

研究報告書

「ポリマー配線を用いたニューラルネットワーク型情報回路の創成」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 2015 年 10 月～2019 年 3 月

研究者: 赤井 恵

1. 研究のねらい

近年、脳の優れた特性、高効率な消費電力性、環境適応力、認識力、判断力に学ぶ新しい情報処理技術が、既存のコンピューターではこなせなかった問題を解決するニューラルネットワーク型人工知能(AI)として盛んに利用され始めている。しかしながら、今の人工知能はコンピュータープログラムであり、そのフレームワークはノイマン型コンピューターの範疇から出ることではない。計算アルゴリズムとしてのニューラルネットワークは並列性やメモリ計算の構造を保持しており、本来ならば省エネルギー特性や小型化といった恩恵を享受すべきところ、計算部とメモリが分離している現行のノイマン型計算機の中で動く以上、その更新すべき情報量の多さから莫大な電力を消費する定めから逃れられない。ニューラルネットワークをより効率的に、また様々な現実の状況に適合させて利用する為には、現在の半導体技術を用いない新規な仕組みと材料を用いた、物理的にニューラルネットワークアーキテクチャを全体的、もしくは部分的に実現した “フィジカル AI” 技術へのパラダイムシフトが求められている。

本研究は空間を自由に配線出来る可塑性を持った有機ポリマー材料を用い、ニューラルネットワークアルゴリズムを基礎とした、物理的にも柔軟かい情報認識回路の創成を提案することを提案する。本研究で用いる導電性高分子は、単量体溶液の中の指向性の高い重合反応として、まるで神経細胞ニューロンのように溶液内の自由空間をワイヤー状に成長する。これらのポリマーワイヤーは、もちろん実際の神経細胞のように複雑な機能を持つわけではないが、指定された電極端子間に指向性を持って成長し、その導電性を変化させ保持する「不揮発性の抵抗変化メモリ」であり、ニューラルネットワークのシナプスとして利用することが出来る。本研究で用いた PEDOT:PSS は、材料としての制御性や堅牢性も高く、機械学習によって成長させたニューラルネットワーク構造は安定に利用することが可能である。

フィジカルニューラルネットワーク構築を目的とする研究は、世界的にも固体メモリスタのクロスバー構造を用いた研究が隆盛であるが、本研究は空間を自由に配線し、安価で生体親和性の高い有機材料を用い、将来の “フィジカル AI” 実現へ向けた異なる視点からの新しいアプローチとコンセプトを提供する。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究は 2 つの研究テーマによって構成された。第一に「ポリマー配線成長の機構解明と制御」、第二に「機械学習を用いたポリマー配線ニューラルネットワークの構築」である。これらは同時進行的に、相補的に行われた。

1) ポリマー配線成長の機構解明と制御

電解重合をする導電性高分子は、単量体溶液内における電解集中によってワイヤー状に

成長する。本研究ではその成長機構を精査し、PEDOT:PSS が最も配線の制御性に富むと結論し、PEDOT:PSS ワイヤー成長の機構解明と制御を目的として研究を進めた。第一にワイヤー径の周波数依存性を見出した。これは矩形波電圧印加における成長先端の単量体酸化がまず起き、その後にワイヤー表面全体の成長が起っていることを示唆している。また、一定の高周波数高電圧条件を満たした場合に、電極間に複数本のワイヤーが成長させることが可能であることを発見した。これは、学習に必須な抵抗変化メモリとして利用可能な線形増加かつ大きな変化幅の抵抗変化を実現することに繋がった。

2) 機械学習を用いたポリマー配線ニューラルネットワークの構築

研究初期には、自作電気回路とマイコン制御による機械学習システムを構築し、教師あり単純パーセプトロンアルゴリズムを用いた、PEDOT:PSS ワイヤー4 入力 1 出力 AND OR 論理回路の作成を達成した。次に、電気回路基盤ボードとマイコン制御による 9×6 の双方向機械学習システムを構築し、54 対電極におけるオートエンコーダー回路を構築し、9 ビット 3 文字の 3 ビットへの特徴抽出に成功した。制御する機械学習による CMOS 以外の材料へのニューラルネットワーク構築の報告は未だ数が少なく貴重な結果である。

ポリマーを利用する利点として、3 次元空間で自由配線をすることにより、既存のクロスバー研究で困難とされている部分配線によって、効率的にニューラルネットワークを形成出来るという理由があった。しかしながら二次元の平面電極を用いた多岐配線には成功したものの、3 次元配線の制御には到達しなかった。原理的には配線が可能であると考えられる為、端子作製技術の革新が必要であると考えている。

また、カーボンナノチューブ(CNT)と分子を用いた関連研究において、CNT/分子ランダムネットワークがリカレントニューラルネットワークの一つである”リザーバー計算”となる可能性があることを示唆した。導電性ポリマー抵抗変化素子は数十から数百で十分機能するとされる”リザーバー計算の読み出し端子重み”の実現に最適であると考えられる。本研究の最終段階としては、将来の機器内実利用を想定し、90 端子を搭載した 2cm 角の PEDOT:PSS 抵抗変化メモリアレーチップを作製した。

(2) 詳細

1)ポリマー配線成長の機構解明と制御 2)機械学習を用いたポリマー配線ニューラルネットワークの構築、に関する主な結果はまだ論文を投稿出来ていない。よって殆どの重要な内容や図が論文に使用される。よって主要な結果の詳細は2*非公開の研究成果に記載する。

3 次元空間での自由配線は、既存のクロスバー研究で困難とされている部分配線を実現する上で本研究の重要なテーマであった。図 1 に示すように、二次元の平面電極を用いた多岐配線ではそのプログラム制御に成功したものの、3 次元配線には成功しなかった。図 2 に 400 μm ピッチの 3×3 電極の作製例と空間溶液中での配線例を示す。原理的には配線が可能であると考えら

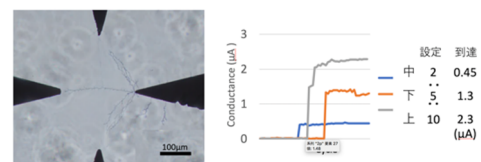


図 1 2 次元平面電極を用いた多岐配線制御例

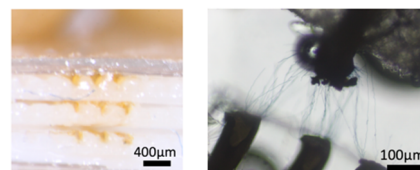


図 2 3 次元電極の作製例(左)と空中配線例(右)

れる為、端子作製技術の革新が必要であると考えている。

将来の機器内実利用を想定し、90 端子を搭載した 2cm 角の PEDOT:PSS 抵抗変化メモリアレーチップを作製した。学習制御機構に簡単に接続可能で一挙に 90 端子の抵抗変化を制御可能である。先端の曲率半径 $30\mu\text{m}$ 、ギャップ長 $50\mu\text{m}$ の金電極 90 対が約 $400\mu\text{m}$ ピッチで並んでいる。端子以外の配線全体は溶液との接触を避ける為にポリイミドによって皮膜されている。さらに電気回路基盤ボードとマイコン制御による 180 端子まで材料に機械学習可能なシステムを構築した。物質への印加信号は外部信号を利用するのでポリマー以外のいろんな材料に適応が可能である。抵抗変化を基本としているので、テスト電圧を印加し微小電流を検出する。

3. 今後の展開

カーボンナノチューブ(CNT)と分子を用いた関連研究において、CNT/分子ランダムネットワークがリカレントニューラルネットワークの一つである”リザーバー計算”となる可能性があることを示唆した。導電性ポリマー抵抗変化素子は”リザーバー計算”の読み出し端子重み”の実現に最適であると考えている。深層学習ニューラルネットワークでは何千何万何億といった全体のシナプス学習更新が必要である。一方で”リザーバー計算”では数十から数百の学習シナプスで複雑な問題に十分機能する。ナノ材料”リザーバー”の開発をこれから進めていくと共に、現在存在するソフト材料”リザーバー”へ接合し、現実の学習と実機搭載を目指していきたい。

4. 自己評価

研究目的として挙げた「空間を自由に配線出来る可塑性を持った有機ポリマー材料を用い、ニューラルネットワークアルゴリズムを基礎とした、物理的にも柔らかい情報回路を創成する。」という目標は、「**有機ポリマー材料を用い、ニューラルネットワーク情報回路を作る**」という部分は 54 対電極におけるオートエンコーダー回路を構築し、9 ビット 3 文字の 3 ビットへの特徴抽出に成功した。ことによって成し遂げたと考えている。しかしながら、制御システムの開発とオペレーションばかりに夢中になって、ワイヤーの詳細な成長機構はあまり振り返り見なかった。この部分は、論文として徐々に発表しておくべきだったかと思う。

研究成果は機械学習による CMOS 以外の材料へのニューラルネットワーク構築の報告は未だ数が少なく貴重な結果であることを鑑みると、十分に新しいコンセプトと材料を披露したという意味で科学技術、社会的には十分意味がある。経済の観点から認められるにはまだ需要を発掘するには至っていない。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. H. Tanaka, M. Akai-Kasaya, A. Termeh Yousefi, L. Hong, L. Fu, H. Tamukoh, D. Tanaka, T. Asai, and T. Ogawa, “A Molecular Neuromorphic Network Device consisting of Single-Walled Carbon Nanotubes complexed with Polyoxometalate” Nature Communication, (2018), 9, 2693–2699,

- | |
|--|
| 2. H. Fujii, A. Setiadi, Y. Kuwahara, and M. Akai-Kasaya , “Single walled carbon nanotube-based stochastic resonance device with molecular self-noise source “, Applied Physics Letters, (2017), 111, 133501–133505. |
| 3. A. Setiadi, H. Fujii, S. Kasai, K. Yamashita, T. Ogawa, T. Ikuta, Y. Kanai, K. Matsumoto, Y. Kuwaharaa and <u>M. Akai-Kasaya</u> , “Room-temperature discrete-charge-fluctuation dynamics of a single molecule adsorbed on a carbon nanotube”, Nanoscale, (2017), 9, 10674–10683. |
| 4.赤井恵,「ポリマーが織り成すニューラルネットワーク」高分子 4 月号 特集 表面・界面の構造がキワ立つ高分子 (2017), 67, 192 |

(2)特許出願

なし

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

学会発表

- [1] M. Akai-Kasaya, Wataru Hikita, Yuji Kuwahara and Tetsuya Asai, “On the Growing Polymer Neural Networks” CMOS Emerging Technologies Research 2017 Symposium, Warsaw, Poland (May 28–30, 2017)
- [2] M. Akai-Kasaya, “Towards Neuromorphic Device and Computing from Molecular Nanotechnology”, Second International Conference on Material Science (ICMS-2017), Tripura, University, Tripura, India (Feb. 14–20, 2017).
- [3] M. Akai-Kasaya , “Complemental Neural Network Built of Growing Polymer Wire” CCMR Incheon Korea (June. 2018)
- [4] M. Akai-Kasaya , “ Use of Room-Temperature Molecular Noise improves Signal Detection in Single Walled Carbon Nanotube Device”, NORTA, Tarragona, Spain, (Sept. 2018)

総説・著作

- [1] 赤井恵,「ポリマーが織り成すニューラルネットワーク」高分子 4 月号 特集 表面・界面の構造がキワ立つ高分子トピック Vol.67, No.4, p.192 (2018).
- [2] M. Akai-Kasaya, “Coulomb-blockade in low-dimensional organic conductors”, Chapter 6, Molecular Architectonics, T. Ogawa and C. Joachim, Eds., Advances in Atom and Single Molecule Machines Series, Springer Berlin / Heidelberg, (2017).

プレスリリース

- [1] “脳の神経に似た電気信号 炭素材料使い再現 九州工大ら” 日経産業新聞 (2018年7月18日) “大阪大学 カーボンナノチューブと分子の乱雑ネットワークが神経様スパイク発火を可能に” 日経バイオテク(Web) (2018年7月18日)
- [2] “Brain function partly replicated by nanomaterials” (2018年7月12–14日), 科学情報We

bサイト: ScienceDaily, Phys.org, NanoWerk, (他 8件)一般情報Webサイト: SPINOff CO M, AZOnano, (他 4件 + α)

- [3] “Creative Use of Noise Brings Bio-Inspired Electronic Improvement”、米国物理学協会AIP からプレスリリース(2017年9月25日)、米国電気工学技術学会誌 IEEE SPECTRUM に紹介記事(2017年10月4日)、科学情報Webサイト: Phys.org, ScienceDaily, Eletronic 360, (他 3件)、一般情報Webサイト: YouTube, R&D, AZOnano, (他 4件 + α)
- [4] “CNT素子内への有機分子導入で分子種ごとに特性周波数をもつ雑音が発生”マイナビニューステクノロジー(Web)(2017年6月23日)
- [5] “Signature analysis of single molecules using their noise signals”(2017年7月11日)、科学情報Webサイト: ScienceDaily, ScienceNewline, Phys.org, (他 3件)、一般情報Webサイト: R&D, AZOnano, (他 4件 + α)