# 数理モデルによる FRET ネットワークのシミュレーションと機械学習応用の検討

## Simulation of FRET Networks Using the Mathematical Model and Examination of its Machine Learning Applications

阪大院情 [1]　○ 中川 正基 [1]

**Osaka Univ.[1]　○Masaki Nakagawa[1]**

**E-mail: m.nakagawa@ist.osaka-u.ac.jp**

本研究は，ナノ粒子間のフェルスター共鳴エネルギー移動（FRET ネットワーク）を基本原理とする新しい計算原理の提案を目指している．我々はこれまでに，FRET 現象の連続時間マルコフ連鎖モデル [1] を拡張し，量子ドットを用いた実験結果を定性的に再現するような FRET ネットワークの数理モデルを構築した [2]．

本講演では，FRET ネットワークのシミュレーションおよび検討している機械学習応用に焦点を当てる．FRET ネットワークは確率的な現象であり，化学反応系の考え方でシミュレーションできる．FRET ネットワークの数理モデルは時間変化する遷移率を含んでおり，このような化学反応系に対応するアルゴリズム [3] を用いてシミュレータを構築した．これまでに，このシミュレータを用いて明らかになった FRET ネットワークのいくつかの特性を用いて，簡単な時系列予測ができることを確認している [4]．現在我々は，この数理モデルを用いて，FRET ネットワークの特性を活かした様々な機械学習応用を検討しており，その進捗状況を紹介したい．

本研究は，JST CREST (JPMJCR18K2) の支援を受けたものである．

[1] S. Wang et al., *Opt. Express*, 2016, 24 (14), pp.15528–15545.

[2] M. Nakagawa et al., *JOSA B*, 2021, 38 (2), pp.294–299.

[3] V. H. Thanh and C. Priami, *J. Chem. Phys.*, 2015, 143, 054104.

[4] M. Nakagawa et al., *Proc. of the 2020 Int. Symp. on NOLTA*, 2020, pp.217–220.

© 2022年 応用物理学会