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(2)

Optimization of a photonic cavity based on iterative search using machine learning (2)

京大院工 [1] ○浅野 卓 [1], 野田 進 [1]
Kyoto Univ.[1] °T. Asano[1], S. Noda[1]
E-mail: tasano@qoe.kuee.kyoto-u.ac.jp

[序] 2次元フォトニック結晶(2D-PC)をもちいた共振器は波長程度の微小領域に長時間光を閉じ込めることが可能であり高度な光操作に利用できる。その最も重要な性能は低損失性であり、我々は理論と実験の両面から低損失化に取り組んできた。前者に関して我々は最近、2D-PC 共振器の高い構造自由度を十分に活用するための機械学習に基づく構造最適化手法を提案した [1-3]。この手法ではまず、ランダムに多数(1000 個程度)の共振器構造を生成し、第一原理計算で低損失度(Q 値)を求めて学習データセットを作成する。これを機械学習して構造から Q 値を推測するモデルを構築し、そのモデル Q 値の構造パラメータに対する勾配と、正則化項によって導入する各種戦略により Q 値の高い構造の探索を複数並列に行う [2]。得られた高 Q 値候補構造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。この手法は高 Q 値構造の探索に非常に有効であったが、コストの大きい第一原理計算を多くの回数必要とする点が課題であった。今回、本手法の改良を試みたので報告する。 **[手法]** 前回の手法の問題点の 1 つは、探索により高い Q 値の構造が得られたとしても、他の数多くの学習データに影響されて、その新構造を十分に学習できない点があった。そこで、学習データセットからのサンプリングに Q 値のヒストグラムに基づく優先度を設けて、高い Q 値の構造から低い Q の構造まで同程度の確率で学習が行われるようにした。また、探索の多様性を増すため、過去に発見された最大の Q をもつ構造付近の探索に加えて、ある程度高い Q 値をもち、かつ最大 Q 構造とできるだけ異なる構造付近の探索を行う戦略も導入した。さらに、前回手法では 70 個の新構造を並列探索していたが、新知見のフィードバックを早めるため並列探索は 10 個ずつとした。

[結果]前回報告 [3]の最良手法では初期 Q 値 7100 の構造を 400 万にまで改良するために 2470 個の構造に対する第一原理計算が必要であったが、本手法では 1300 個の構造に対する第一原理計算によって同等の Q 値を保つ構造を発見できた。その後の Q 値の増加に飽和傾向が見られるため、究極的に高い Q 値の構造探索に有効かはまだ不明であるが、ある程度高い Q 値の構造を素早く探索できる効果はあるといえる。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.

[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、科研費 19H02629 の支援を受けた。

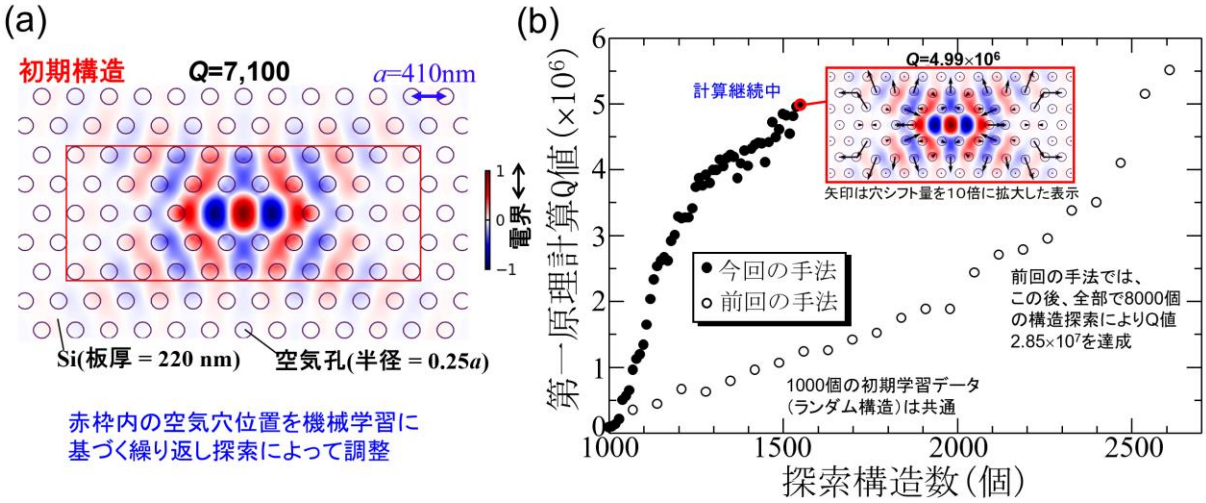

図:(a)共振器初期構造、(b)最適化による Q 値の推移