ニューラルネットを用いた量子井戸デバイス設計におけるサンプルデータ依存性

河野 芳江　　安藤 太郎
ＡＴＲ適応コミュニケーション研究所

１．はじめに

設計変数と特性変数の間の関係が単純な関数形で表わされている場合、設計問題の評価関数が簡単に定式化できるため、関数形が未知な場合に比べ、合理的な設計を行うことが大変容易である。そこで、関数形が未知ではあるがいくつかのサンプルデータがあり、かつ、その関数が変動がゆるやかな非線型関数であると予測される系に対して有効な関数近似手法として、超球面識別型３層ニューラルネットの高次元アルゴリズム学習を提案している。今回は、その手法の量子井戸デバイス設計への応用[1]において、関数近似の教師として用いるサンプルデータの取り方と汎化能力の関係を調べることにより、実験によるデータ作成の場合などにしばしばみられる、サンプルデータを数多く作成するのが難しいケースに対する効率的なサンプリング法を議論する。

以下、本報告において対象とする量子井戸系と今回用いた６種類のサンプルデータ集合、そして、各々のサンプルデータ集合に対する関数近似および得られた近似関数の汎化能力評価に関する計算機実験結果について記す。

２．用いたサンプルデータ集合

対象系は、文献[1]同様、強度 f(kV/cm)の一様な外部電界下にある $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 単一量子井戸中の電子である。基底状態と第一励起状態の占有比を r: (1-r)、構造サイズを 35/d/35 (monolayer)、合金比を x/0/x、不純物ドープ量を 0/n/0 ($\times 10^{18}$cm^{-3})、基底準位 E_0(eV)と第一励起準位 E_1(eV)のエネルギー差を△E(eV)とする。入力(f, r, d, x, n)に対する出力△E は変分原理に基づく数値計算法を用いて計算した。

この５次元入力空間において関数近似すべき領域 $\boldsymbol{D_{FA}}$ を {f=[0,60]；r=[0.6,0.9]；d=[30,60]；x=[0.2,0.5]；n=[-1.5,-0.01]} とする。近似関数の汎化能力のサンプルデータ依存性を調べるため、以下のサンプルデータ集合を用意した。

（ア）領域 $\boldsymbol{D_{FA}}$ よりやや広い領域中の{f =(0, 30, 60, 90)；r =(0.6, 0.7, 0.8, 0.9)；d =(30, 40, 50, 60, 70)；x =(0.2, 0.3, 0.4, 0.5)；n =(-2, -1, -0.001)}の 4×4×5×4×3＝960 個の入力点のうち、出力が得られなかった 27 個を除く 933 個の入力点に対するサンプルデータからなる集合。

（Ａ）各入力変数の関数近似区間の両端と３等分点に対する全組み合わせ、すなわち、領域 $\boldsymbol{D_{FA}}$ 中の{f =(0, 20, 40, 60)；r =(0.6, 0.7, 0.8, 0.9)；d =(30, 40, 50, 60)；x =(0.2, 0.3, 0.4, 0.5)；n =(-1.5, -1, -0.5, -0.01)}の 4^5＝1024 個の入力点のうち、出力が得られなかった 6 個を除く 1018 個の入力点に対するサンプルデータからなる集合。

（イ）各入力変数の関数近似区間の両端と中間点に対する全組み合わせ、すなわち、領域 $\boldsymbol{D_{FA}}$ 中の{f =(0, 30, 60)；r =(0.6, 0.75, 0.9)；d =(30, 45, 60)；x =(0.2, 0.35, 0.5)；n =(-1.5, -0.75, -0.01)}の 3^5＝243 個の入力点のうち、出力が得られなかった 4 個を除く 239 個の入力点に対するサンプルデータからなる集合。

（エ－２）各入力変数の関数近似区間の両端に対する全組み合わせ、すなわち、領域 $\boldsymbol{D_{FA}}$ 境界上の格子点である{f =(0, 60)；r =(0.6, 0.9)；d =(30, 60)；x =(0.2, 0.5)；n =(-1.5, -0.01)}の 2^5=32 個の入力点のうち、出力が得られなかった 1 個を除く 31 個の入力点に対するサンプルデータからなる集合。

（ウ－１）集合（A）と（イ）の和集合からランダムに選んだ 60 個のサンプルデータからなる集合。

（ウ－２）集合（A）と（イ）の和集合から（エ－２）を除いた集合からランダムに選んだ 29 個と、（エ－２）の 31 個の計 60 個のサンプルデータからなる集合。

（エ－１）集合（A）と（イ）の和集合からランダムに選んだ 31 個のサンプルデータからなる集合。

３．計算機実験結果

今回は、上記のうち、（ア）、（イ）、（ウ－１）、（ウ－２）、

Sample data dependence in designing quantum well devices by using neural networks
KOHNO Yoshie, ANDO Taro
ATR Adaptive Communications Research Laboratories

（エ－１）、（エ－２）の６種類のサンプルデータ集合に対し、各々、文献[1]の関数近似法を用いて、エネルギー差$\triangle E$を入力(f, r, d, x, n)の関数として、真値と近似値の平均二乗誤差が9×10^{-4}を満たすように求めた。要した中間ユニット数は、各々、（ア）10、（イ）6、（ウ－１）4、（ウ－２）7、（エ－１）3、（エ－２）4であった。

得られた近似関数の汎化能力評価のため、領域$\boldsymbol{D_{FA}}$中にランダムに300個の入力点を選び、対応する真の出力値をサンプルデータ同様に計算し、評価用データを準備した。図１に、これらの評価用データの出力値$\triangle E$_rv と各近似関数による出力値$\triangle E$_nn の関係を示す。各図の赤い直線は$\triangle E$_nn＝$\triangle E$_rv を表わし、プロット点がこの赤線に近いほど近似精度が高いことを示す。平均二乗誤差は、（ア）1.8×10^{-3}、（イ）2.3×10^{-3}、（ウ－１）3.5×10^{-3}、（ウ－２）4.3×10^{-3}、（エ－１）4.9×10^{-3}、（エ－２）2.3×10^{-1}であった。やはり、サンプルデータ数が933個と十分な（ア）、次いで239個の（イ）は良い汎化能力を有することが分かる。サンプルデータ数が少なくなるにつれ、汎化能力はだんだん悪くなるが、今回の対象が変動がゆるやかな非線型関数のためか、大雑把な値は把握できるようである。（ウ－１）と（エ－１）は（A）と（イ）の和集合からランダムに選んだサンプルデータからなり、その中で領域$\boldsymbol{D_{FA}}$の境界上に入力点をもつものの割合はかなり少ないと考えられる。そのせいか、入力点により精度にバラつきが見られる。一方、（ウ－２）は境界上の格子点をすべて含み、かつ、領域内部の点も含むため、同じデータ数にもかかわらず（ウ－１）に比べ入力点による精度のバラつきが小さい。最も悪い結果を導いた（エ－２）は境界上の格子点のみの集合のため、領域内部の情報を全く含まず、非線型関数のサンプルデータ集合として適当でないことが分かる。

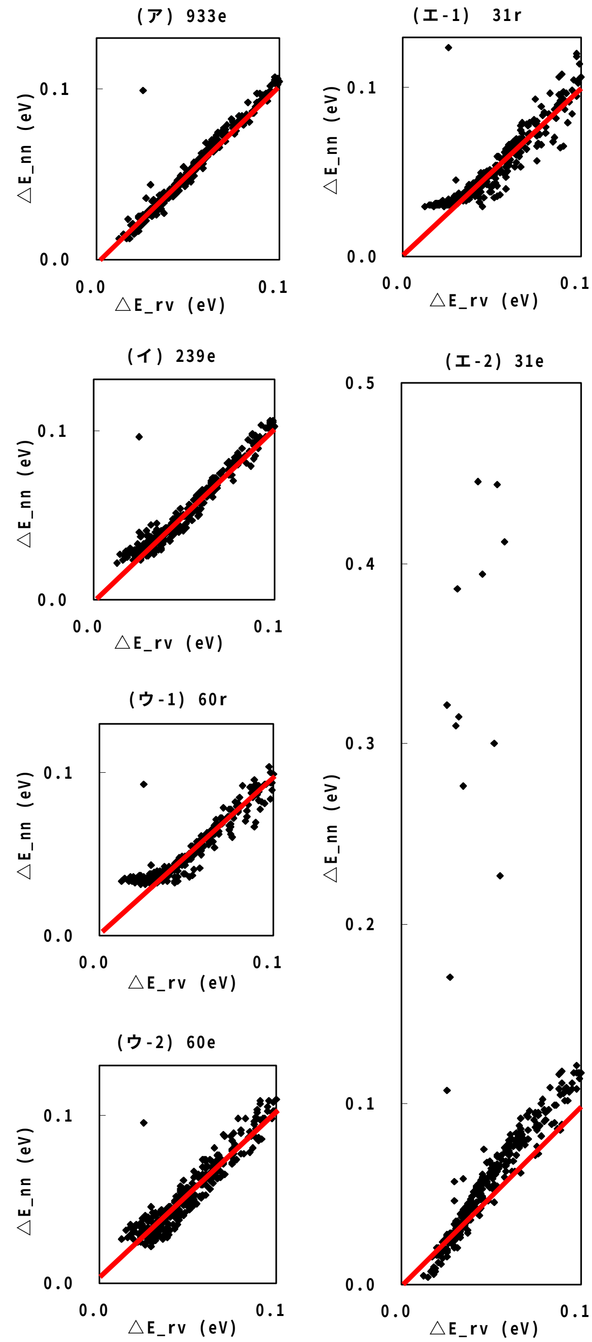

図１　各サンプルデータ集合（ア）、（イ）、（ウ－１）、（ウ－２）、（エ－１）、（エ－２）に対する近似関数の汎化能力評価結果。横軸は評価用データの出力値、縦軸は近似値であり、赤い直線に近い点ほど近似精度が良いことを示す。

４．おわりに

超球面識別型３層ニューラルネットの高次元アルゴリズム学習による関数近似法の量子井戸デバイス設計への応用において、サンプルデータの取り方と得られる近似関数の汎化能力の関係を調べた。入力空間の関数近似領域の境界上の点および領域内部の点の両方をバランスよく含んだサンプルデータ集合を用いれば、精度のバラつきを抑えて関数近似できる可能性が高いことが分かった。

本研究は通信・放送機構の研究委託により実施したものである。

参考文献

[1]「ニューラルネットワークを用いた量子井戸デバイスの設計」、河野芳江、安藤太郎、FIT2003 講演論文集 Vol.1, pp.111-112 (2003).