

SiC 溶液成長における温度・流速の局所分布からの全体分布予測

Global distribution prediction from local distribution of temperature and flow velocity in SiC solution growth

名大院工¹, 物材機構², 理研 AIP³, 名大未来研⁴, 産総研 GaN-OIL⁵

○(M1)高石 将輝¹, 小山 幸典², 沓掛 健太郎^{3,4}, 原田 俊太^{1,4}, 田川 美穂^{1,4}, 宇治原 徹^{1,4,5}

Grad. School of Eng. Nagoya Univ.¹, NIMS², AIP RIKEN³, IMaSS Nagoya Univ.⁴, GaN-OIL AIST⁵

°Masaki Takaishi¹, Yukinori Koyama², Kentaro Kutsukake^{3,4}, Shunta Harada^{1,4},

Miho Tagawa^{1,4}, Toru Ujihara^{1,4,5}

E-mail: takaishi@unno.material.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】SiC 溶液成長プロセスでは、溶液の温度や流れ分布の制御が結晶の高品質化に重要であり、溶液の熱流体解析が欠かせない。我々は、熱流体解析結果の機械学習を用いた結晶成長設定値の時々刻々な変化に追従可能な高速な溶液状態予測を報告している[1]。しかし、より正確な状態予測のためには、設定値に加えて、実験中の観察結果を予測に反映させる必要がある。そこで本研究では、ソフトセンサーのように、実験中に観測できる部分的な溶液状態から全体の溶液状態を予測することを目指した。本研究では、教師なし機械学習を用いることで多様で複雑な状態を数少ない次元で表現できることに着目し、教師なし機械学習の1つである特異値分解を SiC 溶液の状態推定に適用した。特異値分解によって抽出した特徴的な分布の中からランクの高い分布を少数選択し、線形和することで近似的な分布を再構成できる。そこで、少数の特徴的な分布を、局所的な溶液状態を持つ全体分布となるように足し合わせることで、温度・流速の局所的な分布から全体分布を予測した。

【方法】Fig.1 に本手法の流れを示す。熱流体計算ソフト CGSim で溶液の温度・流速分布を 98 条件シミュレーションした。全 98 条件の温度・流速分布を特異値分解し、温度と流れに関する特徴的な分布を抽出した。次に、温度・流速の局所的な分布を与え、再構成された分布との二乗和誤差が最小となるような最適な係数を遺伝的アルゴリズムで探索した。得られた最適な係数と少数の特徴的な分布の線形和で全体の溶液状態を再構成した。

【結果】温度・流速分布を特異値分解し、ランクの高い 10 個の特異値で温度・流速分布を近似した。近似の精度は、累積寄与率で評価し、近似精度は 91%であった。Fig.2 (a) (b) は、用意した温度・流速分布の全体を表し、この内の黄枠内領域を温度・流速の局所的な分布とした。Fig. 2 (c) (d) は、遺伝的アルゴリズムで得られた候補のうち、温度・流速の局所的な分布との誤差が最小となった 10 個の係数を用いて再構成された全体分布を表す。用意した温度・流速の全体分布と、局所的な温度・流速分布から予測された全体分布を比較すると、温度に関しては、最高温度の領域や最低温度の領域、全体の温度分布を精度高く予測できた。また、流速に関しては、溶液全域で渦の回転方向や数、位置関係を予測できた。

【参考文献】 [1] Y. Tsunooka et al., CrystEngComm, **20**, (2018), 6546.

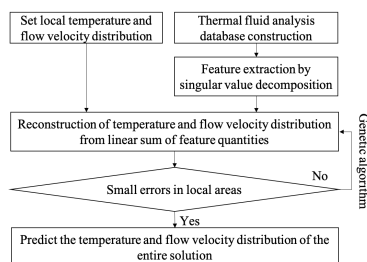


Fig. 1 Flow chart of this method

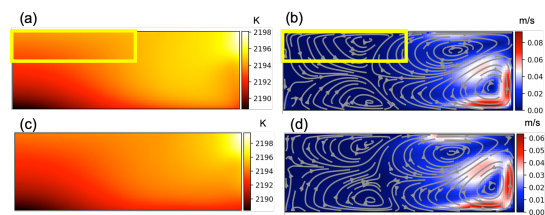


Fig. 2 Given local (a) temperature distribution and (b) flow velocity, reconstructed (c) temperature distribution and (d) flow velocity