

機械学習の消費電力を飛躍的に低減する脳型情報処理デバイスの開発

研究代表者 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 グループリーダー 土屋 敬志
共同研究者 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 ICYS フェロー 西岡 大貴
共同研究者 東京理科大学 先進工学研究科物理工学専攻 博士課程 2 年 北野 比菜
共同研究者 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 グループリーダー 寺部 一弥

1. 緒言

近年、深層学習や生成 AI の登場により指数関数的に増加している機械学習の消費電力を削減するため、脳型情報処理の研究開発が進められている¹。特に、物理デバイスが示す非線形現象を計算資源として情報処理に利用する物理リザーバーコンピューティング (Physical Reservoir Computing, PRC) が注目されている²。中でも、材料内部で生じる非線形現象を利用する材料を基盤とする PRC、すなわち *in-materio* リザーバーコンピューティングは、その優れた汎用性から特に有望視されている³⁻¹⁷。例えば、宇佐美らは、スルホン化ポリアニリン (SPAN) で形成された有機電気化学ネットワークの電気応答を用いて、短期記憶タスクや音声認識タスクを高精度で解決できることを示し、材料の固有特性が計算資源として利用可能であることを強く示唆した⁴。多くの研究者が、ソフトボディ、原子スイッチ、ナノワイヤネットワーク、強誘電体、スピントロニクス材料など様々な材料システムの探索に取り組んでおり、この動きは目覚ましい発展を見せている³⁻¹⁷。我々は、イオン伝導性無機酸化物薄膜と水素末端ダイヤモンド単結晶を用いて作製した電気二重層トランジスタ (EDLT) において、イオン輸送と電子輸送の相互作用が複雑な電気応答を生じ、様々な時系列データ処理が可能であることを報告した¹⁸⁻²¹。しかし、ハイパーパラメータを自由に設定し性能を最適化できるシミュレーションベースの機械学習とは異なり、EDLT の特性と計算性能の相関関係、およびその相関の程度は不明確であり、より高い性能を達成するための設計指針は得られていない。

そこで本研究では、グラフェンとリチウムイオン伝導性無機固体電解質薄膜からなる EDLT を開発し、その物理リザーバーコンピューティング性能を評価した。グラフェンはディラックコーン型の電子構造を持ち、フェルミ準位を制御することで n 型と p 型の両方の両極性輸送を示す半金属である²²。その *I-V* 特性は、従来の EDLT 型物理リザーバーコンピューティングの研究で使用されたワイドギャップ半導体である水素終端ダイヤモンドとは大きく異なるため¹⁸⁻²¹、チャネル材料の *I-V* 特性が計算性能にどのように影響するかを調査することが可能である。PRC の代表的なベンチマーク課題である非線形自己回帰移動平均 (NARMA) タスク^{17,18,21,23-26}に加え、タスクの種類に依存しない計算性能指標である情報処理能力 (IPC) を PRC 性能評価のために分析した²⁷⁻²⁹。情報入力に使用されるゲート電圧パルス列の電圧幅とパルス周期をハイパーパラメータ (外部設定変数) として制御・評価することで、EDLT の *I-V* 特性と計算性能の相関関係を調査し、PRC デバイスの性能

向上の指針を得た。

2. 実験結果および考察

図 1(a)は、 Li^+ 伝導性アモルファス酸化物薄膜と単層グラフェンから構成される EDLT の模式図を示す³⁰。 SiO_2/Si 基板上に化学気相成長法 (CVD) で成長させた単層グラフェ

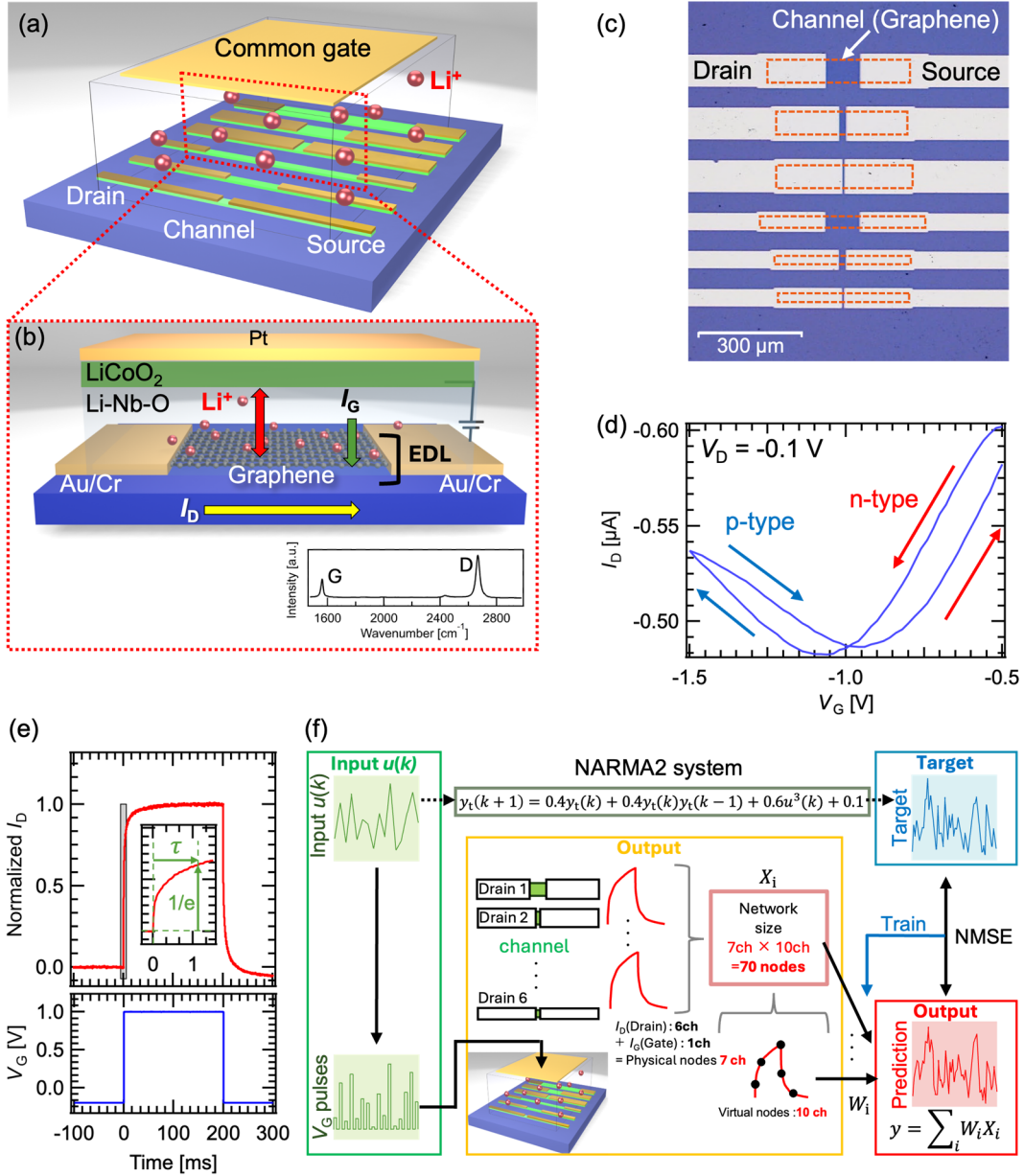


図 1 (a)グラフェンと α -LN から構成される EDL 型 IGR の模式図、(b)IGR における EDL メカニズムの模式図 (挿入図はグラフェンチャネルのラマン分光スペクトルを示す)、(c)グラフェンチャネルの光学顕微鏡像、(d)EDLT の I_d - V_g 特性、(e) V_g パルスに対する EDLT の典型的な I_d 応答、(f)本研究における NARMA2 タスクの模式図³⁰

ンをチャネルとして使用した。フォトリソグラフィと電子線蒸着法を用いて、ソース電極およびドレイン電極として Au/Cr 薄膜を堆積した。その後、パルスレーザー堆積法により、Li⁺伝導性アモルファス Li-Nb-O (*a*-LN) および Li⁺正孔混合伝導性 LiCoO₂ 薄膜を堆積した。さらに、集電体として LiCoO₂ 層上に Pt を堆積した[図 1(b)]³⁰。チャネルのラマン分光スペクトルの G バンド(1582 cm⁻¹)、D バンド(2685 cm⁻¹)より、グラフェン層数が 1 層であることを確認した[図 1(b)挿入図]³¹。グラフェンチャネルから多様な出力を得るため、5~100 μm の異なる長さのチャネルを製作し、EDLT からの多様な出力を得た。実際のグラフェンチャネルの光学顕微鏡像を図 1(c)に示す³⁰。図 1(d)は、チャネル長 100 μm の EDLT について、ドレイン電圧(V_D) -0.1 V で測定した I_D - V_G 特性を示す³⁰。正のゲート電圧(V_G)を EDLT に印加すると、Li⁺イオンがチャネル側へ移動し、グラフェンチャネル内に電子が蓄積する (EDL の充電)。これによりチャネル抵抗が減少し、ドレイン電流(I_D)が増加する。逆の電圧を印加すると、逆の現象によって正孔が蓄積する。図 1(d)で観察される両極性 (V 字型) I_D - V_G 特性は、グラフェン系電界効果トランジスタの典型的な挙動である^{22,32-35}。これは単層グラフェンのディラックコーン型のバンド構造に対応する。 I - V 特性に観察されるヒステリシスは、*a*-LiN/グラフェン界面近傍における Li⁺の比較的遅い緩和に起因し、これは短期記憶の強化に有益である。図 1(e)は単一 V_G パルスに対する EDLT の典型的な I_D 応答を示す。 I_D 応答から、EDL の充電/放電の時間定数 (τ) は、 $t=\tau$ において I_D が初期値 A の $1/e$ (A の 37%、減衰率は A の 63%) に減少するという条件を仮定することで、約 1.10 ms と算出された^{19, 30}。

図 1(f)に示すように、このような EDLT の I_D 応答を PRC における計算資源として利用した³⁰。計算性能は、PRC の典型的なベンチマークタスクである 2 次非線形自己回帰移動平均 (NARMA2) タスクに基づいて評価した。時系列データ $u(k)$ は入力層に入力される (k は離散時間)。 $u(k)$ は V_G パルス列として入力され、その後、 $u(k)$ は、リザーバー層として機能する EDLT 内のイオン・電子結合ダイナミクスを通じて、非線形高次元空間にマッピングされる。これらは様々な I_D 応答と時間多重化として表され、各ノード i ($i=1, 2, \dots, N$) におけるリザーバー状態 $X_i(k)$ を生成する。リザーバー出力 $y(k)$ は、 $X_i(k)$ と読み出し重み w_i の線形結合として以下のように得られる：

$$y(k) = \sum_{i=1}^N w_i X_i(k) + b \quad (1)$$

ここで、 N と b はそれぞれリザーバーの状態数とバイアス項を表す。読み出し重みはリッジ回帰を用いて学習した。前述のように、物理リザーバーとしての EDLT の主な役割は、入力に対する高次元空間への写像関数として機能することである。したがって、デバイスの伝達曲線 (I_D - V_G 特性) の非線形性がこのマッピングに大きく影響する一方、 I_D の緩和挙動は時間多重化の程度、すなわちリザーバーの高次元性に強い影響を及ぼす。

前述のように、我々は NARMA2 タスクを用いて、グラフェンの I_D - V_G 特性が情報処理

性能に及ぼす影響を調査した。このタスクは式(2)に示す NARMA2 モデルを予測するものである³⁶。

$$y_t(k+1) = 0.4y_t(k) + 0.4y_t(k)y_t(k-1) + 0.6u^3(k) + 0.1 \quad (2)$$

ここで、 $u(k)$ は 0 から 0.5 の間で値を取る一様分布のランダムな列である。式 (2) は NARMA2 モデルの状態遷移 y_t を記述しており、モデルの出力は、自身の出力と 2 ステップ遅延との積項や過去の入力項の 3 次項などで構成される。したがって、IGR を用いて NARMA2 モデルを正確に再現するには、IGR がこれらの要素を表現するのに十分な表現力（すなわち非線形性と記憶容量）を備えている必要がある。図 2(a)に示すように、入力データは、固定された基準 V_G (-1.5 V) と各場合で-1.2 V から+2.0 V まで変化させた最大 V_G ($V_{\max}$) の間の V_G 範囲で規格化した V_G パルス列に変換された³⁰。 $V_{\max}$ を変化させることで、グラフェンの I_D - V_G 特性が I_D 応答および計算性能に与える影響を調査した。例えば、 $V_{\max}=-0.8$ V (青矢印) の場合、ディラック点より下にあるため、単調な I_D - V_G 特性と単純な I_D 応答が得られる。

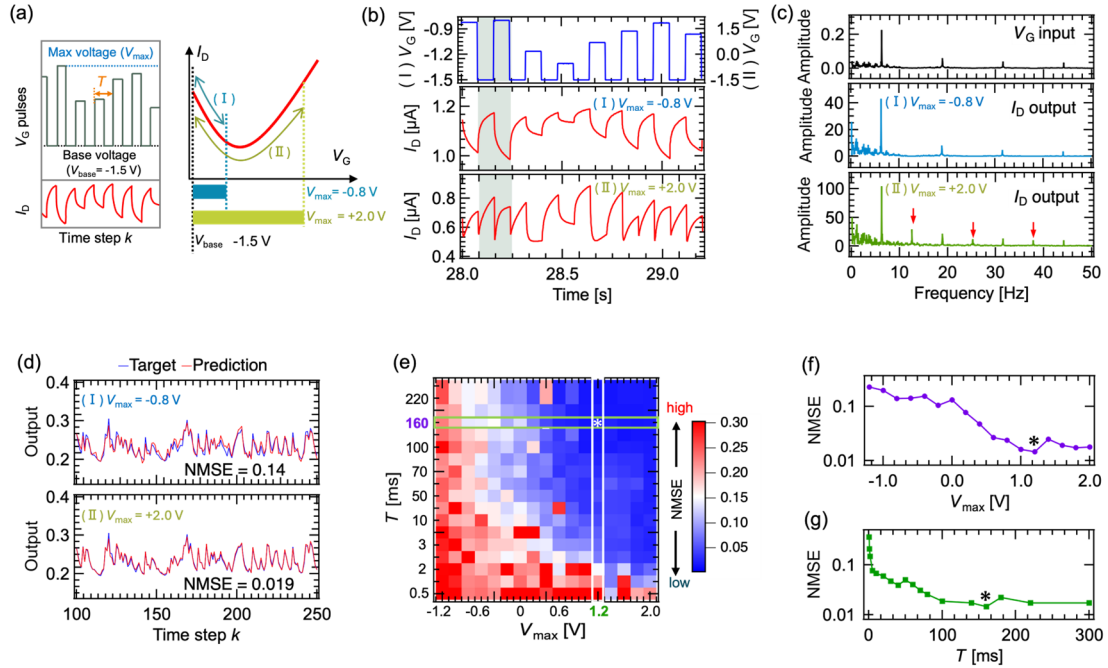


図 2 (a) V_G パラメータ ($V_{\max}$, V_{base}) と対応する I_D 応答の関係、(b) 2 つの $V_{\max}$ 条件[(I) および(II)]における I_D 応答、(c) (I)および(II)の高速フーリエ変換 (FFT) スペクトル、(d)条件(I)および(II)における目標波形と予測波形、(e)パルス周期 T および $V_{\max}$ 依存性の NMSE (最適条件は*で示される)、(f) $V_{\max}$ 依存性の NMSE ($T=160$ ms)、(g) T 依存性の NMSE ($V_{\max}=+1.2$ V)³⁰

一方、 $V_{\max}$ がディラック点を上回る場合 (緑矢印)、 I_D - V_G 特性は V 字型のトランスファ

カーブを示し、より複雑な I_D 応答を示唆する。 I_D の緩和特性と計算性能の関係を探るため、 V_G パルス列のパルス周期 T を $0.5 \sim 300$ ms に設定した。 V_D は全チャンネルで $+0.1$ V に設定した。共通ゲートに V_G パルス列を印加し、異なるチャンネル長を持つ 6 つのドレイン端子と 1 つのゲート端子から出力電流を測定した。全体で物理ノードは計 7 つ： I_D ノード 6 つと I_G ノード 1 つであった。各電流波形から 10 個の仮想ノードを抽出（時分割）した。したがって、 $N=140$ の下で、式(1)に記述されるようにリザーバー出力 y が得られた。計算性能は、以下のように定義される正規化平均二乗誤差（NMSE）を用いて評価した。

$$\text{NMSE} = \frac{1}{M} \frac{\sum_{k=1}^M [y_t(k) - y(k)]^2}{\sigma^2[y_t(k)]} \quad (3)$$

ここで、 M はデータ長（訓練フェーズでは $M=2000$ 、テストフェーズでは $M=700$ ）であり、 $\sigma^2(\cdot)$ は分散である。

図 2(b) は、代表的な $V_{\max}$ 値における V_G パルス列に対するチャンネル 3 (ch3) の I_D 応答を比較したものであり、(I) $V_{\max}=-0.8$ V ($T=160$ ms) および(II) $V_{\max}=+2.0$ V ($T=160$ ms) という条件である³⁰。条件(I) ($V_{\max}=-0.8$ V) では、 V_G 変動に対する I_D 応答は単純であり、 V_G が一定の間、 I_D は単調増加または単調減少する。しかし、 $V_{\max}=+2.0$ V の条件(II) では、 I_D は複雑な応答を示し、 V_G が一定の間でも I_D の変化方向（増加または減少）が変化する。この特徴的な I_D 過渡挙動は、測定された V_G 範囲内にディラック点が含まれることと、それに伴う EDL 充電中の n 型伝導と p 型伝導の切り替わりに起因する。このような挙動は、擬似的な二次高調波を発生させ、デバイスに優れた非線形性を付与している。フーリエ変換によって導出されたパワースペクトルは、非線形性の高次項の分布を直感的に視認するのに便利である⁴。図 2(c) は、条件(I) および(II) における V_G 入力と対応する I_D 出力の高速フーリエ変換（FFT）スペクトルを示す³⁰。3 つの FFT スペクトル全てに、 0.3 Hz における強いピークと奇数次高調波が含まれており、これらはデューティ比 50% の矩形波の形の V_G 入力に起因する。条件(I) のスペクトルは V_G 入力のものと類似しているが、偶数次高調波（赤矢印）は条件(II) のスペクトルでのみ顕著であり、これは V_G 範囲にディラック点を含むことで非線形性の高次項が増強されることを示している。条件(I) と(II) における目標波形と予測波形の比較を図 2(d) に示す。条件(I) では予測誤差が比較的大きい（NMSE=0.14）のに対し、条件(II) では予測波形が目標波形に近似し、テストフェーズにおける予測誤差は条件(I) と比較してほぼ 1 桁低減している（NMSE=0.019）。この結果は、デバイスの輸送特性（ I_D - V_G 特性）における強い非線形性が、PRC における計算性能を著しく向上させることを示している。

図 2(e) は、テストフェーズにおける NMSE の $V_{\max}$ と T への依存性を示す³⁰。図中の* が示すように、 $V_{\max}=+1.2$ V かつ $T=160$ ms で最適条件が達成され、 $V_{\max}$ と T の増加に伴い性能が向上する傾向が認められる。図 2(f) は、 $T=160$ ms における NMSE の $V_{\max}$ 依存

性を示す (図 2(e)の白枠部分)。NMSE は+1.2 V まで $V_{\max}$ の増加に伴い減少し、この値を超えると飽和する³⁰。これは非線形性の増大による性能向上が反映されている。図 2(g)は、 $V_{\max}=+1.2$ V における NMSE の T 依存性を示す (図 2(e)の緑枠部分)。NMSE は T の増加に伴い減少し、 $T=100$ ms 付近で飽和する。このように $T=100$ ms から 300 ms までの広い動作範囲で高性能が得られる点は、様々な時間スケールにわたる時系列データ処理において特に有利である。さらに、図 2(e)に示すように、 $V_{\max}$ を約 2 V まで増加させることで、 $T=2\sim 3$ ms の高速領域においても高性能を達成できる。これは $V_{\max}$ の調整によって動作速度を最適化できる可能性を示している。これらの結果は、本デバイスの広い動作条件範囲とパラメータ調整による最適化の可能性、および多様な時系列データを処理する統合型エッジ AI デバイスに好適であることを強く示唆する。

デバイスの動作条件 ($V_{\max}$) と非線形性・記憶容量の関係性を解明するため、IGR の情報処理容量 (IPC) を評価した。これにより、異なる動作条件下での調整可能な非線形性と、情報処理におけるデバイスの非線形写像能力を関連付けた。IPC は、タスクに依存しないリザーバーの計算能力の指標であり、リザーバーの短期記憶と非線形性を定量的に特徴づけるものである。IPC は回帰タスクの精度に基づいて計算され、リザーバーは入力 (およびその遅延) の n 次多項式で変換されたターゲットに対する出力を生成する²⁷⁻²⁹。総容量 C_{tot} は、各次数 n に対する部分容量 C_n の和として定義される。

$$C_{\text{tot}} = \sum_n C_n \quad (4)$$

一般的に、高い C_{tot} を持つリザーバーは様々なタスクで良好な性能を発揮し、高い計算性能を示す。本研究では n を最大 9 まで用いて IPC 解析を実施した： C_1 は短期記憶に対応する線形成分、 $C_2\sim C_9$ は非線形成分である。図 3(a)は C_{tot} と NMSE の $V_{\max}$ 依存性を示す。 C_{tot} は $V_{\max}$ が正方向に上昇するにつれて単調増加する一方、NMSE は+1.2 V の $V_{\max}$ まで低下した後、飽和する³⁰。この挙動に関連し、図 3(b)に示す部分容量 $C_1\sim C_9$ の $V_{\max}$ 依存性には、 C_1 (線形成分) と $C_2\sim C_9$ (非線形成分) で対照的な傾向が認められる³⁰。 C_2 から C_9 は $V_{\max}$ に対して単調増加する一方、 C_1 は $V_{\max}=+0.4$ V でピークを示し、高 $V_{\max}$ 領域において C_1 と C_2 から C_9 の間にトレードオフが存在することを示唆している。図 3(c)は、様々な $V_{\max}$ で得られた線形成分 (C_1) と非線形成分 ($C_{\text{total}} - C_1$) の関係を示す³⁰。図 3(b)から予想される通り、非線形成分は全範囲で単調増加するが、線形成分は $V_{\max}=+0.4$ V でピークを示す。したがって、 $V_{\max}=+0.4$ V 以上における C_1 (短期記憶) の減少が、非線形成分 ($C_{\text{total}} - C_1$) の増加による利点を相殺し、計算性能のさらなる向上を制限すると結論した。理論と実験の両方で、線形成分と非線形成分の間に同様のトレードオフが報告されており³⁷、この関係の精密な制御は、高性能 PRC を実現する上で極めて重要と考えられる。

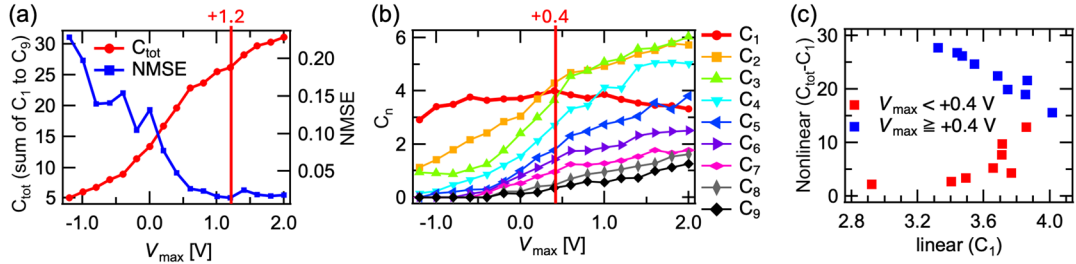


図3 (a) C_{tot} および NMSE の V_{max} 依存性、(b) IPC の V_{max} 依存性、
(c) 線形成分 (C_1) と非線形成分 ($C_{\text{total}} - C_1$) の関係³⁰

3. 結言

本研究では、グラフェンと α -LN 薄膜からなる EDLT ベースの IGR を利用した PRC を開発し、その PRC 性能を評価した。ディラックコーン型電子構造に起因するグラフェンの両極性特性により、 I_b - V_G 特性は V 字型のトランスファーカーブを示す。これにより複雑で多様な I_b 応答が生じ、これらは V_{max} と T の強い影響下にあるため、NARMA2 タスクにおける計算性能はこれらのパラメータに強く依存した。動作条件を最適化することで、本研究における最小 NMSE は 0.015 を達成し、これは先行報告のダイヤモンドチャネルを用いる IGR (NMSE=0.020)¹⁸ よりも 25% 低い値であった。IPC 解析により、 V_{max} と T に対する計算性能の依存性をさらに調査したところ、非線形成分 C_2 から C_9 は、 V_G 範囲が正方向に拡大するにつれて単調増加する一方、線形成分 C_1 は $V_{\text{max}} = +0.4$ V でピークに達した。 $V_{\text{max}} = +0.4$ V を超える領域における C_1 (すなわち短期記憶) の減少は、非線形成分 ($C_{\text{total}} - C_1$ 、または $C_2 \sim C_9$) の増加による利点を相殺し、演算性能のさらなる向上を制限した。この結果は、物理リザーバーの出力において線形だけでなく非線形な IPC 成分を得ることが PRC デバイスにとって極めて重要であることを示している。材料科学に基づいた物理リザーバーの特性調整によるハイパーパラメータの最適化は、PRC デバイスの適用範囲の調整だけでなく、高性能 PRC 実現のための信頼性ある手法を提供し、実用的なタスク解決能力と低消費電力を兼ね備えた脳型情報処理デバイスおよびシステムの実現につながる。

謝辞

本研究は、公益財団法人 JFE21 財団 2023 年度技術研究助成の支援のもとに実施されました。関係各位に謝意を示します。

研究成果

原著論文

- H. Kitano, D. Nishioka, K. Terabe, T. Tsuchiya. Physical reservoir computing with graphene-based solid electric double layer transistor and the information processing capacity analysis. Appl. Phys. Express. 18, 024501(2025).

参考文献

1. D. Kramer, Phys. Today. 2024, 77, 28.
2. W. Maass, T. Natschläger, H. Markram, Neural Comput. 2002, 14, 2531.
3. Tanaka, H., Akai-Kasaya, M., Termeh Yousefi, A. et al., Nat Commun 9, 2693 (2018).
4. Y. Usami, B. van de Ven, D. G. Mathew, T. Chen, T. Kotooka, Y. Kawashima, Y. Tanaka, Y. Otsuka, H. Ohoyama, H. Tamukoh, H. Tanaka, W. G. van der Wiel, T. Matsumoto, Adv. Mater. 2021, 33, 2102688.
5. Hadiyawardman et al., 2021 Jpn. J. Appl. Phys. 60 SCCF02
6. H. O. Sillin, R. Aguilera, H. H. Shieh, A. V. Avizienis, M. Aono, A. Z. Stieg, J. K. Gimzewski, Nanotechnology 2013, 24, 384004.
7. M. Akai-Kasaya, Y. Takeshima, S. Kan, K. Nakajima, T. Oya, T. Asai, Neuromorph. Comput. Eng. 2022, 2, 014003.
8. S. Kan, K. Nakajima, T. Asai, M. Akai-Kasaya, Adv. Sci. 2022, 9, 2104076.
9. S. G. Koh, H. Shima, Y. Naitoh, H. Akinaga, K. Kinoshita, Sci. Rep. 2022, 12, 6958.
10. Y. Paquot, F. Duport, A. Smerieri, J. Dambre, B. Schrauwen, M. Haelterman, S. Massar, Optoelectron. Reservo. Comput. Sci. Rep. 2012, 2, 287.
11. K. Toprasertpong, E. Nako, Z. Wang, R. Nakane, M. Takenaka, S. Takagi, Commun. Eng. 2022, 1, 21.
12. S. Tsunegi, T. Taniguchi, K. Nakajima, S. Miwa, K. Yakushiji, A. Fukushima, S. Yuasa, H. Kubota, Appl. Phys. Lett. 2019, 114, 164101.
13. R. Nakane, G. Tanaka, A. Hirose, IEEE Access 2018, 6, 4462.
14. S. Lilak, W. Woods, K. Scharnhorst, C. Dunham, C. Teuscher, A. Z. Stieg, J. K. Gimzewski, Front. Nanotechnol. 2021, 3, 675792.
15. M. Nakajima, K. Minegishi, Y. Shimizu, Y. Usami, H. Tanaka, T. Hasegawa. Nanoscale, 2022, 14, 7634-7640
16. Y. Shimizu, K. Minegishi, H. Tanaka, T. Hasegawa. 2023 Jpn. J. Appl. Phys. 62 SG1001
17. K. Nakajima, H. Hauser, T. Li, R. Pfeifer, Sci. Rep. 2015, 5, 10487.
18. D. Nishioka, T. Tsuchiya, W. Namiki, M. Takayanagi, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi, K. Terabe, Sci. Adv. 2022, 8, eade1156.

19. M. Takayanagi, D. Nishioka, T. Tsuchiya, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi, K. Terabe, *Mater. Today Adv.* 2023, 18, 100393.
20. Y. Yamaguchi, D. Nishioka, W. Namiki, T. Tsuchiya, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi, K. Terabe, *Appl. Phys. Express* 2024, 17, 024501.
21. D. Nishioka, T. Tsuchiya, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi, K. Terabe, *Commun. Eng.* 2024, 3, 81.
22. A. K. Geim, K. S. Novoselov. *Nat. Mater.* 6, pages 183–191 (2007)
23. T. Tsuchiya, D. Nishioka, W. Namiki, K. Terabe. *Adv. Electron. Mater.* 2400625 (2024)
24. T. Wada, D. Nishioka, W. Namiki, T. Tsuchiya, T. Higuchi, K. Terabe. *Adv. Intell. Syst.* 5 [9] (2023) 2300123
25. K. Shibata, D. Nishioka, W. Namiki, T. Tsuchiya, T. Higuchi, K. Terabe. *Sci. Rep.* 13, (2023) 21060
26. W. Namiki, D. Nishioka, Y. Yamaguchi, T. Tsuchiya, T. Higuchi, K. Terabe. *Adv. Intell. Syst.* 5, (2023) 2300228
27. S. Tsunegi et al., *Adv. Intell. Syst.* 5, 9, 2300175 (2023).
28. J. Dambre et al., *Sci. Rep.* 2, 514 (2012).
29. N. Akashi et al., *Phys. Rev. Res.* 2, 043303 (2020).
30. H. Kitano, D. Nishioka, K. Terabe, T. Tsuchiya. Physical reservoir computing with graphene-based solid electric double layer transistor and the information processing capacity analysis. *Appl. Phys. Express.* 18, 024501(2025).
31. A.C. Ferrari et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 187401 (2006).
32. F. Schwierz., *Nat. Nanotech.* 5, 487-496 (2010).
33. A Di Bartolomeo et al., *Nanotechnology.* 22, 275702 (2011).
34. J. Wei et al., *Carbon*, 156, 67-76 (2020).
35. F. Urban et al., *Nano Express*, 1, 010001 (2020).
36. A. F. Atiya et al., *IEEE Trans. Neural Networks*, 11, 3 (2000).
37. M. Inubushi et al., *Sci. Rep.* 7, 10199 (2017).