に基づく予測符号化ネットワークとその応用

4.5.1 順伝播型階層的予測符号化ネットワーク

勾配降下法から導出された前節の予測符号化ネットワークを多次元かつ階層的なモデルへと拡張し、これを実践的タスクへと応用した。類似研究として Millidge は、階層的予測符号化ネットワークを FEP に基づき教師なし学習させることで、感覚信号として入力された画像データを予測再構成した例を過去に報告している [12]。さらに彼らはこれを教師あり学習へと拡張し、画像データの分類タスクへと応用している [13]。本研究でまず用いる予測符号化ネットワークのグラフ構造は概ね先行研究と一致しており、図 4.5 のように表現される。本ネットワークは L 個の層で構成されており、図 4.5 は $L = 2$ の場合の例を示している。認識分布を表現する第 l 層のノード $x_i^{(l)}$ ($l = 1, 2, \dots, L$) は隠れ状態を符号化している。感覚信号として $\mathbf{x}^{(0)}$ が入力されると、各層では認識分布ベクトル $\mathbf{x}^{(l)}$ から重み行列 $\mathbf{W}^{(l)}$ を通じて予測信号ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(l-1)}$ が生成される。予測信号 $\boldsymbol{\mu}^{(l-1)}$ は以下の式に従って生成される。

$$\boldsymbol{\mu}^{(l-1)} = \mathbf{W}^{(l)} f(\mathbf{x}^{(l)}) \quad (4.17)$$

ここで、関数 $f(\cdot)$ はノードの持つ活性化関数であり、活性化関数を通じて非線形変換された認識分布ベクトルが重み付けされて低次階層の予測信号が生成される。このように、予測信号は高次から低次の層へとトップダウン的に伝達される。また、本ネットワークにおける VFE は以下のように定義される。

$$F \equiv \frac{1}{2} \left(\sum_{l=0}^L \|\boldsymbol{\varepsilon}^{(l)}\|^2 \right) = \frac{1}{2} \left(\sum_{l=0}^{L-1} \|\mathbf{x}^{(l)} - \boldsymbol{\mu}^{(l)}\|^2 + \|\mathbf{x}^{(L)} - \mathbf{v}_p\|^2 \right) \quad (4.18)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}^{(l)}$ は第 l 層における認識分布 $\mathbf{x}^{(l)}$ と、高次の階層から生成された予測信号 $\boldsymbol{\mu}^{(l)}$ との間の誤差であり、これを第 l 層における予測誤差 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(l)} \equiv \mathbf{x}^{(l)} - \boldsymbol{\mu}^{(l)}$ と定義する。すなわち、VFE は各層で求められた予測誤差の二乗総和であると見なすことができる。また、最終層 ($l = L$) における誤差は、学習を通じて最適化される事前分布ベクトル \mathbf{v}_p と認識分布 $\mathbf{x}^{(L)}$ との差によって求められ、これは前節における情報利得に相当する。生理学的には、これらの予測誤差は誤差ユニットへ入力される興奮性入力と抑制性入力によって脳内で計算されていると考えられる [14]。この VFE の定義は、大域的な予測誤差である VFE の最小化が各階層での局所的な予測誤差の最小化によって達成されることを

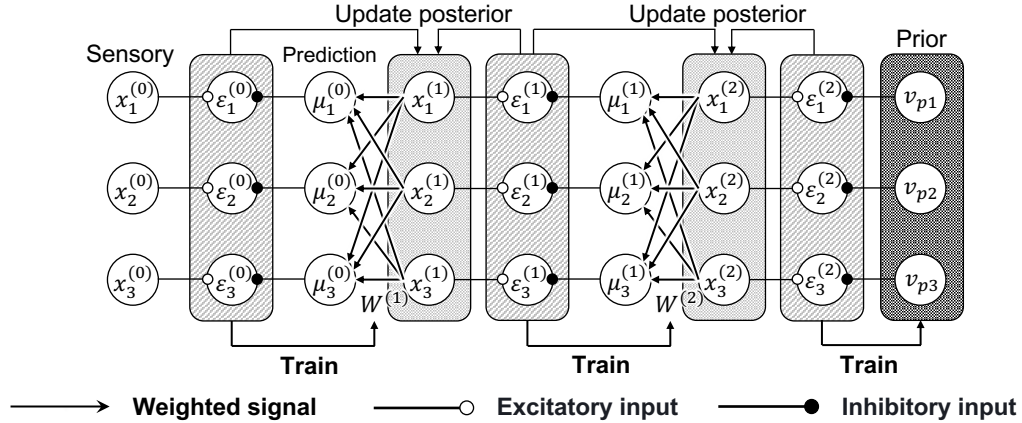


図 4.5 多次元化された順伝播型階層的予測符号化ネットワーク。

表しており，従来の機械学習で用いられるような多層にわたる BP を必要とすることなく局所的なパラメータ更新のみで VFE を最小化できる．STDP に代表されるように，実際の脳が局所的な形質変化のみで知覚及び学習を行っていることを踏まえると，式 (4.18) は生理学的にも妥当な VFE の表現であるといえる．

知覚過程における各階層の認識分布の更新式は，勾配降下法により以下のように導出される．

$$\frac{d\mathbf{x}^{(l)}}{dt} = -\eta \frac{dF}{d\mathbf{x}^{(l)}} = \eta \{f'(\mathbf{x}^{(l)}) \odot \mathbf{W}^{(l)T} \boldsymbol{\varepsilon}^{(l-1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(l)}\} \quad (4.19)$$

ここで， η は 4.3 節と同様の知覚過程におけるパラメータ更新率であり，脳内における神経発火活動の遷移速度に対応するハイパーパラメータである．式 (4.19) は内部重みの転置行列を用いて各階層内で予測誤差を逆伝播し，認識分布を更新するような BP 法の形式をとっている．

また，学習過程における重み及び事前分布の更新式も同様に以下の通り導出される．ここで， γ は 4.3 節と同様の学習過程におけるパラメータ更新率であり，脳内におけるシナプス結合強度の変化速度に対応するハイパーパラメータである．

$$\frac{d\mathbf{W}^{(l)}}{dt} = -\gamma \frac{dF}{d\mathbf{W}^{(l)}} = \gamma \{\boldsymbol{\varepsilon}^{(l-1)} f(\mathbf{x}^{(l)T})\} \quad (4.20)$$

$$\frac{dv_p}{dt} = -\gamma \frac{dF}{dv_p} = \gamma \boldsymbol{\varepsilon}^{(L)} \quad (4.21)$$

式 (4.20) はプレニューロンとポストニューロン間のシナプス結合強度がヘブ則に基づいて更新されることに対応している．

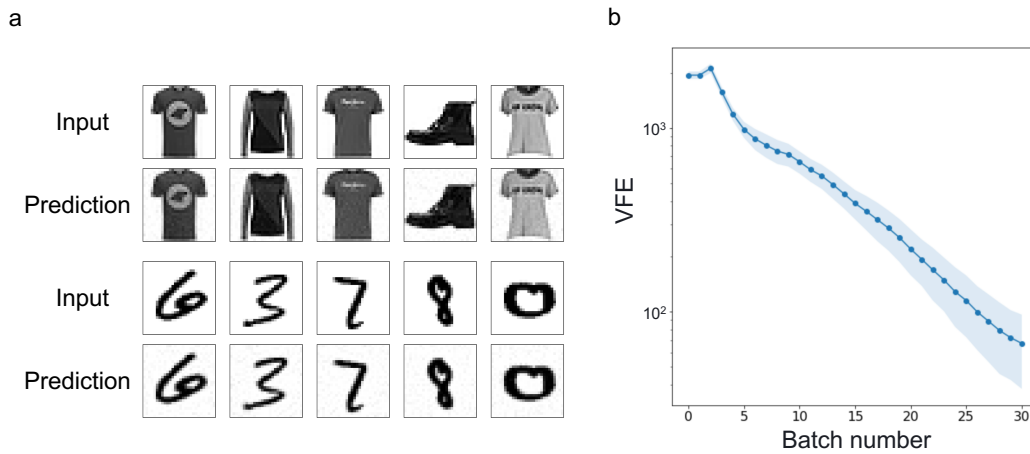


図 4.6 (a) 入力画像 (FashionMNIST, MNIST) 及び、予測符号化ネットワークにより出力された予測画像の例. (b) 1 エポック目における VFE の推移. 青色の実線はバッチあたりの平均値を示しており、水色の領域は標準偏差を表している.

本研究では、先行研究にて提案された incremental predictive coding (iPC) に基づく知覚及び学習手法を採用した [13]. iPC では知覚と学習が 1 エポック中で T 回交互に繰り返されることで、VFE が次第に減少していく. また、本研究では GPU による計算効率化のためバッチ処理を導入し、全ての実験はバッチサイズ 256、エポック数 10 の条件下で行われた.

構築した予測符号化ネットワーク ($784 \times 1,024 \times 1,024 \times 1,024 \times 10$) による予測の例として、入力画像の再構成を試みた際の結果を図 4.6 に示す. 本タスクでは、感覚入力 $\mathbf{x}^{(0)}$ として画像データがネットワークへ入力され、予測信号 $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$ として再構成画像がネットワークから出力された. 図 4.6a は入力された 28×28 の FashionMNIST, MNIST 画像データ及び、予測符号化ネットワークにより出力された入力に対する再構成画像である. 各データセットはそれぞれ 60,000 枚の学習用画像データと 10,000 枚のテスト用画像データから構成されており、 $\eta = 0.1, \gamma = 0.01, T = 30$ の条件下で iPC による知覚及び学習が実行された. 図 4.6a より、構築された予測符号化ネットワークが感覚信号を概ね正確に予測出来ていることが分かる. また、図 4.6b は 1 エポック目における VFE の平均値及び標準偏差の推移を示しており、バッチ処理が繰り返される度に VFE が減少する様子が観察された. このことは、予測符号化ネットワークが知覚と学習を交互に繰り返しながら VFE を最小化することで、予測信号を正しく生成できるようになることを示している.

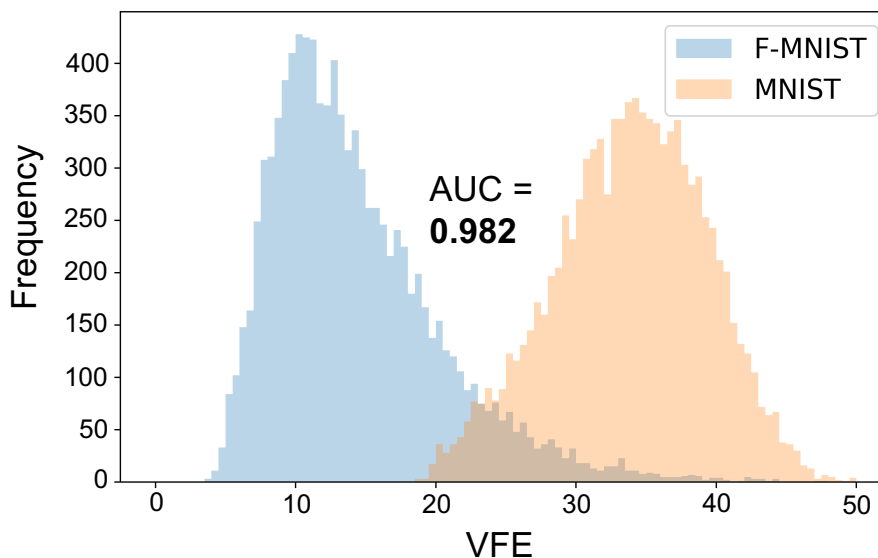


図 4.7 学習済みデータ (FashionMNIST) と訓練外データ (MNIST) を予測符号化ネットワークへ入力して予測させた際に得られた VFE の分布.

4.5.2 訓練外データ検出への応用

訓練外データの検出は近年の AI における課題の 1 つである。従来の AI は入力された未学習のデータを、学習した範囲内の知識で処理してしまうため、誤った判断を下してしまう例が報告されている [15]。すなわち、未知の入力に対しても「知っている振り」をして何らかの判断を下してしまうため、様々な危険性をはらんでいる。自動運転を例にとると、カメラによる撮影画像が汚れや降雪等の影響によって不鮮明になった結果、道の状況を正しく把握できていないのにも関わらず「直進」といった誤った判断を下す可能性がある。このような危険を回避するために必要とされるのが、AI が行う判断にどの程度の不確実性が含まれているのかを評価することである。AI に対する不確実性を評価する手法は数多く提案されており、ANN が出力するクラス確率の最大値で評価する手法などが提案されている [16]。

VFE が予測の不確実性を表現しているという観点から、本研究では予測符号化ネットワークによる画像再構成タスクを訓練外データ検出に応用できないか試みた。これは、予測符号化ネットワークが学習済みデータの予測に対して小さな VFE を示し、訓練外データの予測に対して大きな VFE を示すという傾向を利用し、予測の結果得られた VFE を閾値処理にかけることで訓練外データを検出できるという仮説に基づくものである。今回、学習済みデータとして FashionMNIST を、訓練外データとして MNIST

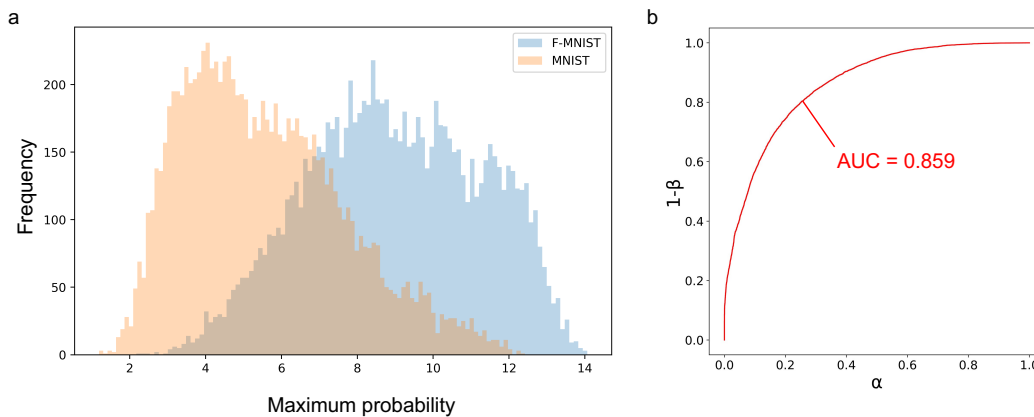


図 4.8 (a) 学習済みデータと訓練外データを LeNet-5 へ入力した際に得られた最大出力尤度の分布. (b) 得られた ROC 曲線とその AUC (AUROC).

データセットを用いた. 各データセットについてそれぞれ 10,000 枚のテスト用画像を学習済みネットワークへ入力し, 予測の結果得られた VFE の分布を図 4.7 に示す. 学習済みデータと訓練外データの間で VFE の分布に明瞭な違いが確認され, VFE が訓練外データの検出指標として有効であることが示唆された. 今回, 訓練外データの検出性能を表す指標として, Receiver operating characteristic (ROC) 曲線及びその曲線下の面積 (Area under the curve: AUC) を導入した [17]. ROC 曲線は弁別性能を測る際にしばしば用いられ, 弁別閾値を細かく変動させた際の偽陽性率 α を横軸に, 真陽性率 $1 - \beta$ を縦軸にとってプロットすることで得られる. また, AUC は弁別性能を定量化することができ, これが 1 に近いほど訓練外データの検出性能が高いことを示している. 例えば, 図 4.8a は典型的な畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional neural network: CNN) として知られる LeNet-5 [18] を FashionMNIST データセットで学習させ, その後学習済みモデルへテスト用 FashionMNIST または MNIST 画像を入力した際の最大クラス確率の分布であるが, このヒストグラムから得られる ROC 曲線は図 4.8b のように表され, その AUC は 0.859 と算出される. 同様に, 図 4.7 の VFE 分布からは, ROC 曲線の AUC (AUROC) は 0.982 と算出される. この 1 に近い AUROC は非常に高い訓練外データの検出性能を示しており, CNN の最大クラス確率を指標として用いた古典的な手法よりも正確に訓練外データを検出できることが示唆された.

次に, ハイパーパラメータ η, γ の値が検出性能に及ぼす影響を調査した. 図 4.9a に AUROC のハイパーパラメータ依存性を示す. η と γ を 0.0001 ~ 0.1 の範囲で変動させながら AUROC を取得した結果, $\eta = 0.1$ の時に 1 付近の値を示した. 一方, η をより

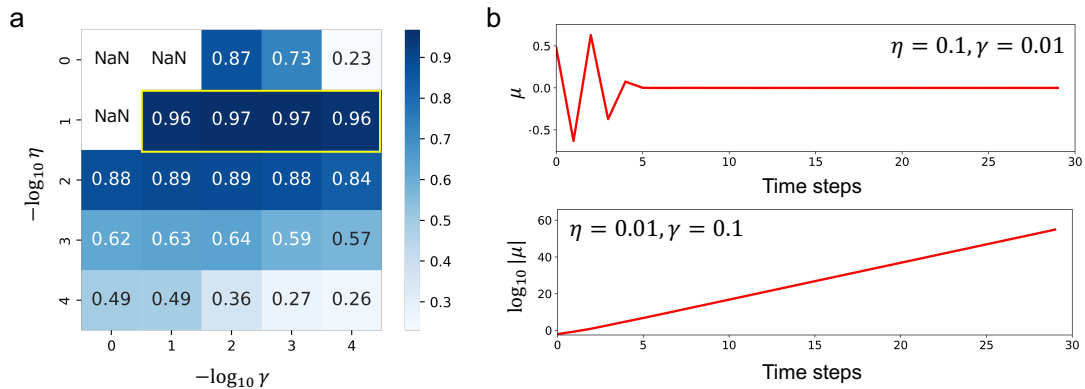


図 4.9 (a) AUROC のハイパーパラメータ依存性. (b) $\eta = 0.1, \gamma = 0.01$ または $\eta = 0.01, \gamma = 0.1$ の条件下で予測を実行した際の、予測信号の推移例.

小さな値に設定すると検出性能は大きく低下した. また, γ の値に対する AUROC の変化はそれほど見られなかった. 加えて, η と γ をともに大きな値へ設定すると, 計算が発散して not a number (NaN) のエラーが生じた. 以上の結果を踏まえ, 本研究で用いるハイパーパラメータの値は全て $\eta = 0.1$ に固定し, γ の値はグリッドサーチを通じて得られた最良のものを用いた.

これらのハイパーパラメータ η, γ の大小関係は, 予測を正しく実行する上で重要である. 例として, $\eta = 0.1, \gamma = 0.01$ または $\eta = 0.01, \gamma = 0.1$ へ設定した際の予測信号の推移例を図 4.9b にそれぞれ示す. $\eta > \gamma$ の場合, 予測信号は更新タイムステップが進むにつれてある値へと収束する傾向が得られたのに対し, $\eta < \gamma$ の場合は予測信号の発散が多く見られた. これは $\eta < \gamma$ の場合, 単位ステップあたりの知覚パラメータの更新量に比べて学習パラメータの更新量が大きくなり, 認識分布が収束しないことに起因する. このことは, 脳の神経発火活動変化に比べてシナプス結合強度変化の時定数が大きく, 長期にわたってゆっくりと変化していくことに対応している.

続いて, モデルに使用する活性化関数や層数といった条件がどの程度訓練外データの検出性能に影響を及ぼし得るのか調査した. 図 4.10a に, 1 層のネットワーク (784×10) へ異なる活性化関数 (ReLU 関数, tanh 関数, シグモイド関数) を適用してそれぞれ取得した ROC 曲線及びその AUC を示す. シグモイド関数や tanh 関数といった強い非線形性を有する活性化関数に対しては 0.95 以上の比較的高い AUC が得られたのに対し, 昨今の深層学習で用いられている ReLU 関数に対しては 0.9 を下回り, 比較的低い AUC を示した. ReLU 関数は入力が正の時にその値をそのまま返し, 負の時に 0 を出力する非常に単純な関数であり, かつその微分形も単純なステップ関数で記述できること

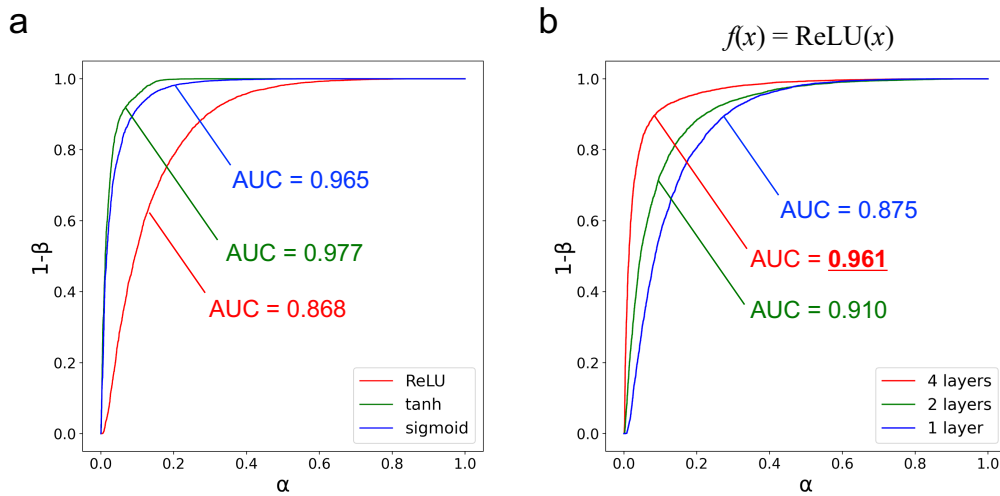


図 4.10 (a) ROC 曲線の活性化関数依存性. 1 層の予測符号化ネットワーク (784×10) に 3 種類の活性化関数 (ReLU 関数, tanh 関数, シグモイド関数) が適用された. (b) ROC 曲線の層数依存性. 活性化関数として ReLU 関数が適用された.

から, ハードウェア実装に比較的適した活性化関数である. また生理学的には, ReLU 関数はニューロンへの入力電流と発火頻度との関係に対応していることから, ReLU 関数を用いて実装できれば人工スパイクニューロンを用いたスパイクベースのハードウェア指向モデルへと拡張できる. ReLU 関数を用いたネットワークの訓練外データ検出性能向上を図るため, ネットワークの深層化を試みた. 活性化関数として ReLU 関数を適用し, ネットワークの層数を変えながら取得した ROC 曲線を図 4.10b に示す. ノード数を入力層 784, 中間層 1,024, 出力層 10 で統一しながら 1, 2, 4 層のネットワーク間で比較を行った. 本結果より, モデルを多層化することで検出性能が向上し, 4 層のネットワークモデル採用時には AUROC が 0.95 を上回る高い性能が得られたことが分かる. 従って, ハードウェア実装に比較的適した ReLU 関数は深層のネットワークに適用することで高い予測性能をもたらすことが確認され, これによりアナログ回路や人工スパイクニューロンによるハードウェア実装が期待される.

4.6 マテリアル知能としての実装に向けたモデル構成

4.6.1 知覚過程における Direct feedback alignment 法の適用

深層学習において、BP法による重み更新はしばしば障害となる。例えば、出力層から入力層へ向かって誤差の逆伝播を繰り返した結果、勾配が消失して学習がうまくいかなくなる勾配消失と呼ばれる問題が知られている [19]。また、BP法は前の層で求めた誤差から次の層の誤差を逐次的に計算するため、多大な計算時間を必要とすることも課題として挙げられる。さらにBP法は生理学的な観点において実際の脳内での学習方法と乖離があり、その生理学的妥当性が疑問視されている。例えば、BP法では推論時の順伝播で用いた重み行列の転置を用いて誤差が逆伝播される。これはすなわち、学習時は誤差信号が重みを通じて順伝播時と逆方向に伝達されることを意味するが、一方で実際の脳内では軸索の構造上、スパイク信号の伝達は一方向的であるという違いがある。

BP法によるこれらの課題を解決するための手法として、Direct feedback alignment (DFA) 法が提案されている [20]。BP法がネットワーク内の重み行列を使用して逐次的に誤差を逆伝播するのに対し、DFA法では乱数行列を使用して出力層の誤差を直接フィードバックすることで重みを学習する。これにより勾配の消失を防ぐことができる他、各層の誤差を並列的に計算できるため、学習の高速化が期待できる。ニューロモルフィック工学の観点では、DFA法はネットワーク内部の重みが物理実装されていて直接アクセスできないような環境下でも学習を実行できるという利点もあり、より生理学的にも妥当な学習手法であると考えられる。一方、DFA法で用いる乱数行列は学習精度の低下を招く可能性があるため、適切に生成する必要がある。

今回、構築した予測符号化ネットワークの知覚更新式(式(4.19))が機械学習におけるBP法に類似していることに着目し、DFA法の知覚過程への適用を試みた。機械学習におけるDFA法の適用例に倣い、式(4.19)中の重み行列 $\mathbf{W}^{(l)}$ の代わりに乱数行列 $\mathbf{B}^{(l)}$ を用いて知覚を実行できないか検討した。DFA法が適用された知覚パラメータ更新式は以下のように記述される。

$$\frac{d\mathbf{x}^{(l)}}{dt} = \eta \{f'(x^{(l)}) \odot \mathbf{B}^{(l)T} \boldsymbol{\varepsilon}^{(l-1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(l)}\} \quad (4.22)$$

乱数行列は $-b \sim b$ の範囲の一様乱数で生成され、 b はハイパーパラメータとしてモデル毎に設定された。

DFA法に基づく知覚更新式の適用可能性を、4.5.2節で用いられた訓練外データ検出

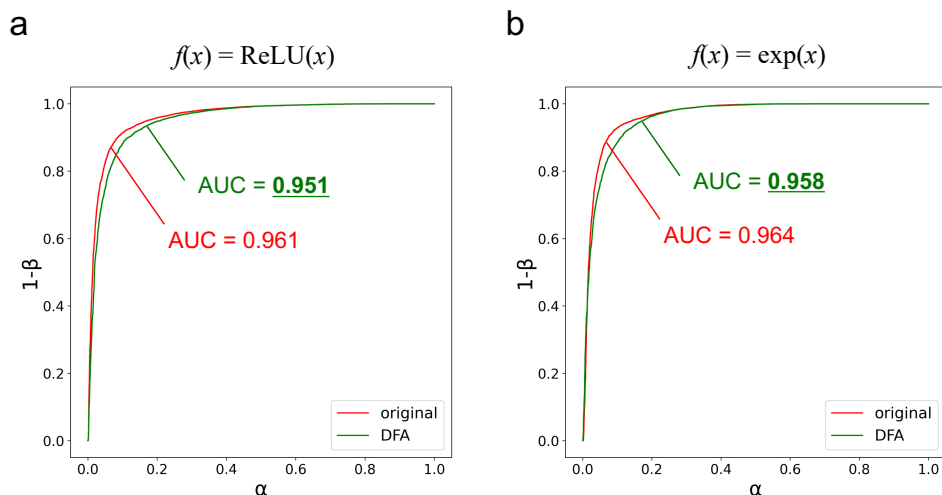


図 4.11 勾配降下法による VFE の最小化から導出されたオリジナルの更新式 (4.19) または, DFA 法が適用された更新式 (4.22) を予測符号化ネットワークの知覚過程へ適用して得られた ROC 曲線とその AUC. 各ノードの活性化関数として (a) ReLU 関数 (b) 指数関数を用いてそれぞれ取得された.

タスクにより評価した. まず, ハードウェア及びスパイクニューロンでの実装に比較的適した ReLU 関数を活性化関数として採用し, 4 層の予測符号化ネットワーク ($784 \times 1,024 \times 1,024 \times 1,024 \times 10$) を用いて訓練外データ検出タスクを実行した. オリジナル (式 (4.19)) 及び DFA 法に基づく知覚更新式 (式 (4.22)) を採用して得られた ROC 曲線及びその AUC を図 4.11a に示す. また, 各ハイパーパラメータは $\eta = 0.1, \gamma = 0.01, T = 30, b = 0.05$ に設定された. DFA 法に基づく知覚更新式を採用した場合, AUC は 0.951 を示した. オリジナルの知覚更新式を採用した場合に得られた 0.961 から僅かに小さな値であるものの, 大きな検出性能の劣化は見られなかったことから, DFA 法の知覚過程への適用が可能であることが示された.

次に, 活性化関数として指数関数 $f(x) = \exp(x)$ を採用して同様の評価を行った. 指数関数は物理系での実装に適しており, かつその導関数もまた指数関数で記述できることから, ハードウェア実装により適した活性化関数である. 各ハイパーパラメータを $\eta = 0.1, \gamma = 0.001, T = 30, b = 0.01$ に設定して得られた結果を図 4.11b に示す. この場合も大きな性能劣化は観察されず, 適切な乱数行列を用いることで性能を損なうことなく DFA 法を適用できることが示された.

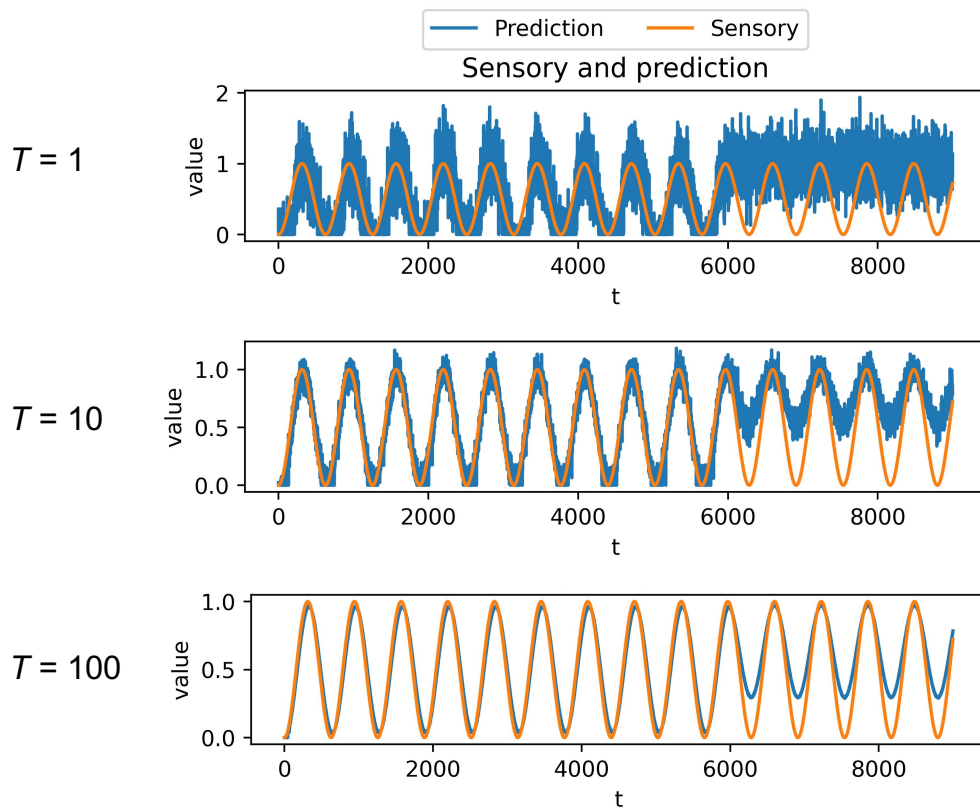


図 4.12 動的な感覚入力信号 (橙線) 及び, 順伝播型階層的予測符号化ネットワーク ($1 \times 256 \times 128$) により生成された動的な予測信号 (青線). 更新ステップ数 T はそれぞれ, 上段: 1, 中段: 10, 下段: 100 に設定された.

4.6.2 リザーバー層と拡張 DFA 法の導入による動的予測

ここまで, 静的な感覚信号として画像データを予測符号化ネットワークへ入力し, これに対する予測が可能であることを示してきた. しかし実際に我々生物が普段取得している感覚信号は, 複雑なダイナミクスのもとで生成された動的なものである. 例えば我々は動いている物体の位置を予測したり, 体をどのように動かせば所望の運動が実行できるかをリアルタイムで予測したりしている. そこで本研究では入力する感覚信号を時系列データにし, 予測符号化ネットワークによる予測を動的なものへと拡張した.

まず, 4.5 節で構築した順伝播型予測符号化ネットワークをそのまま動的予測へと適用できるかどうか検討した. 入力として $x^{(0)} = \sin^2(0.005t)$ の感覚信号を 9,000 ステップ分用意し, これを 2 層のネットワーク ($1 \times 256 \times 128$) へ入力して予測信号を生成した.

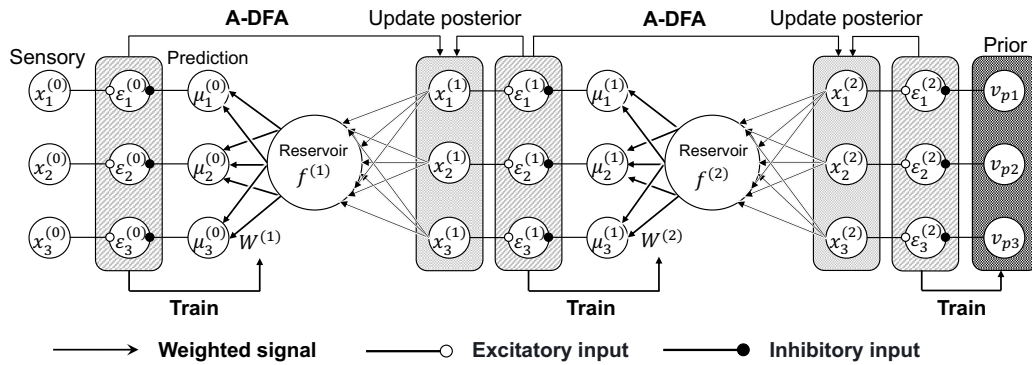


図 4.13 リザーバー層が導入された再帰型階層的予測符号化ネットワークの概念図.

$t = 0 \sim 6,000$ にわたる学習フェーズの間, $\eta = 0.1, \gamma = 0.001$ の条件下で各タイムステップ毎に知覚及び学習が T 回行われた. また, $t = 6,000 \sim 9,000$ にわたる評価フェーズの間は知覚のみが実行され, 学習済みネットワークの予測性能が評価された. 入力された感覚信号及び生成された予測信号の T 依存性を図 4.12 に示す. $T = 100$ の時, 学習フェーズの間は入力された感覚信号を高精度で予測できている一方, 評価フェーズの間は一部のみ正確に予測できた (図 4.12 下段). さらに T を小さくしていくと予測精度が低下し, $T = 1$ の際は評価フェーズの間ほとんど予測ができておらず, 大きな予測誤差を示した (図 4.12 上段). 従って, 順伝播型ネットワークを用いて高精度な動的予測を達成するためには, 各タイムステップにおけるパラメータ更新回数 T を大きく取る必要がある. ところがパラメータの更新回数増加は計算時間の増加を招き, リアルタイムでの予測信号生成が難しくなる. 実応用を考慮すれば, ネットワークは各タイムステップにおいて少ない回数でパラメータを更新し, リアルタイムで予測信号を生成できなければならない. 従って, 大きな更新回数を必要とする順伝播型ネットワークは動的予測に不向きであると結論づけた.

動的リアルタイム予測が可能な予測符号化ネットワークとして, 図 4.13 に示すような再帰型モデルを提案する. 本モデルは順伝播型ネットワークと同様に, 各階層において認識分布から予測信号が生成されるが, 大きな違いとしては認識分布ノードが予測信号ノードと重みを通じて直接結合されているのではなく, リザーバーを介して結合している点である. リザーバーはノード同士が固定重みを通じてランダムに相互結合した再帰型ネットワークであり, 高次元性, 非線形性, 短期記憶性を備えたダイナミクスを有することから, 近年では音声認識や時系列データ予測といった分野へ幅広く応用されている [21–23]. 図 4.13 のモデルでは, ある階層 l における認識分布ベクトル $\mathbf{x}^{(l)}$ はリザーバー層へ固定重みを通じて入力され, 非線形変換された信号 $f(\mathbf{x}^{(l)})$ がリザーバー

の状態として取り出される。リザーバーから取り出された信号は学習可能な重みを通じて予測信号ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(l-1)}$ へと変換される。時系列データ処理に長けたリザーバーを導入することでリアルタイムの予測信号生成が実現できると考え、本モデルが考案された。また、リザーバー層は非線形な物理系での置き換えが可能であるため、ハードウェア及びマテリアル知能との親和性も高いという利点もある [24, 25]。

一方、本モデルは知覚時における認識分布の更新方法が大きな課題となる。順伝播型ネットワークでは式 (4.19) に基づく BP 的手法を用いて認識分布を更新していたが、リザーバーが導入された再帰型ネットワークではリザーバー層の存在により予測誤差の逆伝播が難しく、そのまま適用できない。そこで今回、リザーバーのようなブラックボックスを介して認識分布を更新するための手法として、近年提案された拡張 DFA (Augmented DFA: A-DFA) 法の適用を試みた。

Nakajima らは、深層リザーバーコンピューティングにおける生理学的にも妥当な学習アルゴリズムとして、A-DFA 法を提案した [26]。A-DFA 法はその名の通り、前項にて扱った DFA 法を拡張したものである。本手法では DFA 法と同様に、乱数行列を用いて誤差を直接フィードバックすることでパラメータを更新するが、唯一異なる点は活性化関数の導関数を必要としない点である。通常の BP 法では逆伝播された誤差へ活性化関数の微分を乗じる必要があったため、ノードが物理実装されていて活性化関数の勾配に直接アクセスできないような環境下での実装が困難であった。また、実際の脳内では不連続なスパイク発火によって情報伝達がなされるため、スパイクングニューラルネットワーク (Spiking neural network: SNN) 等のモデル中では活性化関数の勾配計算が難しく、BP 法をそのまま適用できない。これに対し A-DFA 法では、活性化関数の導関数 $f'(x)$ の代わりに任意の非線形関数 $g(x)$ を用いることでこれらの課題を解消している。Nakajima らは深層 SNN に A-DFA 法を適用し、適切な非線形関数 $g(x)$ のもとで従来の BP 法を上回る画像分類性能が達成できることを示すことで、必ずしも厳密な活性化関数の導関数が必要でないことを明らかにした。

今回、この A-DFA 法を予測符号化ネットワークの知覚過程にも適用できないか試みた。具体的には、乱数行列 $\mathbf{B}^{(l)}$ と非線形関数 $g(\boldsymbol{\mu})$ を用いて式 (4.19) を以下のように書き換えた。

$$\frac{d\mathbf{x}^{(l)}}{dt} = \eta \{ \mathbf{B}^{(l)} (g(\boldsymbol{\mu}^{(l-1)})) \odot \boldsymbol{\varepsilon}^{(l-1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(l)} \} \quad (4.23)$$

また、学習時の更新式に関しては、リザーバー内の各ノード状態を $f(x)$ と置くことで式 (4.20)、式 (4.21) と同じ式で記述できる。

まず、前節まで扱ってきた訓練外データ検出タスクを用いて、予測符号化ネットワー

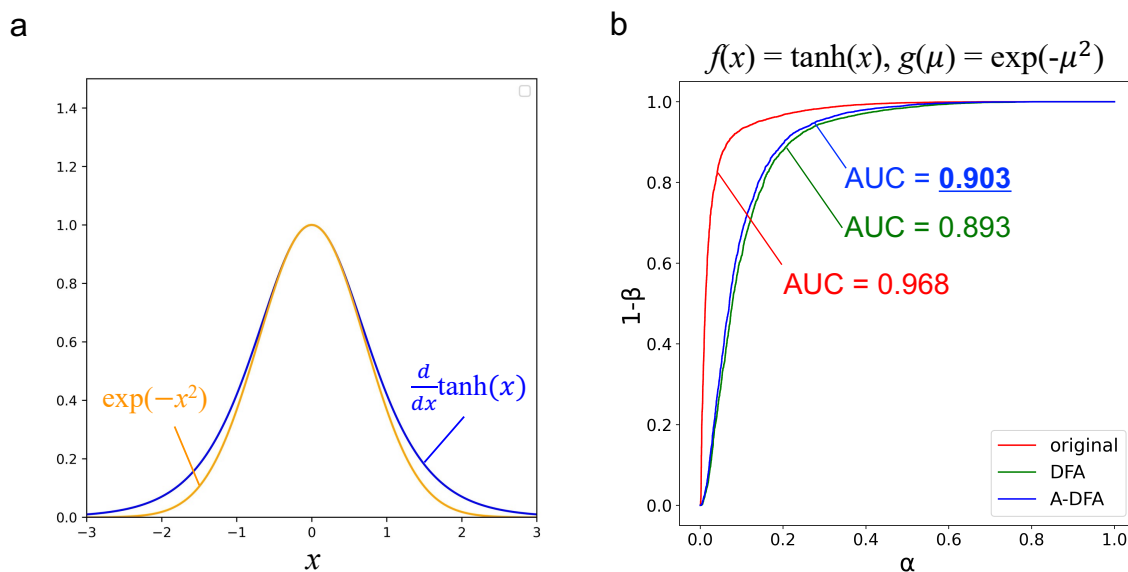


図 4.14 (a) \tanh 関数の導関数及びガウス関数 (平均 0, 標準偏差 1). (b) 勾配降下法による VFE の最小化から導出されたオリジナルの更新式 (4.19), DFA 法が適用された更新式 (4.22), 及び A-DFA 法が適用された更新式 (4.23) を, 順伝播型予測符号化ネットワーク ($784 \times 1,024 \times 1,024 \times 1,024 \times 10$) の知覚過程へ適用して得られた ROC 曲線及びその AUC の比較. 活性化関数には \tanh 関数が用いられた. また, A-DFA 法における非線形関数にはガウス関数 $g(\mu) = \exp(-\mu^2)$ が用いられた.

クの知覚過程への A-DFA 法の適用可能性を評価した. オリジナル (式 (4.19)) 及び DFA 法, A-DFA 法に基づく更新式を予測符号化ネットワーク ($784 \times 1,024 \times 1,024 \times 1,024 \times 10$) の知覚に適用して得られた ROC 曲線及びその AUC を図 4.14b に示す. 活性化関数は \tanh 関数を用いており, 各ハイパーパラメータは $\eta = 0.1, \gamma = 0.01, T = 30, b = 1$ に設定された. また, A-DFA 法に用いる非線形関数は平均 0, 標準偏差 1 のガウス関数 $g(\mu) = \exp(-\mu^2)$ を採用した. これは活性化関数の導関数と非線形関数の間にある程度の相関が必要であるという先行研究の結果に基づいて決定されたものである (図 4.14a) [26]. オリジナルの知覚更新式を採用した場合, AUC は 0.968 と高い検出性能を示した. 一方で DFA 法を適用すると AUC は 0.893 と大幅に減少し, 訓練外データの検出性能劣化が見られた. ところが A-DFA 法を適用した場合, AUC は 0.903 と DFA 法適用時よりも僅かに増加し, ガウス関数での導関数の置き換えによる性能劣化は見られなかった. このことから, ガウス関数は A-DFA 法で用いる非線形関数として妥当であることが示された.

以上の結果を踏まえ、ガウス関数を非線形関数として採用した A-DFA 法ベースの知覚更新式を用いて、再帰型予測符号化ネットワークによる動的予測を試みた。2層の再帰型ネットワーク ($1 \times 256 \times 128$) へ 10,000 ステップの感覚信号 $x^{(0)} = \sin^2(0.005t)$ を入力し、予測信号の生成学習を試みた。今回、リアルタイムでの予測を目的としているため、 $T = 1$ で予測信号を生成できるかどうか検証した。すなわち、各タイムステップにおいて感覚信号が入力されると、知覚及び学習パラメータの更新がそれぞれ 1 回ずつ実行される。 $\eta = 0.1, \gamma = 0.001, T = 1, b = 1$ の条件下にて行われた実験結果を図 4.15 に示す。また、本実験で用いられたリザーバーは 500 個のノードを内部に有しており、それらの間のランダムな結合はスペクトル半径 $\rho = 0.9$ の条件下にて生成された。図 4.15 上段は入力された感覚信号及び生成された予測信号を描いている。中段は感覚信号と予測信号の間の予測誤差推移であり、下段は VFE の推移を描いている。 $t = 0 \sim 1,000$ の間は初期化フェーズであり、感覚信号を一定時間入力してリザーバー内部の状態を安定化させる目的で導入されたものである。 $t = 1,000 \sim 7,000$ を学習フェーズ、 $t = 7,000 \sim 10,000$ を評価フェーズとした。本結果より、構築モデルは学習と評価フェーズともに、感覚信号をリアルタイムで高精度に予測できていることが分かる。また、初期に大きな値を示していた VFE は、学習開始直後に大きく減少した。これらの結果は、リザーバーと A-DFA 法を導入することで、順伝播型ネットワークでは困難とされた動的リアルタイム予測が高精度で実現できることを示唆している。A-DFA 法を導入して適切な非線形関数を選択することで、ブラックボックスを介した認識分布の更新が可能となることから、物理リザーバーを用いたハードウェアでの実装等が今後期待できる。また、A-DFA 法は SNN の実装にも適していることから、より生理学的に妥当なスパイクベースモデルへの拡張も期待される。

4.7 結言

本研究では、VFE 最小化のみで動作を記述可能なマテリアル知能の新たな枠組みを提案した。本枠組みにおいて、マテリアル知能は外環境から受け取った感覚信号をもとに知覚及び学習し、行為を通じて外環境の状態を操作する。その結果変化した外環境を再度知覚して学習する、といった外環境との循環を通じて自己を最適化しながら柔軟に外環境へ適応する。このようなマテリアル知能を実現するためのアプローチとして、勾配降下法から導出された VFE 最小化のダイナミクスをハードウェア上で等価表現するアプローチと、エネルギー最小化に伴う物理系の状態遷移を用いて VFE 最小

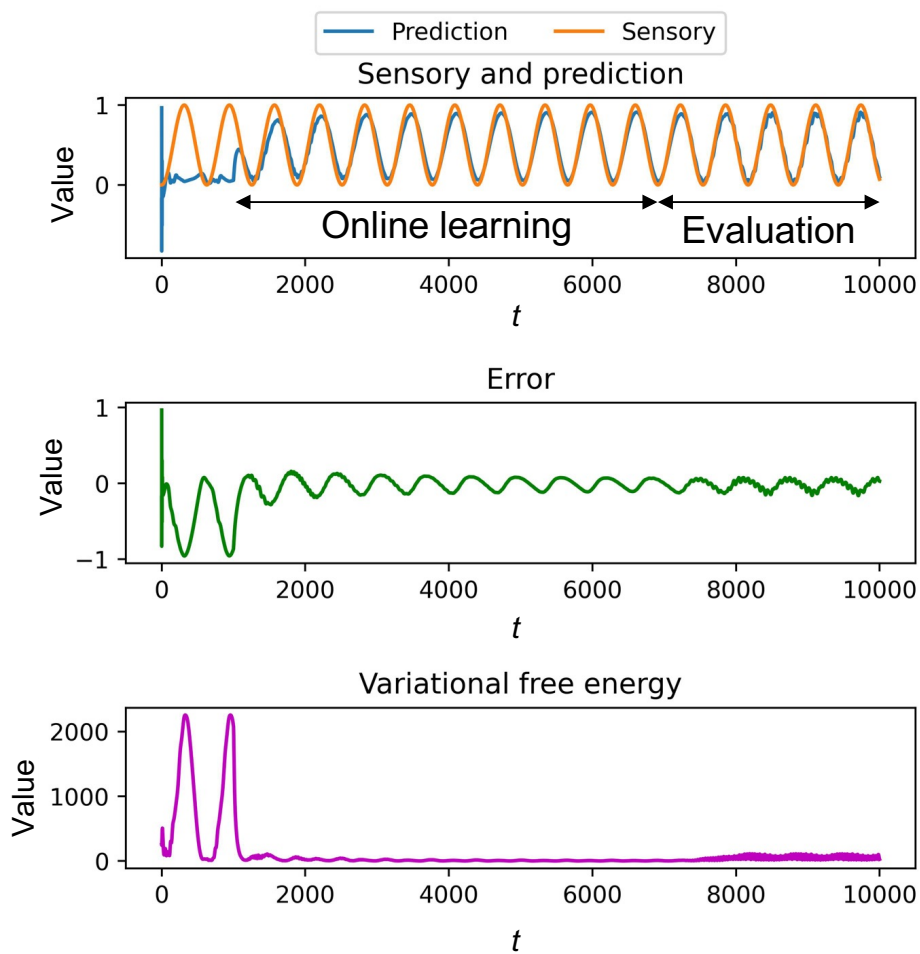


図 4.15 再帰型予測符号化ネットワーク ($1 \times 256 \times 128$) による動的予測結果. 上段: 入力された感覚信号 (橙線) と生成された予測信号 (青線), 中段: 予測誤差の推移, 下段: VFE の推移.

化のプロセスを擬似的に模倣するアプローチを新たに提案した。本研究では前者のアプローチを採用し、アナログ等価回路や予測符号化ネットワークによる実装を試みた。

アナログ等価回路を用いた実装では、VFE を最小化しながら回路内の電位が推移していく過程がシミュレーションを通じて観測され、物理現象を用いて知覚に伴う脳内発火活動遷移の模倣が可能であることが示唆された。予測符号化ネットワークによる実装では、先行研究に基づいて勾配降下法から導出された微分方程式を階層的なニューラルネットワークモデルへ落とし込み、知覚と学習の両方を VFE 最小化によって実行できることが確かめられた。本ネットワークは多層にわたる BP を用いることなく、実際の脳内で見られるような局所的パラメータ更新則を用いて容易かつ低コストで各階層の信念を更新できるため、生理学的妥当性と工学的優位性を兼ね備えている。また、構築された予測符号化ネットワークによる静的予測を訓練外データ検出タスクへと応用し、実践的タスクへの応用可能性を初めて示した。本タスクにおいて VFE は訓練外データを検出するための新たな指標として用いられ、予測の不確かさを表す VFE の工学的優用性が見出された。

本研究では更に、マテリアル知能としての実装により適していて、かつ生理学的妥当性も備えた新たなネットワークアーキテクチャが提案された。従来の知覚アルゴリズムではネットワーク内部重みの転置を必要とし、BP 的な手法を用いて信念を更新していたが、これは脳内で見られる単方向的な信号伝達と乖離があり、また重みに直接アクセスできない環境下における信念の更新が難しいといった課題があった。そこで今回提案した DFA 法に基づく知覚アルゴリズムでは、乱数行列を通じて直接フィードバックされた誤差を用いて信念を更新することで、これらの課題解決を図った。また、動的予測にも適用可能な予測符号化ネットワークが、ニューロモルフィック工学において用いられてきた A-DFA 法とリザバーを取り入れることで実現された。可塑性を持たないリザバーは小脳のモデルとみなすことができ、これを A-DFA 法ベースの知覚アルゴリズムと組み合わせることで、高い生理学的妥当性を有するネットワークモデルが構築された。これにより、マテリアル実装された物理リザバーのようなブラックボックスを介した信念の更新が可能となるため、ハードウェア実装との親和性が高まった。また、A-DFA 法では導関数の計算を必要としないことから、より生理学的かつエネルギー効率の高いスパイクベースのモデルへの拡張も今後期待できる。

参考文献

- [1] 島崎秀昭. 認知と行動の適応原理. 日本神経回路学会誌, Vol. 25, No. 3, pp. 86–103, 2018.
- [2] K. Friston. Friston, k.j.: The free-energy principle: a unified brain theory? *nat. rev. neurosci.* 11, 127-138. *Nature reviews. Neuroscience*, Vol. 11, pp. 127–38, 2010.
- [3] K. Friston and S. Kiebel. Predictive coding under the free energy principle. *Philosophical Transactions of The Royal Society B Biological Sciences*, Vol. 364, No. 1521, pp. 1211–1221, 2019.
- [4] A. Rosier, L. Arckens, G. Orban, and F. Vandesande. Laminar distribution of nmda receptors in cat and monkey visual cortex visualized by 3h-mk-801 binding. *The journal of comparative neurology*, Vol. 335, No. 3, pp. 369–380, 1993.
- [5] A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin. Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, Vol. 39, No. 1, pp. 1–22, 1977.
- [6] B. Nessler, M. Pfeiffer, L. Buesing, and W. Maass. Bayesian computation emerges in generic cortical microcircuits through spike-timing-dependent plasticity. *PLOS Computational Biology*, Vol. 9, No. 4, 2013.
- [7] 吉田正俊, 田口茂. 自由エネルギー原理と視覚的意識. 日本神経回路学会誌, Vol. 25, No. 3, pp. 53–70, 2018.
- [8] K. Friston, T. FitzGerald, F. Rigoli, P. Schwartenbeck, J.O. Doherty, and G. Pezzulo. Active inference and learning. *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*, Vol. 68, pp. 862–879, 2016.
- [9] 上田正仁. 微小トンネル接合の物理とその応用. 応用物理, Vol. 62, No. 9, pp. 889–897, 1993.
- [10] R. Bogacz. A tutorial on the free-energy framework for modelling perception and learning. *Journal of Mathematical Psychology*, Vol. 76, pp. 198–211, 2017.

- [11] K. Friston, T. Shiner, T. FitzGerald, J. Galea, R. Adams, H. Brown, R. Dolan, R. Moran, K. Stephan, and S. Bestmann. Dopamine, affordance and active inference. *PLoS Computational Biology*, Vol. 8, No. 1, pp. 1–20, 2012.
- [12] B. Millidge. Implementing predictive processing and active inference: Preliminary steps and results. *PsyArXiv*, 2019.
- [13] T. Salvatori, Y. Song, B. Millidge, Z. Xu, L. Sha, C. Emde, R. Bogacz, and T. Lukasiewicz. Incremental predictive coding: A parallel and fully automatic learning algorithm. *arXiv*, 2022.
- [14] Z. Padamsey and N.L. Roehfourt. Defying expectations: How neurons compute prediction errors in visual cortex. *Neuron*, Vol. 108, No. 6, pp. 1016–1019, 2020.
- [15] I.J. Goodfellow, J. Shlens, and C. Szegedy. Explaining and harnessing adversarial examples. *arXiv*, 2015.
- [16] D. Hendrycks and K. Gimpel. A baseline for detecting misclassified and out-of-distribution examples in neural networks. *arXiv*, 2018.
- [17] K.H. Britten, M.N. Shadlen, W.T. Newsome, and J.A. Movshon. The analysis of visual motion: a comparison of neuronal and psychophysical performance. *Journal of Neuroscience*, Vol. 12, No. 12, pp. 4745–4765, 1992.
- [18] Y. Lecun, L. Bottou, Y. Bengio, and P. Haffner. Gradient-based learning applied to document recognition. *Proceedings of the IEEE*, Vol. 86, No. 11, pp. 2278–2324, 1998.
- [19] G.E. Hinton, S. Osindero, and Y. Teh. A Fast Learning Algorithm for Deep Belief Nets. *Neural Computation*, Vol. 18, No. 7, pp. 1527–1554, 2006.
- [20] A. Nøkland. Direct feedback alignment provides learning in deep neural networks. *arXiv*, 2016.
- [21] H. Jaeger. Short term memory in echo state networks. *GMD Forschungszentrum Informationstechnik*, 2001.
- [22] M. Lukoševičius and H. Jaeger. Reservoir computing approaches to recurrent neural network training. *Computer Science Review*, Vol. 3, No. 3, pp. 127–149, 2009.

- [23] H. Jaeger and H. Haas. Harnessing nonlinearity: Predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication. *Science*, Vol. 304, No. 5667, pp. 78–80, 2004.
- [24] H.O. Sillin, R. Aguilera, H. Shieh, A.V. Avizienis, M. Aono, A.Z. Stieg, and J.K. Gimzewski. A theoretical and experimental study of neuromorphic atomic switch networks for reservoir computing. *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 38, p. 384004, 2013.
- [25] Y. Usami, B. Ven, D.G. Mathew, T. Chen, T. Kotooka, Y. Kawashima, Y. Tanaka, Y. Otsuka, H. Ohoyama, H. Tamukoh, H. Tanaka, W.G. Wiel, and T. Matsumoto. In-materio reservoir computing in a sulfonated polyaniline network. *Advanced Materials*, Vol. 33, No. 48, p. 2102688, 2021.
- [26] M. Nakajima, K. Inoue, K. Tanaka, Y. Kuniyoshi, T. Hashimoto, and K. Nakajima. Physical deep learning with biologically inspired training method: gradient-free approach for physical hardware. *Nature Communications*, Vol. 13, No. 1, p. 7847, 2022.

第5章 総括

本研究では計算論、アルゴリズム、ハードウェアといった異なる抽象度のレベル間を統一的に説明可能な新たなフレームワークを軸とし、ボトムアップとトップダウンの両アプローチから、外環境に対してより柔軟に適応可能な「柔らかな」マテリアル知能の実現を目指した。ボトムアップ的なアプローチとしては、脳の形態に学んだ導電性ポリマーネットワークの実験的な構築を試み、脳型情報処理への応用可能性を模索した。一方でトップダウン的なアプローチとしては、計算論的神経科学の分野で近年人気を博している FEP に着目することで、知覚や学習、行動等を通じて環境と相互作用しながら柔軟に適応可能なマテリアル知能の枠組みを新たに提案し、マテリアル知能としての実装に適した FEP に基づく予測符号化ネットワークモデルを構築した。

脳の形態に学んだボトムアップ的なアプローチでは、実際の脳と同じく液中の有機材料で構成された物理的に柔らかい導電性ポリマーネットワークを用いて、ミクロスケールの脳神経ネットワーク様回路を構築した。最も抽象度の低い研究レベルとして第2章では、導電性ポリマー細線の液中電解重合成長及びその電極ギャップ間配線を用いたシナプス機能模倣を試み、配線本数や直径、導電性制御によって長期増強や短期増強・抑制といった可塑的シナプス効率変化をコンダクタンス変化で再現し得ることを示した。特に、ポリマー細線の可逆的導電性制御により得られた電極間コンダクタンスの双方向的かつ連続的な変化は、これまで報告されているいくつかの抵抗変化メモリシナプスが示すシナプス増強及び抑制に近い挙動をとることから、ANN における物理重みとして機能し得る。その動作原理はラマン分光法やドーパント濃度依存性の調査等を通じて追求され、フォーミングの際に細線側壁へ堆積する導電性ポリマー膜の可逆的ドーピング反応に起因することが明らかとなった。また、生じたコンダクタンス変化は一時的であり、時間と共にゆっくりと平衡値へと変化していくような短期記憶性を有していることも明らかとなった。この短期記憶性を利用することで、リザーバコンピューティングに代表されるような情報処理への応用が今後期待される。

より抽象度の高い研究レベルとして、第3章では前章のポリマー配線を高次元のものへと拡張し、脳神経回路を模した高次元ポリマーネットワークの構築及び、これを用

いた脳型情報処理の実装を試みた。2次元平面内へ形成された複数電極間へ細線を分岐配線することに成功し、また電圧スパイクの印加によって各電極間の相対的なコンダクタンスをヘテロシナプスのごとく制御できることを見出した。更に、3次元構造を有する電極を複数作製し、立体空間上へ配置された上部電極と下部電極の間へポリマー細線を立体分岐配線する技術を初めて確立した。第2章で得られた知見を踏まえ、電極間へ配線する細線の本数や径、導電性を制御することで、形成されたポリマーネットワークを学習させることに成功し、学習するマテリアル知能としての応用可能性が見出された。また、側抑制的なコンダクタンス変化や、物理リザーブとして応用可能な非線形電気応答ダイナミクスが観測され、実際の脳内で見られるような生理学的現象が本ネットワークから創発されることを見出した。一方で、ポリマー細線の立体配線に関し、以下に挙げるような課題が残った。

1. 上部電極と下部電極間の距離をある程度小さく取る必要がある。
2. より多数の電極を用いた際に同様の制御が可能かどうかは不明である。
3. AIチップとしての集積化に向け、上部電極もAuスタッドバンプを用いて実装すべきである。

上部電極と下部電極の距離が大きくなると溶液中での電位勾配が緩やかになるため、電極先端における電場強度が減少して細線の成長が進行しにくくなる様子が本研究を通じて観測された。長距離にわたる配線を実現するためには電極先端の曲率半径をより小さくすることで電界集中を促したり、印加重合電圧の振幅や周波数といったパラメータの最適化を行ったりするといった工夫が必要となる。また今回用いた電極数は上部電極1個と下部電極3個と少なく、より多数の電極を用いた実験は未実施である。特に本研究で得られた知見として、同一溶液中において細線の重合成長は一箇所のみで局所的に進行することが示唆されたが、このことは所望する電極間への配線を並列的に実行できないことを示している。そのため、多数の電極間をポリマー配線するのに多大な時間を要する恐れがある。AIチップとしての実装に向け、将来的には上部電極もAuスタッドバンプを用いて大量に作製してこれを集積化する必要があるが、本研究ではマニュアルでアプローチされた1つのAu探針による実装に留まった。多数の上部・下部電極同士が向かい合う形で配列された微細構造を、前駆体溶液を密閉可能な流路中に作り込むためのチップデザイン及び製造工程の設計は今後の課題として残った。

第4章では最も抽象度の高い計算論的アプローチとして、計算論的神経科学に根ざす新たなマテリアル知能の枠組みを提案し、物理リザーブ等を用いたハードウェア実

装が容易な予測符号化ネットワークモデルを新たに構築した。勾配降下法による VFE の最小化からネットワークを構成し、知覚過程において新たに DFA 法を適用することで、予測誤差の BP を必要としないより生理学的に妥当な手法で予測を実行することが可能となった。予測の不確かさを表す VFE を尺度として用いることで訓練外データ検出を高精度で実現できることが示され、工学的な利用価値も見出された。また、物理リザーバーのように複雑なダイナミクスを示すネットワーク構造を取り入れ、知覚過程に A-DFA 法を適用することで動的なリアルタイム予測が可能となった。マテリアル知能としての実装に適したモデルが新たに示された一方、任意の物理系で実装された物理リザーバーに対して本モデルを実際に適用できるかどうかの評価は今後の課題として残った。また、A-DFA 法を採用することによって活性化関数の微分操作を必要としない勾配フリーな手法で信念を更新できることから、スパイクニューロンモデルを用いたスパイクベースの予測符号化ネットワークモデルへの拡張が今後期待できる。

以上の研究結果を通じ、以下に示す重要な知見が得られた。

1. 軸索誘導やシナプス可塑性といった脳の基本メカニズムを、導電性ポリマーファイバーを用いて物理的に模倣できる。
2. 生理学的な現象やアルゴリズム、ネットワークの学習が、構築された導電性ポリマーネットワークから創発され得る。
3. 脳の計算論に従うマテリアル知能が、物理実装に適した予測符号化ネットワークとして実現できる。

導電性ポリマーネットワークから創発される脳型情報処理と、脳の計算論に従うマテリアル知能を結びつけ、柔らかなマテリアル知能を物理的に構築することは今後の大きな課題である。第3章と第4章で扱われたリザーバーの概念は、抽象度の異なるこれらの研究レベルを橋渡すフレームワークとして大いに期待できる。本研究に着想を得て今後異なる研究レベル間での横断的な研究が発展し、「柔らかな」マテリアル知能の実現に繋がることを期待する。

謝辞

本研究を進め論文を執筆するにあたり、ご多忙のなか多大なるご指導ご協力を賜りました、本学大学院情報科学研究科 集積システム分野 浅井哲也教授及び赤井恵教授 (現大阪大学理学部教授) に深く感謝申し上げます。特に赤井恵教授には大阪大学工学部所属時より計6年間もの間、時には優しく、時には厳しくご指導を賜りました。ここに深い感謝の意を表します。また本研究中長期にわたり有益な議論をさせていただきました Kan Shaohua 氏、雨宮佳希氏、Ali Emiliano Jose 氏、國見峻史氏らをはじめとする、集積ナノシステム研究室の皆様には厚く御礼申し上げます。特に集積ナノシステム研究室秘書の横川厚子氏、三浦由貴氏には予算管理や出張の手配等をはじめとする多大なサポートを賜り、お陰様で日々の研究生生活を快く送ることができました。深く感謝致します。

大阪大学大学院 工学研究科 原子制御プロセス領域 桑原裕司教授、齋藤彰准教授、服部卓磨助教、岡田将氏、山下和真氏には、本研究の着想段階よりご助言を頂きましたこと、心より感謝の意を表します。

大阪大学大学院 理学研究科 表面科学研究室 渡部誠也助教、吉野裕貴氏には、本研究を進めるにあたり関連研究者の立場から大変有益なご助言や議論を賜りましたことを心より感謝申し上げます。

本研究の一部は科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 ACT-X (グラントナンバー: JPMJAX21KE) 及び、日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費助成事業 (グラントナンバー: 22J10487) における研究課題の一環として行われ、各助成金の支援のもと遂行されました。特に ACT-X の研究課題遂行につきましては、東芝研究開発センター ナノ材料・フロンティア研究所 平尾明子博士及び、豊橋技術科学大学 電気・電子情報工学系 集積電子システム分野 澤田和明教授より領域アドバイザーとして大変貴重なご助言を定期的に賜り、お陰様で本研究をより一層良いものへと昇華させることができました。心より深く感謝致します。

また、本研究の一部は JSPS の研究拠点形成事業及び若手研究者海外挑戦プログラムの支援のもと、ドレスデン工科大学 Dresden Integrated Center for Applied Physics and

Photonic Materials (IAPP) への派遣を通じて行われました。派遣先にてご指導を賜りました Karl Leo 教授, Hans Kleemann 博士らをはじめとする IAPP の皆様, そして共同研究を進めるにあたり大変有益な議論をさせて頂きましたライプニッツポリマー研究所の方々に厚く御礼申し上げます。本派遣に際し, 様々な手厚いサポートを賜りました大阪大学理学部 松本卓也教授及び大上恵奈氏に心より感謝申し上げます。

新たな研究を開始するにあたり, 活発な議論をさせて頂きました北海道大学人間知・脳・AI 研究教育センター (CHAIN) の皆様に厚く御礼申し上げます。特に島崎秀昭准教授 (現京都大学准教授) 及び石原憲氏には, 自由エネルギー原理及び予測符号化に関する深い見聞をご共有頂き, 本研究を円滑に進める上で大きな貢献をして頂きました。心より深く感謝致します。

最後に, 本研究の遂行にあたり精神的, 経済的にもご支援頂きました家族へ心からの感謝をここに表します。

本研究に関する発表・業績

学術論文

1. Hagiwara N., Kunimi T., Ando K., Akai-Kasaya M., and Asai T., “Design and evaluation of brain-inspired predictive coding networks based on the free-energy principle for novel neuromorphic hardware,” *Nonlinear Theory and Its Applications*, Vol. E15-N, no.1, pp. 107-118, 2024.
2. Hagiwara N., Asai T., Ando K., and Akai-Kasaya M., “Fabrication and training of 3D conductive polymer networks for neuromorphic wetware,” *Advanced Functional Materials*, Vol. 33, No. 42, pp. 02300903-(10 pages), 2023.
3. Amemiya Y., Ali E.J., Hagiwara N., Akai-Kasaya M., and Asai T., “Heuristic model for configurable polymer wire synaptic devices,” *Nonlinear Theory and Its Applications*, Vol. E13-N, No. 2, pp. 379-384, 2022.
4. Hagiwara N., Sekizaki S., Kuwahara Y., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Long- and short-term conductance control of artificial polymer wire synapses,” *Polymers*, Vol. 13, No. 2, pp. 312(1)-(10), 2021.
5. Akai-Kasaya M., Hagiwara N., Hikita W., Okada M., Sugito Y., Kuwahara Y., and Asai T., “Evolving conductive polymer neural networks on wetware,” *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 59, No. 5, 2020.

査読付国際会議プロシーディング

1. Hagiwara N., Kan S., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Construction of a neural network using organic materials and ions,” *Proceeding: The 29th International Workshop*

on Active-Matrix Flatpanel Displays and Devices (AM-FPD), pp. 86-89, Ryukoku University Avanti Kyoto Hall, (On line), Japan, Jul. 2022.

2. Hagiwara N., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Multi-synaptic conductance control using conductive polymer wiring,” Proceeding: 2022 IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop, pp. 1-2, Hilton Hawaiian Village, Honolulu, USA, Jun. 2022.

招待講演/セミナー

1. 萩原 成基, “導電性ポリマーネットワークがもたらす柔らかな脳型ウェットウェア,” 第 258 回 JOEM 研究会, オンライン, 2023 年 12 月.
2. Akai-Kasaya M., Hagiwara N., Nakajima R., and Watanabe S., “Conductive polymer 3D networks and synaptic behavior trainings for neuromorphic wetware,” 3rd Workshop on Organic Neuromorphic Devices and Systems, Hotel Elbresidenz, Bad Schandau, Germany, Sep. 2023.
3. Hagiwara N., “Conductive polymer neural networks for neuromorphic wetware,” 2023 International Workshop on Neuromorphic Computing, Information Science and Technology, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jan. 2023.
4. Hagiwara N., Kan S., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Construction of a neural network using organic materials and ions,” The 29th International Workshop on Active-Matrix Flatpanel Displays and Devices (AM-FPD), Ryukoku University Avanti Kyoto Hall, (On line), Japan, Jul. 2022.
5. Ali E.J., Amemiya Y., Hagiwara N., Akai-Kasaya M., and Asai T., “A comparison between simulations and experiments of neuromorphic devices using electropolymerization of conductive polymer nanowires,” Joint Symposium of JSPS-DST Bilateral Research on Charge- and Spin-Blockade in Ultrathin-Layers of Single Molecule Magnets, online, Japan, Feb. 2021.
6. Hagiwara N., Sekizaki S., Y. Kuwahara, Asai T., and Akai-Kasaya M., “Long- and Short-term Conductance Control of Conductive Polymer Wire Synapses,” Joint Symposium of JSPS-DST Bilateral Research on Charge- and Spin-Blockade in Ultrathin-Layers of Single Molecule Magnets, online, Japan, Feb. 2021.

国際会議

1. Hagiwara N., Abe Y., and Asai T., “Highly-Integrable Analogue Reservoir Circuits Based on a Simple Cycle Architecture,” The 5th International Symposium on Neuromorphic AI Hardware, ART HOTEL Kokura New Tagawa, Kitakyushu, Japan, Mar. 2024.
2. Kunimi T., Hagiwara N., Ando K., and Asai T., “A Novel Dynamic Predictive Coding Network with Augmented Direct Feedback Alignment towards its Physical Implementation,” The 5th International Symposium on Neuromorphic AI Hardware, ART HOTEL Kokura New Tagawa, Kitakyushu, Japan, Mar. 2024.
3. Kunimi T., Hagiwara N., Ando K., and Asai T., “Out-of-distribution data detection applying predictive coding networks and their variational free energy,” 10th Anniversary Korea-Japan Joint Workshop on Complex Communication Sciences (KJCCS 2024), Kamenoi Hotel, Beppu, Japan, Jan. 2024.
4. Watanabe S., Hagiwara N., Shibakita H., Zhou Y., Kato H.S. and Akai-Kasaya M., “Study of synaptic PEDOT:PSS wire in electrolyte solutions,” MNC2023, Keio Plaza Hotel Sapporo, Sapporo, Japan, Nov. 2023.
5. Hagiwara N., Asai T., Ando K., and Akai-Kasaya M., “Growth of 3D Conductive Polymer Fiber Networks towards Neuromorphic Wetware,” 3rd Workshop on Organic Neuromorphic Devices and Systems, Hotel Elbresidenz, Bad Schandau, Germany, Sep. 2023.
6. Hagiwara N., Asai T., Ando K., and Akai-Kasaya M., “3D Conductive Polymer Wiring Synapses for Neuromorphic Wetware,” The 4th International Symposium on Neuromorphic AI Hardware, ART HOTEL Kokura New Tagawa, Kitakyushu, Japan, Dec. 2022.
7. Hagiwara N., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Multi-synaptic conductance control using conductive polymer wiring,” 2022 IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop, Hilton Hawaiian Village, Honolulu, USA, Jun. 2022.

8. Hagiwara N., Amemiya Y., Ali E.J., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Feasibility of neuromorphic wetware using configurable polymer networks,” The 10th RIEC International Symposium on Brain Functions and Brain Computer, Online, Feb. 2022.
9. Amemiya Y., Ali E.J., Hagiwara N., Akai-Kasaya M., and Asai T., “A heuristic model for configurable polymer-wire synaptic devices,” The 2021 Nonlinear Science Workshop, Online, Dec. 2021.
10. Hagiwara N., Asai T., and Akai-Kasaya M., “Conductance control of free-wiring conductive polymer synapses,” The 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems (MEMRISYS 2021), Online, Japan, Nov. 2021.
11. Hagiwara N., Okada M., Sugito Y., Asai T., Kuwahara Y., and Akai-Kasaya M., “Examination of machine learning using conductive polymer wires as nonvolatile resistance change elements,” Dynamics Days 2020, Hilton Hartford, Hartford, USA, Jan. 2020.

国内学会

1. 渡部 誠也, 萩原 成基, 柴北 洋明, 周 陽, 加藤 浩之, 赤井 恵, “PEDOT:PSS ワイヤシナプス素子の導電挙動に電解質イオンが及ぼす影響,” 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 熊本城ホール, 熊本, 2023 年 9 月.
2. 國見 峻史, 萩原 成基, 安藤 洸太, 赤井 恵, 浅井 哲也, “自由エネルギー原理に基づく予測符号化ネットワークへの拡張 DFA 法の適用,” 電子情報通信学会 ソサイエティ大会, 名古屋大学 東山キャンパス, 名古屋市, 2023 年 9 月.
3. 萩原 成基, 國見 峻史, 安藤 洸太, 赤井 恵, 浅井 哲也, “自由エネルギー原理に基づく予測符号化ネットワークのハードウェア実装,” 電子情報通信学会複雑コミュニケーションサイエンス研究会, 北海道ルスツリゾートホテル&コンベンション, 北海道, 2023 年 3 月.
4. 萩原 成基, 安藤 洸太, 浅井 哲也, 赤井 恵, “脳型ウェットウェア創製に向けた 3 次元導電性ポリマーネットワークの構築及び学習,” 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023 年 3 月 15-18 日.

5. 萩原 成基, 國見 峻史, 赤井 恵, 浅井 哲也, “自由エネルギー原理に基づく予測符号化ネットワーク回路の提案,” JSPS 研究拠点形成事業「マテリアル知能による革新的知覚演算システム」国内全体会議, 京都烏丸コンベンションホール, 京都, 2023 年 1 月.
6. 渡部 誠也, 萩原 成基, 柴北 洋明, 赤井 恵, “高分子シナプス素子の生理食塩水中における導電性評価,” 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 東北大学, 宮城 (ハイブリッド開催), 2022 年 9 月 20-23 日.
7. 萩原 成基, 浅井 哲也, 赤井 恵, “立体配線型メモリ素子を用いた高実装効率なエッジ向け深層学習アクセラレータの検討,” 第 35 回 回路とシステムワークショップ, 北九州国際会議場, 福岡 (ハイブリッド開催), 2022 年 8 月.
8. 萩原 成基, 雨宮 佳希, アリ ホセ エミリアーノ, 浅井 哲也, 赤井 恵, “立体配線型メモリ素子で構成される新規脳型回路アーキテクチャの検討,” 電子情報通信学会複雑コミュニケーションサイエンス研究会, 北海道ルスツリゾートホテル&コンベンション, 北海道 (ハイブリッド開催), 2022 年 3 月.
9. 萩原 成基, 浅井 哲也, 赤井 恵, “導電性ポリマーワイヤーシナプスの抵抗変化特性評価,” 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学&オンライン, 愛知 (ハイブリッド開催), 2021 年 9 月.
10. 萩原 成基, 関崎 翔馬, 桑原 裕司, 浅井 哲也, 赤井 恵, “長期・短期記憶を形成可能なポリマーワイヤーシナプスの創成,” 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン開催, 2021 年 3 月.
11. 萩原 成基, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵, “ウェットウェア創生に向けたポリマーシナプス素子の開発,” 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, 9a-Z28-6, オンライン開催, 2020 年 9 月.
12. 萩原 成基, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵, “導電性ポリマーシナプス素子の開発,” 第 11 回分子アーキテクニクス研究会, オンライン開催, 2020 年 7 月.
13. 杉戸 泰雅, 岡田 将, 萩原 成基, 桑原 裕司, 赤井 恵, “PEDOT:PSS ワイヤーの成長機構の考察,” 2019 年度関西薄膜・表面物理セミナー, 京都府立ゼミナールハウス あうる京北, 京都, 2019 年 11 月.

14. 萩原 成基, 岡田 将, 杉戸 泰雅, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵, “導電性高分子ワイヤーを不揮発性抵抗変化素子として用いた機械学習の検討,” 第 10 回分子アーキテクトニクス研究会, O-11, 九州国立博物館, 福岡, 2019 年 11 月.
15. 萩原 成基, 岡田 将, 杉戸 泰雅, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵, “導電性高分子ワイヤーを用いた相互結合型ネットワークの構築,” 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 20p-F211-12, 北海道大学, 北海道, 2019 年 9 月.
16. 岡田 将, 杉戸 泰雅, 萩原 成基, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵, “導電性高分子ワイヤーを用いた機械学習システムの作製,” 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 11p-W810-9, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2019 年 3 月.

受賞

1. Hagiwara N., Asai T., Ando K., and Akai-Kasaya M., The 3rd Workshop on Neuromorphic Organic Devices and Systems - Poster-Award for the 3rd place, Sep. 20, 2023.
2. 萩原 成基, 第 35 回回路とシステムワークショップ - A 分科会奨励賞, 2023 年 2 月 14 日.
3. Hagiwara N., The 4th International Symposium of Neuromorphic AI Hardware - Student Presentation Award, Dec. 14, 2022.