

令和元年6月4日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H03889

研究課題名(和文) 相変化材料による局所的演算・記憶要素の空間相関形成とシミュレータ機能の実装

研究課題名(英文) Emergence of spatial correlation of local processing and memory elements based on phase-change materials and its application to simulator for large-scale problems

研究代表者

齋木 敏治 (Saiki, Toshiharu)

慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授

研究者番号：70261196

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,000,000円

研究成果の概要(和文)：スピングラスの解探索を目的とした物理計算機の開発を2つのアプローチで試みた。1つはスピングラスを結合振動子系に置き換え、その最低固有モードを求める問題に変換するものである。アルゴリズムとしての評価を実施し、既存の焼きなまし法と比較して約1桁の計算時間短縮が確認された。また物理実装法として、結合プラスモン粒子系において、粒子間相互作用を相変化材料によって自律的に調節し、高速で最適解に到達するスキームを考案した。2つめは、フラストレーションをかかえたスピン格子系と等価な2次元コロイド結晶に着目した。1μmのポリスチレンビーズを使った物理実装を実現し、最適解に至るアニーリング過程を可視化した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

相変化材料による演算・記憶機能が大域的に相関を形成することを実証し、その機構の多様性、多自由度性と複雑性に基づく入出力相関の中にコンピューティング機能、さらには広義の知性を見出す契機となった。これらの研究を通して非ノイマン型コンピューティングの新しい着想と設計論が生まれると期待され、工学的意義は大きい。

既存のアルゴリズムの実装によるコンピューティング機能の実証を通して、脳機能や複雑な自然・社会現象の理解を目的とした構成論的アプローチ、すなわち複雑な相互作用、相関形成機能を内在したシミュレータを実際に動かして現象の理解に役立てるへの応用という新しい視座を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：We demonstrated two approaches to solve spin glass problem by implementing it into physical systems. The first approach is to replace the spin glass to a coupled oscillator system and to calculate its lowest eigenmode. We evaluated the algorithm by comparing with the conventional simulated annealing algorithm and found that the calculation time can be reduced by one order. We proposed to implement the algorithm into a coupled plasmon particles, where the strength of inter-particle interaction can be autonomously modified through dielectric screening using a phase-change material to come to the optimized solution efficiently. The second approach is to utilize a buckled phase of two-dimensional colloidal crystal, which is equivalent to the frustrated triangular spin lattice. We experimentally demonstrated frustration behavior by confining 1-μm polystyrene beads in a two-dimensional slit and visualized the annealing process to reach the lowest frustrated solution.

研究分野：ナノ光学 光物性

キーワード：自然知能 組み合わせ最適化 スピングラス 相変化材料 コロイド結晶

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

ディープラーニングに先導される第3次人工知能ブーム、脳機能を模倣したチップ開発、最適化問題専用マシンとしての量子シミュレータの出現、超低消費電力を実現するメモ素子の提案など、近年ビッグデータの活用や既存の計算機の限界打破を目指して、新たなコンピューティングの潮流が急速に生まれつつある。メモリとプロセッサが物理的に一体化し、ハードウェアとアルゴリズムが不可分の関係となり、さらにコンピューティングそのものがヘテロ化へ向かうという、これまでとは全く異質の変化が起きようとしている。まさにその出発点にいる現在、生物や自然現象が実現している発見的解法を何らかの物理系に実装するための設計論が求められている。その本質は「並列的・局所的な記憶・演算に基づく大域的機能発現」であり、記憶機能と演算機能を兼ね備えた要素粒子の素励起が時間・空間的に相関を形成することにより、全体を見ながら自らが学習・修復・最適化するという広義の知性を具現化することにある。このようなコンピューティング機能や機能構造形成能力は今後、人工知能やロボティクス分野で広く活用されることが期待されている。

本研究では、ナノ～マイクロ領域における光と物質の相互作用に着目し、要素粒子とその環境場に演算・記憶機能を導入し、組み合わせ最適化問題の解探索アルゴリズムを実装し、シミュレータ動作を試みる。特に光による物性変化(相変化にともなう光学特性、電気特性の変化)を活用し、より速く正確に解へ辿り着くよう、自律的に問題を書き換える機能を導入する。外場と物性変化を通して演算・記憶機能、相互作用、ゆらぎに関わるパラメータを大きな自由度で調整しながら、従来のモデル化と計算機シミュレーションでは見出されない新たな物理描像と、事例を横断して共通する数理構造の発見を目指す。

### 2. 研究の目的

共鳴応答するサブ波長粒子系において、可塑性・閾値性を有する相変化材料を介した粒子間相互作用の自律的制御を通して、系全体としてシミュレータ機能を発現させることを目的とする。組み合わせ最適化問題をその基底状態探索問題に置き換えることが可能なスピングラスを数理モデルの軸に据え、多様な実装の可能性を議論する。粒子間の電磁相互作用によって長距離相関を形成する全固体ベースのシミュレータと隣接粒子間だけに働く電氣的・流体的相互作用によって系全体の基底状態を探索するナノ流体ベースのシミュレータの動作実証を目指す。演算(閾値性)・記憶(可塑性)機能、相互作用、ゆらぎに関わるパラメータを大きな自由度で調整しながら、従来のモデル化と計算機シミュレーションでは見出されない新たな物理描像と、事例を横断して共通する数理構造の発見を試みる。

### 3. 研究の方法

#### (1) スピングラス解探索のための物理計算機

組み合わせ最適化問題の1つであるスピングラス基底状態探索に対して2つのアプローチを試みた。1つは、磁気双極子相互作用を電気双極子相互作用に置き換えるという方法であり、もう1つは、2次元コロイド結晶のBuckled相を利用する方法である。前者で扱うスピングラスは、正方格子に配列したイジングスピン系(スピンの方向は上・下の2方向のみ)において、隣り合うスピン同士の間で強磁性相互作用と反強磁性相互作用(それぞれスピンを同方向、反対方向に揃える相互作用)がランダムに分布している状況を指す。すべての結合が強磁性であれば、スピンはすべて上、または下を向き、すべての結合が反強磁性であれば、スピンの向きは上・下を交互に繰り返す。相互作用がランダムに分布するスピングラスの場合、一般にすべての結合における相互作用を満足するスピン配置は存在しない。あらゆるスピン配置(上・下のあるあらゆる組み合わせ)のうち、相互作用を満足する結合が最も多い(最もエネルギーが低い)配置を基底状態と呼ぶ。図1はスピングラスの一例であり、スピン配置は別途計算された基底状態の厳密解を示している。太い青点線で示した結合は反磁性相互作用であるが、それによって結ばれているスピンは同じ方向を向いており、相互作用が満たされていない。

スピングラス問題を解くためのアルゴリズムとして、シミュレーテッドアニーリング法とよばれる方法が頻繁に用いられる。

スピン配置とともに変化する全系のエネルギーランドスケープにおいて、浅い谷底(局所解・極小値)に落ち込むことを避けるために、熱的なジャンプを繰り返しながら、最も深い谷底(グローバル解・最小値)を探し出すというアルゴリズムである。近年、量子力学における重ね合わせの原理を巧みに利用し、トンネル効果によってグローバル解に到達するアルゴリズムが提案され、それを物理実装した量子シミュレータが開発されている。

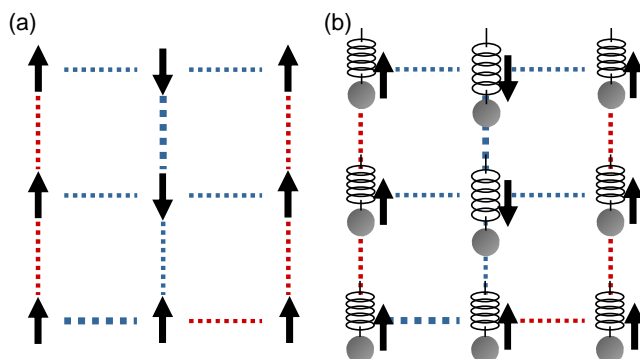


図1 (a)スピングラス問題の一例。赤・青点線はそれぞれ強磁性・反強磁性相互作用を表す。(b)(a)に対応する結合振動子モデル。各振動子の振幅の符号(相対的な振動方向)とスピンの方向を対応させる。

### (2) 結合振動子系へのスピングラスの実装

本研究の前半では、スピングラス系を結合振動子系に置き換えることにより、新しいアルゴリズム探索とその物理実装の研究を遂行した。具体的には、図1(b)に示すように各スピンを古典的な振動子(バネとおもり)に置き換え、強磁性・反強磁性結合に対応させて、隣り合う振動子のおもりを以下に説明する2種類のバネでつなぐ(図2)。強磁性相互作用に対応するバネは、通常バネであり、その伸縮によって復元力が加算され、系のエネルギーが上昇する。従って隣り合う振動子は伸縮を避けて、同位相で振動することを好む。もう1のバネは仮想的なものであり、伸縮によって系のエネルギーは低下し、隣り合う振動子は逆位相で振動することを好む。図2中の矢印の向きが、強磁性・反強磁性相互作用におけるスピンの向きを連想させる。スピングラスの基底状態探索に対応する計算として、結合振動子系の最低モード(最も固有振動数の低い基準モード)を求める。個々の振動子に対する連立運動方程式の定常解の計算は、線形代数の固有値問題を解くことと等価であり、固有ベクトルの各成分が、対応する振動子の振幅をあらわす。上述したように各振動子の振幅の符号をスピンの向きに対応させる。

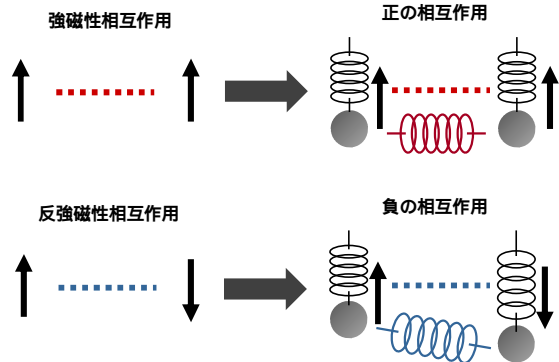


図2 強磁性・反強磁性相互作用と結合振動子モデルで導入する正・負の相互作用。

### (3) 2次元コロイド結晶へのスピングラスの実装

本研究の後半では、フラストレーションをかかえたスピン格子系と等価となる、2次元コロイド結晶系を利用し、新しい計算機としての活用を見出した。コロイド粒子の集合体は、結晶やガラスの人工的モデルとして広く研究対象となっている。粒子に対する表面修飾によって粒子間相互作用を制御でき、かつその挙動を光学顕微鏡下で実時間観察できるという特長をもつ。

実験のセットアップは図3の通りである。2枚のカバーガラスと直径 $2\mu\text{m}$ のビーズを使って、2次元スリットを形成する。ビーズはスペーサとして機能しているが、ビーズサイズや空間分布のばらつきにより、スリット高さは $1\sim 2\mu\text{m}$ の範囲で場所ごとに異なっている。スリット内を直径 $1\mu\text{m}$ のビーズを含む水で充填する。このビーズが結晶・ガラスを構成する「原子」として振る舞う。下方のカバーガラス表面には厚さ $100\text{nm}$ のGeSbTe(GST)が成膜されている。上方からパルスレーザーを広域に照射すると、GSTがこれを吸収し、空間的な温度勾配が形成され、強い対流が発生する。この対流をビーズの集合体形成の駆動力として利用する。光強度を変化させると対流の強さが変わる。これは結晶を外側から押す「圧力」が調整可能であることを意味する。

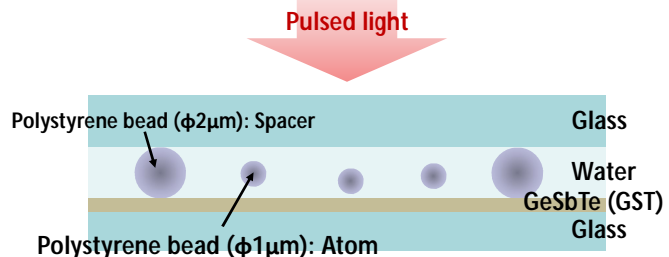


図3 2次元コロイド結晶形成の実験セットアップ。

まず簡単なシミュレーションにより、スリット高さ、ならびに光強度(圧力)とともにさまざまな結晶構造が出現することを確認した。スリット高さがほぼ粒子直径に近い1層の場合は三角格子になり、2層に近い高さになると正方格子も現れる。特にここで興味があるのは、スリット高さが1.5層分に相当する場合であり、Buckled相と呼ばれる、ビーズが上下交互に配置する構造が形成される(図4(b)、(c))。この構造に特に注目する理由は、イジングスピン系で頻りに議論される、三角格子におけるフラストレーションと等価な現象が見られるからである。三角格子が反強磁性結合でつながっていると、スピンは互いに反対方向を向きたがる(反平行の配置を好む)。図4(a)のように2つのスピンの配置を考えると、上下どちらを向いたとしても、いずれかの反強磁性結合は満たされないこと

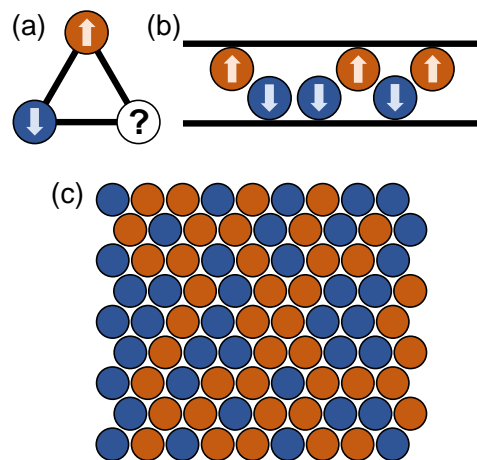


図4 (a)反強磁性相互作用する三角格子上のスピンの配置。Buckled相を(b)横から、(c)上から見たときのビーズの配置。スピンの上向き・下向きがビーズ位置の上・下に対応している。

になり、フラストレーションが発生する。ビーズによる結晶構造の Buckled 相もこれと同じ状況にある。図 4 (b)、(c)のようにビーズは上下交互の配置（スピンの反平行の配置に対応）を好むが、三角格子を形成しているため、フラストレーションをとまなう。

#### 4. 研究成果

##### (1) 結合振動子系へのスピングラスの実装

具体的なスピングラス問題（例えば  $5 \times 5$  の格子）を結合振動子アルゴリズム（Coupled Oscillator Algorithm; COA）で解いてみると、あるときは別途計算した厳密な基底状態の spin 配置と完全に一致し、あるときは2~3カ所のスピンの向きに誤りが見られた。そこで、COA のアルゴリズムとしての評価を、シミュレーテッドアニーリングアルゴリズム（Simulated Annealing Algorithm; SAA）と比較することによって実施した。例題としては  $79 \times 79 \times 79$  の3次元のスピングラスを使用し、両アルゴリズムを同一の計算プラットフォームで実行した。結果を図5に示す。計算時間の関数としてイジングエネルギー（低いほど正解に近い）がどのように下がっていくかをプロットしている。計算開始時は圧倒的に COA が優れた解を示し、徐々に飽和していくのに対し、SAA が途中から COA を追い抜き、最終的には SAA の方がより良い解を提示している。計算時間と解の精度はトレードオフであり、これらの優劣はどのような場面で使用するかに依存する。仮に SAA が提示するベストな解の 75%程度で十分満足いく用途であれば（図5の点線）計算時間は COA の方が1桁短く、既存の SAA に対して優位性を主張できる。

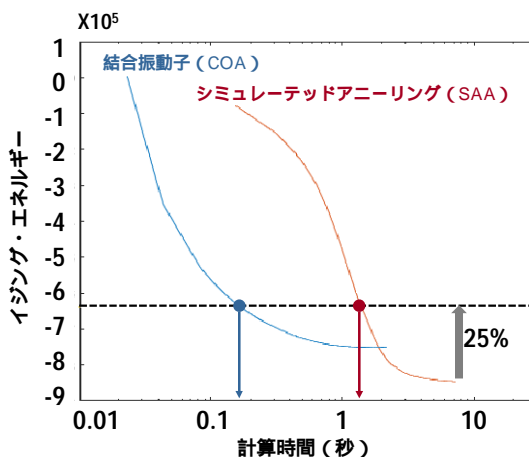


図5 結合振動子アルゴリズムとシミュレーテッドアニーリングアルゴリズムの性能比較。

スピングラス問題の解としては、各振動子の振幅の符号にのみ着目するが、COA の特長は振幅の大きさからも有用な情報を引き出すことができるという点にある。例えば、COA で得られる解において、誤りはおもに振幅の小さな振動子において生じる。この傾向を利用すると、より良い解へ到達するためのアルゴリズムが得られる。すなわち、振幅の小さな振動子とその周囲の振動子の結合（おもりに同士をつなぐバネの強さ）を強くすることによって、当該の振動子の優先度を上げて計算することができ、誤りを高い確率で訂正できる。逆に振幅の大きな振動子は、対応するスピンが反転したときに周囲に与える影響が大きく、「絶対に誤ってはいけないスピン」であることを明示している。

プラズモニクスを利用した COA の実装の概念図を図6に示す。各振動子はある特定の波長で共鳴する金ナノ粒子で置き換える。振動子同士をつなぐバネの役割は、隣接する金ナノ粒子同士の双極子間相互作用が担う。正・負の相互作用は金ナノ粒子の相対位置の調整によって与えることができる。さらに前段で説明した、隣り合う振動子間の結合強度を調整する機構として、相変化材料を金ナノ粒子間に挿入する。系全体に光を照射したとき、振幅の大きな振動子に対応する金ナノ粒子はその周囲の光電場強度が強くなり、相変化材料がアモルファス相から結晶相に変化する。結晶相の方が屈折率が大きいいため、金ナノ粒子間の相互作用が弱まる。逆に言うと、振幅の小さな振動子の周囲は光電場強度が小さく、相変化材料はアモルファス相のまま変化しないため、相対的に金ナノ粒子間の相互作用が強くなり、上述と等価な機構となる。しかも、結合強度の調整を自律的に行う仕掛けになっている。

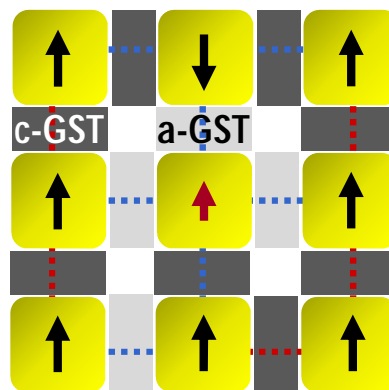


図6 結合振動子系の物理的実装。プラズモン粒子（金ナノ粒子）間の相互作用を相変化材料によって自律的に調整する機構を内在している。c-GST, a-GST はそれぞれ結晶相, アモルファス相 GST。

##### (2) 2次元コロイド結晶へのスピングラスの実装

Buckled 相の動画観察のスナップショット（20ms ごとの静止画）を図7に示す。ビーズはフラストレーションを感じ、いろいろな場所で上下動しながら、最適解を探していることがわかる。この測定のパルス光強度では、エネルギーランドスケープ（全ビーズの上下配置の関数としての自由エネルギー変化）におけるエネルギー障壁が小さく、自由エネルギーが極小となるさまざまなビーズ配置が時々刻々出現している。さらにパルス光強度を増大させると、エネルギー障壁が徐々に高くなり、いずれかのビーズ配置が選択されることになる。これは、いわゆるアニーリング過程に相当すると考えられ、われわれの手法はその可視化を可能にする。磁性

ビーズを一定の割合で混合し、ビーズ間に強磁性相互作用（隣り合うビーズが揃って上下に動きたがる傾向）を導入すると、まさしく前節のスピングラスが実現する（図8）。

動的過程への興味として現在、ビーズ間の相間距離（あるビーズの上下動がどの程度遠くのビーズに影響を与えているか）の評価や相間に対する人為的な重み付け付与（強い動的相関をもつビーズを結合する）などを行い、最適化問題としての問題設定の多様化を検討している。また、上下動を神経細胞の発火現象とみなし、相間を持ったネットワークが徐々に形成される過程を模擬できる可能性も議論している。

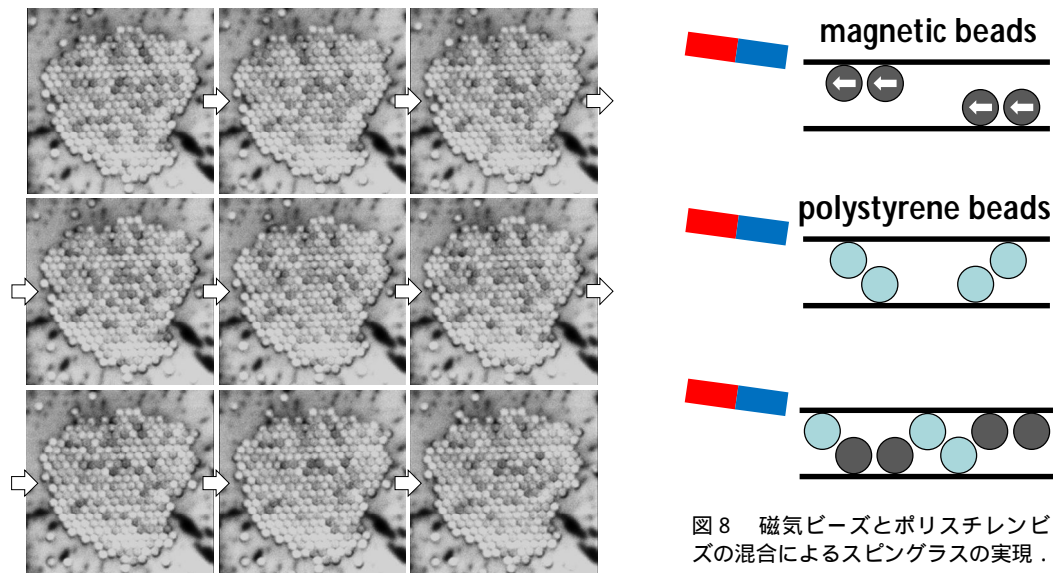


図7 Buckled 相におけるフラストレーション下でのビーズの上下動のダイナミクス観察 .20ms ごとのスナップショットを並べている .

図8 磁気ビーズとポリスチレンビーズの混合によるスピングラスの実現 .

## 5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計5件)

K. Yamaguchi, E. Yamamoto, R. Soma, B. Nakayama, M. Kuwahara, and T. Saiki, “Rapid Assembly of Colloidal Crystals under Laser Illumination on a GeSbTe Substrate”, *Langmuir* **35**, 6403-6408 (2019) <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b00176> 査読有.

F. Sobhi, Y. Kihara, D. Kataiwa, Y. Taguchi, M. Kuwahara, and T. Saiki, “Coding two-dimensional patterns into mode spectrum of silicon microcavity covered with a phase-change film”, *Appl. Phys. A* **124**, 757/1-5 (2018) <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2186-0> 査読有.

齋木敏治, “コロイド粒子系への自然知能の物理的実装”, *人工知能* **33**, 600-607 (2018) 査読無.

R. Akimoto, H. Handa, S. Shindo, Y. Sutou, M. Kuwahara, M. Naruse, and T. Saiki, “Implementation of pulse timing discriminator functionality into a GeSbTe/GeCuTe double layer structure”, *Opt. Expr.* **25**, 26825-26825 (2017) 10.1364/OE.25.026825 査読有.

T. Saiki, “Switching of localized surface plasmon resonance of gold nanoparticles using phase-change materials and implementation of computing functionality”, *Appl. Phys. A* **123**, 577/1-12 (2017) 10.1007/s00339-017-1185-x 査読有.

〔学会発表〕(計41件)

T. Saiki, “Natural intelligence and computing with colloidal particles”, 15th International Conference on Frontiers of Polymers and Advanced Materials (2019).

T. Saiki, “Intelligent sensing, memory and computing with phase-change materials”, SPIE Defense+Commercial Sensing (2019).

齋木敏治, “コロイド粒子系への自然知能の物理的実装”, 第79回応用物理学会秋季学術講演会 (2018).

T. Saiki, “Nano-optical implementation of swarm intelligence”, 15th international conference of Near-field Optics and Nanophotonics (2018).

T. Saiki, “Implementation of swarm intelligence using active nano-optics and

fluidics ”, Asia-Pacific Laser Symposium 2018 (2018).  
T. Saiki, “ Natural intelligence with nanooptics and fluidics ”, SPIE Nanophotonics Australasia 2017 (2017).  
T. Saiki, “ Natural intelligence with phase-change materials ”, European Phase Change and Ovonics Symposium 2017 (2017).  
T. Saiki, “ Nano-optical implementation of natural intelligence ”, The 11th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (2017).  
T. Saiki, “ Intelligent functionalities based on nano-optics and nano-fluidics ”, The 6th Japan-Korea Workshop on Digital Holography and Information Photonics (2016).  
T. Saiki, “ Nanooptics- and Nanofluidics-based Implementation of Spin-Glass Algorithm Using Phase Change Material ”, The 28th Symposium on Phase Change Oriented Science (2016).  
齋木敏治, “ ナノ光学・流体工学を基盤としたコンピューティング機能の物理実装 ”, 第77回応用物理学会秋季学術講演会 (2016).  
T. Saiki, “ Active plasmonics with phase change material for intelligent computing applications ”, SPIE Optics + Photonics 2016 (2016).  
T. Saiki, “ Possibility of non-von-Neumann computing using phase change materials ”, 21th OptoElectronics and Communications Conference /International Conference on Photonics in Switching 2016 (2016).

〔その他〕

ホームページ <http://keio-saiki-lab.com/>

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、研究者個人に帰属されます。