

2021 年度研究ステーション研究成果報告書

1. 研究ステーション名 先進エネルギーデバイスと AI 融合技術研究ステーション

研究代表者名 i-パワードエネルギー・システム研究センター (iPERC) 准教授 曾我部東馬

2. 研究組織

<学内構成員>

電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	准教授	曾我部 東馬
電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	特任教授	早瀬 修二
電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	研究員	小野 洋
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	教授	山口 浩一
電気通信大学	基盤理工学専攻・光工学	教授	沈 青
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	准教授	宮下 直也
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	助教	坂本 克好

<学外構成員>

東京大学 先端科学技術研究センター 教授 岡田 至崇

3. 2021 年度の研究の特筆すべき成果

本年度の特筆すべき成果は主に下記 3 点となる。

成果 1) 希土類発光中心における 2 段階光吸収を世界ではじめて検証。

電気通信大学の山口浩一教授、曾我部東馬准教授、東京大学先端科学技術研究センターの岡田至崇教授、玉置亮助教らと英・豪の大学の国際共同研究において、希土類添加半導体のエネルギー移動機構を光制御することによりラチェット効果の実現に成功した。本研究では、ミリ秒ライフタイムを持つ希土類発光中心に着目し、希土類発光中心に特有のエネルギー移動機構を制御した長寿命ラチェットバンドを実現し、その 2 段階光吸収の観測に世界ではじめて成功した。本来、希土類発光中心におけるエネルギー移動機構は温度消光や光消光などで発光に不利な働きをするため抑制の対象だが、本研究はそれに反して‘不利’な働きを‘有利’に活用し、希土類発光に新たな設計指針を与え、脱炭素に向けた次世代エネルギー変換技術に新たな道の開拓に貢献した。本成果は、英国 Springer Nature 社のオープンアクセス誌「Communications Physics」にオンライン掲載され、“Communications Physics”の Editor’s Highlights of 2021 に選出された。さらに化学工業日報(2021. 4. 8)に掲載された。

成果 2) 量子技術から着想を得た AI アルゴリズムを開発し、有用性を実証。

従来の機械学習アルゴリズムに対して、量子アルゴリズムを応用した「量子インスパイア型 AI アルゴリズム」を株式会社グリッドとの共同研究にて開発し、シミュレーションと理論により、その有用性を実証した。本研究では、Deutsch-Jozsa アルゴリズムの原理と、クラスタリングアルゴリズムである density-based spatial clustering of applications with noise (DBSCAN) とを融合させた、分類問題を解く新たな AI アルゴリズムを開発した。従来手法では、データ分類の決め手となるデータをひとつひとつ吟味して判定していたが、本アルゴリズムでは少ない回数で判断できる量子技術を応用することにより効率的に学習することができ、従来手法の Kernel SVM と比較して、モデルの学習にかかる計算速度について理論的に優位性があることを実証した。またモデルの複雑性の指標である VC 次元の上限値を導き出すことにより、本アルゴリズムの学習可能性を理論的に証明した。本成果は MDPI Applied Sciences 誌と日刊工業新聞(2021. 12. 24)に掲載され、その他メディアでも紹介された。

成果3) 光電極の光電気化学特性評価のリアルタイムモニター化

東京大学先端科学技術研究センターとの協力体制のもと半導体電極を用いた光-化学エネルギー変換素子の作製及びその電気化学特性評価を実施した。このシステムでは光エネルギーで直接、水を分解できるため高いエネルギー変換効率が期待される。電解質溶液中に浸漬した半導体電極は光エネルギーを捉えこれを水の分解に振り分ける機能を持つ素子であるが、水中の電極に光照射した際に如何に安定した動作を維持できるかが課題である。様々なエネルギー構造をもつ電極の光電気化学特性を素早く評価し電極作製条件にこの結果をフィードバックし性能の向上を図る事が重要である。電極の特性評価は今まで大部分を手動で行ってきたが、電流-電位 (I-V) 特性や容量-電位 (C-V) 特性など自動化プログラムを作成することで大幅に評価時間を短縮させることに成功した。また、これによりリアルタイムでの電気化学特性評価が実現した。

半導体電極作製法として一般的に真空蒸着法、スパッタリング法など真空装置を用いた製法が多く用いられている。これに対して高価な真空装置を使用せず、溶液中に基板を浸漬させるだけで薄膜が簡便に作製される化学的手法が注目されている。この液相成長法 (Liquid-Phase Deposition :LPD) による電極作製に着目し新しい電極の作製方法を模索した。膜中へのドーピングも容易に行えるため、今後の電極性能の向上に使用できるかどうか現在、詳しく実験を進めている段階である。

4. 2021 年度の研究成果の公表実績

1. 「グリッド×電通大、量子インスパイア開発 機械学習アルゴリズム」日刊工業新聞 (2021/12/24)
2. 「中間バンド太陽電池、希土類を用い 2 段階光吸収に成功」化学工業日報 (2021/4/8)

5. 外部資金の獲得状況

1. 受諾研究 (NEDO)

「太陽光発電主力電源化推進技術開発／太陽光発電の新市場創造技術開発／壁面設置太陽光発電システム技術開発 (ビル壁面開口部向けシースルー太陽電池の開発)」

代表者名 曾我部 東馬 直接経費 11,539,000 円・間接経費 1,730,500 円。

2. 共同研究 (株式会社グリッド、国立大学法人東京大学)

「エネルギー環境分野における数理モデルと人工知能融合」

代表者名 曾我部 東馬 直接経費 4,545,500 円・間接経費 454,500 円。

6. 今後の研究発展

2021 年度は、学内の横断的組織である「カーボンニュートラル推進本部会」に参画し、本学におけるカーボンニュートラル計画案の策定に貢献した。また、組織的な連携として i-パワーエネルギーシステム研究センター主催のシンポジウムに後援という形で協力した。2022 年度は、ワークショップや研究会の主催を計画し、学内外との連携および外部への発信力を強化していく。

今後の研究課題としては、下記の点に注力し AI を融合した先進エネルギーデバイス技術の開発を推進していく。

- ①実社会での問題に近い、不確実な要素を考慮した環境下での確率的最適化問題や、トレードオフの関係にある複数の目的関数を同時に最適化する多目的最適化問題を解く AI アルゴリズムの開発に取り組む。
- ②液相成長法 (Liquid-Phase Deposition :LPD) による電極作製に着目し新しい電極の作製方法を模索する。またこの手法で膜中へのドーピングも容易に行えるため、今後の電極性能の向上が期待できる。

7. 発表論文等

「雑誌論文(査読あり)」:

[1] Tomoaki Kimura, Kodai Shiba, Chih-Chieh Chen, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe;

"Variational Quantum Circuit-Based Reinforcement Learning for POMDP and Experimental Implementation" Mathematical Problems in Engineering, Volume21, 2021, Article ID 3511029.

- [2] Kodai Shiba, Chih-Chieh Chen, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe; "Quantum-Inspired Classification Algorithm from DBSCAN-Deutsch-Jozsa Support Vectors and Ising Prediction Model", MDPI Applied Sciences, Vol. 11, 2021, Issue23 app112311386.
- [3] Chih-Chieh Chen, Masaya Watabe, Kodai Shiba, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe; "On the Expressibility and Overfitting of Quantum Circuit Learning", ACM Transactions on Quantum Computing, Vol. 2, Issue2, 2021, Article No. 8, pp1-24.
- [4] Motoyuki Tanaka, Keiichiro Banba, Tomah Sogabe, Koichi Yamaguchi; "InAs/GaAsSb In-Plane Ultrahigh-Density Quantum Dot Lasers", Applied Physics Express, Volume14, Number12, 2021, 124002.

「学会発表」:

- [1] Chih-Chieh Chen, Masaya Watabe, Kodai Shiba, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe; "Learnability and expressibility of variational quantum circuit learning: VC theory and PAC-Bayes theory", CANDAR2021, 2021/11/23-26, Online.
- [2] Risa Takayanagi, Keita Takahashi, Masaya Watabe, Kazunori Ohkawara, Tomah Sogabe; "Decision Making in American Football under State Uncertainty by Stochastic Inverse Reinforcement Learning", CANDAR2021, 2021/11/23-26, Online.
- [3] 斯波 廣大、坂本 克好、山口 浩一、沈 青、岡田 至崇、曾我部 東馬; "AI を用いたペロブスカイト/PbS 量子ドット中間バンド太陽電池の光マネジメント構造設計", 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021/9/10-13, オンライン.
- [4] 熊倉 健太、坂本 克好、曾我部 東馬; "第一原理非平衡グリーン関数輸送解析を用いたマルチ量子ビットの物理モデルの設計とゲート制御", 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021/9/10-13, オンライン.
- [5] 吉田 響、坂本 克好、山口 浩一、曾我部 東馬; "コアシェル量子ドットにおける第一原理非平衡輸送解析と構造逆設計", 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021/9/10-13, オンライン.
- [6] 福田 渉、坂本 克好、山口 浩一、曾我部 東馬; "PbS 量子ドットにおける第一原理非平衡グリーン関数解析およびリガンド効果", 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021/9/10-13, オンライン.
- [7] 小栗 直己、丁 超、早瀬 修二、曾我部 東馬、豊田 太郎、沈 青; "PbS/CdS 量子ドット薄膜の光励起キャリアダイナミクス", 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021/9/10-13, オンライン.
- [8] Chen Chih-Chieh, 渡部雅也, 斯波廣大, 曾我部完, 坂本克好, 曾我部東馬; "A study on the expressibility and learnability of quantum circuit learning", 情報処理学会第3回量子ソフトウェア研究発表会, 2021/7/1-2, オンライン.

「招待講演発表」:

- [1] 曾我部東馬; "AI 技術の最新動向とシステム制御と最適化に関する応用事例", 第 52 回計装制御技術会議, 2022/1/19-21, オンライン.

- [2] 曾我部東馬; “AI リテラシー入門・就職・転職支援のための大学リカレント教育推進事業における「AI リテラシー入門」”, 2021/11/20, オンライン.
- [3] 曾我部東馬; “「量子× AI が創る新しい社会」, 「量子[回路・機械]学習って、学習できる保証があるの?」”, 電気通信大学, 2021/8/17, オンライン.
- [4] 曾我部東馬; “「量子コンピュータが作る未来」, 「量子過学習ってなあに?」”, データサイエンティスト協会, 2021/9/30, オンライン.
- [5] 曾我部東馬; “不確定性を考慮したエネルギーミックス問題の最適化—数理手法、AI 手法そして量子アルゴリズムまで—”, i-PERC シンポジウム 2021, 2021/6/30, オンライン.

「図書」:

- [1] Chih-Chieh Chen, Kodai Shiba, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe Springer; “Hybrid quantum-classical dynamic programming algorithm”, Advances in Artificial Intelligence, Selected Papers from the Annual Conference of Japanese Society of Artificial Intelligence, 2021, pp. 192–199.
- [2] Reed. Sogabe, Dinesh Bahadur Malla, Masaru Sogabe, Katsuyoshi Sakamoto, Tomah Sogabe - Springer; “Impact of Domain Knowledge’ s Quality on Inverse Reinforcement Learning”, Advances in Artificial Intelligence, Selected Papers from the Annual Conference of Japanese Society of Artificial Intelligence, 2021, pp. 97–108.

「受賞」: 該当なし

「特許出願」: 該当なし

「その他」

先進エネルギーデバイスと AI 融合技術研究ステーション (EDITAS) ホームページ
<https://www.editas.org/home>