

機械学習を用いた溶液成長における過飽和度分布の予測

Prediction of supersaturation distribution in solution growth by machine learning

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

Nagoya Univ., [○]Yosuke Tsunooka¹, Nobuhiko Kokubo, Shunta Harada, Miho Tagawa,
and Toru Ujihara

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

【緒言】溶液成長においては、過飽和度が非常に重要であるが、それを実測するのは困難なことが多い。そこで、しばしば溶液成長における熱流体解析が行われている[1]。しかし複雑な熱流体解析は計算コストが高く時間がかかる。そこで我々は機械学習の手法のひとつであるスパースモデリングに注目した。この手法は、少ないデータからでも結果の予測を可能にする強力な手法である[2]。例えば、4個の変数を10刻みで全条件を調べようとすれば10000回の試行を必要とする。しかしスパースモデリングでは、数十回程度の計算結果の解析だけで、あらゆる条件における結果を網羅的に知ることができ、時間にして数百倍の高速化が期待できる。本研究では、SiC溶液成長の系において熱流体解析を行い、その成長パラメータと過飽和度との関係をスパースモデリングにより解析し、各成長パラメータの組み合わせに対する過飽和度を網羅的に予測した。

【熱流体解析】熱流体解析には、OpenFOAMを用いた。Fig. 1に計算モデルを示す。計算領域は溶液のみとした。軸対称の仮定をおいて、定常状態における温度・濃度・流速を解いた。パラメータは溶媒の上下2点の温度($2123\text{ K} < T_a, T_b < 2163\text{ K}$)、るつぼ底位置の温度勾配($100 < \text{grad}T < 1000\text{ K/m}$)、結晶回転速度($0 < \omega < 150\text{ rpm}$)の4つとした。幾何学形状および結晶温度(2143 K)、その他の境界条件は固定した。パラメータをランダムに設定し20通りの計算を行った。計算結果の一例の流れと濃度分布をFig. 1に示す。流れに伴い濃度分布が形成されていることがわかる。

【スパースモデルによる解析】スパースモデルによる解析には、R言語のパッケージであるglmnetを用いた。本研究では、成長パラメータと結晶直下0.5 mmの過飽和度の平均値の予測を行った。Fig. 2に過飽和度の平均値についての解析結果を示す。3つのパラメータを軸にとり、過飽和度の平均値の予測値を点の色で表している。黒枠で囲まれた点は流体解析の計算値を示しており、予測とよい一致が見られている。このように、スパースモデリングを用いれば、複数のパラメータについて、少ない試行で網羅的に調べることができる。

【参考文献】

- [1] T. Umezaki, *et al.*, Mater. Sci. Forum 778-780 (2014) 63-66.
[2] R. Tibshirani, J. R. Statist. Soc. 58 (1996) 267-288.

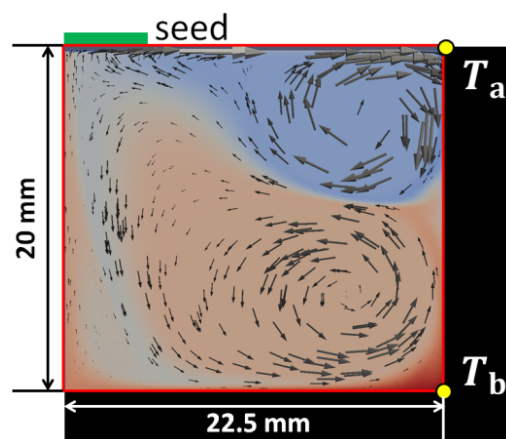


Fig. 1: Schematic of calculation model. Solvent region is in the red frame.

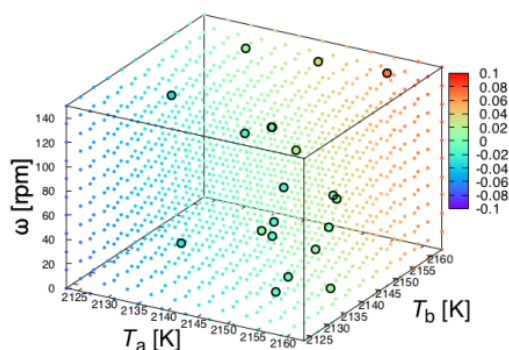


Fig. 2: Prediction of supersaturation by sparse modeling. Each axis shows parameter. Color scale indicates supersaturation. Large points with black frame are values by the simulation.