慶應義塾大学学術情報リポジトリ Keio Associated Repository of Academic resouces

Title	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
Sub Title	Emergence of spatial correlation of local processing and memory elements based on phase- change materials and its application to simulator for large-scale problems
Author	斎木, 敏治(Saiki, Toshiharu)
Publisher	
Publication year	2019
Jtitle	科学研究費補助金研究成果報告書 (2018.)
JaLC DOI	
Abstract	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、結合プラズ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。1um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。 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-um polystyrene beads in a two-dimensional slit and visualized the annealing process to reach the lowest frustrated solution.
Notes	研究種目 : 基盤研究 (B) (一般) 研究期間 : 2016~2018 課題番号 : 16H03889 研究分野 : ナノ光学 光物性
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_16H03889seika

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって 保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

科学研究費助成事業 研究成果報告書

	之上	九千	οд	4	口呪仕
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					
斎木 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、結合プラズ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。1 um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

制の扱業が予備する。 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。

です。 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-um 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ム素子の提 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ー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のみに働く電気的・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、正方格子上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結合として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 強磁性的であれば、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的であれば、 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、通常のバネであり、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 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法を見出した。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2mm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1~2mmの範囲で場所ごとに異なっている。スリット内を 直径1mm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100nmのGeSbTe(GST)が 成膜されている。上方からパルスレ ーザ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。

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))。この構造に特に着目す る理由は、イジングスピン系で頻繁に議論さ 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 が反平行の状況で、3 つ目のスピンの方向を 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3 2次元コロイド結晶形成の実験セットアップ.



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もなう。

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 5×5 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スピン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 ×79×79 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%程度の解で +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、



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.

既存の SAA に対して優位性を主張できる。

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。各振動子を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.

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 <u>T. Saiki</u>, "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 <u>T. Saiki</u>, "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.

斎木敏治, "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 <u>T. Saiki</u>, "Implementation of pulse timing discriminator functionality into a GeSbTe/GeCuTe double layer structure", Opt. Expr. **25**, 26825-26825 (2017) 10.1364/0E.25.026825 査読有.

<u>T. Saiki</u>, "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)

<u>T. Saiki</u>, "Natural intelligence and computing with colloidal particles", 15th International Conference on Frontiers of Polymers and Advanced Materials (2019). <u>T. Saiki</u>, "Intelligent sensing, memory and computing with phase-change materials", SPIE Defense+Commercial Sensing (2019).

<u>斎木敏治</u>, "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).

<u>T. Saiki</u>, "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).

<u>T. Saiki</u>, "Natural intelligence with nanooptics and fluidics", SPIE Nanophotonics Australasia 2017 (2017).

 $\underline{\text{T. Saiki}},$ "Natural intelligence with phase-change materials", European Phase Change and Ovonics Symposium 2017 (2017).

<u>T. Saiki</u>, "Nano-optical implementation of natural intelligence", The 11th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (2017).

<u>T. Saiki</u>, "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).

<u>斎木敏治</u>,"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).

<u>T. Saiki</u>, "Active plasmonics with phase change material for intelligent computing applications", SPIE Optics + Photonics 2016 (2016).

<u>T. Saiki</u>, "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。