A-038

ニューラルネットを用いた特性予測に基づく量子井戸デバイス設計法

An approach to designing quantum well devices based on using neural networks to estimate functional requirements

河野 芳江　　安藤 太郎

Yoshie Kohno　　Taro Ando

1．はじめに

量子効果を利用した高速・高機能デバイスなどの特性予測法として、十分な数のサンプルデータに対し超球面識別型3層ニューラルネットワークの学習を適用することにより、あらかじめ系の特性変数を設計変数の単純な関数として適応的に近似しておく方法を提案してきた[1]。この方法は、設計変数が数個～10個程度で、比較的穏やかな挙動を示す非線型関数である系を適用対象とするものである。量子井戸レーザ等の半導体量子井戸構造を利用したデバイスにおいて最も基本的な構成要素の一つである単一量子井戸に対して計算機実験を行い、その有効性を確認している。一旦、特性変数の近似関数形を求めておけば、極めて簡単な計算で設計変数入力値から特性変数出力値をただちに推定できるため、系のモデル化や様々なシミュレーションの実行が大変容易になる。特に、デバイスの設計や特性改善・安定化等を図る目的で、特性変数に課された要求条件を満たす設計変数値を求める問題等、一般には直接的に解くことが困難である逆問題に対して評価関数の大局的設定が簡単にできるため、その応用が大いに期待される。

本報告では、要求条件を評価関数として定式化し、その評価関数から最適解を求める段階において大局解探索法の一つである高次元アルゴリズム[3]を用いて、所望のデバイス設計変数値を求めるアプローチを提案する。最も基本的な量子系の一つである単一量子井戸の設計問題を例にとって、提案手法の検討を行う。

ATR適応コミュニケーション研究所,

ATR Adaptive Communications Research Laboratories

2．対象系とその特性予測

今回、具体例として扱う系は文献[1]で扱った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（図1）。外部電界強度を f (kV/cm)、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})、基底準位を E_0 (meV)、第一励起準位を E_1 (meV)とする。設計変数は(f, r, d, x, n)の5個、特性変数はΔE (= $E_1 - E_0$) (meV)の1個である。

この系に対し、変分原理に基づく量子井戸中のキャリアの状態解析法[2]を用いて、異なる設計変数入力値の組合せ各々に対する特性変数出力値ΔE を求め、設計変数入力値―特性変数出力値のサンプルデータ 933 個(f, r, d, x, n ; ΔE)を求めた。

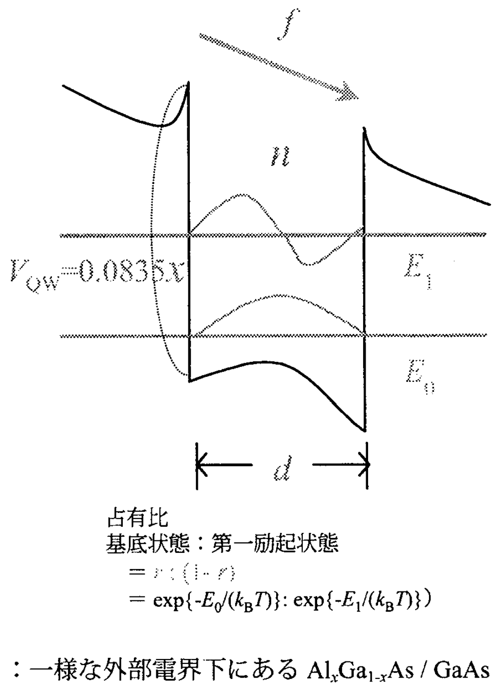

図1：一様な外部電界下にある $Al_xGa_{1-x}As$ / GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ 単一量子井戸中の電子の量子準位

そのサンプルデータに対し、超球面識別型3層ニューラルネットワークの学習を適用して特性変数の近似関数形を求めた。このネットワークにおいては、線形・非線型の局所的・大域的特徴のいずれに対しても、数少ないパラメータで効率よく表現できるよう、識別超球の中心と半径のパラメータの許容範囲を広く設定しているのがポイントである。一方で、そのことで評価関数に広い平坦領域や局所解が現れてしまうため、そうした系の最適化に適した高次元アルゴリズムを学習法として採用することで学習の高速化を実現した。また、中間ユニット数を合理的に決めるため、中間ユニット1つから最適化を始め、指定精度を達成するまで中間ユニットをひとつづつ追加し、追加したユニットのみを学習する方法を用いた。この方法で求めた特性変数の近似関数形 $\Delta E_{NN}(f, r, d, x, n)$ は文献[1]にあるとおりである。

3．近似関数を用いた設計問題の定式化と解探索

一旦、特性変数の関数形が求まれば、系のモデル化や様々なシミュレーションが大変容易になる。最も重要な応用例の一つとして、特性変数に課されたいくつかの要求条件を満たす系の設計が挙げられる。

第2節の系に関して、以下に要求条件の例をいくつか記す。それに対応する評価関数 $V(f, r, d, x, n)$は、例えば次のように設定すればよい。

◆発光・吸光波長の指定：

$\Delta E = A$ (meV)（A は定数）.

$\rightarrow \quad V(f, r, d, x, n) = \{\Delta E_{NN}(f, r, d, x, n) - A\}^2.$

◆指定電場下における発光・吸光波長の指定：

$f = F$(kV/cm)において $\Delta E = A$ (meV)（A は定数）.

$$\rightarrow \quad V(f, r, d, x, n) = \{\Delta E_{NN}(f, r, d, x, n) - A\}^2 + (f - F)^2.$$

◆外部電場による可変波長の制御：

ある f(kV/cm)において $\Delta E = A$ (meV)（A は定数）、

$f+50$((kV/cm)において $\Delta E = B$ (meV)（B は定数）.

$$\rightarrow \quad V(f, r, d, x, n) = \{\Delta E_{NN}(f, r, d, x, n) - A\}^2 + \{\Delta E_{NN}(f+50, r, d, x, n) - B\}^2.$$

他にも、目的に応じて様々な要求条件があり得る。

評価関数 $V(f, r, d, x, n)$を最小とする方法としては高次元アルゴリズムを用いた。

上記の例において、A や B の様々なパラメータ値に対して計算機実験を実行したところ、いずれも高々数秒～数分程度の計算時間で精度の良い解が得られた (COMPAQ AlphaStation XP1000 (667MHz))。

4．おわりに

量子効果を利用した高速・高機能デバイスなどの設計法として、サンプルデータに対して階層型ニューラルネットワークの学習を適用することにより設計変数と特性変数の間の関数近似を行い、得られた近似関数を用いて要求条件を簡潔な評価関数として定式化し、高次元アルゴリズムで所望のデバイス設計変数値を求めるというアプローチを提案した。AlGaAs / GaAs / AlGaAs 量子井戸を具体例にとって計算機実験を行ったところ、非常に有効な結果が得られた。

本研究は情報通信研究機構の研究委託により実施したものである。

参考文献

[1]河野芳江、安藤太郎、「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」、FIT2003, Vol.1, pp.111-112 (2003).

[2]T.Ando, H.Taniyama, N.Ohtani, M.Hosoda, and M.Nakayama, "Numerically stable and flexible method for solutions of the Schroedinger equation with self-interaction of carriers in quantum wells", IEEE Jour. of Quantum Electronics, Vol.38, No.10, pp.1372-1383 (2002).

[3]新上和正、「高次元アルゴリズム」、ｂｉｔ、Vol.31, No.7, p.2 (1999).