ニューラルネットワークを用いたナノデバイス特性の機械学習

Machine Learning of Nano-device Characteristic by Using Neural Network

°古林　せなみ [1]，中根　滉稀 [1]，小川　雄己 [1]，富田　基裕 [1,2], 渡邊孝信 [1]
(早大理工 [1], 学振特別研究員 PD[2])
°S. Furubayashi[1], K. Nakane[1], Y. Ogawa[1], M. Tomita[1,2,3] and T. Watanabe[1]
(Waseda Univ.[1] , Meiji Univ.[2], JSPS Research PD[3])
E-mail: furubayashi_senami@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】

近年、計算で得られる大量のデータから物質・材料の構造と物性と相関を明らかにする方法として、機械学習に注目が寄せられている。ただし、目的によって機械学習の手法やデータセットを適切に選ぶ必要があり、その指針の確立が課題となっている。本研究では、ナノスケールのデバイス特性の統計ばらつきを再現するシミュレーション[1]で得られるデータを用いて、そのばらつきの傾向を学習・予測するニューラルネットワーク（N/N）の可能性を検討した。

【シミュレーションおよび機械学習の方法】

今回機械学習の対象に選んだのは、粒子ベースのキャリア輸送シミュレーション法（Ensemble Monte Carlo/Molecular Dynamics 法）で計算した、全周ゲート型Ｓｉナノワイヤ ＦＥＴのオン電流ばらつきのデータである[1]。不純物イオンの分布の違いによってオン電流の値が変動するが、系内の全ての荷電粒子間のクーロン相互作用をすべての時間刻みで計算する必要があるため、統計解析に必要なデータを用意するには膨大な計算量が必要となる。機械学習で帰納的に主要なばらつき要因を特定することができれば、シミュレーションの総時間とその解釈に要する時間の短縮につながると期待される。

今回、N/N 機械学習に用いたデータは、①「チャネルに不純物を 1 つランダムに配置した場合（Fig.1 参照）のシミュレーション結果」、および②「ソース・ドレイン領域の不純物イオンの分布を、密度一定の条件下（10^{20}/cm^3）でランダムに変えた場合（Fig.2 参照）のシミュレーション結果」の 2 ケースである。N/N の入力値を不純物イオンの位置座標（x 値,y 値,z 値）とし、出力値をオン電流の時間平均値とした。②のケースでは、3 次元メッシュデータ化した不純物イオン分布も入力値に用い、主として画像認識に用いられる畳み込み N/N を用いた機械学習も行った。

【結果および考察】

簡単なデータ①を学習させた単層 N/N による未学習データの予測結果は概ね成功したが、入力値の自由度が大きい②については層数を増やした N/N でもほとんど学習に成功しなかった(Fig.2 参照)。ただし、②のデータの入力を 3 次元メッシュデータ化して畳み込み N/N で適用した場合、Fig.3 に示すように既学習データの学習に成功した。多数の不純物イオン分布のような多次元の入力値の場合、座標値そのものから結果の傾向を見出すことができず、画像処理のように入力値のメッシュデータ化と畳み込み N/N を用いることが有効であると考えられる。

【謝辞】 本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)(15H03979)の支援を受けて行われた。

【参考文献】 [1] A. Suzuki, et al., IEDM Extended Abstract, 30.1.4. (2014). [2] T. Watanabe, et al., SSDM (2015).

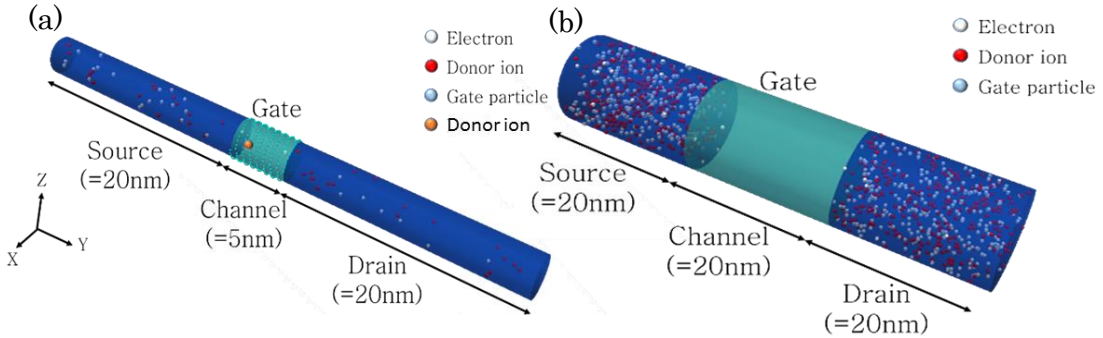

Fig.1 Nanowaire FET models used in the simulation to provide data for machine learning. (a) Interface trap charge (ITC) position dependency simulation. (b) Random dopant fluctuation simulation.

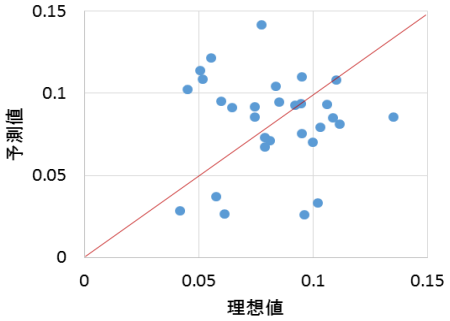

Fig.2 The relation between ideal value and predicted value using by Deep N/N

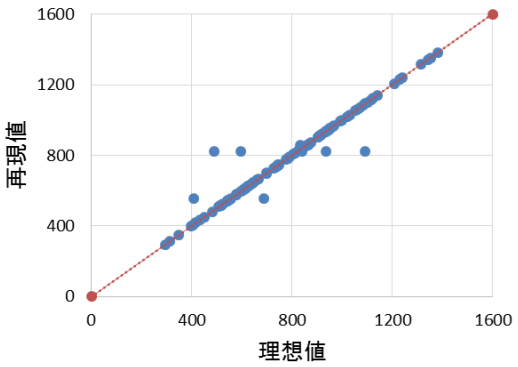

Fig.3 The relation between ideal value and predicted value using by Convoluted N/N

© 2016年 応用物理学会