

機械学習に基づく繰り返し探索を用いたフォトニック結晶共振器の最適化(3)

Optimization of photonic cavities based on iterative search using machine learning (3)

京大院工¹ ○浅野 卓¹, 野田 進¹

Kyoto Univ.¹ ○T. Asano¹, S. Noda¹

E-mail: tasano@qoe.kuee.kyoto-u.ac.jp

[序] 2次元フォトニック結晶光共振器は、波長程度の微小領域に長時間光を保持する能力をもち、これにより高度な光操作が実現できる。我々は理論と実験の両面から光保持時間の増大に取り組んでおり、特に後者に関して機械学習に基づく構造最適化手法を提案している¹⁻³。この手法ではまず、ランダムに多数(今回は1000個)の共振器構造を生成し、各構造について第一原理計算で光保持性能(Q 値)を求めて学習データセットを作成する。これを用いて構造から Q 値を推測する機械学習モデルを構築し、その予測を活用してさらに高 Q 値が高いと予想される複数の候補構造を生成する²。その候補構造に対して第一原理計算を行って Q 値を確認し、これを学習データセットに加えつつ、上記の学習—探索を繰り返す。我々はこの手法により従来を数倍上回る超高 Q 値構造を発見することに成功した³が、本手法をより広く活用する上でコストの大きい第一原理計算の回数を低減できることが望ましい。前回これに向けて改良手法を提案した⁴が、今回さらに詳しい検討を行ったので報告する。[結果および考察] 従来手法と改良手法の主要な違いは、学習時にサンプル数の多い Q 値の低い構造の選択率を下げて均等に学習する手法の導入、および1ラウンドの候補構造の生成数を適度に抑制することによる学習—探索フィードバックの高速化にある。図1に追加探索構造数と

各学習—探索ラウンドで発見された最良構造の Q 値の関係を、従来法、改良法についてそれぞれ3系列分示す。学習・探索過程にランダムな要素があるため各系列の結果は異なるが、改良法の方が少ない探索数で Q 値を向上できることが分かる。図1中段に代表的な段階における、第一原理計算 Q 値とモデル予測 Q 値の相関を示す。新手法(A)で従来手法(B,C)より精度の高い学習ができており、これがより高速な Q 値の向上につながっていると考えられる。図1下段にはそれぞれの系列で得られた最適化構造を示す。高い Q 値をもつ構造が複数存在することがわかる。そのため、さらなる最適構造の発見には、本改良法によって高速化された探索を複数回行うことが有効と考えられる。詳細は当日報告する。[文献] 1) T. Asano and S. Noda, *Opt. Exp.* **26**, 32704 (2018). 2) T. Asano, and S. Noda, *Nanoph.* **8**, 0380 (2019). 3) 浅野卓, 野田進, 20a-B01-7, 19 秋季応物. 4) 浅野卓, 野田進, 14p-A205-8, 20 春季応物. [謝辞] 本研究の一部は NEDO の委託 JPNP13004 を受けて行われ、科研費 19H02629 の支援を受けた。

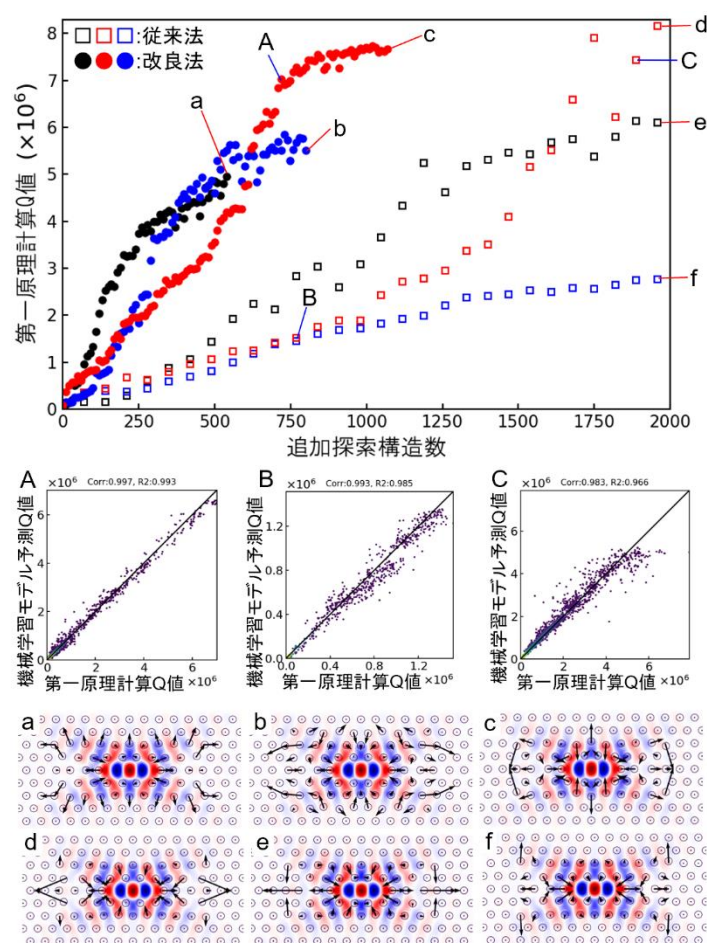


図1: (上段) 従来法と改良法における光共振器の構造最適化の推移 (各3例)、(中段) 代表的な学習結果、(下段) 各系列で得られた最適構造。円はシリコンの薄板に形成された空気孔を、矢印はその位置のシフト量を表す。また色は光電界の分布を表す。