

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	義永 那津人
研究機関名	東北大学
所属部署名	材料科学高等研究所
役職名	准教授
研究課題名	ソフトマテリアルの構造形成プロセスを理解するための数理モデルとデータ科学の協奏
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

#### 研究成果の概要

本年度は、ソフトマテリアルの構造形成の非平衡プロセスを推定するための数理モデルと機械学習の融合の実践的な研究を行った。構造形成過程を、外力やパラメーターの変化を伴う非自立系のダイナミクスと捉えることで、強化学習の枠組みとの類似性を明らかにすることができた。この結果を利用し、異方的な相互作用を持つヤヌス粒子の自己組織化過程において、各時間での構造の特徴量を観測しそこから実行すべき温度変化を推定することによって最適なフィードバックを行う手法を開発した。実際に、従来知られている、線形にゆっくりと温度を下げるプロセスよりも高速に目的とする構造を得ることができた。ここでは、準結晶の構造形成を対象にしている。なぜこのような学習がうまくいくのかについても解析を行い、準結晶の構造形成において、転移温度でゆらぎが非常に大きくなること、そして、強化学習によって経験から転移温度を発見し、その温度にまず変化させることによって効率的に目的構造を得ることができることを明らかにした。

上記の結果は、機械学習の性能がシステムの物理化学的性質によって決まることを示唆している。そこで、磁性体中のスピン波を使って、時系列データを学習し、未来予測や過去の情報の記憶などのタスクの性能評価を行った。物理リザーバ計算の枠組みで解析を行い、時系列を入力としてスピンの波を励起し、それを読み出して重みを学習することでタスク処理を行った。マイクロマグネティック計算によって、ナノスケール・ギガヘルツで、ノード数が 100 程度の最先端の計算機と同等の性能が出せることを明らかにした。また、外部からのスピントルクによる駆動に対する応答と学習性能との関係を明らかにし、スピン波の伝播速度と最適な性能のためのシステムのサイズのスケールリングを理論的に明らかにした。今後は実際の実装に向けて実験のグループと研究を進めていきたい。