

ニューラルネットワークを用いた強束縛近似ハミルトニアンの圧縮

Reduction of Order of Tight-binding Hamiltonian by Artificial Neural Network

阪大院工 ○(B)岡田 丈, 森 伸也

Osaka Univ., °Jo Okada¹, Nobuya Mori

E-mail: {okada, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

量子輸送シミュレーションの高速化にむけて、電子状態を記述するハミルトニアンのサイズを圧縮する手法の開発が重要である。等価モデル[1]では、バンド端付近のブロッホ波を基底に選び、非物理状態を消去することにより、圧縮を実現している。本研究では、ニューラルネットワークが任意の関数を表現できることに着目し、強束縛近似 (TB) 法で計算した半導体ナノワイヤバンド構造から、そのバンド構造を導く小さなハミルトニアンを逆に推定するシステムを開発した。

システムの概要を Fig. 1 に示す。まず初めに、小さなハミルトニアンを Fig. 1 のような隠れ層 1 層からなるニューラルネットワークで生成する。その際、ニューラルネットワークのパラメータには各々適当な初期値を与える。次に、生成されたハミルトニアンからバンド構造を求め、推定目標である TB 法バンド構造との平均 2 乗誤差を計算し、これを損失関数とし最小化する。最小化は、固有値の摂動に対する変化と、誤差逆伝搬法とを用いて勾配法からニューラルネットワークのパラメータを調整することで実現した。

以上の構成を TensorFlow で実現し、ハミルトニアンを推定した例を Fig. 2 に示す。Fig. 2 (a) は TB 法で計算した Si ナノワイヤのバンド構造であり、これを導く小さなハミルトニアンを推定し、バンド構造を計算した結果を Fig. 2 (b) に示す。Fig. 2 より、目標とするバンド構造を導くハミルトニアンが精度よく求められていることがわかる。

[1] G. Mil'nikov, N. Mori & Y. Kamakura, PRB **85**, 035317 (2012).

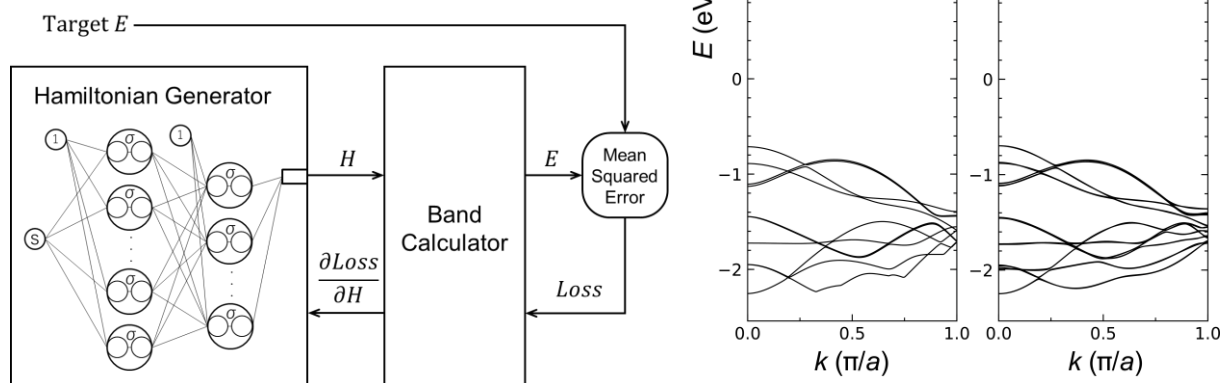


Fig. 1 [left] Information flow. **Fig. 2** [right] (a) Target TB-band structure of a Si nanowire. (b) Band structure calculated from the predicted Hamiltonian.