

I

反応拡散系を模したアナログ集積デバイスとその応用

浅井 哲也

北海道大学工学部電子工学科

〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目

II

An analog reaction-diffusion chip and its application

Tetsuya ASAI

Department of Electrical Engineering, Hokkaido University

(Kita 13, Nishi 8, Kita-ku, Sapporo 060-8628)

## 要旨

熱や物質の流入出のあるような非平衡開放系（反応拡散系）の性質を数値的に調べることは、自然界の生き生きとした非線形現象が持つ意味や仕組みを明らかにするための重要な手がかりとなる。ところが、近年の高速計算機を用いたとしても、大規模な反応拡散系を数値的にシミュレートすることは容易ではない。そこで、反応拡散系そのものをアナログ的に模倣するようなアナログ集積デバイスを構築し、それを用いた応用の可能性を探る。空間の一点の反応ダイナミクスを模倣するアナログ回路をシリコンチップ上に二次元配置することで、空間規模によらない高速エミュレーションが可能になる。本稿では、その設計の一例と試作チップの動作について紹介する。さらに、エミュレータ用途以外の応用の可能性についても議論する。

## Abstract

Reaction-diffusion (RD) systems give us important clues to reveal the functions of nonlinear vital phenomena in nature. Because of the difficulty in computing such RD systems using conventional digital processors, analog CMOS circuits that emulate RD systems have been proposed. A 2-D array of the analog reaction circuit is responsible for fast emulation, and its operation rate is independent of the system size. I hereby introduce some examples of these analog circuits and report actual operations of fabricated LSIs, as well as potential applications of the RD LSIs.

### **Keywords:**

analog VLSI, reaction-diffusion system, nonlinear analog circuit, Oregonator, Belousov-Zhabotinsky reaction, image processing

## 1. 反応拡散系とは？

反応拡散系とは、非平衡状態において反応現象と拡散現象が混在したシステムのことをいう。物質やエネルギーの流れをともなう非平衡-開放系では、反応の非線形性が著しく強調されて、平衡系からは予想もつかない動的（ダイナミック）で多様性に富む世界が出現する。たとえば、ベローゾフ・ジャボチンスキー（BZ）反応に見られるようなダイナミックな螺旋パターンの発生、動物の縞状体模様（チューリング構造）の発生、化学パターンの自己複製現象などは、反応拡散系における現象の典型例である。<sup>1)</sup>

化学物質の反応と拡散のモデル（反応拡散モデル）を、以下のような連立偏微分方程式

$$\frac{\partial x_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_i \nabla^2 x_i(\mathbf{r}, t) + f_i(x_i(\mathbf{r}, t)), \quad (1)$$

で表わす。ここで、 $x_i$ は反応種の濃度、 $\mathbf{r}$ は空間、 $t$ は時間、 $\nabla^2$ は空間のラプラシアン、 $D_i$ は拡散係数、 $f_i$ は非線形反応項を表わす。なお、この式は必ずしも化学反応に限られたモデルではない。

一般によく知られている反応モデルとして、二変数のオレゴネータが挙げられる。<sup>2)</sup> これは、生物の代謝回路（クエン酸回路/TCA回路）を模したBZ反応のモデルのひとつで、そのダイナミクスは

$$\tau \frac{dx_1}{dt} = x_1 (1 - x_1) - a x_2 \frac{x_1 - b}{b + x_1}, \quad (2)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = x_1 - x_2, \quad (3)$$

で表わされる。ここで、 $x_1$ と $x_2$ はそれぞれ $\text{HBrO}_2$ と $\text{Br}^-$ イオンの濃度に相当する量を表わし、 $\tau$ 、 $a$ 、 $b$ は反応パラメータである。ここで、 $\text{HBrO}_2$ イオンの反応速度は、 $\text{Br}^-$ のそれよりも十分に速い（ $\tau \ll 1$ ）。オレゴネータのイオン濃度が変化しない点の集合（ $dx_1/dt = 0$ 、 $dx_2/dt = 0$ ）をヌルクラインとよび、それは式(2)と(3)より

$$x_2 = \frac{x_1 (x_1 + b)(1 - x_1)}{a (x_1 - b)}, \quad (\equiv l_1) \quad (4)$$

$$x_2 = x_1. \quad (\equiv l_2) \quad (5)$$

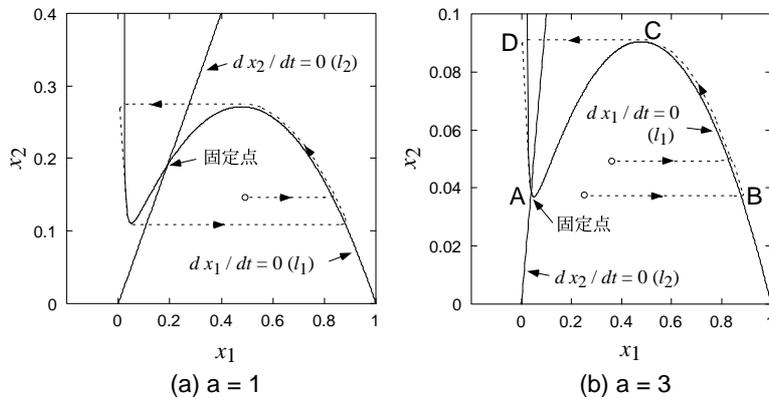


図 1 二変数オレゴネータの相平面上での振る舞い ( $\tau = 10^{-2}$ ,  $b = 0.02$ ): (a) 振動解; (b) 安定解.

である. これらのヌルクライン( $l_1$ と $l_2$ )の交点が, オレゴネータの固定点となる.

図1に典型的なパラメータを用いた場合のオレゴネータの相平面上の軌道とヌルクラインを示す. パラメータの値(固定点に位置)に応じて, オレゴネータの安定性が変化する. 図1(a)に示すように,  $a = 1$ のとき, 固定点はヌルクライン $l_1$ の $dx_2/dx_1 > 0$ の位置にあり, このとき, その固定点のまわりにリミットサイクルが現れる. また $a = 3$ では, 固定点がヌルクライン $l_1$ の $dx_2/dx_1 < 0$ の位置にある. この場合の固定点は, 図1(b)に示すように漸近安定となる.

ここで, 生体組織とオレゴネータとの対応について考えてみる. 刺激を受けると興奮する性質のある細胞には, 刺激が与えられて興奮状態にある興奮期, 興奮が収まり刺激を与えても興奮しない不応期, および刺激を与えると興奮する休止期の三つの状態がある. オレゴネータは, このような興奮性細胞と同様の振る舞いを示す. つまり, 図1(b)中のラベルが示すような, 休止期(A), 興奮期( $B \rightarrow C$ ), 不応期( $D \rightarrow A$ )の三つの状態を持つ. これらの状態はそれぞれ,  $\text{Br}^-$ イオンの消費,  $\text{HBrO}_2$ イオンの自己触媒的增加(触媒の酸化),  $\text{Br}^-$ イオンの消費(触媒の還元反応)を表わす. オレゴネータが休止期にあるときは, 外部からの刺激によって興奮できる状態にある( $A \rightarrow B$ ). 興奮性細胞と同様, 興

奮後に不応期にはいる (C → D). 不応状態では, 外部から入力があっても興奮しない.

## 2. アナログ集積デバイス化のためのモデル設計

オレゴネータのような非線形性の強い系をアナログ集積回路上で正確に模することは容易ではないが, その基本性質のみを模するのであれば, それはさほど難しい問題ではない.<sup>3)</sup> ここでは, 上述のオレゴネータを例にとりて, 反応拡散系をアナログ集積回路するための前準備, すなわちアナログ集積回路向けのモデル設計の例を紹介する.

アナログ集積回路向けのモデル設計を行う上で重要なことは, 集積化が可能なデバイス (またはその回路) が持つ非線形性のみを利用して, 反応ダイナミクス (この例では二変数オレゴネータ) と等価なモデルを設計することである. 以下では, そのモデルをセルと呼ぶ. まず, 少々天下り的ではあるが, 以下のようなセルのダイナミクス

$$\tau \frac{dx_1}{dt} = -x_1 + f(x_1 - x_2, \beta_1), \quad (6)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -x_2 + f(x_1 - \theta, \beta_2), \quad (7)$$

を考える. ここで,  $f(\cdot)$  は以下のようなシグモイド関数

$$f(x, \beta) = \frac{1 + \tanh \beta x}{2}, \quad (8)$$

である. このダイナミクスは, アナログ集積回路で実現が容易なシグモイド関数 (差動増幅器の基本特性) の非線形性のみを利用して, その振る舞いがオレゴネータと質的に等価となるように設計したものである. 図2(a)に示すように,  $\theta = 0.5$  のとき, セルの固定点は式(6)のヌルクライン ( $L_1$ ) の  $dx_2/dx_1 > 0$  の位置にあり, その固定点のまわりにリミットサイクルが現れる. 一方,  $\theta = 0.05$  のとき, 固定点はヌルクラインの  $dx_2/dx_1 < 0$  の位置にあり, 図2(b)に示すような興奮性の応答をする.

上記のセルを組み合わせて二次元反応拡散システムを構成する. そのダイナミクスは, 式(1)の反応項を, 式(6)と(7)

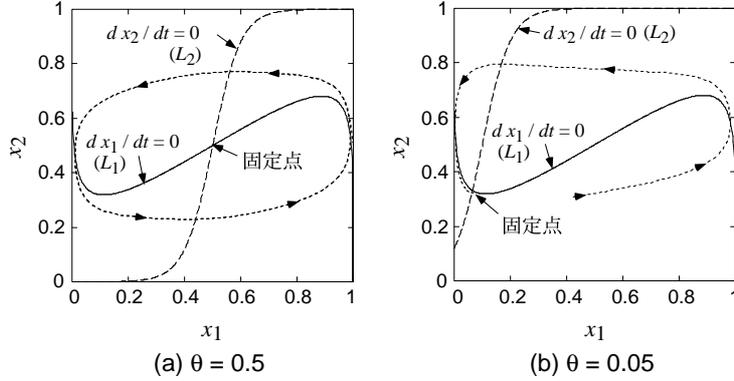


図 2 オレゴネータの等価モデルの相平面上での振る舞い ( $\tau^{-1} = 10, \beta_1 = 5, \beta_2 = 10$ ): (a) 振動解; (b) 安定解.

の右辺でおきかえたものになる. 格子モデル (離散空間形式) を用いてそれらを表現すると,

$$\tau \frac{du_{i,j}}{dt} = -u_{i,j} + f(u_{i,j} - v_{i,j}, \beta_1) + g_{i,j}^u, \quad (9)$$

$$\frac{dv_{i,j}}{dt} = -v_{i,j} + f(u_{i,j} - \theta, \beta_2) + g_{i,j}^v, \quad (10)$$

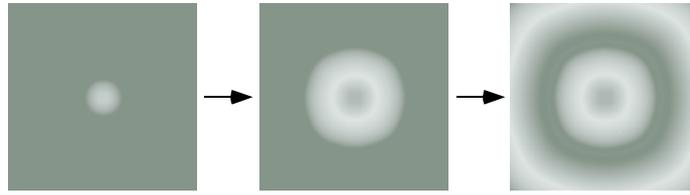
となる. ここで, 式(1)の変数 $x_i$ を $u_{i,j}$ と $v_{i,j}$ で置き換えた. また,  $g_{i,j}^u$ と $g_{i,j}^v$ は, セルの周りの平均状態に自分をもっていこうとする短距離引力相互作用 (物質の拡散) であり, それらは

$$g_{i,j}^u = D_u \frac{u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}}{h^2},$$

$$g_{i,j}^v = D_v \frac{v_{i-1,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j-1} + v_{i,j+1} - 4v_{i,j}}{h^2}.$$

で表わされる (ラプラシアンを一次まで展開したもの).

図3は式(6)と(7)で表わされた反応拡散系の数値計算例である (50 × 50のセルを二次元配置). 図中の矢印は時間の経過を表わす. ここでは, 変数 $v_{i,j}$ の値をグレイスケールで表わした ( $v_{i,j} = 0$ : 黒,  $v_{i,j} = 1$ : 白). セルが興奮動作をするようなパラメータでは, BZ反応によく見られるような図3(a)のターゲットパターン (同心円パターン) が得られる. 図3(b)に, セルがリミットサイクル解を持つ時の振る舞



(a)  $D_u = 3 \times 10^{-4}$ ,  $\theta = 0.15$



(b)  $D_u = 10^{-4}$ ,  $\theta = 0.5$

図 3 オレゴネータの等価モデルを用いた反応拡散系の振る舞い ( $\beta_1 = 5$ ,  $\beta_2 = 10$ ,  $h = 0.01$ ,  $D_v = 0$ ,  $\tau^{-1} = 10^2$ , ノイマン境界条件を設定): (a) 興奮性セルの集団によるターゲットパターン; (b) 振動性セルの集団による螺旋パターン.

いを示す. ランダムな初期値を与えると, 局所的に位相がそろった安定振動パターンが得られる. セル間の結合を強めると (このパラメータ例では,  $D_u > 10^{-3}$ ), セルが同期振動するようになり, 空間パターンは消失する.

### 3. 反応拡散モデルのアナログ集積化

前述したように,  $\text{HBrO}_2$ の反応速度が $\text{Br}^-$ のそれよりも十分に速いとする ( $\tau \ll 1$ ). この仮定により, 式(6)の微分項が無視できるとする. また, 式(7)において $\beta_2 \rightarrow \infty$ であれば,  $x_1 \leq \theta$ のとき $x_2 \rightarrow 0$ ,  $x_1 > \theta$ のとき $x_2 \rightarrow 1$ である. ここでもし,  $x_2$ の取りうる値が $[0:1]$ であるとすれば (何らかの物理的制限によって $x_2$ 値は発散しないと仮定すれば), 式(7)の右辺は $x_2$ の増減を表わす二値で近似できそうである. その結果, 式(6)と(7)を簡略化したダイナミクス

$$x_1 = f(x_1 - x_2, \beta_1) \quad (11)$$

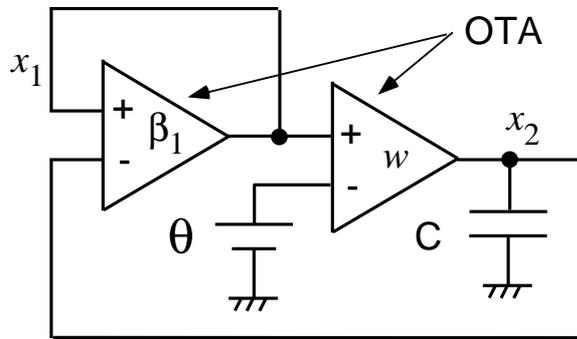


図 4 アナログ集積デバイス向けに最適化したオレゴネータ回路.

$$\frac{dx_2}{dt} = \begin{cases} w & (\text{if } x_1 > \theta) \\ -w & (\text{else}) \end{cases} \quad (12)$$

を得る. ここで,  $w$  は  $x_2$  の増減を表わす定数である.

図4にセル回路の構成を示す. シグモイド型の非線形特性をつくるための差動トランスコンダクタンス増幅器(OTA)とキャパシタのみを用いて構成できる. 回路中のOTA ( $\beta_1$ ) が式(11)を表わし,  $C$ とOTA ( $w$ ) が式(12)のダイナミクスをつくりだす. OTA ( $w$ ) に含まれる差動増幅器のソース電流が,  $x_2$  の増減を表わす定数  $w$  に相当する. OTA ( $w$ ) の出力電圧  $x_2$  が電源電圧 (VDD または VSS) に近づくと, OTA の出力バッファの MOS FET が飽和領域で動作しなくなるため, 出力電流は 0 に近づく. したがって,  $x_2$  の取り得る電圧が [VDD:VSS] に制限され, 式(12)の  $x_2$  が発散することはない.

図5は試作チップ (MOSIS 1.5- $\mu\text{m}$  CMOS プロセス, セルの大きさ: 約  $70 \times 70 \mu\text{m}^2$ ) のセルの測定結果である. このように, BZ 反応に見られるような硬い振動が得られる. 図6に 0.5- $\mu\text{m}$  CMOS プロセスで試作した反応拡散チップの写真を示す. これは,  $24 \times 24$  個のセルを実装したもので, 一つのセルのサイズは約  $30 \times 30 \mu\text{m}^2$  である. 全てのセルを振動状態に設定し ( $\theta = 2.5 \text{ V}$ ), セル間をパストランジスタで結合した場合のチップの表面電位の移り変わりを図7に示す. これは, チップからシリアルに読み出した全セルの出力電圧  $v_{ij}$  を画面上で再構成したものである. 図中の白点が興奮状態, 黒点が休止状態を表わす. 興奮状態と休止状態のセ

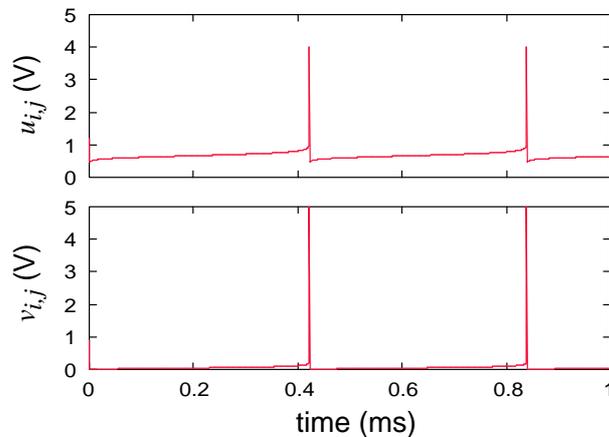


図 5 試作したオレゴネータ回路の時間応答. OTA ( $\beta_1$ ) の電源電圧は,  $V_{DD} = 4\text{ V}$  と  $V_{SS} = 0.5\text{ V}$ , OTA ( $w$ ) の電源電圧は,  $V_{DD} = 5\text{ V}$  と  $V_{SS} = 0$ , しきい電圧  $\theta$  は  $2.5\text{ V}$  (振動モードに設定).

ルのクラスタが形成されて, 図に示すようなダイナミックなパターンが発生する. 同じパターンが出ることは二度とない. これは大変に「生々しい」動きであり, 紙面ではその全てを表現できない. 文献<sup>7)</sup>に挙げたサイトにて実物の動画をご覧頂ければ幸いである.

#### 4. 反応拡散チップの応用

反応拡散系を応用して画像処理 (パターン修復) を行うことができる. 指紋のような縞構造を持つパターンは反応拡散系が創り出す典型的な空間パターンであり, この系にパターンの種 (欠損のある指紋画像) を与えると, 周囲の構造の特徴を保ちながら最適なパターン (欠損・ノイズのない指紋画像) が自己生成される.<sup>4,5)</sup> 以下では, アナログ集積回路化に適した神経振動子モデル (シグモイド伝達特性を持つ興奮性と抑制性の神経細胞のカップリングモデル<sup>6)</sup>) をセルとして用いた例を紹介する. 神経細胞間の相互作用を二物質の化学反応に対応させ, 膜電位の時間変化をヌルクラインの近傍で線形近似すると, その方程式はチューリングのパターン発生モデル<sup>1)</sup>と同形になる. 空間の周期解を仮

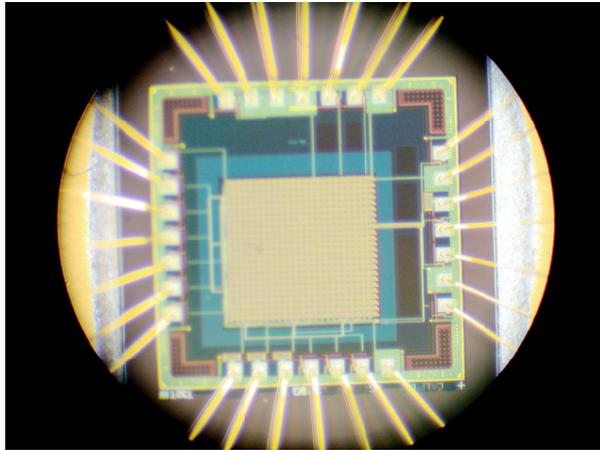


図 6 0.5- $\mu\text{m}$  CMOSプロセスで試作した反応拡散チップ. 約 $1\text{mm}^2$ の面上に $24\times 24$ 個のオレゴネータセルを実装.

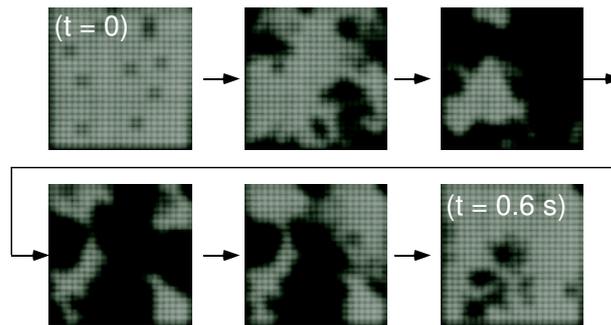


図 7 反応拡散チップの実測例(チップ表面の電位の移り変わり).

定して空間周波数に関する安定性を計算すると, パラメータにより決まる特定の空間周波数が不安定化する. この仕組みが, 安定な(一定空間周波数の)縞分布をつくりだす.

セル回路を二次元結合させた反応拡散チップの動作例を図8と9に示す.<sup>4)</sup> パラメータには, ランダム初期パターンから縞状パターン(平均空間周波数を $f$ で定義)が発生するような値を与える. 平均空間周波数が $f$ と同程度の縞状パターン(これを参照パターンと呼ぶ)を初期パターンとして反応拡散チップに与えると, 当然ながら同じパターンが得られるのだが, 参照パターンに空間周波数が $f$ 以下のノイズ(傷)をのせたパターンを反応拡散チップに与えた場合

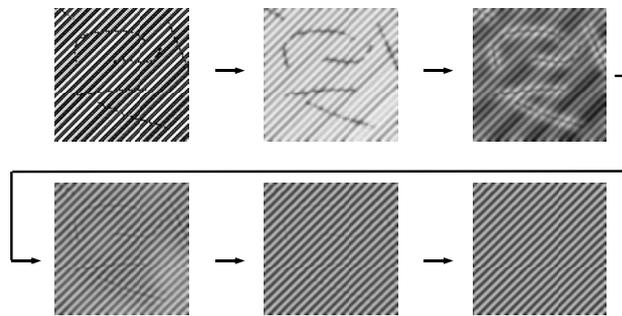


図 8 傷の修復動作.

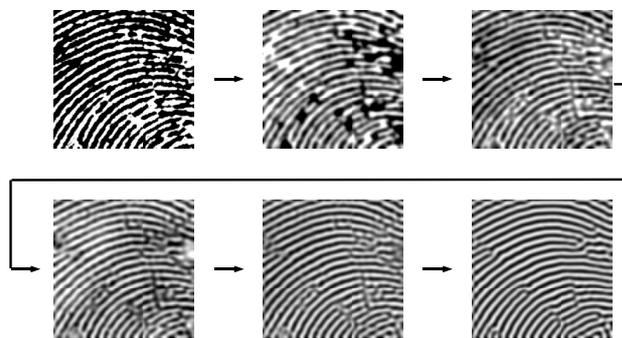


図 9 指紋画像の修復動作.

でも、参照パターンと同じパターンが得られる（図8）。この結果は、パターンに与えたノイズ（傷）が反応拡散回路のパターン生成能力によって除去（傷に対しては修復）されることを示している。また、同様の試みを指紋パターンに対して行い、初期画像のノイズ部分（黒い塊）が除去され、さらに指紋の細線部・欠損部を復元できることが確認できている（図9）。

## 5. 今後の展開とさらなる応用

対流や生命の群行動など、自然が創り出す「模様」は見るものの心にその存在を大きく訴えかける。このような自然がつくりだす模様は、もとをたどれば、反応拡散現象である。反応拡散チップ（生き生きとした時空間パターンを生成する自然模倣型半導体デバイス）の開発の第一の狙いは、この反応拡散現象そのものを電氣的に模する半導体デバイス／集積回路を実現し、自然がつくりだすさまざまな「模

様」をわずか数ミリ角のチップ上に人工的に創り出すことである。これを既存の表示装置と組み合わせることで、人の目を惹く「生きた」模様（たとえば、雲の流れやある種の細胞性粘菌が創り出す壮大な螺旋模様など）をリアルタイムに描く集積システムができる。

人と反応拡散チップのコラボレーションにより、これまでにない斬新な模様が生まれる可能性がある。たとえば衣類等の新しいデザイン設計、広告用視覚効果デバイス、デジタルメディアプレーヤなどに搭載するビジュアルエフェクタ、携帯電話等のスクリーンセーバ等、様々な応用への展開が期待できる。また、デバイスに与えられた入力（たとえば、人の指が触れる、声をかける）に応じて、多種多様なパターンを出力することも可能である。これはいわば、人とデバイス（=自然）の原始的なコミュニケーションであり、次世代のヒューマンインターフェースの共通基盤としてのデバイス技術となりえるかもしれない。

## 文献

- 1) 三池 英敏, 森 義仁, 山口 智彦, 非平衡系の化学III: 反応・拡散系のダイナミクス (講談社, 1997) .
- 2) R. J. Field and M. Burger, *Oscillations and travelling waves in chemical systems* ( John Wiley & Sons, Inc., 1985 ) .
- 3) T. Asai, Y. Nishimiya, and Y. Amemiya: IEICE Trans. Fundamentals **E85-A**, 2093 (2002).
- 4) 浅井 哲也: 電気学会誌 **121**, 253 (2001).
- 5) K. Ito, T. Aoki. and T. Higuchi: IEICE Trans. Fundamentals **E84-A**, 1909 (2001).
- 6) H.R. Wilson and J.D. Cowan: Biophys. J. **12**, 1 (1972).
- 7) <http://sapiens-ei.eng.hokudai.ac.jp/contents/rdchip.shtml>

浅井 哲也（あさい てつや）

1999年豊橋技術科学大学大学院工学研究科博士課程修了。同年、北海道大学大学院工学研究科助手。2001年同研究科助教授、現在に至る。現在の専門分野は、ニューラルネットワーク、アナログ集積回路、生体様イメージセンサ、インテリジェントセンサ集積回路、量子デバイス回路。