

AIN 溶液成長における機械学習を用いた溶液流動の高効率予測

Rapid prediction of solution flow by machine learning in AIN solution growth

名大院工 °小久保 信彦, 角岡 洋介, 原田 俊太, 田川 美穂, 宇治原 徹

Nagoya Univ. °Nobuhiko Kokubo, Yosuke Tsunooka, Shunta Harada, Miho Tagawa, Toru Ujihara

E-mail: kokubo@sic.numse.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】 溶液成長において溶媒の流動制御は極めて重要である。溶液流動はさまざまな物理現象が複雑に絡み合っているため単純な予測が難しく、しかも直接観測も難しいことから、しばしばシミュレーションによる予測を行う。しかし、流体シミュレーションは計算コストが高く、多くの時間を要するため、網羅的なシミュレーションによる条件最適化は困難である。そこで本研究では、機械学習の一種であるスパースモデリングに着目した。このモデルは数少ないデータから統計的な手法で結果を予測することができ、現在、MRI 画像における高速撮影や少数のデータからのブラックホールの構造予測まで、多くの分野で使用されている^[1,2]。本研究では、我々のグループで行っている AIN の溶液成長^[3]における坩堝形状設計を念頭において、数少ないシミュレーション結果から坩堝形状と溶液流動の関係の高効率予測を行った。

【方法】 最初に、10 通りの坩堝形状をモデリングし流体シミュレーションを行った。具体的には Fig. 1 に示すように、溶液部分の上部温度を 2023 K で固定し、下部温度($1973 \text{ K} < T_b < 2023 \text{ K}$)、溶液高さ($5 \text{ mm} < h < 20 \text{ mm}$)、坩堝半径($5 \text{ mm} < r_c < 15 \text{ mm}$)、基板厚さ($0.1 \text{ mm} < t_s < 1 \text{ mm}$)、基板半径($2.5 \text{ mm} < r_s < r_c$)をパラメータとして変化させた。次にシミュレーション結果から基板上 1 mm の下降流の流速の平均値を計算し、パラメータと流速の関係をスパースモデルでフィッティングをし、予測モデルを構築した。

【結果】 Fig. 1 にシミュレーション結果の一例を示す。この例では、坩堝内で溶液が壁面で上昇し、中央部分で下降する流れが生じていることが分かる。同様に 10 通りの計算を行い、その結果から予測モデルを構築した。各パラメータに対して予測される流速を Fig. 2 に示す。ここでは T_b , t_s , r_s を一定とし、溶媒高さ h と坩堝半径 r_c に対する変化を示す。この予測から、坩堝半径を大きくし、溶媒高さを小さくすることで、流速が大きくなることがわかった。また、同様の予測を、全てのパラメータ変化に対して網羅的に行った。予測を基に、わずか 10 通りのシミュレーション結果から、瞬時に最適な実験パラメータを設計するための指針を得ることができた。

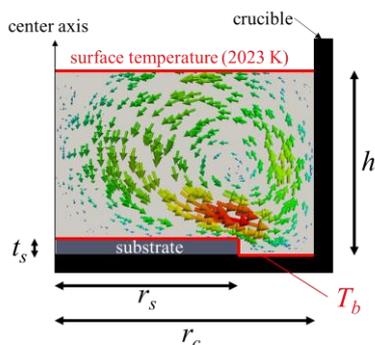


Fig. 1. Simulation configuration and one example of simulation result.

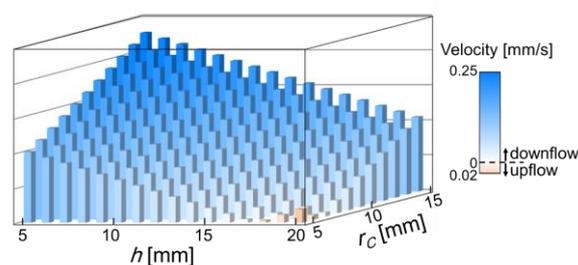


Fig. 2. Predicted solution flow velocity by the sparse modelling under the condition of $T_b = 2000$, $t_s = 0.5$, $r_s = 5$.

【参考文献】

- [1] M. Lustig *et al.*, Magn. Reson. Med., 59 (2007) 1182.
- [2] M. Honma *et al.*, Publ. Astron. Soc. Jpn., 66 (2014) 95.
- [3] S. Watanabe *et al.*, Mater. Sci. Forum, 858 (2016) 1210.