

令和3年度 卒業論文

超伝導体内の電界の時間変化を用いた  
リザーコンピューティングに関する研究

九州工業大学情報工学部

物理情報工学科 電子物理工学コース

学生番号 182C3004

有田 拳

指導教員：小田部 荘司

# 目次

目次	1
第1章 序論	1
1.1 はじめに	1
1.2 超伝導現象	1
1.2.1 超伝導現象の概要	1
1.2.2 超伝導体の分類	2
1.3 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式	3
1.3.1 Ginzburg-Landau 方程式	3
1.3.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式	4
1.4 磁束の量子化	4
1.5 磁束ピンニング機構	5
1.5.1 要素的ピン力	5
1.5.2 巨視的ピン力密度	6
1.6 Affine Integrator(AFI)	7
1.6.1 1次元系における空間・時間離散化	7
1.6.2 2次元系での AFI	11
1.7 リザーバーコンピューティング	13
1.7.1 リザーバーコンピューティングの概念	13
1.7.2 エコーステートネットワーク	14
1.7.3 バッチ学習(線形回帰とリッジ回帰)	16
1.7.4 NARMA モデル	18
1.8 研究目的	18
第2章 実装および計算方法	19
2.1 オーダーパラメータ $\Psi$ の初期条件・更新式	19

2.2	リンク変数・ループ変数.....	20
2.3	境界条件の処理.....	22
2.3.1	リンク変数の境界条件.....	23
2.3.2	オーダーパラメータの境界条件.....	25
2.4	ゲージ場ダイナミクスの時間離散化.....	26
2.5	電界、磁界、電流密度の実装.....	26
2.5.1	電界.....	27
2.5.2	磁界.....	27
2.5.3	電流密度.....	27
2.6	ピンの導入.....	28
2.7	描画.....	28
2.8	リザーバーコンピューティング.....	28
2.8.1	入出力応答.....	29
2.8.2	波形生成タスク.....	29
2.8.3	NARMA タスク.....	29
2.8.4	非線形-メモリタスク.....	29
2.8.5	予測精度の評価.....	30
第3章	結果と考察.....	31
3.1	量子化磁束および電磁現象の可視化.....	31
3.2	電流、電界を用いたリザーバーコンピューティング.....	33
3.2.1	入出力応答.....	33
3.2.2	リサージェ波形と FFT.....	35
3.2.3	波形生成タスク.....	37
3.2.4	NARMA タスク.....	40
3.2.5	非線形-メモリタスク.....	43
第4章	まとめ.....	48
	参考文献.....	49

謝辭..... 50

研究業績..... 51

# 図目次

Fig. 1.1	外部磁界に対する超伝導体の内部の磁束密度.....	2
Fig. 1.2	複数の磁束線のピン止め[2].....	6
Fig. 1.3	格子・リンク変数[5].....	8
Fig. 1.4	2次元系におけるダブルインデックスの定義(周期的境界条件)[5].....	12
Fig. 1.5	リザーバーコンピューティングの概念図.....	14
Fig. 1.6	エコーステートネットワークの基本モデル.....	15
Fig. 2.1	演算 $\nabla \times$ のリンク変数による差分化およびループ変数の定義[5].....	20
Fig. 2.2	境界付近の格子点およびリンク変数の配置[5].....	22
Fig. 2.3	東西境界における印加磁界、印加電流のリンク変数への反映[5].....	24
Fig. 2.4	境界条件と基礎方程式によるオーダーパラメータの更新[5].....	25
Fig. 2.5	電流の印加方法と電界の抽出方法の概略.....	28
Fig. 3.1	量子化磁束と電磁現象の可視化(ピンなし).....	31
Fig. 3.2	量子化磁束と電磁現象の可視化(正形状ピン).....	32
Fig. 3.3	電流密度の正弦波入力に対する電界の出力応答.....	33
Fig. 3.4	電流密度の乱数波入力に対する電界の出力応答.....	34
Fig. 3.5	入出力データによるリサージュ波形.....	35
Fig. 3.6	入出力データのFFT.....	36
Fig. 3.7	正弦波の予測結果.....	37
Fig. 3.8	三角波、鋸波、矩形波の予測結果.....	38
Fig. 3.9	NARMA2 タスクの予測結果.....	40
Fig. 3.10	NARMA2 タスクにおける NMSE の Timestep 依存性.....	41
Fig. 3.11	NARMA10 タスクの予測結果.....	42
Fig. 3.12	非線形-メモリタスクの予測結果.....	43

# 表目次

Table. 3.1 波形生成タスクの評価.....	38
Table. 3.2 非線形-メモリタスクの $(v, \tau)$ に対する NMSE.....	43
Table. 3.3 非線形-メモリタスクの $(v, \tau)$ に対する $R^2$ .....	45

# 第1章 序論

## 1.1 はじめに

近年、人工知能(AI)、中でも機械学習に関する研究が盛んに行われている。その主流となるのがニューラルネットワークである。従来のニューラルネットワークは、学習させなければならない部分が多量にあるために、学習にかかる時間とコストが膨大になってしまうという問題を抱えていた。そこで、学習にかかる時間とコストを大幅に削減させるために登場したのがリザバーコンピューティングである。リザバーコンピューティングは、ニューラルネットワークの一つであるが、学習させる部分を中間層と出力層の間の一か所のみとすることで学習時間とコストの削減を実現している。現在は、非線形性を有する物理現象を中間層(リザバー)として用いてハードウェアで実装を行う、物理リザバーコンピューティングの研究が盛んにおこなわれている。非線形性を持つ物理現象の中で今回目を付けたのが、超伝導現象の磁束線の運動に伴う電流電圧特性である。電流電圧特性を利用したものであれば、ハードウェアの実装を考える際に電流と電圧を測定するだけで済むという点からこれを採用した。

超伝導現象は、極低温下において物質が完全反磁性を示す、物質の電気抵抗がゼロになる、という2つの特長をもつ現象のことである。超伝導は、これらの特殊な現象を生じるため、電流密度と電界との間に強い非線形性を有していることが広く知られている。超伝導現象の強い非線形性がリザバーコンピューティングとして応用できれば、超伝導の応用先も広げることができる。本研究は、超伝導現象をシミュレーションにより可視化し、そこで計算される電流密度と電界を用いてリザバーコンピューティングの様々なタスクを実行するという形で行った。

## 1.2 超伝導現象

超伝導とは、1911年にKamerlingh-Onnesにより発見された現象である。極低温における水銀の電気抵抗の測定中、ある温度で急に測定不能なほど電気抵抗が小さくなったことから超伝導が発見された[1]。

### 1.2.1 超伝導現象の概要

ある温度以下で電気抵抗がゼロになる現象を超伝導現象といい、その状態のことを超伝導状態という。反対に電気抵抗がある状態を常伝導状態という。電気抵抗がゼロにな

る温度を臨界温度 $T_c$ と呼ぶ。この臨界温度は、材料に依存する値であり一般に金属系超伝導体では低く、酸化物超伝導体では高くなっている。

超伝導現象のもう一つの特長は、完全反磁性を示すことである。完全反磁性とは、磁界を加えても磁界が内部に侵入しない、または、常伝導状態で磁場を加えた後、冷却して超伝導状態になった際、内部の磁界をはじき出すことをいう。この特徴は、マイスナー効果とも呼ばれている。

超伝導状態であるための条件として、 $T_c$ のほかに臨界磁界 $H_c$ 、臨界電流密度 $J_c$ というものがあり、温度、外部磁界、内部を流れる電流密度がそれぞれ $T_c$ 、 $H_c$ 、 $J_c$ 以下のとき、超伝導状態が実現される。

### 1.2.2 超伝導体の分類

超伝導体は、第1種超伝導体と第2種超伝導体の2種類に分類される。これらは磁気的な性質により区別されている。一般に磁束密度 $B$ は、

$$B = \mu_0 H_e + \mu_0 M \quad (1.1)$$

と表される。 $H_e$ は外部磁界、 $M$ は磁化である。第1種超伝導体においては、超伝導体内部の磁束密度はFig. 1.1(a)のようになる。 $H_e < H_c$ では、 $M = -H_e$ であるので、内部の磁束密度はゼロのまま保たれている。 $H_e > H_c$ では、 $M = 0$ となるので、内部の磁束密度は、

$$B = \mu_0 H_e \quad (1.2)$$

となり、常伝導状態へと相転移する。

第2種超伝導体の内部の磁束密度の様子はFig. 1.1(b)のようになる。第2種超伝導体においては、下部臨界磁界 $H_{c1}$ と上部臨界磁界 $H_{c2}$ というものが存在し、 $H_e < H_{c1}$ では第1種超伝導体と同様に、内部の磁束密度はゼロのままである。 $H_{c1} < H_e < H_{c2}$ では、超伝導体の内部に磁束が量子化された状態で侵入していく。そのため内部の磁束密度は徐々に大きくなっていく。 $H_e > H_{c2}$ では、内部の磁束密度は式(1.2)となり常伝導状態へ相転移する。内部の磁束密度ゼロである領域をマイスナー状態と呼び、磁束が量子化されて内部に侵入する領域を混合状態と呼ぶ。混合状態においても電気抵抗ゼロが保たれているため、マイスナー状態と混合状態を合わせて超伝導状態と呼ぶ。

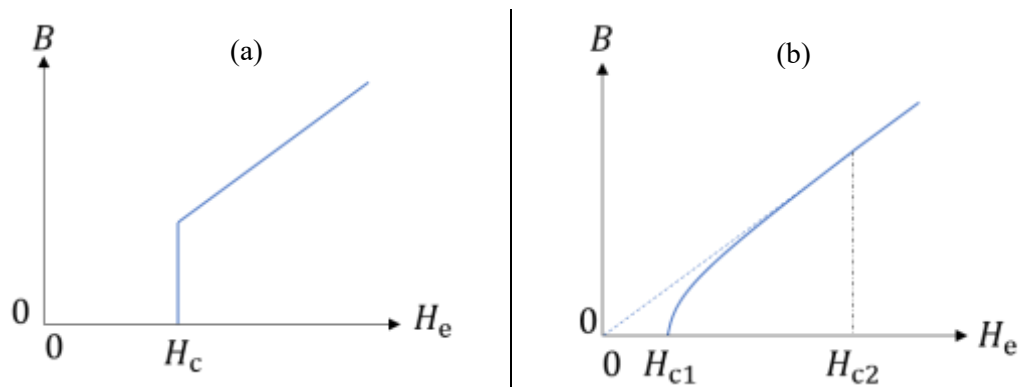


Fig. 1.1 外部磁界に対する超伝導体の内部の磁束密度



### 1.3 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式

ここでは、第 2 種超伝導体の磁気的特性を記述する理論として、Ginzburg-Landau 理論を説明する。

#### 1.3.1 Ginzburg-Landau 方程式

超伝導状態とは電子の位相がそろった状態である。したがって量子性が巨視的なスケールまで保持される。そこで量子力学の波動関数 $\psi$ に対応する複素関数、オーダーパラメータ $\Psi$ を定義する。その大きさの 2 乗 $|\Psi|^2$ は超伝導電子密度に比例する。超伝導体の自由エネルギーは超伝導電子密度によって変わるため、それを $|\Psi|^2$ の冪で展開すると、

$$\text{const.} + \alpha|\Psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\Psi|^4 + \dots \quad (1.3)$$

となる。式(1.3)を凝縮エネルギー密度と呼ぶ。 $\alpha$ 、 $\beta$ は冪展開係数である。磁場がかかっている場合は磁場のエネルギーも考慮する必要がある。磁場のエネルギー密度は、

$$\frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 \quad (1.4)$$

と表される。 $\mu_0$ は真空の透磁率、 $\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャルである。また、磁場存在中はオーダーパラメータが空間的に変化することも考えられるため式量子力学的な運動エネルギーも生じる。運動エネルギー密度は、

$$\frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla + e^*\mathbf{A})\Psi|^2 \quad (1.5)$$

と表される。これらのエネルギー密度、式(1.3)、(1.4)、(1.5)を足し合わせるで磁場中の超伝導体の自由エネルギー密度は、

$$F_s(B) = F_n(0) + \alpha|\Psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla + e^*\mathbf{A})\Psi|^2 \quad (1.6)$$

と記述できる。ここで、式(1.6) $m^*$ は超伝導電子の質量、 $e^*$ は超伝導電子の電荷である。 $F_n(0)$ は磁界がないときの常伝導状態の自由エネルギー密度である。このとき、 $\Psi$ と $\mathbf{A}$ は超伝導領域 $V$ の全エネルギー $E_s = \int F_s dV$ を最小にするように決定される。その方法として $\Psi$ の共役複素数 $\Psi^*$ と $\mathbf{A}$ に変分法を適用する。

$$\frac{\delta E_s}{\delta \Psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial \Psi^*} - \left[ \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \Psi^*} \right] = 0 \quad (1.7)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} - \left[ \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} \right] = 0 \quad (1.8)$$

(1.7)式、(1.8)式をそれぞれ解くと、

$$\frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0 \quad (1.9)$$

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0}\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{i\hbar e}{m^*}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{4e^2}{m^*}|\Psi|^2\mathbf{A} \quad (1.10)$$

となる。 $\mathbf{J}$ は電流密度である。これら式(1.9)、(1.10)を Ginzburg-Landau 方程式という。

[1]

### 1.3.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式

GL 方程式に時定数を導入し、時間依存性を持たせた方程式を Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式(以下 TDGL 方程式)という。

$\psi$ と $\mathbf{A}$ の時定数を $\gamma$ 、 $v$ とおくと、(1.7)式と(1.8)式は以下の形に書き換えられる。

$$\frac{\delta E_s}{\delta\Psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial\Psi^*} - \left[ \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial\nabla\Psi^*} \right] = -\gamma \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (1.11)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta\mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial\mathbf{A}} - \left[ \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial\nabla\mathbf{A}} \right] = -v \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.12)$$

(1.11)式、(1.12)式にゲージ変換

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t} + ie^*V\psi \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \quad (1.14)$$

を与える。 $V$ はスカラーポテンシャルである。

$$\gamma \left( \frac{\partial\Psi}{\partial t} + ie^*V\Psi \right) + \frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla + e^*\mathbf{A})^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0 \quad (1.15)$$

$$v \left( \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \right) + \frac{1}{\mu_0}\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \frac{i\hbar e^*}{2m^*}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*}|\Psi|^2\mathbf{A} = 0 \quad (1.16)$$

(1.15)式、(1.16)式を解くことで超伝導体の数値解析を行うことが可能となる。。

## 1.4 磁束の量子化

第2種超伝導体において、外部磁界が $H_{c1} < H_e < H_{c2}$ であるとき磁束は量子化された状態で超伝導体内部に侵入する。ここでは磁束の量子化について説明する。

式(1.8)式においてオーダーパラメータを大きさと位相 $\varphi$ で表して $\Psi = |\Psi|e^{i\varphi}$ と置くと、

$$\mathbf{j} = -\frac{2\hbar e}{m^*}|\Psi|^2\nabla\varphi - \frac{4e^2}{m^*}|\Psi|^2\mathbf{A} \quad (1.17)$$

となる。ここで、超伝導体内で孤立した1本の量子化磁束(中心 $R = 0$ )を考える。この磁束量子を囲み、中心より十分離れた円 $C(R \gg \lambda)$ を考えると、この上では $\mathbf{j} = 0$ である一方で $|\Psi|^2 \neq 0$ である。よって式(1.17)は、

$$\mathbf{A} = -\frac{\hbar}{2e} \nabla \varphi \quad (1.18)$$

と変形できる。 $C$ 上で $\mathbf{A}$ について線積分すると、これは $C$ に鎖交する磁束 $\Phi$ に等しいので、

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \oint_S \mathbf{b} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \quad (1.19)$$

となる。ここで $S$ 上は $C$ に囲まれた面である。式(1.19)に式(1.18)を代入すると、

$$\Phi = -\frac{\hbar}{2e} \oint_C \nabla \varphi \cdot d\mathbf{s} = -\frac{\hbar}{2e} \Delta \varphi \quad (1.20)$$

となる。ただし、 $\Delta \varphi$ は $C$ を一周したときの位相の増加分である。 $\Psi$ が一価関数であるためには、 $\Delta \varphi$ は $2\pi$ の整数倍でなければならない。今は1本の量子化磁束の周りを考えており、 $\Delta \varphi = -2\pi$ であるため、その磁束は、

$$\Phi = \frac{h}{2e} = \phi_0 = 2.0678 \times 10^{-15} \text{ [Wb]} \quad (1.21)$$

と求められる。この $\phi_0$ を磁束量子という[2]。

## 1.5 磁束ピンニング機構

超伝導現象には応用上で重大な問題がある。第2種超伝導体において、 $H_{c1}$ 以上の外部磁界が与えられると混合状態で内部に量子化された磁束が侵入する。また、その状態の超伝導体に電流を流すと、量子化磁束にローレンツ力 $\mathbf{F}_L = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$ が働き、そのままでは磁束が運動(速度 $\mathbf{v}$ )する。これによって誘導電界

$$\mathbf{E} = \mathbf{B} \times \mathbf{v} \quad (1.22)$$

が発生する。このため、電気抵抗が生じ、エネルギーが消費されてしまう。このままでは電気抵抗がゼロであるという超伝導の特長が利用できない。この問題は、ピンの導入により磁束の運動を止める( $\mathbf{v} = 0$ )で対策することができる。磁束が止まれば $\mathbf{E} = 0$ となり、抵抗が発生しなくなるからである。ここでは、磁束のピンニング機構について説明する。

### 1.5.1 要素的ピン力

ピン止めの要因の一つとして、常伝導析出物によるピンニングが挙げられる。常伝導析出物とは、超伝導体を作る際に、ある元素を多めに含めることでその元素が析出することで超伝導体の中にできる常伝導状態の部分のことである。

超伝導体に侵入した磁束線の中心部(半径 $\xi$ 程度)は、ほとんど常伝導状態ということが出来る。つまり、周囲の超伝導部分に比べて凝縮エネルギーの分だけエネルギーは高くなっている。もし、超伝導体の中に常伝導析出物があり、そこに磁束線の常伝導核が交われば、破壊される超伝導領域が減り、交わらない場合よりも凝縮エネルギー的に

$$U_p \cong \frac{1}{2} \mu_0 H_c^2 \pi \xi^2 L \quad (1.23)$$

だけ得になる(エネルギーが低くなる)。ここで、 $H_c$ は熱力学的臨界磁界と呼ばれ、 $1/2\mu_0 H_c^2$ で凝縮エネルギー密度を表している。 $L$ は、磁束線が常伝導析出物に交わっている部分の高さである。その結果、自然はエネルギーを低くするようになっているため、磁束線と常伝導析出物との間に引力相互作用が働き、磁束線は常伝導析出物の中で固定される。これから要素的ピン力 $f_p$ (1個のピンが及ぼす最大力)を計算すると、エネルギーの変化は $2\xi$ (常伝導核の直径)で起こるため、

$$f_p \cong \frac{U_p}{2\xi} \cong \frac{\pi}{4} \mu_0 H_c^2 \xi L \quad (1.24)$$

となる。

### 1.5.2 巨視的ピン力密度

高磁界下では、磁束線同士の感覚が近いいため、磁束線同士にばねのような力が働き合っており、一本だけでなく複数の磁束線がまとまって移動する(磁束バンドル)。そこで、一辺が $D$ の立方体で密度が $N_p$ の常伝導析出物に複数の磁束線が交わる状態を考える。そのイメージ図を Fig. 1.2[2]に示す。

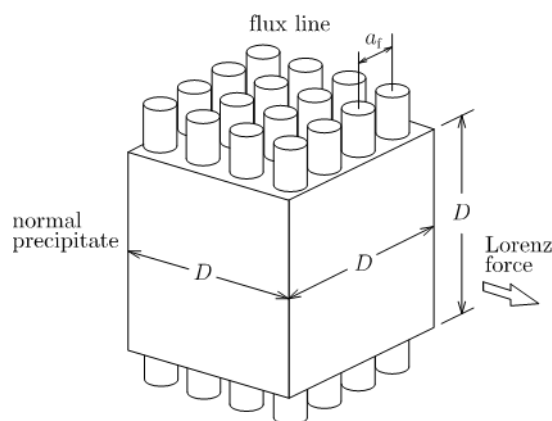


Fig. 1.2 複数の磁束線のピン止め[2]

この場合、ピンから力を受ける磁束線は図中の赤で色を塗ったもののみである。したがって、ピン力を受ける磁束線の本数は $D/a_f$ であるので、この常伝導析出物によるピン力 $f_p$ は、

$$f_p = \frac{\pi}{4} \mu_0 H_c^2 \xi D \times \frac{D}{a_f} \quad (1.25)$$

と求められる。また、超伝導体全体のピン力密度(巨視的ピン力密度) $F_p$ は、

$$F_p = \eta N_p f_p = \eta N_p \frac{\pi \mu_0 H_c^2 \xi D^2}{4 a_f} \quad (1.26)$$

と求められる。ここで、 $\eta$ はピンニング効率であり、 $\eta < 1$ である。高磁界では、超伝導性が弱くなっているためオーダーパラメータの最大値が減少し、それにより凝縮エネルギーも減少する。その影響を式(1.26)に考慮すると、 $F_p$ は

$$F_p = \eta N_p \frac{\pi \mu_0 H_c^2 \xi D^2}{4 a_f} \left( 1 - \frac{B}{\mu_0 H_{c2}} \right) \quad (1.27)$$

となる[2]。

## 1.6 Affine Integrator(AFI)

Affine Integrator[3](以下、AFI)とは、拡散方程式やゲージ場存在下の Schrödinger 方程式、TDGL 方程式、回転系の Time-Dependent Gross-Pitaevskii 方程式の数値積分のために考案された、陽的数値積分法である。

数値的安定性に関して、AFIはラプラシアン項に関して無条件安定であり、方程式を構成する講全体に関して高い数値的安定性を有する。また、Schrödinger 方程式のような線形保存系において全エネルギーが厳密に保存される性質を持つ。TDGP 方程式のような非線形保存系においてノンドリフト特性を持つ。

AFIは空間に関し離散化するための格子をチェッカボード状に分解することから導かれるアフィン変換対で構成される。数値的安定性やエネルギー保存に関する理論解析が容易で、必要とされる記憶領域が最小であり、また付加的なワーキングメモリを必要としないという長所を持つ。

### 1.6.1 1次元系における空間・時間離散化

基礎方程式を1次元 TDGL 方程式

$$\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial x} - i A_x \right)^2 \Psi - \alpha \Psi - \beta |\Psi|^2 \Psi \quad (1.28)$$

であるとする。ここではベクトルポテンシャルが与えられ、固定されているとする。 $A_x$ はベクトルポテンシャルの  $x$  成分である。

パラメータ  $\gamma$  は時定数であり一般には複素数値をとる。 $\gamma$  が実数値の場合は TDGL 方程式、 $\gamma = -i$  のときは Time-Dependent Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式あるいは非線形 Schrödinger 方程式と同じ形になる。

ベクトルポテンシャルはリンク変数[4]  $w_{ij}$  によって次のように実装される。

$$w_{ij} = \exp(i\theta_{ij}), \quad \theta_{ij} = -hA_x \left( \frac{x_i + x_j}{2} \right), \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad (1.29)$$

$x_i$  は格子点  $i$  の  $x$ 座標である。 $h$  は格子点間隔である。ただし、もし格子点  $i$  と格子点  $j$  が接続していない場合、 $w_{ij} = 0$  であるとする。

空間に関する離散化のために導入した格子、リンク変数の状況を Fig. 1.3[5]に示す。

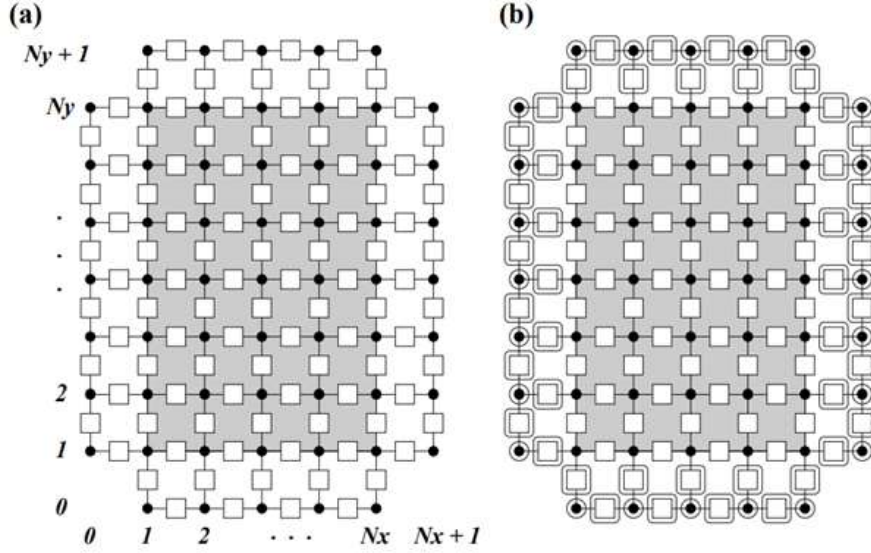


Fig. 1.3 格子・リンク変数[5]

(a)空間離散化格子 (b)境界条件で更新される格子点とリンク変数

式(1.28)を空間に関して離散化する。 $\Psi_i(t) = \Psi(x_i, t)$ ,  $\alpha_i = \alpha(x_i)$ ,  $\beta_i = \beta(x_i)$ とおけば、以下の連立微分方程式が得られる。

$$\gamma \frac{d\Psi_1}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{12}\Psi_2 + \bar{w}_{41}\Psi_4 - 2\Psi_1) - \alpha_1\Psi_1 - \beta_1|\Psi_1|^2\Psi_1 \quad (1.30)$$

$$\gamma \frac{d\Psi_3}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{34}\Psi_4 + \bar{w}_{23}\Psi_2 - 2\Psi_3) - \alpha_3\Psi_3 - \beta_2|\Psi_3|^2\Psi_3 \quad (1.31)$$

$$\gamma \frac{d\Psi_2}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{23}\Psi_3 + \bar{w}_{12}\Psi_1 - 2\Psi_2) - \alpha_2\Psi_2 - \beta_3|\Psi_2|^2\Psi_2 \quad (1.32)$$

$$\gamma \frac{d\Psi_4}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{41}\Psi_1 + \bar{w}_{34}\Psi_3 - 2\Psi_4) - \alpha_4\Psi_4 - \beta_4|\Psi_4|^2\Psi_4 \quad (1.33)$$

ここで、 $\bar{w}$  は  $w$  の複素共役を表す。ここで、

$$U_i = \alpha_i + \beta_i|\tilde{\psi}_i|^2, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (1.34)$$

とおく。 $\tilde{\psi}_i$  は  $\Psi_i$  の推定値である。詳細は後述する。

連立微分方程式は次のようにも書き表される。AFI法の準備のため、奇数の格子点の組と偶数の格子点の組の順番に並べている。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_3 \\ \Psi_2 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 - U_1 h^2 & 0 & w_{12} & w_{14} \\ 0 & -2 - U_3 h^2 & w_{32} & w_{34} \\ \bar{w}_{12} & \bar{w}_{32} & -2 - U_2 h^2 & 0 \\ \bar{w}_{14} & \bar{w}_{34} & 0 & -2 - U_4 h^2 \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

式(1.35)は、次のようにも表される。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} D(-\sigma_Q) & W \\ W^\dagger & D(-\sigma_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

ここで、 $\mathbf{q} = (\Psi_1 \ \Psi_3)^T$ 、 $\mathbf{p} = (\Psi_2 \ \Psi_4)^T$  および

$$\sigma_i = 2 + U_i h^2, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (1.37)$$

とおいた。また

$$D(-\sigma_Q) = \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix}, \quad D(-\sigma_P) = \begin{pmatrix} -\sigma_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_4 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} w_{12} & w_{14} \\ w_{32} & w_{34} \end{pmatrix} \quad (1.38)$$

とおいた。なお、 $W^\dagger = \bar{W}^T$  である。

式(1.35)あるいは式(1.36)は

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_3 \\ \Psi_2 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_3 \\ \Psi_2 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \quad (1.39)$$

あるいは

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

とあらわされる。ただし時間推進演算子  $\hat{A}$  は次のように定義される。

$$\hat{A} = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in \{1,2,3,4\}} \left( -\sigma_i \Psi_i + \sum_{j \in \{1,2,3,4\}} w_{ij} \Psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \quad (1.41)$$

時間推進演算子  $\hat{A}$  を次のように分解する。

$$\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_P \quad (1.42)$$

ただし、

$$\hat{A}_Q = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in Q} \left( -\sigma_i \Psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \Psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \quad (1.43)$$

$$\hat{A}_P = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in P} \left( -\sigma_i \Psi_i + \sum_{j \in Q} w_{ij} \Psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \quad (1.44)$$

ここでは、 $Q = \{1, 3\}$  および  $P = \{2, 4\}$  である。

次に、微分方程式

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

を時間に関して離散化する。時間刻み幅を $\tau$ とおくことで離散時間における時間発展方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

が得られる。なお、 $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$  および  $(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = (\mathbf{q}(t + \tau), \mathbf{p}(t + \tau))$  である。

指数関数演算子は Lie-Trotter-Suzuki 分解により次のように近似できる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right) \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_P\right) + O(\tau^2) \\ \exp\left(\frac{\tau}{2\gamma} \hat{A}_Q\right) \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_P\right) \exp\left(\frac{\tau}{2\gamma} \hat{A}_Q\right) + O(\tau^3) \\ \dots + O(\tau^4) \\ \dots \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

指数関数演算子  $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_Q)$  および  $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_P)$  の行列表現を得ることができれば数値積分スキーム(AFI)を構成できる。

まず、演算子  $\hat{A}_Q$  を  $\Psi_i$ 、 $i \in Q$  に作用させる。

$$\hat{A}_Q \Psi_i = \frac{1}{\hbar^2} \left( -\sigma_i \Psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \Psi_j \right), \quad i \in Q \quad (1.48)$$

次に、 $\hat{A}_Q$  を  $\Psi_i$ 、 $i \in Q$  に2回作用させる。

$$\hat{A}_Q^2 \Psi_i = \left( -\frac{\sigma_i}{\hbar^2} \right)^2 \left( \Psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \Psi_j \right), \quad i \in Q \quad (1.49)$$

したがって、 $\hat{A}_Q$  を  $\Psi_i$ 、 $i \in Q$  に  $m$ 回作用させると

$$\hat{A}_Q^m \Psi_i = \left( -\frac{\sigma_i}{\hbar^2} \right)^m \left( \Psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \Psi_j \right), \quad i \in Q, \quad m \geq 1 \quad (1.50)$$

であることがわかる。ゆえに、

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right) \Psi_i &= \Psi_i + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right)^m \Psi_i \\ &= a_i \Psi_i + b_i \sum_{j \in P} w_{ij} \Psi_j, \quad i \in Q \end{aligned} \quad (1.51)$$

が得られる。ただし、

$$a_i = \exp\left(-\frac{\sigma_i \tau}{\hbar^2 \gamma}\right), \quad b_i = \frac{1 - a_i}{\sigma_i} \quad (1.52)$$



とおいた。また、

$$\hat{A}_Q \Psi_i = 0, \quad i \in P \quad (1.53)$$

より、

$$\hat{A}_Q^m \Psi = 0, \quad i \in P, \quad m \geq 1 \quad (1.54)$$

であることがわかる。演算子  $\hat{A}_P$  についても同様に、次の結果が得られる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.55)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_P\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(b_P)W^\dagger & D(a_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.56)$$

ここで、

$$\begin{aligned} D(a_Q) &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_3 \end{pmatrix}, & D(b_Q) &= \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_3 \end{pmatrix} \\ D(a_P) &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 \\ 0 & a_4 \end{pmatrix}, & D(b_P) &= \begin{pmatrix} b_2 & 0 \\ 0 & b_4 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.57)$$

とおいた。 $I$ は単位行列である。

式(1.55)、式(1.56)はそれぞれ指数関数演算子  $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_Q)$  および  $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_P)$  の行列表現を表している。つまり、AFI が得られたことになる。

## 1.6.2 2次元系での AFI

ここで、2次元系を考える。基礎方程式は

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (1.58)$$

と表される。ただし、

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \mathbf{A} = (A_x, A_y) \quad (1.59)$$

である。ここでは格子点やリンク変数を指定するためにダブルインデックスを用いる。このダブルインデックスは空間的な位置に対応する。Fig. 1.4[5]にダブルインデックスの定義を示す。リンク変数は $x$ 成分と $y$ 成分に分けて定義されることになる。

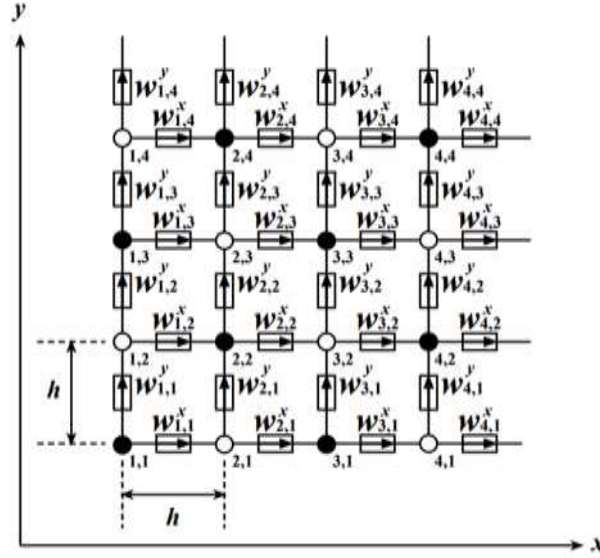


Fig. 1.4 2次元系におけるダブルインデックスの定義(周期的境界条件)[5]

格子点は図中の黒丸と白丸のように、2つのグループに分割される。まず空間に関して離散化すると次式のような微分方程式が得られる。

$$\gamma \frac{d\Psi_{i,j}}{dt} = \frac{1}{h^2} \left( w_{i,j}^x \Psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \Psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y \Psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \Psi_{i,j-1} - 4\Psi_{i,j} \right) - \alpha_{i,j} \Psi_{i,j} - \beta_{i,j} |\Psi_{i,j}|^2 \Psi_{i,j} \quad (1.60)$$

ただし、周期的境界条件より、たとえば  $i=0$  は  $i=4$ 、 $i=5$  は  $i=1$  と読み替えるものとする。ここでは、

$$U_{i,j} = \alpha_{i,j} + \beta_{i,j} |\tilde{\Psi}_{i,j}|^2 \quad (1.61)$$

とおく。ただし、

$$\tilde{\Psi}_{i,j} = \frac{1}{4} (w_{i,j}^x \Psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \Psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y \Psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \Psi_{i,j-1}) \quad (1.62)$$

である。また、

$$\sigma_{i,j} = 4 + U_{i,j} h^2 \quad (1.63)$$

とおく。

1次元系のと看と同様、格子点を黒丸グループ  $Q$  と白丸グループ  $P$  に分割することにより AFI を構成することができる。時間推進演算子  $\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_P$  は1次元系のと看と同様に定義することができる。黒丸グループに属する格子点上の  $\Psi$  の値で構成されるベクトルを  $\mathbf{q}$ 、白丸グループに属する格子点上の  $\Psi$  の値で構成されるベクトルを  $\mathbf{p}$  とおけば、1次元系のと看と同様の次のような形の微分方程式

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.64)$$

が得られる。この微分方程式を時間に関して時間刻み幅 $\tau$ で離散化することで、離散時間における時間発展方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

が得られる。指数関数演算子の行列表現も1次元系の時と同様に、

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(b_P)W^\dagger & D(a_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.67)$$

行列 $D(a_Q)$ および $D(a_P)$ は対角行列であり、それぞれ

$$a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right), (i,j) \in P \quad \text{および} \quad a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right), (i,j) \in P \quad (1.68)$$

を対角成分とするものである。なお、ダブルインデックスにより指定される格子点が黒丸グループに属することを $(i,j) \in P$ 、白丸グループに属することを $(i,j) \in Q$ と表記している。

また、行列 $D(b_Q)$ および $D(b_P)$ は対角行列であり、それぞれ

$$b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}}, (i,j) \in Q \quad \text{および} \quad b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}}, (i,j) \in P \quad (1.69)$$

を対角成分とするものである。

行列 $W$ は黒丸グループに属する格子点と白丸グループに属する格子点を結ぶ辺の上で定義されたリンク変数を成分とする行列である。行列 $W$ の行は白丸グループの格子点に対応し列は黒丸グループの格子点に対応する[5]。

## 1.7 リザバーコンピューティング

リザバーコンピューティングとは、特に系列データや時系列データの機械学習に適した計算の枠組みのことである。特徴としては、学習に必要な計算量が少ないため、よく知られているディープラーニングに比べて高速に計算が行える、一般の計算機でも純分に扱えるという利点がある。また、近年ではデジタルコンピュータだけでなく、さまざまなスケールの物理系を用いたハードウェアの実装が可能であるという面からもリザバーコンピューティングに対する注目が高まっている。

### 1.7.1 リザバーコンピューティングの概念

リザバーコンピューティングは、いくつかの具体的なリカレントニューラルネットワ

ークから派生して生まれた一般的な概念である。リザーバーコンピューティングモデルは、一般にリザーバー(Reservoir)とリードアウト(Readout)から構成される。リザーバーは学習の過程で変化させず固定し、リードアウトには線形学習機のような簡便な学習識別機を用いるため高速な学習が可能となっている。

リザーバーコンピューティングの概念図を Fig. 1.5 に示す。Reservoir という英単語は、液体を入れておく容器うや生活用水を貯蔵しておく貯水池を意味している。例えば、その水面(Reservoir)に1つの石を投入すると波紋が広がる。この波紋は入力にあたる石の大きさや形によって変化する。つまり、水面の波紋は入力の情報を反映していると考えられる。次に、1つ目の石を投入して波紋が残っている間に、次々と別の石を投入することを考える。ここで、順番に投入する石の列は時系列入力に相当する。複数の石が投入された場合の波紋は、それぞれの石によって生成された波紋が相互作用しあって複雑になる。このときの波紋には、石の大きさや形だけでなく石を入れる順番も影響している。これは、波紋がそれまでに投入された石の情報、つまり過去の入力に関する「記憶」を持つことを意味する。この性質が、時系列データを扱う上でカギとなる。生まれた波紋から投入された石の情報を読み出し(Readout)、時系列予測などを行うというのがリザーバーコンピューティングのイメージである。

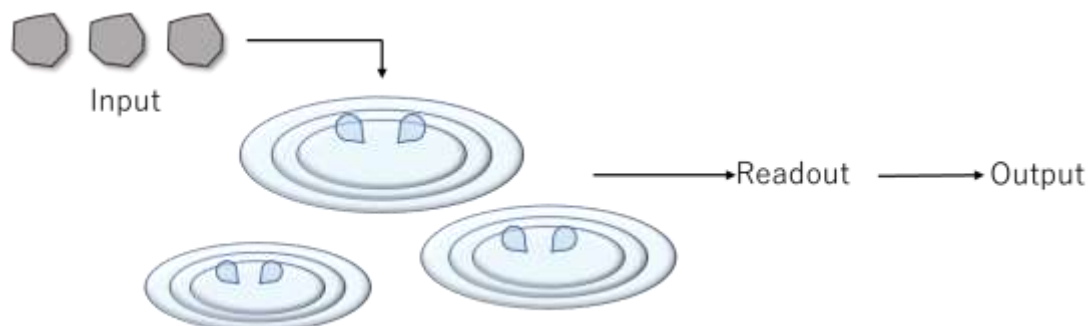


Fig. 1.5 リザーバーコンピューティングの概念図

## 1.7.2 エコーステートネットワーク

エコーステートネットワーク(Echo State Network, ESN)は、リザーバーコンピューティングを代表するモデルの一つである。人工ニューラルネットワークの流れを汲んでおり、結合重みを固定したリカレントニューラルネットワーク(Reservoir)を用いて、時系列入力の過去の情報が反響している状態(Echo State)を作り出し、そこから入力の特長の読み出し(Readout)を行う。

エコーステートネットワークの最も基本的なモデルを説明する。そのモデル構造を Fig. 1.6 に示す。ここで、 $W^{in}$ 、 $W$ 、 $W^{out}$ はそれぞれ入力層からリザーバー層への結合重み、リザーバー内のノード間の結合重み、リザーバー層から出力層への結合重みである。一般のリカレントニューラルネットワークでは $W_{in}$ 、 $W$ に関する学習が必要であるが、エ

コーステートネットワークでは $W_{in}$ 、 $W$ を固定する。したがって学習アルゴリズムによって調整されるのは $W_{out}$ のみになる。リザーバは入力データの変換器、リードアウトはリザーバの状態から入力の特賞を適切に読み出すための学習器である。

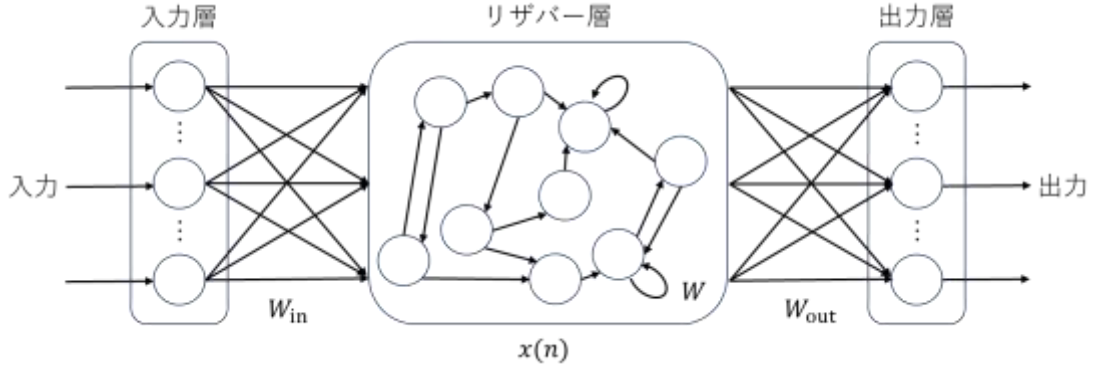


Fig. 1.6 エコステートネットワークの基本モデル

Fig. 1.6 において、入力層のノード数を $N_u$ 、リザーバのノード数を $N_x$ 、出力層のノード数を $N_y$ と表す。時系列データを扱うため、各ノードの状態は離散時間 $n(n = 0, 1, 2 \dots)$ とともに発展すると仮定する。時刻 $n$ における入力ベクトル $\mathbf{u}(n)$ 、リザーバのノード状態のベクトル $\mathbf{x}(n)$ 、出力ベクトル $\mathbf{y}(n)$ をそれぞれ、

$$\mathbf{u}(n) = (u_1(n), \dots, u_{N_u}(n))^T \in \mathbb{R}^{N_u} \quad (1.70)$$

$$\mathbf{x}(n) = (x_1(n), \dots, x_{N_x}(n))^T \in \mathbb{R}^{N_x} \quad (1.71)$$

$$\mathbf{y}(n) = (y_1(n), \dots, y_{N_y}(n))^T \in \mathbb{R}^{N_y} \quad (1.72)$$

と表す。また、それぞれの結合重み行列を、

$$W_{in} = (w_{ij}^{in}) \in \mathbb{R}^{N_x \times N_u} \quad (1.73)$$

$$W = (w_{ij}) \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \quad (1.74)$$

$$W_{out} = (w_{ij}^{out}) \in \mathbb{R}^{N_y \times N_x} \quad (1.75)$$

と表す。

各時刻 $n$ において、入力ベクトルが入力層に与えられると、その情報は変換されながら、出力層に向かって伝達される(順伝播)。時刻 $n$ のリザーバ状態ベクトル $\mathbf{x}(n)$ と時刻 $(n+1)$ の入力ベクトル $\mathbf{u}(n+1)$ が与えられると、リザーバ状態ベクトルの時間発展は、

$$\mathbf{x}(n+1) = \mathbf{f}(W^{in}\mathbf{u}(n+1) + W\mathbf{x}(n)) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.76)$$

と記述される。これをリザーバのノード $i(i = 1, \dots, N_x)$ について書き下すと、

$$x_i(n+1) = f\left(\sum_{j=1}^{N_u} w_{ij}^{in} u_j(n+1) + \sum_{j=1}^{N_x} w_{ij} x_j(n)\right) \quad (1.77)$$

となる。ここで、 $f(\cdot)$ は活性化関数 $f$ を括弧内の要素ごとに施す操作を表す。出力層の出力ベクトルは、リザーバーのすべてのノード状態の線形結合として、

$$\mathbf{y}(n+1) = W^{\text{out}}\mathbf{x}(n+1) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.78)$$

と与えられる。これを出力ノード $k(k = 1, \dots, N_y)$ について書き下すと、

$$y_k(n+1) = \sum_{j=1}^{N_x} w_{ki}^{\text{out}} x_i(n+1) \quad (1.79)$$

となる。リザーバー状態ベクトルの初期条件 $\mathbf{x}(0)$ と入力ベクトル $\mathbf{u}(1)$ が与えられると、式(1.76)および式(1.78)から、リザーバー状態ベクトル $\mathbf{x}(1)$ と出力ベクトル $\mathbf{y}(1)$ が計算される。同様の状態更新により、リザーバー状態ベクトルの時間発展 $\mathbf{x}(n)$ とモデル出力の時系列 $\mathbf{y}(n)$ が生成される。

### 1.7.3 バッチ学習(線形回帰とリッジ回帰)

バッチ学習では、データを一定期間貯めておき、それらを用いて学習を一括で行う。その時間範囲内では $W^{\text{out}}$ は時間 $n$ によらず一定とする。ここでは線形回帰とリッジ回帰について説明する。

エコーステートネットワークの基本モデルの出力は、式より、 $\mathbf{y}(n) = W^{\text{out}}\mathbf{x}(n)$ と表される。理想的には、すべての時刻 $n$ でこれが目標出力 $\mathbf{d}(n)$ と一致すればよく、

$$W^{\text{out}}\mathbf{x}(n) = \mathbf{d}(n) \quad (n = 1, \dots, T) \quad (1.80)$$

を満たす $W^{\text{out}} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_x}$ を求めればよい。これは、連立線型方程式を解くことに他ならない。

ここで、時刻 $n = 1, \dots, T$ についてリザーバー状態ベクトルを横方向に連結した行列を、

$$X = [\mathbf{x}(1), \dots, \mathbf{x}(T)] \in \mathbb{R}^{N_x \times T} \quad (1.81)$$

と定義し、目標時系列出力ベクトルを連結した行列を、

$$D = [\mathbf{d}(1), \dots, \mathbf{d}(T)] \in \mathbb{R}^{N_y \times T} \quad (1.82)$$

と定義すると、式(1.80)は、

$$W^{\text{out}}X = D \quad (1.83)$$

と書ける。もし $N_x = T$ で $X$ が正則行列ならば、その逆行列 $X^{-1}$ を用いて解を $\hat{W}^{\text{out}} = DX^{-1}$ と求めることができる。

しかし、現実の多くの問題では $T \gg N_x$ であり、式(1.83)は未知変数の数より制約式の数が多い優決定系となるので、近似解を求める必要がある。そこで、式の両辺を最小化するため、線形回帰を行う。具体的には、最小二乗法を利用して、二乗誤差の総和

$$E_{\text{LR}} = \frac{1}{2} \|D - W^{\text{out}}X\|_F^2$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^T \|\mathbf{d}(n) - \mathbf{y}(n)\|_2^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^T \|\mathbf{d}(n) - W^{\text{out}} \mathbf{x}(n)\|_2^2
\end{aligned} \tag{1.84}$$

を最小化する。ここで、 $\|\cdot\|_F$  は行列の Frobenius ノルムを表す。この最小化問題の解は、正規方程式

$$W^{\text{out}} X X^T = D X^T \tag{1.85}$$

を解くことにより、

$$\hat{W}^{\text{out}} = D X^T (X X^T)^{-1} \tag{1.86}$$

と求められる。したがって、 $X$  の Moore-Penrose 疑似逆行列  $X^\dagger = X^T (X X^T)^{-1}$  を用いて

$$\hat{W}^{\text{out}} = D X^\dagger \tag{1.87}$$

と書ける。 $X$  のサイズが大きい場合は、 $X^\dagger$  を直接求めると計算に必要なメモリ量が増加して効率的ではないため、 $X X^T$  と  $D X^T$  を  $n$  の増加とともに逐次的に求めて式(1.86)を適用するとよい。 $X X^T$  が正則でない場合には

$$\hat{W}^{\text{out}} = D X^T (X X^T)^\dagger \tag{1.88}$$

としてもよい。

リードアウトの学習パラメータ数はリザバーのノード数  $N_x$  に比例するので、 $N_x$  を増加させれば出力誤差をより小さくすることができると考えられる。しかし、モデルの自由度が高すぎて訓練データに過適応したモデルが得られる(過学習になる)可能性がある。機械学習では、過学習を抑制するために正則化がよく用いられる。正則化によって出力重み行列の要素の絶対値は小さくなる傾向があるので、ノイズに対してロバストなモデルを得ることが期待できる。このような必要最小限の学習パラメータでモデルを表現しようとする方法をスパース最適化という。

式の右辺に学習パラメータの二乗和を正則化項として加える場合を  $L_2$  最適化と呼び、この場合の最適な  $W^{\text{out}}$  を求める回帰をリッジ回帰という。すなわち、最小化すべきコスト関数を、

$$\begin{aligned}
E_{\text{RR}} &= \frac{1}{2} \|D - W^{\text{out}} X\|_F^2 + \frac{\beta}{2} \|W^{\text{out}}\|_F^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^T \|\mathbf{d}(n) - W^{\text{out}} \mathbf{x}(n)\|_2^2 + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N_y} \sum_{j=1}^{N_x} |w_{ij}|^2
\end{aligned} \tag{1.89}$$

とする。ここで、 $\beta > 0$  は正則化項の大きさを調整する正則化パラメータである。このとき解は、

$$\hat{W}^{\text{out}} = D X^T (X X^T + \beta I)^{-1} \tag{1.90}$$

と求められる。ここで、 $I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$ は単位行列を表す。 $\beta = 0$ のときは式(1.86)に帰着される。

#### 1.7.4 NARMA モデル

時系列予測は、時系列データの将来の値を予測する問題である。ここでは、非線形自己回帰移動平均(Nonlinear Auto Regressive Moving Average, NARMA)モデルについて説明する。このモデルは、自己回帰部分と移動平均部分から成る自己回帰移動平均(ARMA)モデルの一種で、現在の値と過去の値とが非線形な依存関係をもつ。

時系列入力 $u(n)$ が与えられるとき、時数 $m$ の NARMA モデルは、

$$d(n+1) = a_1 d(n) + a_2 d(n) \sum_{i=0}^{m-1} d(n-i) + a_3 u(n-m+1)u(n) + a_4 \quad (1.91)$$

と記述される。ここで、 $m$ は1以上の整数、 $a_1, a_2, a_3, a_4$ は定数パラメータである。右辺の第二項は過去 $m$ ステップの状態に依存する非線形項である。右辺の第三項は入力に依存する非線形項である。NARMA モデルの時系列予測を行うには、機械学習モデルが非線形性と少なくとも $m$ ステップ前の入力の「記憶」を備えている必要がある。 $m = 2$ のときのモデルを NARMA2、 $m = 10$ のときのモデルを NARMA10 という[6]。

### 1.8 研究目的

本研究の目的は主に2つある。まず、AFI法を用いた2次元TDGL方程式の実装により第2種超伝導体における磁束量子の動きおよびそれに伴う電磁現象を可視化する。また、ピンを導入し、それが磁束線の動きや電磁現象にどのような影響を与えるのか調査し、超伝導体内部で磁束線はどのように振る舞うのか、電流はどのように流れているのか、磁束線の運動に伴い電界はどのように発生するのか、内部の磁束密度はどのようにになっているのかなど、超伝導体内部の様子をシミュレーションすることで、詳しく調査することを1つ目の目的とする。また、超伝導現象における $E$ - $J$ 特性を用いてリザーバーコンピューティングを行う。まず、超伝導体に印加する電流密度を時間的に変化させ、それによって超伝導体内部に発生する電界の時間変化を無作為抽出し、電流密度の時間変化を正弦波で与えた場合と乱数波で与えた場合の電流密度と電界の入出力応答をリサージュ波形や高速フーリエ変換によって調査し、超伝導現象が非線形性や高次高調波特性を備えているか調査する。続いて、リザーバーコンピューティングの波形生成タスク、NARMA2タスク、非線形-メモリタスクなどの様々なタスクを実行し、超伝導現象が物理リザーバーとして有用であるか否か、有用であるのならばどれくらいの精度を得ることができるのか、またどのようなタスクに対して有効であるかなどを調査することで、超伝導現象の新たな応用の可能性を探ること、超伝導現象を新たな物理リザーバーとして提案することを2つ目の目的とする。



## 第2章 実装および計算方法

### 2.1 オーダーパラメータ $\Psi$ の初期条件・更新式

2次元 TDGL 方程式を AFI 法によって実装した。今回はスカラーポテンシャルが常にいたるところでゼロであるゲージを採用した。ゲージ場(ベクトルポテンシャル)が時間的にも空間的にも変化するとき、TDGL 方程式は、

$$\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \Psi - \alpha \Psi - \beta |\Psi|^2 \Psi \quad (2.1)$$

$$\tau_A \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \text{Im}[\bar{\Psi}(\nabla - i\mathbf{A})\Psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.2)$$

で与えられる。式(2.1)がオーダーパラメータ、式(2.2)がベクトルポテンシャルに関する方程式である。ここで式(2.2)の $\tau_A$ はベクトルポテンシャルに関する時定数である。オーダーパラメータに関する初期条件として、

$$\Psi(x, y, 0) = \cos\left(\frac{\pi m}{L} x\right) \cos\left(\frac{\pi n}{L} y\right), \quad m, n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.3)$$

を与えた。

AFI を用いて「反応項」およびゲージ場存在下での従属変数 $\Psi_{i,j}$ (オーダーパラメータ)の更新式を計算して、

$$\Psi'_{i,j} = a_{i,j} \Psi_i + b_{i,j} (w_x^{i,j} \Psi_{i+1,j} + \bar{w}_x^{i-1,j} \Psi_{i-1,j} + w_y^{i,j} \Psi_{i,j+1} + \bar{w}_y^{i,j-1} \Psi_{i,j-1}) \quad (2.4)$$

を得た。式(2.4)において $\Psi'_{i,j}$ は $\Psi_{i,j}$ が時間 $\tau$ 後に更新された値である。

ただし、

$$a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right) \quad (2.5)$$

$$b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}} \quad (2.6)$$

である。

## 2.2 リンク変数・ループ変数

ゲージ場の時間発展に関しては、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ の形のまま実装するのではなく、容易にするためにリンク変数 $w_x^{i,j}, w_y^{i,j}$ に関する偏微分方程式を導き、それを時間に関して離散化する方法を採用した。

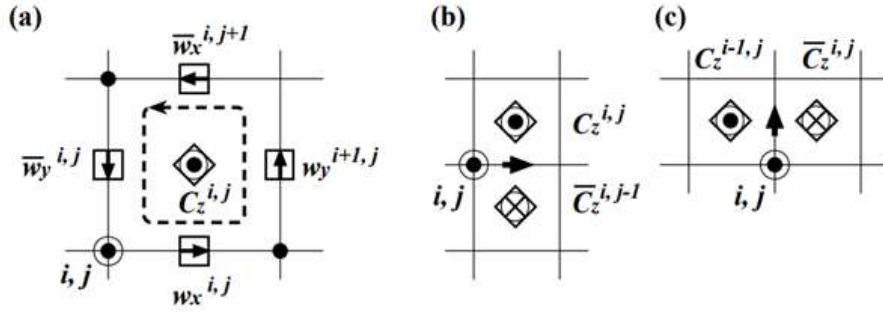


Fig. 2.1 演算 $\nabla \times$ のリンク変数による差分化およびループ変数の定義[5]

リンク変数の積をループ変数 $C$ と呼ぶこととする。このとき、式(2.2)における演算 $\nabla \times \nabla \times$ の差分化はループ変数 $C$ の積で実現できる。

ここで、リンク変数 $w_x^{i,j}, w_y^{i,j}$ の更新は次のように行った。方程式(2.2)を空間に関して離散化することを考える。リンク変数の定義式

$$w_x^i \equiv \exp(-ihA_x^{i,j}), \quad w_y^{i,j} \equiv \exp(-ihA_y^{i,j}) \quad (2.7)$$

および Fig. 2.1(a)より、格子点 $(i,j)$ を左下の頂点とする微小正方形によって演算子 $\nabla \times$ を差分化することを考える。ループ変数 $C_z^{i,j}$ を次式のように、微小正方形の辺上で定義されたリンク変数の積で定義する。

$$\begin{aligned} C_z &\equiv w_x^{i,j} w_y^{i+1,j} \bar{w}_x^{i,j+1} \bar{w}_y^{i,j} \\ &= \exp[-ih(A_y^{i+1,j} - A_y^{i,j} - A_x^{i,j+1} + A_x^{i,j})] \\ &\cong \exp[-ih^2(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}] \end{aligned} \quad (2.8)$$

ここで、 $(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}$ は、位置 $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})$ における $\mathbf{A}$ のローテーションの $z$ 成分である。

さらに、このループ変数 $C_z^{i,j}$ を用いて次式が得られる。

$$C_z^{i,j} \bar{C}_z^{i,j-1} \cong \exp[-ih^3(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_x^{i,j}] \quad (2.9)$$

$$\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} \cong \exp[-ih^3(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_y^{i,j}] \quad (2.10)$$

ここで式(2.9)と(2.10)は、それぞれリンク変数 $w_x^{i,j}$ および $w_y^{i,j}$ と同じ位置で定義されている。

ループ変数 $C_z^{i,j}$ は $(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}$ に対応する(Fig. 2.1[5])。Fig. 2.1(b)、Fig. 2.1(c)は $C_z^{i,j} \bar{C}_z^{i,j-1}$ と $\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j}$ の定義を説明している。

以上の計算より、TDGL 方程式を空間に関して離散化することにより、次の常微分方程式が得られた。

$$\begin{aligned} \gamma \frac{\partial \Psi_{i,j}}{\partial t} = & \frac{1}{h^2} (w_x^{i,j} \Psi_{i+1,j} + \bar{w}_x^{i-1,j} \Psi_{i-1,j} + w_y^{i,j} \Psi_{i,j+1} + \bar{w}_y^{i,j-1} \Psi_{i,j-1} - 4\Psi_{i,j}) \\ & - \alpha_{i,j} \Psi_{i,j} - \beta_{i,j} |\bar{\Psi}_{i,j}|^2 \Psi_{i,j} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\tau_A \frac{\partial w_x^{i,j}}{\partial t} = -i \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_x^{i,j} \Psi_{i+1,j}] w_x^{i,j} - \frac{1}{h^2} (\bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j} - 1) w_x^{i,j} \quad (2.12)$$

$$\tau_A \frac{\partial w_y^{i,j}}{\partial t} = -i \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_y^{i,j} \Psi_{i+1,j}] w_y^{i,j} - \frac{1}{h^2} (\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} - 1) w_y^{i,j} \quad (2.13)$$

ここで、

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_x^{i,j} \cong \frac{\bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j} - 1}{-ih^3} \quad (2.14)$$

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_y^{i,j} \cong \frac{\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} - 1}{-ih^3} \quad (2.15)$$

であることを用いた。

## 2.3 境界条件の処理

ここでは境界条件の実装方法について説明する。

これまでのように2次元では長方形シミュレーション領域を考える。オーダーパラメータの値は格子点上で定義されている：

$$\Psi_{i,j}, \quad i = 0, \dots, N_x + 1, \quad j = 0, \dots, N_y + 1 \quad (2.16)$$

ここではz方向に印加されている一様磁界 $B_a$ を考える。このとき、 $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}_a = (0, 0, B_z)$ が東西南北の境界で満たされていなくてはならない。さらに、y方向に電流 $\mathbf{J}_a$ が印加されている場合、すなわち $\mathbf{J}_a = (0, J_a, 0)$ である場合、先の境界条件に電流による効果が重畳されることになる。Fig. 2.2[5]に境界付近の格子点およびリンク変数の配置を示す。印加磁界および印加電流はリンク変数の境界条件に反映される。

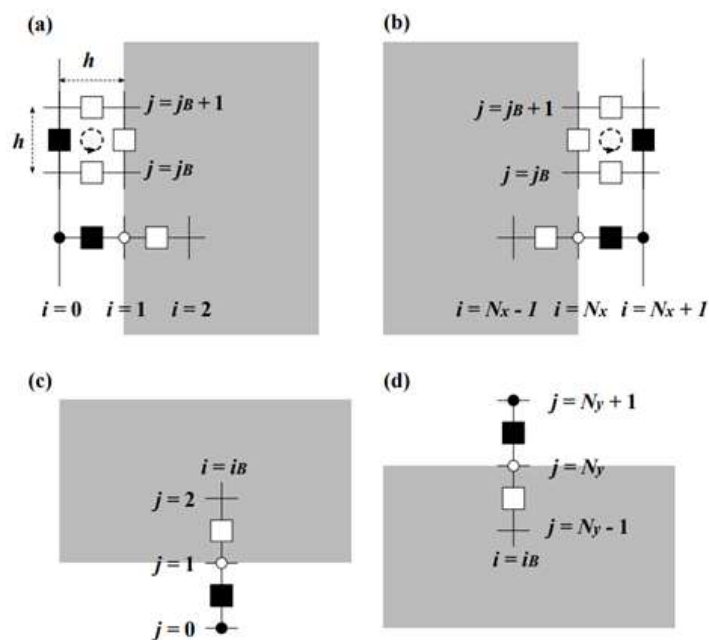


Fig. 2.2 境界付近の格子点およびリンク変数の配置[5]

(a)西側境界( $x = 0$ ) (b)東側境界( $x = L_x$ ) (c)南側境界( $y = 0$ ) (d)北側境界( $y = L_y$ )

### 2.3.1 リンク変数の境界条件

西側および東側の境界( $x = 0$ および $x = L_x$ )において、境界面に垂直な成分 $w_x$ はノイマン境界条件

$$w_x^{0,j_B} = w_x^{1,j_B}, \quad (2.17)$$

$$w_x^{N_x,j_B} = w_x^{N_x-1,j_B} \quad (2.18)$$

を採用した。ここで、 $j_B = 1, \dots, N_y$ である。右辺が左辺に代入されるような実装を行うものとし、以降の境界条件の式についても、同様に実装を行った。

西側の境界( $x = 0$ )において境界面に平行な成分 $w_y$ が満たすべき条件は、アンペールの法則より、

$$\begin{aligned} w_x^{0,j_B} w_y^{1,j_B} \bar{w}_x^{0,j_B+1} \bar{w}_y^{0,j_B} &\cong \exp\left(-i \oint_{(0,j_B)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &= \exp\left(-i \int \int_{(0,j_B)} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}\right) \\ &\cong \exp\left[-ih^2(B_a + \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)\right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

ここで $\mu_0$ は真空透磁率、 $L_x$ はシミュレーション領域の $x$ 方向のサイズに対応する。式(2.19)により、西側境界における境界面に平行な成分 $w_y$ として、

$$w_y^{0,j_B} = w_x^{0,j_B} w_y^{1,j_B} \bar{w}_x^{0,j_B+1} \exp\left[ih^2(B_a + \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)\right] \quad (2.20)$$

が得られた。

東側の境界( $x = L_x$ )において境界面に平行な成分 $w_y$ が満たすべき条件は、同様にアンペールの法則から導かれる次の関係式によって求めた。

$$\begin{aligned} w_x^{N_x,j_B} w_y^{N_x+1,j_B} \bar{w}_x^{N_x,j_B+1} \bar{w}_y^{N_x,j_B} &\cong \exp\left(-i \oint_{(N_x,j_B)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &= \exp\left(-i \int \int_{(N_x,j_B)} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}\right) \\ &\cong \exp\left[-ih^2(B_a - \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)\right] \end{aligned} \quad (2.21)$$

式(2.21)により、東側境界における境界面に平行な成分 $w_y$ として、

$$w_y^{N_x+1,j_B} = w_x^{N_x,j_B} w_x^{N_x,j_B+1} \bar{w}_y^{N_x,j_B} \exp\left[-ih^2(B_a - \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)\right] \quad (2.22)$$

が得られた。

ここで、式(2.20)および式(2.22)において、 $j_B = 1, \dots, N_y - 1$ である。

印加磁界( $z$ 方向)と印加電流( $y$ 方向)の効果は東西境界面における面に平行な成分に反映される。印加磁界と印加電流のリンク変数の境界条件への反映について、Fig. 2.3[5]に

示す。

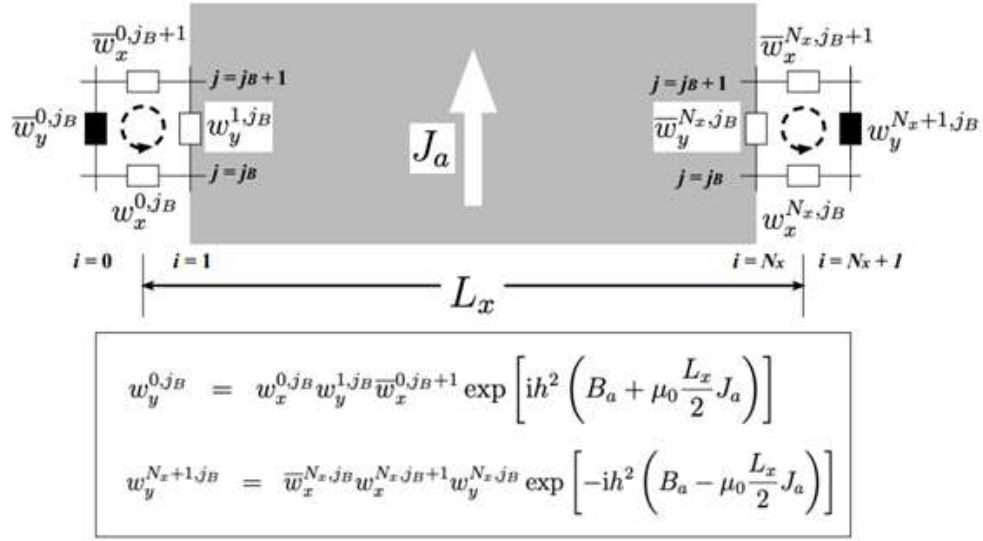


Fig. 2.3 東西境界における印加磁界、印加電流のリンク変数への反映[5]

南側、北側の境界面における境界面に垂直な成分に関して、次のようなノイマン境界条件

$$w_y^{i_B,0} = w_y^{i_B,1} \quad (2.23)$$

$$w_y^{i_B,N_y} = w_y^{i_B,N_y-1} \quad (2.24)$$

を採用した。ここで、 $i_B = 1, \dots, N_x$ である。

南および北側の境界面における接線成分についてもノイマン境界条件が満たされるとした。

$$w_x^{i_B,0} = w_x^{i_B,1} \quad (2.25)$$

$$w_x^{i_B,N_y+1} = w_x^{i_B,N_y} \quad (2.26)$$

ここで  $i_B = 1, \dots, N_x - 1$ である。

### 2.3.2 オーダーパラメータの境界条件

西側と東側の境界においてはノイマン境界条件に対応する、次式を実装した。

$$\Psi_{0,j_B} = w_x^{0,j_B} \Psi_{1,j_B} \quad (2.27)$$

$$\Psi_{N_x+1,j_B} = \bar{w}_x^{N_x,j_B} \Psi_{N_x,j_B} \quad (2.28)$$

ここで、 $j_B = 1, \dots, N_y$ である。

南側と北側の境界においても、ノイマン境界条件に対応する、次式を実装した。

$$\Psi_{i_B,0} = w_y^{i_B,0} \Psi_{i_B,1} \quad (2.29)$$

$$\Psi_{i_B,N_y+1} = \bar{w}_y^{i_B,N_y} \Psi_{i_B,N_y} \quad (2.30)$$

ここで、 $i_B = 1, \dots, N_x$ である。

オーダーパラメータについて、値の更新方法を示す図を Fig. 2.4[5]に示す。

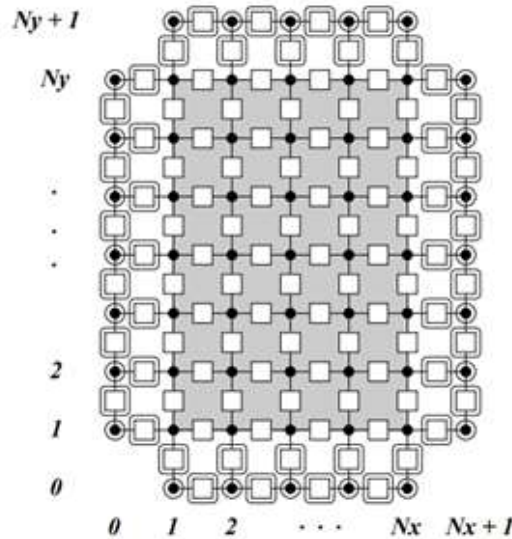


Fig. 2.4 境界条件と基礎方程式によるオーダーパラメータの更新[5]

曲線で囲まれている格子点およびリンク変数は境界条件によって、囲まれていないものは基礎方程式によって値が更新される。

## 2.4 ゲージ場ダイナミクスの時間離散化

ここで、ゲージ場のダイナミクスを記述する常微分方程式の時間に関する離散化を以下の通り実装した。ゲージ場に関する方程式(2.12)、(2.13)について、

$$w_x^{i,j} = \exp(i\theta_x^{i,j}), \quad w_y^{i,j} = \exp(i\theta_y^{i,j}) \quad (2.31)$$

および

$$\omega_x^{i,j} = \frac{d}{dt}\theta_x^{i,j}, \quad \omega_y^{i,j} = \frac{d}{dt}\theta_y^{i,j} \quad (2.32)$$

とおく。すると次の関係式が得られる。

$$\omega_y^{i,j} = -\frac{1}{\tau_A} \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_x^{i,j} \Psi_{i+1,j} + \frac{1}{\hbar^2} \bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j}] \quad (2.33)$$

$$\omega_x^{i,j} = -\frac{1}{\tau_A} \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_y^{i,j} \Psi_{i,j+1} + \frac{1}{\hbar^2} \bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j}] \quad (2.34)$$

これらの関係式より、次のような、リンク変数の偏角に関するオイラー法が考えられる。

$$\theta_x^{i,j}(t+\tau) = \theta_x^{i,j}(t) + \frac{\tau}{2} (\omega_x^{i,j}(t) + \omega_x^{i,j}(t+\tau)), \quad (2.35)$$

$$\theta_y^{i,j}(t+\tau) = \theta_y^{i,j}(t) + \frac{\tau}{2} (\omega_y^{i,j}(t) + \omega_y^{i,j}(t+\tau)) \quad (2.36)$$

## 2.5 電界、磁界、電流密度の実装

TDGL 方程式(1.10)、(1.11)は次のようにも表される。

$$\gamma \left( \frac{\partial}{\partial t} + iq\phi \right) \Psi = (\nabla - iq\mathbf{A})^2 \Psi - \alpha\Psi - \beta|\Psi|^2\Psi \quad (2.37)$$

$$\gamma \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\phi \right) = q \text{Im}[\bar{\Psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\Psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.38)$$

ここで、 $\phi$ はスカラーポテンシャル、 $q$ は電荷である。

電界 $\mathbf{E}$ および磁界 $\mathbf{B}$ は次のように表される。

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.39)$$

ここで、式(2.37)、(2.38)、(2.39)はゲージ対称性を持つ。すなわち、任意関数 $\chi$ のゲージ変換

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \Psi \rightarrow \Psi \exp(iq\chi) \quad (2.40)$$

によって式(2.37)、(2.38)、(2.39)は形を変えない。



このゲージ対称性を利用して、ゲージを選択する。今回はスカラーポテンシャル $\phi$ があらゆる場所で常にゼロであるゲージを採用した。このゲージのもとでは、式(2.37)、(2.38)、(2.39)はそれぞれ次のように表される。

$$\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\nabla - iq\mathbf{A})^2 \Psi - \alpha \Psi - \beta |\Psi|^2 \Psi \quad (2.41)$$

$$\tau_A \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = q \text{Im}[\bar{\Psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\Psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.42)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.43)$$

### 2.5.1 電界

式(2.43)の左式および式(2.7)より、電界 $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$ は次のように計算され、これらの式を実装した。

$$E_x^{i,j} = \frac{1}{h} \frac{d\theta_x^{i,j}}{dt} = \omega_x^{i,j}/h \quad (2.44)$$

$$E_y^{i,j} = \frac{1}{h} \frac{d\theta_y^{i,j}}{dt} = \omega_y^{i,j}/h \quad (2.45)$$

### 2.5.2 磁界

式(2.43)右式および式ループ変数 $C_z^{i,j}$ の定義式より、磁界は

$$B_z^{i,j} = -\frac{1}{h^2} \arg [C_z^{i,j}] \quad (2.46)$$

と表され、これを実装した。磁界はループ変数 $C_z^{i,j}$ の値が定義されている空間位置と同じ位置で定義される。

### 2.5.3 電流密度

式(2.38)右辺の第1項は電流密度に対応する。これを $\mathbf{J}$ とおく。

$$\mathbf{J} = q \text{Im}[\bar{\Psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\Psi] \quad (2.47)$$

であり、

$$J_x^{i,j} = q \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_x^{i,j} \Psi_{i+1,j}]/h \quad (2.48)$$

$$J_y^{i,j} = q \text{Im}[\bar{\Psi}_{i,j} w_y^{i,j} \Psi_{i,j+1}]/h \quad (2.49)$$

である。式(2.48)、式(2.49)を実装した。電流密度の $x$ 成分、 $y$ 成分は対応するリンク変数 $w_x$ および $w_y$ が定義されている空間位置と同じ位置で定義される。

## 2.6 ピンの導入

ピンの導入に関しては、TDGL 方程式中のパラメータ $\alpha$ に空間依存性を持たせることによって実現した。すなわち $\alpha = \alpha(x, y)$  (2次元)とすることである。ピンを配置したい座標で $\alpha = 0$ とすることでピン領域(常伝導領域)を設定した。

## 2.7 描画

描画処理は統合開発環境 Processing により行った。100  $\xi$   $\times$  100  $\xi$ の大きさを持つ超伝導平面について、各部分のオーダーパラメータの大きさの2乗( $|\Psi|^2$ )を輝度に、位相を色相に割り当て表示させた。これにより量子化磁束の観測を行った。ピンがある領域( $\alpha = 0$ )には白い格子を描画し、ピンの位置がわかるようにした。また、その右の画面に、磁界の大きさを色相で、電界を黒矢印で、電流密度を白矢印で表示させた。これにより電磁現象の可視化を行った。

## 2.8 リザーバーコンピューティング

Processing 上で描画された大きさ100  $\xi$   $\times$  100  $\xi$  2次元超伝導領域に電流密度の時間変化を与え、その領域から無作為に50個の点を選択し、選択した点における電界を抽出した。これを $t = 1 \sim 10000$ まで行った。

得られた電界値 $E(t)$ を入力信号系列である電流密度 $J(t)$ に駆動されるリザーバーのノード $X(t)$ とした。この電流密度と電界を用いてリザーバーコンピューティングを行った。Fig. 2.5 に電流密度の印加と電界の抽出に関する概略を示す。

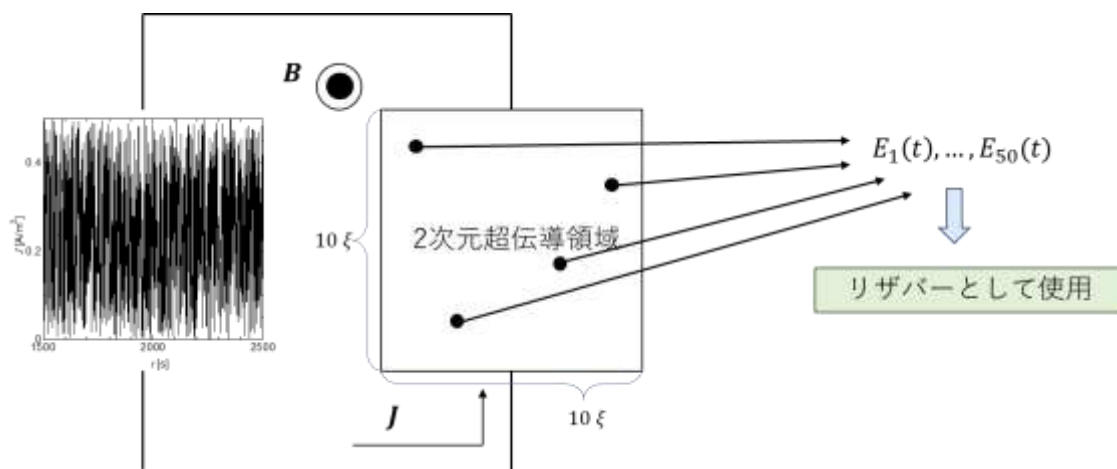


Fig. 2.5 電流の印加方法と電界の抽出方法の概略

### 2.8.1 入出力応答

リザーバーとして重要である非線形性を超伝導現象が備えているか否かを調査するために電流密度として正弦波入力と乱数波入力を与えてそのときの選択した点の電界値の計算を行い、入出力の応答を調べた。

まず、横軸を Timestep 縦軸を電界  $E(t)$  として直接グラフに表した。

続いて、入出力応答を調べる別の方法として、正弦波入力の入出力データを用いて、電流密度  $J(t)$  を横軸、電界  $E(t)$  を縦軸にとり、リサージュ波形を描いてその軌道を調査した。

最後に FFT(Fast Fourier Transform)によって、超伝導現象の高次高調波特性を調査した。結果を、横軸に周波数、縦軸に振幅スペクトルをとって、グラフに表示した。

### 2.8.2 波形生成タスク

波形生成タスクを行った。このタスクでは入力信号として与える電流密度  $J(t)$  は正弦波とした。教師信号に正弦波、三角波、鋸波、矩形波を用いて学習を行い時系列予測を行った。このとき 7001~9000 Timestep のデータをタスクに用いた。その中で学習と予測に使う部分の比は、8 : 2 とした。学習方法には線形回帰(式(1.86))を用いた。またこのとき、教師信号の正弦波には  $\cos \omega$ ,  $\sin 2\omega$ ,  $\sin 3\omega$  の 3 種類を用いた。教師データと学習部分の結果と予測部分の結果を色を分けて 1 つのグラフ上に表示した。また、各タスクにおける NMSE と  $R^2$  (2.8.5 にて後述) を計算し表にまとめた。

### 2.8.3 NARMA タスク

まず、NARMA2 タスクを行った。このタスクでは教師信号に NARMA2 を用いて時系列予測を行った。NARMA モデルは複雑な波形ゆえに、線形回帰で学習を行うと過学習を起こす恐れがあるため、学習方法にはリッジ回帰(式(1.90))を用いた。このときタスクに用いる Timestep 数を 50、100、300、1000 と変化させてのどデータ数が最も精度が良くなるか調査した。NARMA2 タスクにおいても、学習部分と予測部分の比は 8 : 2 とした。教師データと学習結果と予測結果を、色を分けて一つのグラフ上に表示した。予測精度の Timestep 依存性は、横軸に Timestep 数、縦軸に NMSE をとり、棒グラフで表示した。

続いて、教師信号を NARMA10 に変えて時系列予測を行った。その際、タスクに用いる Timestep 数は、NARMA2 で最も精度が高かったときのものとした。

### 2.8.4 非線形-メモリタスク

最後に非線形-メモリタスクを行った。このタスクでは非線形-メモリタスクの目的関数

$$y(n) = \sin(v \times I(n - \tau))$$

を教師信号として与え超伝導現象に非線形性とメモリ性がどのくらい備わっているか

を調査した。ここで式の $(\nu, \tau)$ はタスクに必要な非線形性の強さと記憶の長さを表している。具体的には、 $\nu$ の値を0.1~4.9まで0.1刻みで、 $\tau$ の値を0~9まで1刻みで大きくしていき、その時々 $\tau$ の NMSE を計算した。その結果を表にして表した。

### 2.8.5 予測精度の評価

また、今回様々なタスクを実行する中で予測の精度を示す指標として NMSE(Normalized Mean Square Error)と  $R^2$  (R Squared)を採用した。NMSE と  $R^2$  はそれぞれ、

$$\text{NMSE} = \frac{\sum_{k=1}^n (Y(t_k) - Y_r(t_k))^2}{\sum_{k=1}^n (Y_r(t_k))^2} \quad (2.50)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^n (Y(t_k) - Y_r(t_k))^2}{\sum_{k=1}^n (Y(t_k) - \bar{Y})^2} \quad (2.51)$$

と表される。NMSE は誤差、 $R^2$  は適合率のことであるので、式(2.50)は、その値が小さいほど、式(2.51)は、その値が大きい(1に近い)ほど予測の精度が高いと言える。

# 第3章 結果と考察

## 3.1 量子化磁束および電磁現象の可視化

まず、ピンが無い状態での磁束量子の動きと電磁現象を可視化したものを Fig. 3.1 に示す。左図が、オーダーパラメータの大きさ(磁束線の動き)に関して、右図が、電磁現象に関する図である。動画の一部を画像として切り取っている。左図の黒い部分で  $|\Psi|^2 = 0$  となっており、そこが磁束線がある部分である。この磁束線が、左端から侵入し右側へ移動していく様子を観測することができた。これは、磁束線にローレンツ力  $F_l = J \times B$  が働いているためであると考えられる。時々右側からも磁束線が侵入する様子が見られたが、これは電流を流すことによって自己磁界が発生したことが原因であると考えられる。すなわち、上向きに電流を流した場合、右ねじの法則によって左側では紙面表向きに、右側では紙面裏向きに自己磁界が発生する。そして、右側境界付近の自己磁界の大きさが外部から与えられた磁界の大きさより大きくなったため右側から磁束が侵入したと考えることができる。位相に関しては、例えば赤を基準として見ると、磁束線一本の周りで一周円を描くとまた赤に戻っている様子が見られた。つまり、磁束線の周りでは位相が  $2\pi$  の整数倍で変化するということである。また、右図では色相で磁束密度、白矢印で電流密度、黒矢印で電界を表している。電流は磁束線の近くではその周りをまわるように流れ、磁束線から離れたところでは上向きに流れている様子が見られた。電界は磁束線が移動した部分で電流密度と同じ向きに発生することを確認した。

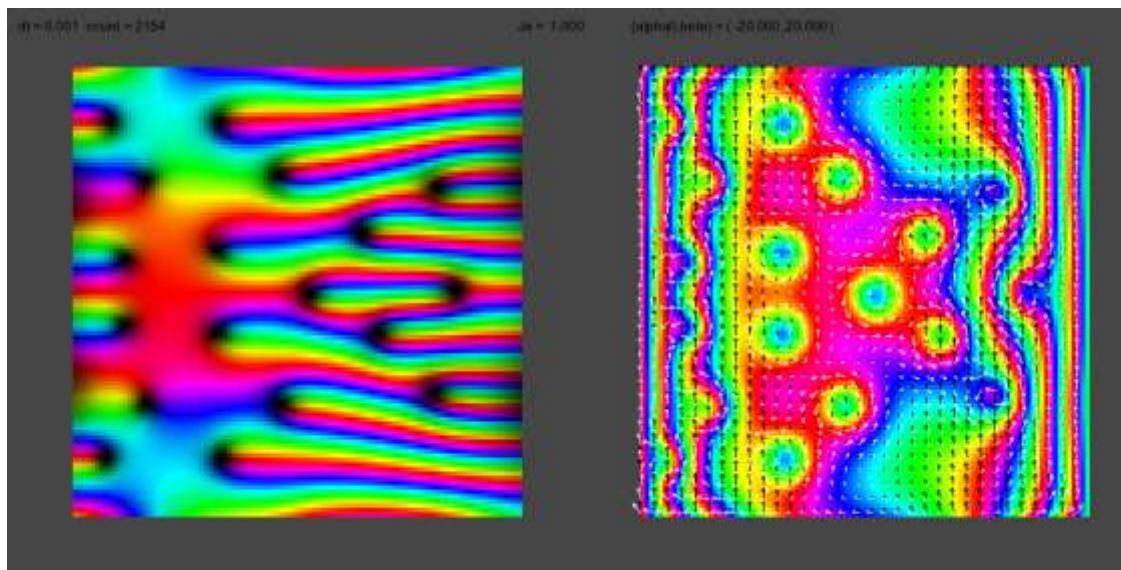


Fig. 3.1 量子化磁束と電磁現象の可視化(ピンなし)

次に、正方形形状のピンを 25 個導入し、量子化磁束および電磁現象を観測した様子を Fig. 3.2 に示す。Fig. 3.2 左図の上部に表示されている、白い格子状の部分がピンを実装した部分である。磁束線はピン無しの場合と同様に左端から侵入し右側へ向かって移動していく。しかし、ピンのある左図の上部では磁束線がピンに近づくと、磁束線がピンの中に吸い込まれるように入っていく様子が見られた。また、一度ピンの中に入った磁束線が、ピンの位置で固定される様子を確認することができた。ここで、磁束線が固定されるというのは、磁束線がその位置に留まって最後まで動かないというわけではない。左端から新たな磁束線が侵入して近づいてくると、あるピンに固定されていた磁束線は、今いるピンから離れ右に移動する。そして、また次のピンで固定されるという様子であった。これは、磁束線同士に、近づくと反発し遠ざかると引き合うばねのような相互の力が働いており、磁束バンドルを構成しているためである。

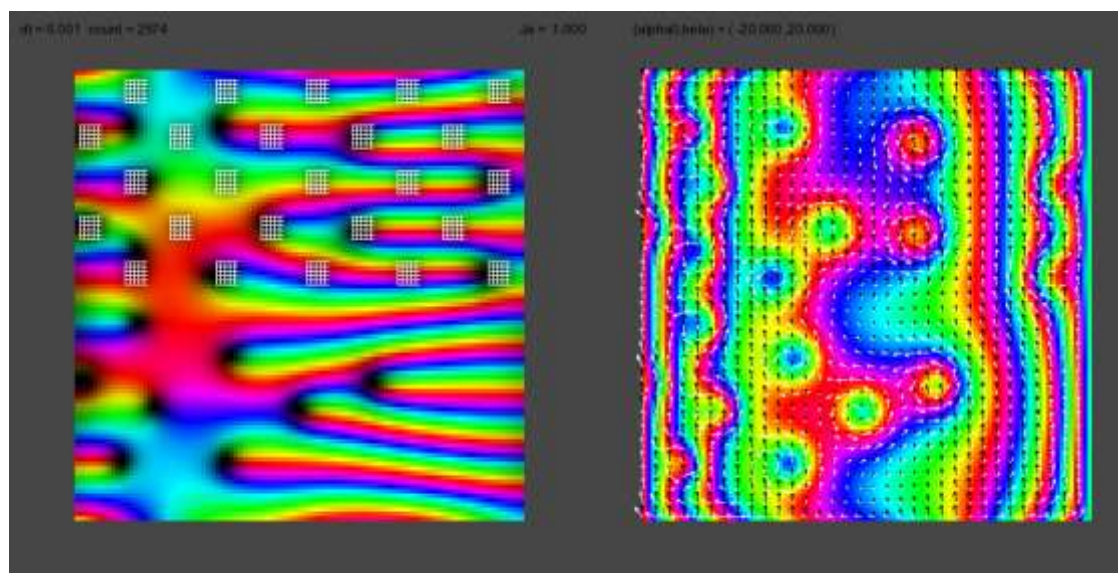


Fig. 3.2 量子化磁束と電磁現象の可視化(正方形形状ピン)

## 3.2 電流、電界を用いたリザーバーコンピューティング

### 3.2.1 入出力応答

まず、電流密度の正弦波入力に対する電界の出力応答を Fig. 3.3 に、乱数波入力に対する電界の出力応答を Fig. 3.4 に示す。どちらも、上図が入力で下図が出力である。

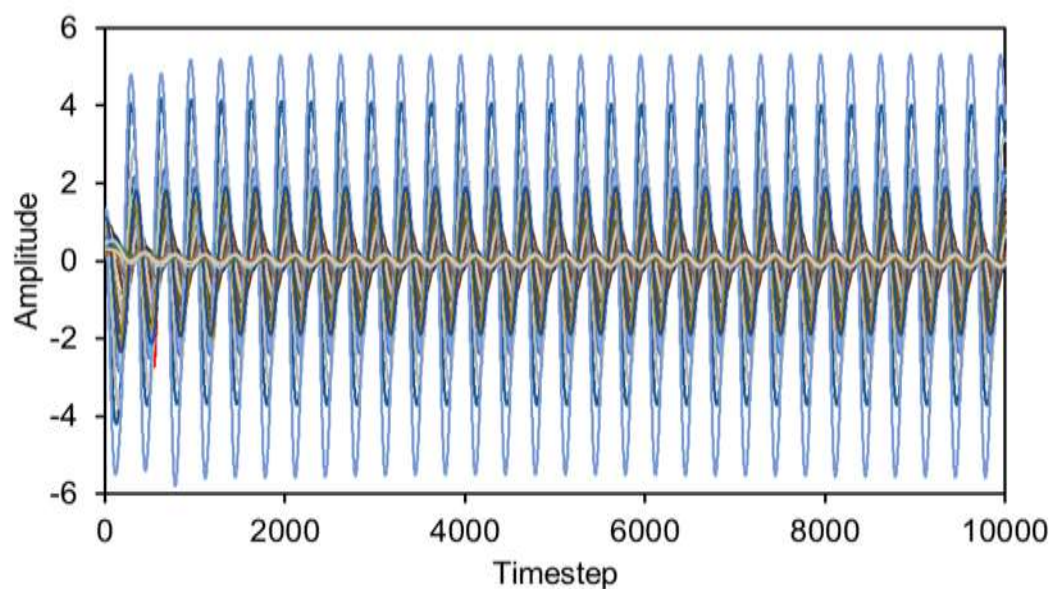
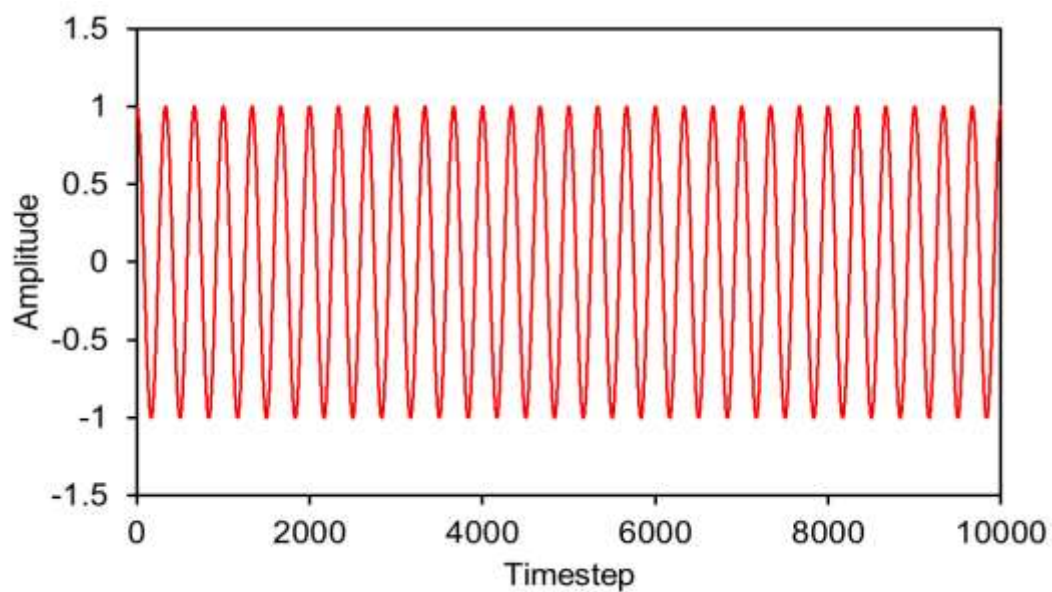


Fig. 3.3 電流密度の正弦波入力に対する電界の出力応答

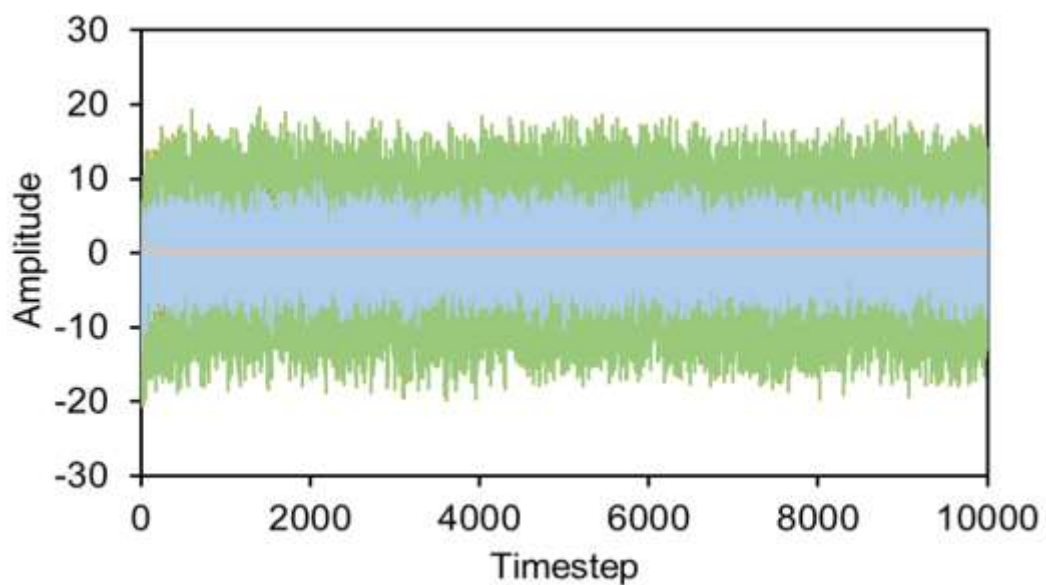
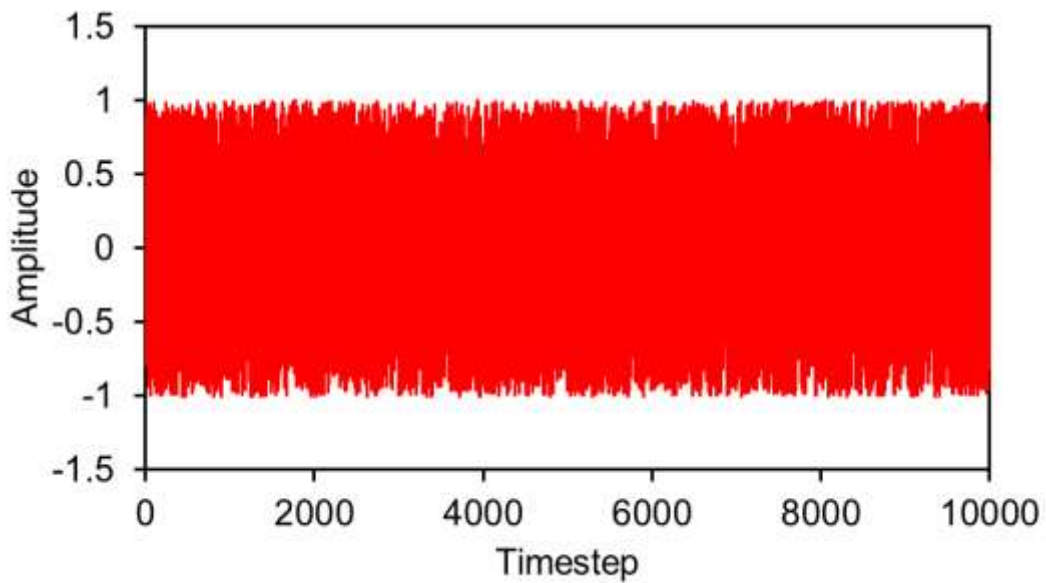


Fig. 3.4 電流密度の乱数波入力に対する電界の出力応答

正弦波について、出力された波形は、入力された波形の周期性を保っていることが確認できた。また、取得した点ごとに位相のずれが生じていることも確認できた。乱数波においても、入力の値の変化に対応して出力が追従していることがわかった。正弦波の方を見ればわかりやすいが、出力の初めの方の振幅が安定していない様子が見られた。これは、Timestepの小さい領域では初期状態の影響を受けやすいためであると考えられる。また、正弦波においても乱数波においても、選ぶ点によって振幅に大きな差が出ている。この原因としては、電流密度の値を更新するスピードが速いため、境界付近で



はシミュレーション領域の境界部分においては激しく磁束線が出たり入ったりするのに対して中心部分では磁束線の動きが小さかったためであると考えられる。

以上の結果から、超伝導現象が、リザーバーとしての重要な要素の一つである非線形性を有しているということがわかった。これにより超伝導現象がリザーバーとして有用である可能性をまず見いだすことができた。

### 3.2.2 リサージュ波形と FFT

電流密度と電界の入出力によって描かれたリサージュ波形を Fig. 3.5 に示す。50 個の点のすべてを表示すると多すぎるので、出力 1 から出力 4 までの 4 つのリサージュ波形を表示する。電界を取得した点はランダムであるので出力 1 や 4 という数字に大きな意味はない。

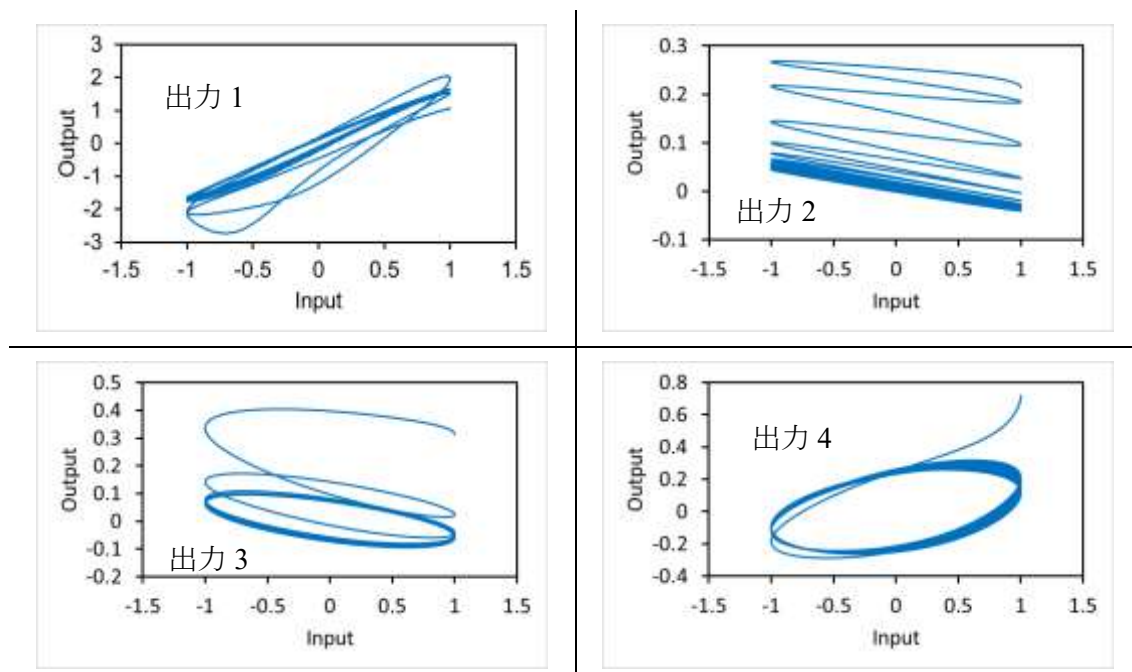


Fig. 3.5 入出力データによるリサージュ波形

一部ずれは見られるが、おおよそいずれの点に関しても一定の軌道を描くことがわかった。振幅に差があることから出力 1 は左右の境界付近、それ以外は中心付近から得られたデータであると判断できる。この結果より、超伝導現象の電流密度と電界の入出力応答は安定したものであることがわかった。一部生じたずれは初めの方に描かれた波形であり、ずれの原因としては、3.2.1 でも述べた通り、Timestepの小さい範囲で初期状態の影響を受けているためであると考えられる。

続いて入出力データを FFT した結果を Fig. 3.6 に示す。示した 4 つのグラフの順番は、Fig. 3.5 のリサージュ波形を示した順番に対応している。

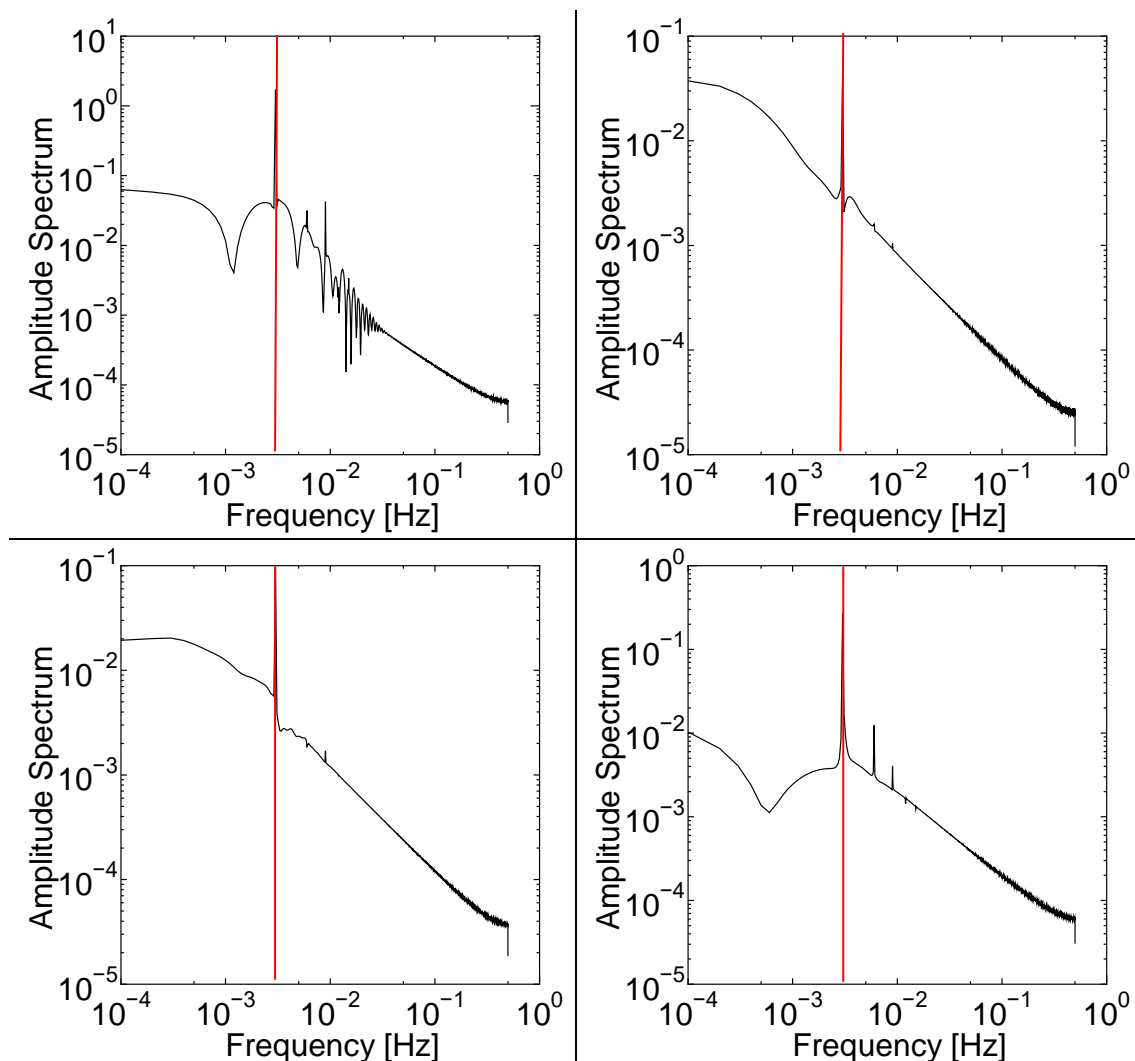


Fig. 3.6 入出力データの FFT

この図において、赤い線で示された部分が入力周波数である。左上図が一番わかりやすいが、入力周波数より高い周波数領域にも波形が立ち上がっていることがわかる。この結果から超伝導現象が、リザーブとして重要な要素の一つである高次高調波特性を備えていることがわかった。

### 3.2.3 波形生成タスク

波形生成タスクの結果を示す。正弦波( $\cos \omega, \sin 2\omega, \sin 3\omega$ )の時系列予測の結果を Fig. 3.7 に示す。赤い線で教師信号、青い線で学習中、緑の線で学習後の波形を表している。

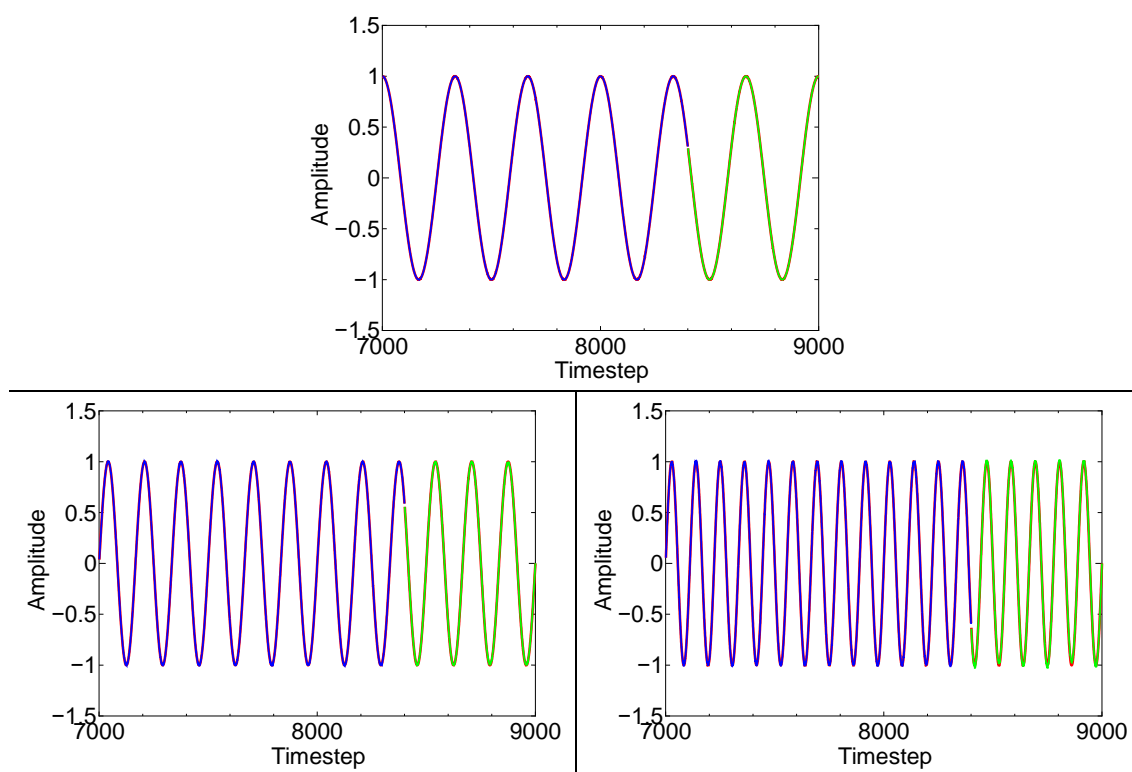


Fig. 3.7 正弦波の予測結果

図を見てのとおり、かなり正確に学習と予測を行うことができていたことがわかった。角周波数を大きくしてもほとんど精度が失われていないように見える。

続いて、三角波、鋸波、矩形波の時系列予測の結果を Fig. 3.8 に示す。

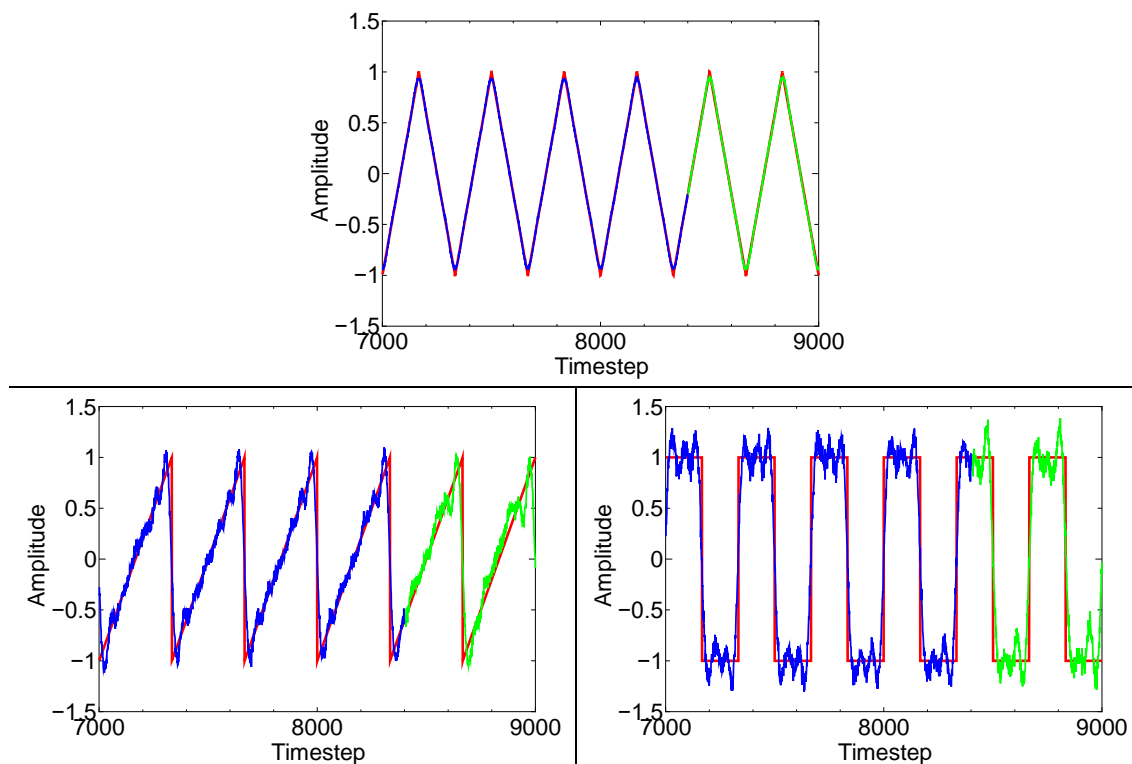


Fig. 3.8 三角波、鋸波、矩形波の予測結果

三角波においては、ほぼ正確に予測できることがわかった。鋸波と矩形波に関しては、十分に波形に追従はできているが正弦波や三角波に比べると精度が悪くなるという結果になった。その原因としては、鋸波や矩形波には横軸に対して垂直に波形が立ち上がる部分があるためであると考えられる。

続いて、各波形タスクの NMSE と  $R^2$  を Table. 3.1 に表す。

Table. 3.1 波形生成タスクの評価

	NMSE	$R^2$
正弦波( $\cos \omega$ )	$1.6 \times 10^{-7}$	1.0
正弦波( $\sin 2\omega$ )	$6.5 \times 10^{-5}$	1.0
正弦波( $\sin 3\omega$ )	$4.5 \times 10^{-4}$	1.0
三角波	$1.0 \times 10^{-3}$	1.0
鋸波	$1.4 \times 10^{-1}$	0.86
矩形波	$8.2 \times 10^{-2}$	0.92

NMSE、 $R^2$ のどちらに関して見てもグラフで確認した通り正弦波、三角波に関してはとても良い精度で予測できており、鋸波や矩形波に関しては少し精度が悪くなるという結果になった。しかし、鋸波や矩形波で精度が悪くなると言っても、どちらも8割以上の精度で予測できているため、超伝導現象の波形タスクに対するリザーブとしての能力は充分にあると評価することができる。

### 3.2.4 NARMA タスク

NARMA2 タスクの予測結果を Fig. 3.9 に示す。波形生成タスクと同様に、赤い線で教師信号、青い線で学習中、緑の線で学習後の波形を表している。

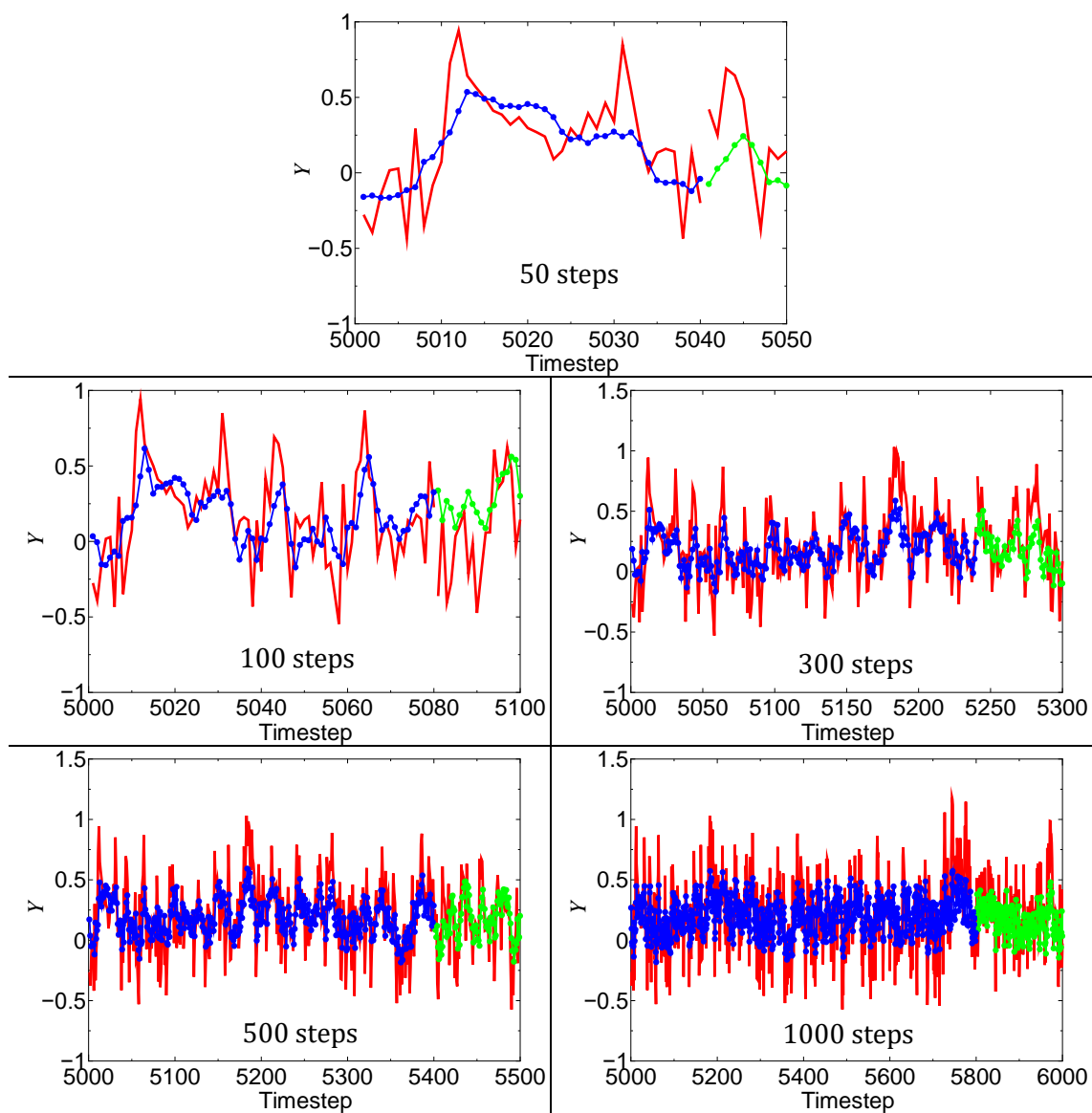


Fig. 3.9 NARMA2 タスクの予測結果

いずれの Timestep 数のグラフを見ても、正確に予測できているとは言えないが、学習中の出力の波形も学習後の出力の波形も教師信号の波形に追従している様子が確認できた。

続いて、NARMA2 タスクにおける NMSE の timestep 依存性を Fig. 3.10 に示す。

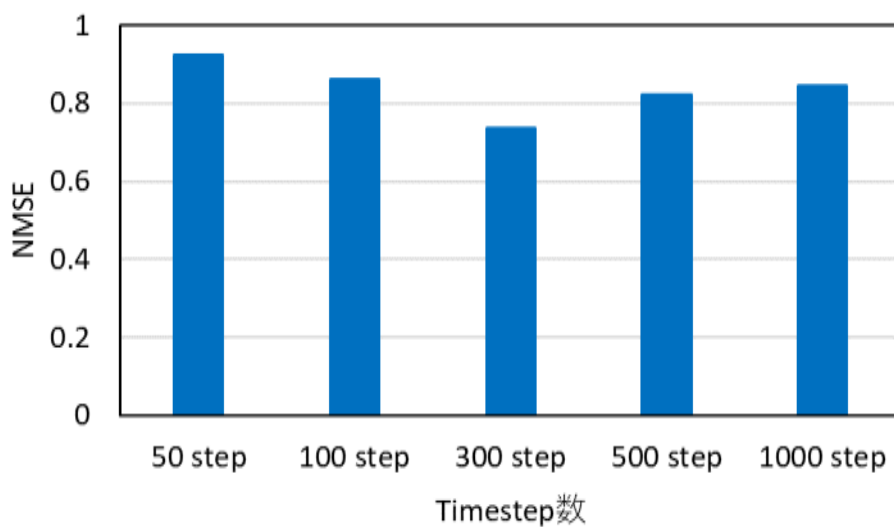


Fig. 3.10 NARMA2 タスクにおける NMSE の Timestep 依存性

Timestep が 300 のとき最も NMSE が小さくなった。用いるデータ数が多ければ多いほど予測の精度が上がるわけではないということを確認することができた。これは、50 step や 100 step では、波形の特長を捉えるうえで学習に用いたデータ数が足りないこと、反対に 500 step や 1000 step では、予測しなければならない部分が増えるため、誤差が蓄積されたことが原因であると考えられる。

続いて、NARMA10 タスクの予測結果を Fig. 3.11 に示す。NARMA10 タスクに用いる Timestep 数は、NARMA2 タスクにおいて最も精度が高かった 300 step とした。

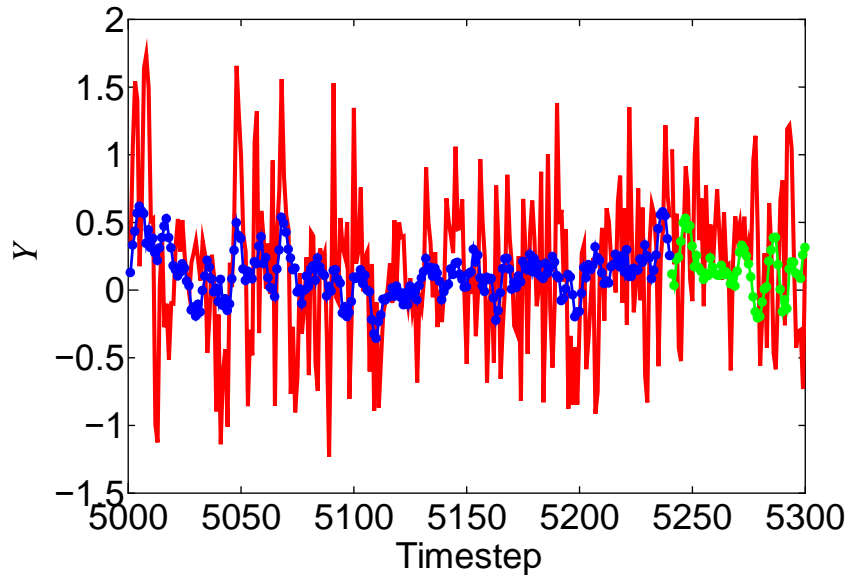


Fig. 3.11 NARMA10 タスクの予測結果

NMSE と  $R^2$  は、

$$\text{NMSE} = 1.0$$

$$R^2 = 5.8 \times 10^{-3}$$

であった。Fig. 3.11 より、目標の波形よりも学習、予測の波形の振れ幅は小さい。また、学習、予測の波形は大体目標の波形の中心付近をなぞっているように見える。つまり、目標波形の大まかな動きのみを予測していると言える。これらの理由としては、まず単純にリザーバの能力が、NARMA10 を予測できるほど高くないということが挙げられる。また、学習にリッジ回帰を用いたことも原因の一つであると考えられる。リッジ回帰は、線形回帰で起こりうる過学習を抑えることで、予測時のずれを小さくするものである。つまり、正確に予測できない波形に対してリッジ回帰で学習を行う場合、振れ幅を小さく目標波形の中心付近をなぞるように重み付けすることが最も予測時のずれを抑えることになるのである。大まかな動きを予測している原因はもう一つ考えられる。それは、NARMA2 はある程度予測できているという結果である。NARMA2 と NARMA10 の違いは、必要となる記憶の長さだけであるので、NARMA2 が予測できたのならば、NARMA10 に関しても精度は落ちるが追従しようとする様子が見えるはずである。

とはいえ、NARMA10 に関しては NMSE と  $R^2$  から見ても予測に成功したとは言えない結果である。NARMA2 が予測できていることから、超伝導現象の記憶能力を上げる方法を模索していく必要がある。



### 3.2.5 非線形-メモリタスク

非線形-メモリタスクの予測結果を Fig. 3.12 に示す。ただし、すべての結果を表示すると  $49 \times 9 = 441$  個のグラフを表示しなければならないため、ここでは代表として 4 つのグラフを表示する。左上図が  $(\nu, \tau) = (0.1, 1)$ 、右上図が  $(\nu, \tau) = (1.6, 4)$ 、左下図が  $(\nu, \tau) = (3.4, 6)$ 、右下図が  $(\nu, \tau) = (4.9, 9)$  のときの結果である。

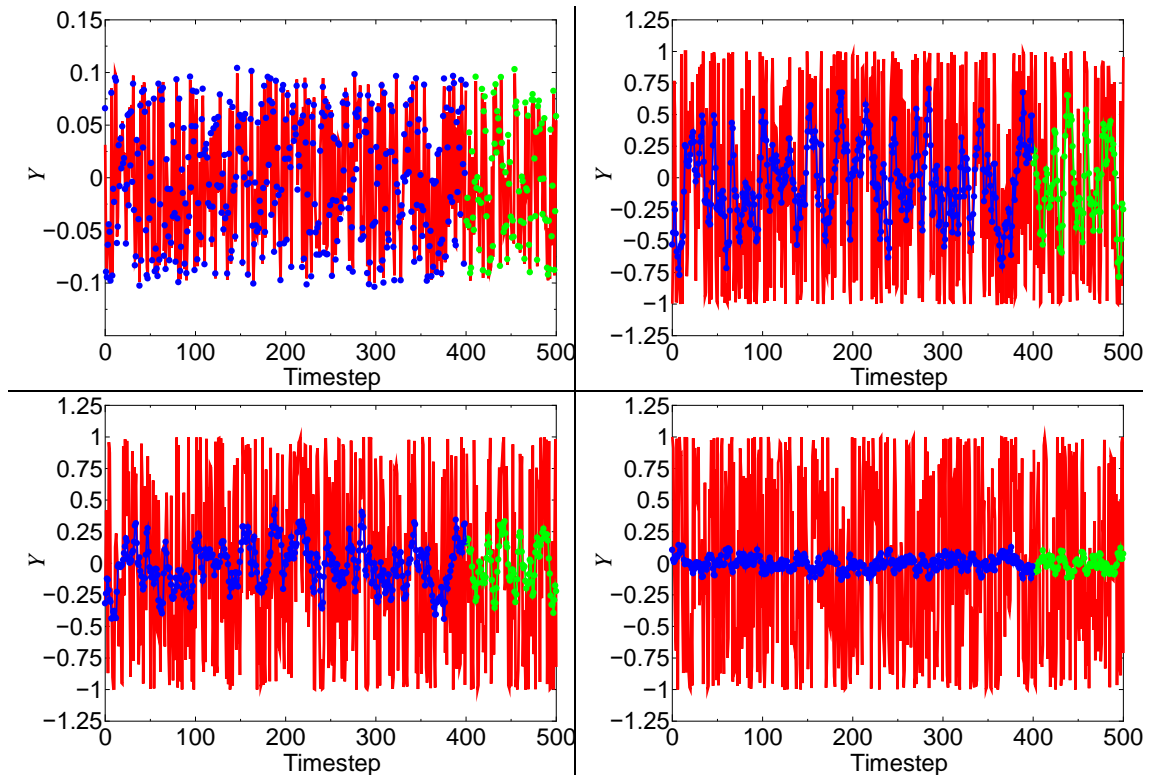


Fig. 3.12 非線形-メモリタスクの予測結果

$(\nu, \tau) = (0.1, 1)$  のときは、ほぼ正確に予測できていることがわかった。また、非線形性と記憶の長さを大きくしていくと正確さが失われていく様子が確認できた。

次に、非線形-メモリタスクの  $(\nu, \tau)$  に対する NMSE を Table. 3.2 に、 $R^2$  を Table. 3.3 に示す。

Table. 3.2 非線形-メモリタスクの  $(\nu, \tau)$  に対する NMSE

$\nu/\tau$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.1	3.37	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12
0.2	3.37	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12
0.3	3.37	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12
0.4	3.38	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12

0.5	3.38	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12
0.6	3.39	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.12
0.7	3.39	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.55	0.73	0.85	1.13
0.8	3.4	0.02	0.07	0.38	0.4	0.4	0.56	0.73	0.85	1.13
0.9	3.41	0.02	0.07	0.38	0.41	0.4	0.56	0.73	0.85	1.13
1	3.43	0.02	0.07	0.39	0.41	0.4	0.56	0.72	0.85	1.13
1.1	3.44	0.02	0.07	0.39	0.41	0.4	0.56	0.72	0.85	1.14
1.2	3.45	0.03	0.07	0.39	0.41	0.4	0.56	0.72	0.86	1.14
1.3	3.47	0.03	0.07	0.39	0.41	0.4	0.56	0.72	0.86	1.14
1.4	3.49	0.03	0.08	0.39	0.41	0.4	0.56	0.72	0.86	1.15
1.5	3.52	0.04	0.08	0.39	0.41	0.4	0.57	0.72	0.86	1.16
1.6	3.54	0.04	0.08	0.39	0.41	0.4	0.57	0.72	0.86	1.16
1.7	3.58	0.05	0.08	0.39	0.42	0.4	0.57	0.73	0.86	1.17
1.8	3.61	0.05	0.08	0.39	0.42	0.41	0.58	0.73	0.86	1.18
1.9	3.65	0.06	0.09	0.4	0.42	0.41	0.58	0.73	0.87	1.19
2	3.7	0.07	0.09	0.4	0.42	0.41	0.59	0.73	0.87	1.2
2.1	3.75	0.07	0.09	0.4	0.43	0.42	0.59	0.73	0.88	1.22
2.2	3.82	0.08	0.1	0.41	0.43	0.42	0.6	0.74	0.88	1.24
2.3	3.89	0.09	0.11	0.41	0.44	0.43	0.61	0.74	0.89	1.26
2.4	3.96	0.1	0.12	0.42	0.45	0.43	0.62	0.75	0.9	1.28
2.5	4.01	0.12	0.12	0.43	0.46	0.44	0.63	0.75	0.92	1.3
2.6	4.06	0.13	0.14	0.44	0.47	0.45	0.64	0.76	0.93	1.33
2.7	4.11	0.15	0.15	0.45	0.48	0.46	0.66	0.77	0.95	1.35
2.8	4.18	0.17	0.16	0.47	0.49	0.48	0.68	0.79	0.98	1.39
2.9	4.26	0.19	0.18	0.49	0.51	0.5	0.7	0.8	1.01	1.43
3	4.37	0.21	0.2	0.51	0.54	0.52	0.73	0.82	1.04	1.49
3.1	4.51	0.24	0.23	0.54	0.57	0.54	0.75	0.85	1.09	1.55
3.2	4.68	0.27	0.25	0.57	0.6	0.58	0.78	0.88	1.15	1.63
3.3	4.9	0.31	0.29	0.62	0.65	0.62	0.82	0.92	1.21	1.73
3.4	5.15	0.36	0.33	0.67	0.71	0.67	0.87	0.97	1.3	1.86
3.5	5.44	0.41	0.38	0.74	0.77	0.73	0.93	1.03	1.41	2.02
3.6	5.81	0.48	0.44	0.83	0.85	0.81	1	1.11	1.55	2.23
3.7	6.19	0.58	0.53	0.95	0.95	0.92	1.09	1.2	1.72	2.48
3.8	6.67	0.7	0.63	1.1	1.08	1.05	1.2	1.31	1.95	2.78
3.9	7.3	0.87	0.78	1.29	1.24	1.24	1.34	1.45	2.26	3.16
4	8.14	1.12	0.97	1.56	1.47	1.49	1.49	1.62	2.69	3.59

4.1	9.29	1.53	1.26	1.84	1.79	1.87	1.68	1.82	3.23	3.85
4.2	10.89	2.32	1.73	2.15	2.27	2.46	1.92	2.05	3.88	3.74
4.3	12.32	4.48	2.67	2.55	3.04	3.54	2.22	2.34	4.69	3.64
4.4	13.35	13.02	3.4	2.92	4.02	6.05	2.61	2.71	5.9	3.58
4.5	14.35	4.26	2.58	3.07	3.63	13.4	3.04	2.98	6.56	3.55
4.6	13.91	2.49	1.94	3.04	2.8	16.53	3.33	3.26	6.23	3.42
4.7	12.96	1.79	1.53	2.82	2.32	7.1	3.01	3.59	5.94	3.24
4.8	11.94	1.4	1.28	2.46	2	4.39	2.51	3.36	5.38	3.11
4.9	11.26	1.16	1.11	2.13	1.73	3.26	2.19	3.07	4.68	3.01

Table. 3.3 非線形-メモリタスクの $(\nu, \tau)$ に対する  $R^2$

$\nu/\tau$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.1	0.052	0.998	0.924	0.291	0.304	0.320	0.303	0.256	0.228	0.150
0.2	0.052	0.998	0.924	0.291	0.305	0.320	0.303	0.256	0.228	0.150
0.3	0.052	0.998	0.924	0.292	0.305	0.320	0.303	0.256	0.228	0.150
0.4	0.052	0.998	0.924	0.292	0.305	0.320	0.304	0.256	0.228	0.151
0.5	0.052	0.998	0.924	0.292	0.305	0.320	0.304	0.256	0.228	0.151
0.6	0.053	0.998	0.924	0.292	0.306	0.321	0.304	0.257	0.229	0.151
0.7	0.053	0.997	0.924	0.293	0.306	0.321	0.304	0.257	0.229	0.152
0.8	0.053	0.997	0.924	0.293	0.306	0.321	0.305	0.257	0.229	0.152
0.9	0.053	0.997	0.924	0.293	0.307	0.322	0.305	0.258	0.230	0.153
1	0.054	0.996	0.924	0.294	0.307	0.322	0.305	0.258	0.230	0.154
1.1	0.054	0.995	0.924	0.294	0.308	0.322	0.306	0.259	0.230	0.155
1.2	0.054	0.993	0.923	0.294	0.308	0.322	0.306	0.259	0.231	0.155
1.3	0.055	0.992	0.922	0.295	0.309	0.323	0.306	0.260	0.231	0.156
1.4	0.055	0.989	0.920	0.295	0.309	0.323	0.306	0.260	0.232	0.157
1.5	0.055	0.986	0.918	0.295	0.309	0.323	0.307	0.261	0.232	0.158
1.6	0.056	0.982	0.915	0.295	0.309	0.323	0.307	0.261	0.232	0.159
1.7	0.056	0.977	0.912	0.295	0.309	0.322	0.306	0.261	0.232	0.160
1.8	0.056	0.971	0.907	0.294	0.309	0.321	0.306	0.261	0.232	0.161
1.9	0.057	0.963	0.901	0.293	0.309	0.320	0.305	0.261	0.232	0.162
2	0.057	0.954	0.893	0.292	0.308	0.319	0.304	0.260	0.232	0.163
2.1	0.057	0.942	0.884	0.290	0.306	0.317	0.302	0.260	0.231	0.163
2.2	0.057	0.928	0.872	0.288	0.304	0.314	0.300	0.258	0.230	0.164
2.3	0.057	0.912	0.858	0.285	0.301	0.311	0.298	0.256	0.228	0.164
2.4	0.057	0.892	0.841	0.281	0.298	0.306	0.294	0.254	0.226	0.164

2.5	0.057	0.869	0.820	0.276	0.293	0.301	0.290	0.251	0.223	0.163
2.6	0.056	0.841	0.796	0.270	0.287	0.294	0.284	0.247	0.220	0.162
2.7	0.055	0.810	0.767	0.262	0.280	0.286	0.277	0.241	0.215	0.160
2.8	0.054	0.773	0.734	0.253	0.272	0.277	0.269	0.235	0.209	0.158
2.9	0.053	0.731	0.696	0.242	0.261	0.266	0.259	0.227	0.202	0.154
3	0.051	0.685	0.652	0.229	0.249	0.252	0.248	0.217	0.194	0.150
3.1	0.049	0.633	0.604	0.215	0.235	0.237	0.234	0.206	0.184	0.144
3.2	0.047	0.576	0.550	0.198	0.219	0.220	0.219	0.193	0.173	0.137
3.3	0.044	0.515	0.493	0.180	0.200	0.202	0.202	0.179	0.161	0.128
3.4	0.042	0.451	0.432	0.161	0.181	0.181	0.183	0.163	0.147	0.117
3.5	0.038	0.386	0.369	0.140	0.159	0.160	0.163	0.146	0.132	0.105
3.6	0.035	0.321	0.306	0.118	0.137	0.138	0.142	0.128	0.116	0.091
3.7	0.032	0.259	0.245	0.097	0.115	0.116	0.121	0.109	0.100	0.075
3.8	0.029	0.200	0.188	0.077	0.093	0.094	0.100	0.090	0.083	0.058
3.9	0.026	0.147	0.136	0.058	0.072	0.074	0.079	0.072	0.067	0.040
4	0.023	0.101	0.091	0.040	0.052	0.056	0.060	0.056	0.052	0.023
4.1	0.021	0.063	0.054	0.026	0.035	0.040	0.043	0.040	0.038	0.009
4.2	0.019	0.033	0.025	0.014	0.019	0.026	0.028	0.027	0.025	0.001
4.3	0.018	0.010	0.005	0.006	0.008	0.015	0.016	0.017	0.013	0.001
4.4	0.017	0.009	0.000	0.002	0.001	0.006	0.008	0.009	0.004	0.006
4.5	0.017	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.003	0.003	0.000	0.012
4.6	0.017	0.001	0.000	0.000	0.000	0.012	0.001	0.001	0.002	0.015
4.7	0.016	0.006	0.005	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.004	0.015
4.8	0.015	0.017	0.014	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.014
4.9	0.014	0.030	0.027	0.003	0.002	0.001	0.000	0.000	0.003	0.012

---

$(\nu, \tau)$ が大きくなると、NMSE に関しては大きくなり  $R^2$  に関しては小さくなることがわかった。ただし、 $\tau = 0$ のときは、 $\nu$ の増加に対して同様の傾向はみられるものの、どの $\nu$ に対しても基本的に NMSE に対しても  $R^2$  に対しても精度が悪くなることがわかった。

Table. 3.3 の 1 列目を除く 1 行目を見ると、 $\tau \leq 2$ では精度が 9 割以上であるのに対して、 $\tau = 3$ から、急激に精度が落ちていることがわかる。また、同表の 2 列目を見ると  $\nu = 2.5$ 付近から、精度の減少傾向が強くなり始めている。したがって、3.2.4 における NARMA10 の予測の精度が悪くなったことは、当然の結果ともいえる。

以上の結果から、超伝導現象は非線形性とメモリ性を持っており、具体的には  $(\nu, \tau) = (2.5, 2)$  ぐらいまでの非線形とメモリ性を必要とする時系列データに関しては、ほぼ正確に予測することができると評価することができる。

## 第4章 まとめ

今回の研究では、AFIによる2次元超伝導平面における量子化磁束の運動とそれに係る電磁現象の可視化およびリザーバーコンピューティングへの応用を行った。

Processingを用いてAFIによる2次元超伝導領域の実装を行った。超伝導体内での磁束線の振る舞い、および超伝導体内の磁束密度、電流密度、電界などの様子を観察することができた。

実装した二次元超伝導領域に印加する電流密度を正弦波、乱数波で与えたとき、それによって発生する電界を計算し、超伝導現象の入出力応答の安定性や、超伝導現象が、リザーバーとして重要である非線形性や高次高調波特性を備えているかどうかを、出力電界の時間グラフ、リサージュ波形、FFTなどにより調査した。電界が、周期性を保ちつつ位相ずれを起こすことや、高次高調波が確認できたことにより、超伝導現象がリザーバーとして動作する可能性を見いだすことができた。

印加する電流密度を正弦波的に時間変化させたとき、発生する電界を計算しそれをリザーバーとして用い、教師信号を正弦波、三角波、鋸波、矩形波として時系列予測とその評価を行った。いずれの波形に対しても精度8割以上の良い予測結果を得ることができた。

印加する電流密度を乱数的に時間変化させたものに変え、発生する電界を計算しそれをリザーバーとして用い、教師信号としてNARMA2、NARMA10を生成し、その時系列予測と予測を行うことで、超伝導現象がリザーバーとして複雑な時系列予測が可能であるか調査した。NARMA2において、精度はよくなかったが、波形に追従する様子が見られたことから超伝導現象によるリザーバーコンピューティングで、複雑な波形を大まかに予測することはできることがわかった。NARMA10においては、予測できているとは言えない結果になった。

教師信号を非線形-メモリタスクの目的関数に変え非線形性とメモリ性に関するパラメータを変化させながら時系列予測を行った。結果として超伝導現象は、2 Timestep 前の記憶を持っており、非線形性も十分強いということが明らかになった。

今後の課題として、ピンの配置や各パラメータを変更することでより精度の高い時系列予測が可能になるかどうかを調査したい。そのために、超伝導現象の非線形性とメモリ性について十分な考察を行う必要があると考える。また、より実用的な音声認識や手書き文字認識への応用にも挑戦していきたい。

# 参考文献

- [1] 松下照男. 「磁束ピンニングと電磁現象」第2版. 2014年3月
- [2] 松下照男. 卒論講義ノート
- [3] T. Matsuno, E.S. Otabe, Y. Mawatari, J.Phys. Soc. Japan 89 (2020) 054006.
- [4] T. Matsuno. Link variables for the TDGL equation. September 11, 2015
- [5] 松野哲也. AFIをはじめよう ver.6. 2020年1月
- [6] 田中剛平, 中根了昌, 廣瀬明. リザーバーコンピューティング-時系列パターン認識のための高速機械学習の理論とハードウェア. 森北出版株式会社. 2021年3月

# 謝辞

本研究に取り組むにあたり、多くの方から多大なご助力を賜りました。

まず、指導教官である小田部荘司教授に御礼申し上げます。研究におきましては進捗が行き詰ったときの相談に乗っていただき、研究に必要な超伝導現象に関する理論に関しても大変わかりやすくご教授下さいました。また、学会発表など私の研究を発表する機会や、バン格拉ディッシュ交流ゼミという英語力を鍛える場を与えていただきました。

次に、有明高専の松野先生に御礼申し上げます。松野先生が書かれた AFI の大変わかりやすい資料のおかげで研究をスムーズに進めることができました。また、私が質問をさせていただいた際にも親切なご回答をいただきました。

次に、ニューロモフィックセンターの宇佐美先生、田中先生に御礼申し上げます。お二方には、にはりザバーコンピューティングに関する部分で大変にお世話になりました。機械学習などに関して素人である私に対して丁寧に教えてくださいました。また、共同研究までさせていただき、私だけで進めても絶対に得られることのない研究結果を得ることができました。

次に、AFI、リザバーコンピューティングの研究テーマに関して先行して研究をされていた上田天馬さんに御礼申し上げます。上田さんが研究資料を細かく残して下さったおかげで一つひとつしっかりと理解しながら研究を進めることができました。また、私が困ったときには親身に相談に乗ってくださいました。

最後にお世話になった小田部研究室の皆様に深く感謝申し上げます。



# 研究業績

## 発表

1. 有田拳、上田天馬、小田部荘司

「超伝導体内の電界の時間変化を用いたリザーバーコンピューティングに関する研究」

2021年度応用物理学会九州支部学術講演会、オンライン、令和3年12月4日