

令和 4 年 5 月 9 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K22877

研究課題名（和文）ナノ材料ネットワーク構造を用いたフィジカルレザバーの構築

研究課題名（英文）Construction of Physical Reservoir Consisting of Nano Material Network

研究代表者

赤井 恵（Akai-Kasaya, Megumi）

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号：50437373

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：ポリオキソメタレート（POM）分子とカーボンナノチューブ（CNT）のランダムで非常に高密度のネットワークニューロモルフィック素子を開発した。この素子は、信号応答のダイナミクスとネットワークの複雑さを利用するリザーバー計算（RC）の基本的な機能を備えていることが期待されていた。本研究では、CNT/POMランダムネットワークから収集された複数の信号を使用してRCを実行することに成功した。信号は、ネットワークの複雑さに起因する幅広い多様性を伴う非線形応答を示し、RCのパフォーマンスは、波形再構成、非線形自己回帰モデル、メモリ容量などのさまざまなタスクについて評価された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ソフトとしてもハードとしても、次世代の技術として、“脳”の持つ機能を応用につなげようという機運が大きく高まっています。脳の構造を模したニューラルネットワーク人工知能（AI）の構造を素子や物質で作成し、より身近でその情報処理を行おうとするエッジコンピューティング技術の開発が重要視されています。ナノマテリアルで構成される物理的な貯留層は、ますます重要になるエッジAIのために、低コスト、低消費電力、および高度に統合されたハードウェアデバイスを備えたコンピューティングシステムになる可能性があります。

研究成果の概要（英文）：Molecular neuromorphic devices are composed of a random and extremely dense network of single-walled carbon nanotubes (SWNTs) complexed with polyoxometalate (POM). Such devices are expected to have the rudimentary ability of reservoir computing (RC), which utilizes signal response dynamics and a certain degree of network complexity. In this study, we performed RC using multiple signals collected from a SWNT/POM random network. The signals showed a nonlinear response with wide diversity originating from the network complexity. The performance of RC was evaluated for various tasks such as waveform reconstruction, a nonlinear autoregressive model, and memory capacity. The obtained results indicated its high capability as a nonlinear dynamical system, capable of information processing incorporated into edge computing in future technologies.

研究分野：表面科学，有機バイオエレクトロニクス，ニューロモルフィック素子

キーワード：カーボンナノチューブ ポリ酸分子 ニューラルネットワーク リザーバー計算 ランダムネットワーク ニューロモルフィック

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ニューラルネットワークを基礎とする人工知能(AI)の能力が格段に発展し、その応用が開始されると同時に、ソフトウェアベースで動く AI の限界や問題点も同時に指摘されてきた。一方でデバイスや材料、そしてこれまで全く情報処理とは無関係だと思われていた物理現象を利用することで、ニューラルネットワークを構築、またはその機能を取り出して情報処理に利用する可能性が盛んに議論され、多くの研究が始まっていた。その中でもリザーバー計算(RC)は時系列情報の処理を得意とするリカレントニューラルネットワークのひとつであり、その特殊構造から学習が早く、かつ物理系の力学的応答や電磁気学的性質が計算資源として利用可能なことが見いだされている。筆者らは以前の研究で、カーボンナノチューブ(CNT)とポリオキソメタレート(POM)分子のネットワーク素子から発生するスパイク信号を再現するモデルを提案し、この系がリザーバーとして機能する可能性を示していた。このモデルでは POM 分子が多段階還元することで電子を溜めこみ、それが高電界下で放出される。この応答では状態の変化が過去の履歴にも依存することから、系はリザーバーの計算能力に不可欠な、非線形変換能力と記憶容量を有するのではないかと期待できた。

2. 研究の目的

先行研究における CNT/POM 分子のネットワークモデルでは、SWNT を介して接続された 5500 個の POM 分子で構成される二次元 POM / CNT ネットワークがリザーバーとして使用され、50~100 個の POM 分子が読み取り値としてランダムに選択された。しかし現実の実験では、凝集した小さな領域から各単一分子で複数の電流を検出することはほとんど不可能である。そこで本研究では現実の二次元 POM / CNT ランダムネットワークを作製し、現実の試料から複数の信号を検出し、リザーバー動作を実証することを最初の目的とした。現実的な電流測定におけるサンプル準備と電流測定条件に関連する多くの制限を最適化させ、またネットワーク構造を最適化し、“CNT/分子ネットワークレザバー”を物理的に実現することだけでなく、試料のリザーバーとしての機能を最大限に引き出すことを目的とした。

3. 研究の方法

研究初期の段階ではネットワーク試料にプローブをコンタクトさせ、信号を入力し、対向端子に出力を得る。この時入力電圧、出力信号は電流を検出する。入力信号には単純な周期信号から非周期の複雑な形状を持った信号を入力する。入出力信号の差、若しくは出力信号の差を解析することで、素子自体がダイナミクスを持つか、そのダイナミクスの性質は何か、そして入力に対する同期特性を持つかなどを解析することで、ネットワークにどれほどのレザバー能力があるのかを見つめる。結果からリザーバー性能を算出し、ネットワークの構造を変えて実験を繰り返し、最適な特性を持つネットワーク構造を見つける。

次に多端子信号計測システムを作り、試料からの出力信号を短い時間で同時計測し、これらの信号から“レザバー計算”を行なう。提案時点の唯一報告であったマテリアルネットワーク多端子リザーバー計算におけるサイン波や三角波等の周期入力から異なる周波数の周期信号を再構成、およびリカレントニューラルネットワーク分野のベンチマークタスクである NARMA 信号等の学習に取り組んだ。

4. 研究成果

本研究は当初の研究計画に非常に忠実に行われた。まず POM と複合体を形成した SWNT ランダムネットワークから収集された複数の信号を使用してリザーバー計算を実行した。試料からの信号は、ネットワークの複雑さに起因する幅広い多様性を伴う非線形応答を示した。取得データは、目的とした周期的な波の再構成タスクの良好なパフォーマンスを示した。これらの結果は周期信号再構成タスクに対して非常に良い結果を示した。

また次にプローブピンアレイを備えた多方向データ取得システムを独自に開発し、SWNT/POM ネットワーク内の物理的に分離されたポイントである複数のノードからの電流を測定可能にした。試料としては研究計画時には想定していなかった CNT 複合紙も、POM 添加後にリザーバー機能を示した。途中、溶液を流れる電気化学電流が非線形信号応答と信号伝達ダイナミクスに大きく影響することが判明した。ウェット条件下で POM を使用した CNT 複合紙の NARMA2 タスクは高いものであった。電気化学電流は試料の劣化を招くため、能力が高くとも機能を保つことは難しい。よって匹敵する能力を示す乾燥 SWNT/POM ネットワークの改良にもとりくんだ。

本研究では、以前の研究でモデルシミュレーションによって予測された SWNT / POM ネットワークのリザーバー機能が実験的に実証されたが、リザーバーの能力はモデル計算の結果には及ばなかった。しかしながら試料からの応答には、それぞれの RC タスクの長所と短所があることも判明した。これらの結果は、将来の開発のための高いリザーバー機能を備えたナノマテリアルネットワークの設計と製造に貢献することが期待される。ナノマテリアルで構成される物理的

な貯留層は、ますます重要になるエッジコンピューティングのために、低コスト、低消費電力、および高度に統合されたハードウェアデバイスを備えたコンピューティングシステムになる可能性がある。これらの結果は以下の代表的な論文によって公表されている。

[1]Akai-Kasaya M., Takeshima Y., Kan S., Nakajima K., Oya T., and Asai T., "Performance of reservoir computing in a random network of single-walled carbon nanotubes complexed with polyoxometalate," *Neuromorphic Computing and Engineering*, vol. 2, pp. 014003(1)-014003(10) (2022).

[2]Kan S., Asai T., Nakajima K., and Akai-Kasaya M., "Physical implementation of reservoir computing through electrochemical reaction," *Advanced Science*, vol. 9, pp. 2104076(1)-2104076(8) (2021).

[3]Kan S., Sasaki Y., Asai T., and Akai-Kasaya M., "Applying a molecular device to stochastic computing operation for a hardware AI system design," *Journal of Signal Processing*, vol. 25, no. 6, pp. 221-225 (2021).

[4]赤井 恵, 浅井 哲也, 中嶋 浩平, "学習する有機材料：リザーバー計算に向けたニューラルネットワーク形成," *応用物理*, vol. 90, no. 8, pp. 504-508 (2021).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kan S., Nakajima K., Takeshima Y., Asai T., Kuwahara Y., and Akai-Kasaya M.	4. 巻 15
2. 論文標題 Simple reservoir computing capitalizing on the nonlinear response of materials: Theory and physical implementations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 024030-024030
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevApplied.15.024030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Akai-Kasaya M., Ogawa N., and Kakinoki S	4. 巻 835
2. 論文標題 Coulomb blockade transport emerged in quasi one-dimensional PEDOT: PSS fiber	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 012017-012017
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Akai-Kasaya M., Hagiwara N., Hikita W., Okada M., Sugito Y., Kuwahara Y., and Asai T.	4. 巻 59
2. 論文標題 Evolving conductive polymer neural networks on wetware	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 060601-060610
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ab8e06	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hagiwara N., Sekizaki S., Kuwahara Y., Asai T., and Akai-Kasaya M.	4. 巻 13
2. 論文標題 Long- and short-term conductance control of artificial polymer wire synapses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Polymers	6. 最初と最後の頁 312-322
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/polym13020312	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Amemiya Yoshiki, Jose Ali Emiliano, Hagiwara Naruki, Akai-Kasaya Megumi, Asai Tetsuya	4. 巻 13
2. 論文標題 Heuristic model for configurable polymer wire synaptic devices	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE	6. 最初と最後の頁 379 ~ 384
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1587/nolta.13.379	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kubota Hiroshi, Hasegawa Tsuyoshi, Akai-Kasaya Megumi, Asai Tetsuya	4. 巻 13
2. 論文標題 Noise sensitivity of physical reservoir computing in a ring array of atomic switches	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE	6. 最初と最後の頁 373 ~ 378
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1587/nolta.13.373	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akai-Kasaya M., Takeshima Y., Kan S., Nakajima K., Oya T., and Asai T.	4. 巻 2
2. 論文標題 Performance of reservoir computing in a random network of single-walled carbon nanotubes complexed with polyoxometalate	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Neuromorphic Computing and Engineering	6. 最初と最後の頁 014003.1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kan Shaohua, Nakajima Kohei, Asai Tetsuya, Akai Kasaya Megumi	4. 巻 9
2. 論文標題 Physical Implementation of Reservoir Computing through Electrochemical Reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Science	6. 最初と最後の頁 2104076 ~ 2104076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/advs.202104076	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kan Shaohua, Sasaki Yoshiaki, Asai Tetsuya, Akai-Kasaya Megumi	4. 巻 25
2. 論文標題 Applying a Molecular Device to Stochastic Computing Operation for a Hardware AI System Design	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Signal Processing	6. 最初と最後の頁 221 ~ 225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2299/jsp.25.221	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 赤井 恵, 浅井 哲也, 中嶋 浩平	4. 巻 90
2. 論文標題 学習する有機材料: リザーバ計算に向けたニューラルネットワーク形成	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 応用物理	6. 最初と最後の頁 504-508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計26件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Kan S., Nakajima K., Asai T., and Akai-Kasaya M.
2. 発表標題 Simple reservoir computing capitalizing on the nonlinear response of materials: theory and physical implementations
3. 学会等名 Joint Symposium of JSPS-DST Bilateral Research on Charge- and Spin-Blockade in Ultrathin-Layers of Single Molecule Magnets (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年 ~ 2021年

1. 発表者名 赤井 恵, 浅井 哲也
2. 発表標題 ナノ材料を用いた生体及び神経細胞機能模倣素子
3. 学会等名 第30回日本神経回路学会 全国大会 (JNNS2020) (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 五十嵐 健人, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 リザーバ機能発現を目指した大規模非線形ネットワークシミュレーターの構築
3. 学会等名 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
4. 発表年 2020年～2021年

1. 発表者名 久保田 宙, 長谷川 剛, 赤井 恵, 浅井 哲也
2. 発表標題 原子スイッチアレイを用いた物理リザーバコンピューティング
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kan Shaohua, 竹嶋 勇樹, 中嶋 浩平, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 An Electrochemical Reaction Reservoir Computing realized by Multiple Data Acquisition System
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年～2021年

1. 発表者名 赤井 恵
2. 発表標題 高分子材料の持つ情報機能の探索
3. 学会等名 第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 秋原 成基, 関崎 翔馬, 桑原 裕司, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 竹嶋 勇樹, Kan Shaohua, 桑原 裕司, 中嶋 浩平, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 ポリ酸溶液を用いたリザーバコンピューティング
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 秋原 成基, 岡田 将, 杉戸 泰雅, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第10回分子アーキテクトニクス研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kan Shaohua, 中嶋 浩平, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 Novel architecture design of echo state network and performance analysis of information processing
3. 学会等名 第10回分子アーキテクトニクス研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 秋原 成基, 岡田 将, 杉戸 泰雅, 浅井 哲也, 桑原 裕司, 赤井 恵
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Akai-Kasaya
2. 発表標題 Physical reservoir computing on nano-scale network devices
3. 学会等名 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications NORTA 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akai-Kasaya M.
2. 発表標題 Towards physical neuromorphic device consisting of nanomaterials
3. 学会等名 International Conference on Memristive Materials, Device & Systems (MEMRISYS 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 赤井 恵
2. 発表標題 有機材料を利用した神経細胞機能模倣デバイスとそのAI応用に向けて
3. 学会等名 第8回電子デバイスフォーラム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 赤井 恵
2. 発表標題 有機マテリアルが拓くニューロモルフィック科学
3. 学会等名 応用物理学会関西支部 2021年度第2回講演会 「昭和から令和までを橋架けた応用物理学における金字塔とその今 ~ノーベル賞から広がる最先端の研究~」 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akai-Kasaya M.
2. 発表標題 Organic material that learns: Construction of physical neural network
3. 学会等名 the 17th International Conference on Multimedia Information Technology and Applications (MITA 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kan S., Nakajima K., Asai T., and Akai-Kasaya M
2. 発表標題 Simple reservoir computing capitalizing on the nonlinear response of materials: theory and physical implementations
3. 学会等名 Joint Symposium of JSPS-DST Bilateral Research on Charge- and Spin-Blockade in Ultrathin-Layers of Single Molecule Magnets (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hagiwara N., Amemiya Y., Ali E.J., Asai T., and Akai-Kasaya M.
2. 発表標題 Feasibility of neuromorphic wetware using configurable polymer networks
3. 学会等名 The 10th RIEC International Symposium on Brain Functions and Brain Computer (国際学会)
4. 発表年 2021年~2022年

1. 発表者名 Hagiwara N., Asai T., and Akai-Kasaya M.
2. 発表標題 Conductance control of free-wiring conductive polymer synapses
3. 学会等名 The 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems (MEMRISYS 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kan S., Sasaki Y., Asai T., and Akai-Kasaya M
2. 発表標題 Applying a molecular device to stochastic computing operation for a hardware AI system design
3. 学会等名 RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 秋原 成基, 雨宮 佳希, アリ ホセ エミリアーノ, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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
4. 発表年 2021年～2022年

1. 発表者名 五十嵐 健人, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 CNT/分子ネットワークによる物理リザーバの構築とその評価
3. 学会等名 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
4. 発表年 2021年～2022年

1. 発表者名 秋原 成基, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 導電性ポリマーワイヤーシナプスの抵抗変化特性評価
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 雨宮 佳希, アリ ホセ エミリアーノ, 赤井 恵, 浅井 哲也
2. 発表標題 再構成可能な分子シナプス素子の簡易モデル
3. 学会等名 第34回 回路とシステムワークショップ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 アリ ホセ エミリアーノ, 雨宮 佳希, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 Neuromorphic Devices using Spatial Free Wiring of Conductive Polymer for Hardware Artificial Neural Networks
3. 学会等名 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
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 五十嵐 健人, 浅井 哲也, 赤井 恵
2. 発表標題 リザーバ機能発現を目指した大規模非線形ネットワークシミュレーターの構築
3. 学会等名 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
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Akai-Kasaya M. and Asai T.	4. 発行年 2021年
2. 出版社 World Scientific	5. 総ページ数 624
3. 書名 Handbook of Unconventional Computing	

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 リザーバコンピューティング用リザーバ及びそれを用いた情報処理装置	発明者 赤井 恵 竹島 勇喜	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2019-184884	出願年 2019年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------