機械学習による結晶方位推定における訓練データ最適化と誤差分析

Training data optimization and error analysis for machine learning-based crystal orientation estimation 名大院工¹,名大院情報²,理研 AIP³

 ^o(M1)原 京花¹, (P)小島 拓人², 沓掛 健太朗³, 工藤 博章², 宇佐美 徳隆¹ Grad. Eng. Nagoya Univ.¹, Grad. Info. Nagoya Univ.², RIKEN AIP³
^oKyoka Hara¹, Takuto Kojima², Kentaro Kutsukake³, Hiroaki Kudo², Noritaka Usami¹

E-mail: hara.kyoka@j.mbox.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

Si 系太陽電池の材料の一つである多結晶 Si は 転位クラスターなどの欠陥を含むため変換効率 向上が課題である。変換効率向上のためには結晶 中の転位クラスターや粒界分布をインゴットス ケールで調査し、発生メカニズムを解明すること が重要である。しかし現在の多結晶組織の方位解 析手法は測定範囲が狭く、解析に長時間を要する ため大面積化と高速化が必要である。先行研究で は、多結晶組織の結晶方位を反映した光反射特性 の撮影と、ニューラルネットワークによる複雑な 相関関係のモデル化により方位推定が可能とな った[1,2]。また、データ拡張により推定精度を向 上した[3]。しかし、予測誤差の大きい結晶粒の存 在や、ニューラルネットワークのブラックボック ス問題により誤差要因の特定が難しいことなど の課題が存在する。本研究では予測誤差が光の反 射特性に依存すると考え、多様な反射特性を得る ため入射光の角度を変更してデータを取得した。 さらに各条件下で誤差の統計的分析を行い、モデ ルの訓練に最適な入力データを探った。

2. 実験方法

多結晶 Si ウエハにテクスチャ処理を施して内 部の結晶方位を反映した表面構造を得た。独自の 輝度測定装置で入射光を水平方向に 360°回転さ せて撮影し、ウエハの光学イメージを取得した。 入射光の仰角は、30°、45°、60°と変えて撮影を行 った。図1は光学イメージから取得した結晶粒の 輝度プロファイルの一例である。次に輝度プロフ ァイルを入力、ラウエ回折法で取得した結晶方位 を教師として結晶粒約 4000 個について訓練した モデルで方位推定を行った。LSTM ニューラルネ ットワークと全結合層で構成したモデルを用い た。推定の高精度化のため、複数仰角での訓練を 行った。さらに、最適な訓練データを探るため入 射光の仰角の観点から結果の可視化を行った。



Fig.1.Example of luminance profile



Fig.2.Estimation error when trained on 3 elevations

3. 結果および考察

入射光の仰角を 30°、45°、60°と変えて訓練し たモデルで推定誤差を比較すると、45°で推定誤 差の中央値が最小となり 5.72°を得た。これは各 仰角に対して適したテクスチャ面の配置が存在 するからであり、モデルの訓練には最適な仰角が 存在すると考えられる。3 種類の仰角のデータを 全て用いてモデルを訓練した結果、推定誤差の中 央値は 4.35°に減少した。(図 2)

続いて入射光の仰角と結晶方位について可視 化を行った。図3に推定誤差が10°以上の結晶 粒の方位分布を、仰角を30°、45°、60°と変えて 訓練したモデルについて比較して示す。30°で {111}~{101}面、45°で{111}面、60°で{111}~{100} 面で誤差が大きく、仰角によって推定が困難な結 晶方位に依存して生成されたテクスチャ構造 の面の幾何学的な関係が推定精度を決定する要 因となることが分かった。また推定精度の向上の ためには、推定が困難な結晶方位を補い合うよう な仰角を選定し組み合わせることが効果的だと 分かった。

4. まとめ

光学イメージ及び機械学習により、推定誤差 5°前後と高精度な結晶方位推定が可能となった。 また訓練データの特性に応じて精度や推定可能 な結晶方位が変化することを解明し、最適な訓練 データを探索することができた。

謝辞 本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)によ るものである。

参考文献

[1] 加藤他, 第80回応物秋季、2019、20a-B01-7. [2] 小島他, 第17回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム, 2020, PB-25.

[3] 小島他, 第 68 回応物春季, 2021, 18a-Z32-9.



Fig.3. Orientational distribution of grains with errors above 10° at elevations 30° , 45° , and 60°