ナノ共振器の Q 値向上に向けた機械学習による構造最適化(2)

Optimization of Q-factors of nanocavities based on machine learning (2)

京大院工，○柴田武志，浅野卓，野田進
Kyoto Univ., °T. Shibata, T. Asano, S. Noda
E-mail: shibata.takeshi@qoe.kuee.kyoto-u.ac.jp, tasano@kuee.kyoto-u.ac.jp

[序] 我々は 2 次元 Si フォトニック結晶ナノ共振器の高 Q 値化に実験および理論の両面から取り組んできた。これまでに実験的には表面清浄化プロセスの開発により Q 値 1100 万を達成し、また最近、フォトニック結晶の高い構造自由度をより活用すべく機械学習を用いた設計手法を提案し、一例として理論 Q 値 15.8 億の設計を得ることに成功している [1,2]。しかし、どのような条件で機械学習を行えば、有効な構造最適化が出来るのかについては、詳しい検討は出来ていなかった。今回、これについて新たな知見を得たので報告する。**[結果]** 本手法では、①様々な共振器構造と Q 値の関係を畳み込みニューラルネットワーク(CNN)に学習させ、②次に学習後の CNN を用いて Q 値の構造パラメータ空間における勾配を推定し、その勾配に従って構造を変形させる。検討対象としたのは図 1 に示すマルチヘテロ共振器である。この初期構造(Q 値 1.4 億)に対称にランダムな孔位置のシフトを入れた様々な共振器構造を 1000 個生成し、第一原理計算によりそれぞれの Q 値を計算した。このデータセットを用いて①、②の手法で構造補正を行い、得られた構造の Q 値を第一原理計算により確かめた。今回、同じデータセットを用いてこれを 10 回繰り返したところ、構造補正後の Q 値は必ず向上するものの、その値は毎回異なり、前回得られた 15.8 億 [1,2]が再現できなかった。そこで、まず②について検討したところ、同じ状態の学習済み CNN を用いれば同じ Q 値の構造が得られることが分かった。そこで問題は①にあると考え、CNN の学習条件を検討した。その結果、①の学習時に CNN 内部の結合重みを抑制することで、②構造補正後の平均 Q 値が向上することが分かった。その結果を図 2(左軸)に示す。同図から、結合重み抑制パラメータλを当初の 0.001 から 0.05 に増大させることで、平均 Q 値が 7 億から 12 億に増大していることが分かる。また、λ=0.05 において、従来の結果(15.8 億)を超える Q 値 17.6 億の構造が得られた。しかしながら、CNN の予測精度は訓練データのみならずテストデータについてもλの増加に伴ってむしろ低下していた(図 2 右軸)。λ=0.05 における Q 値の向上は、訓練データとテストデータの双方に対する予測精度が一致し始めることが関連していると考えられるが、詳細は当日報告する。**[文献]** 1)浅野,野田,18 春応物, 20p-C301-5. 2)T. Asano and S. Noda, Opt. Exp 26, 32704 (2018). **[謝辞]** 本研究の一部は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の委託を受けて行われた。

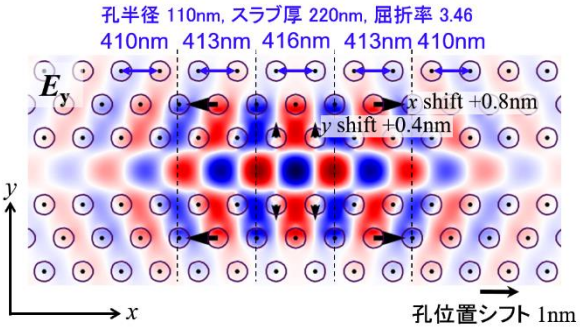


図 1: 最適化対象とした共振器構造

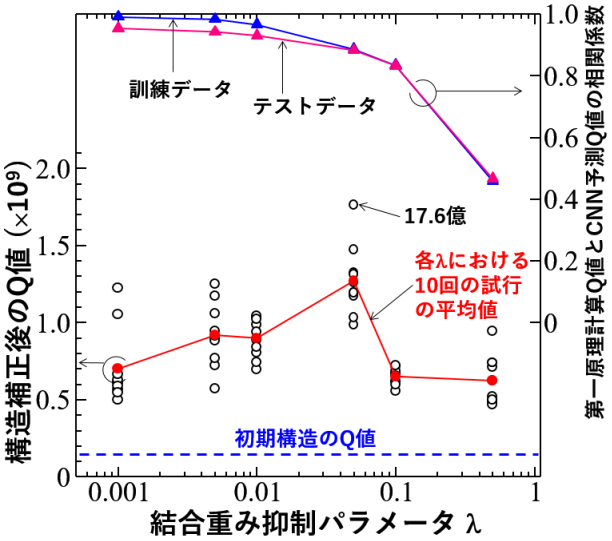


図 2: 結合重み抑制パラメータλと構造補正後に得られた Q 値および予測精度の関係の関係

© 2019年 応用物理学会