

ニューラルネットワークを用いたメタマテリアルの設計

Design of Metamaterials using Neural Networks

東工大院工¹, [○]明石直人¹, 梶川浩太郎¹, 當麻真奈¹

Tokyo Institute of Technology, [○]Naoto Akashi, Kotaro Kajikawa, Mana Toma

E-mail: kajikawa@ep.titech.ac.jp

汎用計算機の処理能力の向上にともない、様々な研究分野において機械学習の利用が現実的なものとなってきた。その一種であるニューラルネットワーク (NN) を用いた光学媒質の設計はこれまでの方法論を革新的に変える可能性がある。我々は、NN を使って (a) 多層円柱の散乱断面積の高速な計算 (順方向計算) と (b) 要求される散乱特性からメタマテリアルの構造を設計する逆問題を解くことに成功した。Fig. 1 に示す 3 層の同心円状のコアシェル円柱構造について、コアの内径、シェルの外径、シェルの屈折率の 3 つの未知のパラメータ (a , b , m_1) を対象とした。コアの屈折率は波長分散を考慮した GaAs の値を用いた。そして、Mie 理論を使った散乱効率の計算を行い、訓練データとして 10,648 ($= 22^3$) のスペクトルと対応するパラメータのデータを準備した。次に、Google が公開している機械学習ライブラリ TensorFlow を用いてモデルを訓練し、学習済みモデルを構築した。最初に行ったのが順方向問題の計算である。任意の a , b , m_1 から散乱断面積を求める問題を計算した結果、Mie 理論を用いた計算結果と良い一致が見られた。1 つのスペクトルの計算時間は Mie 理論を使った場合には約 60 秒かかったのに対して、学習済みモデルを使った計算では僅か 0.0008 秒でスペクトルが予測された。すなわち、計算時間が約 1/75,000 に短縮されることがわかった。次に、スペクトルからパラメータ a , b , m_1 を求める逆問題の学習モデルを構築し、散乱スペクトルを与えて光学パラメータを予測させた。順方向計算と同様に、僅かな計算時間で光学パラメータを予測することに成功した。比較のため、そのパラメータからスペクトルを計算して、入力スペクトルと共に示したものが Fig. 2 である。さらに既存手法との比較をおこなった。まず、代表的な回帰計算法であるシンプレックス法と Mie 理論の組み合わせでこの逆問題を解いた。この場合には、計算時間は平均約 3 時間であった。これに対して、シンプレックス法と NN を使った順方向計算では 0.065 秒で結果が得られた。すなわち、計算時間は 1/100,000 以下であった。このように、NN を用いると高速な光学計算が行え、特に光学構造の逆設計に極めて有効であることがわかった。

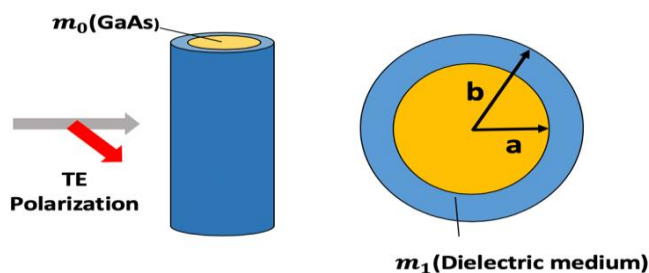


Fig.1 Simulation model

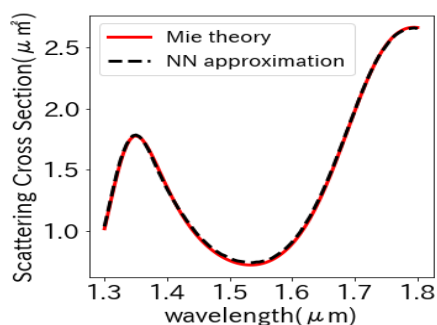


Fig.2 Comparison of Mie theory and NN approximation