

SiC 結晶成長シミュレーションのノンパラメトリック機械学習

Nonparametric Machine Learning of Crystal Growth Simulation for Silicon Carbide

物材機構¹, 名大院工², 理研³, 名大未来研⁴

○小山 幸典¹, 角岡 洋介², 沓掛 健太郎³, 宇治原 徹⁴

NIMS¹, Nagoya Univ.², RIKEN³, Nagoya Univ. IMaSS⁴

○Yukinori Koyama¹, Yosuke Tsunooka², Kentaro Kutsukake³, Toru Ujihara⁴

E-mail: KOYAMA.Yukinori@nims.go.jp

半導体材料を実用化するためには、その結晶成長プロセスを最適化することが不可欠である。本研究では溶液法による炭化珪素(SiC)バルク単結晶の育成に注目しているが、その結晶成長プロセスを理解するためには、溶液の流速や温度分布などの状態を把握することが重要である。我々は熱流体解析の結果を用いてプロセス条件から溶液状態を推定する機械学習モデルの構築を進めており、溶液状態の表現次元を特異値分解により圧縮し、次元圧縮された溶液状態をプロセス条件の多項式でモデル化することで、プロセス条件から溶液状態を推定できることを示してきた。流体解析の非線形性をより精確に考慮できるノンパラメトリック回帰を用いることで、溶液状態の推定精度を大幅に向上させることに成功したので、これについて報告する。

熱流体解析には、2次元軸対称モデルの有限体積法を用いた。設定温度や坩堝回転速度などのプロセス条件を変えた計算を行い、流速や温度などの溶液状態を等間隔直交メッシュ上でサンプリングした。以下、断面内流速分布のモデリングについて述べる。断面内流速分布を特異値分解により5成分に次元圧縮した。各成分に対して、プロセス条件の多項式を用いたLASSO回帰と、プロセス条件を説明変数とするガウス過程回帰を適用した。正則化パラメータやカーネルパラメータは適応的に決定した。図1に8分割交差検証で求めた断面内流速の推定誤差 (root mean squared error; RMSE) とその平均値を示す。LASSO回帰では、4次モデルの場合に検証データの推定誤差が2.5 mm/sで最小であった。一方、ガウス過程回帰ではカーネルの選択によって差異があるものの、推定誤差は約1 mm/sとLASSO回帰の場合よりも大幅に縮小させることに成功した。

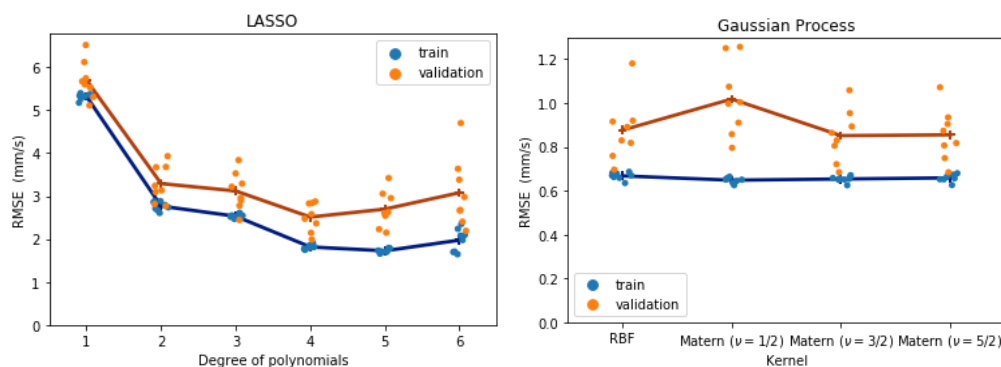


Fig. 1 Root mean squared errors in 8-fold cross validation for cross-section flow velocities using LASSO and Gaussian process regressions.