

暗黙知によるプロセス最適化手法の開発 (SiC 結晶成長プロセスを例に)

Development of a process optimization method based on tacit knowledge

using SiC crystal growth process as an example

名大未来研, 産総研 GaN-OIL °宇治原 徹

Nagoya Univ., AIST, °Toru Ujihara

E-mail: ujihara@nagoya-u.jp

素材開発には非常に長い年月を要す, と言われている. 若干大雑把ではあるが, 素材開発を二つの段階に分けるとすると, 前半が材料探索や材料設計に相当し, 後半はそれらを合成するためのプロセス開発になる. マテリアルズ・インフォマティクスという分野が登場してから長らく経過したが, 当初は前半の材料探索や材料設計にフォーカスが充てられていた. 一方, プロセス設計に対するインフォマティクスの適用については, ここ数年になって多くの研究者が取り組むようになってきた. また産業化においても活用が始まりつつある.

いわゆるプロセス・インフォマティクスには, 大きく分けて二つのアプローチがある. 一つは, 実験や製造などにおけるプロセスデータを取得し, そのデータを分析する手法である. 最適プロセス条件などを得る場合は, プロセスデータを分析することで, ベイズ最適化などの手法によって効率よくその条件を見出すことができる. もう一つは, コンピュータ内に実際の現象を模倣する, いわば代理モデル (サロゲートモデル) を構築し, それを用いて最適化する手法である. 我々の結晶成長の最適化はこの後者の方法を用いて行っている. 具体的には, 結晶成長のシミュレーションによりデータを生成し, 機械学習を用いて, 高速で正確にシミュレーション結果を再現するモデルを構築する. このモデルを用いて, 何百万回, 何千万回の実験を計算機上で行い, それにより最適解を求める.

さて, 最適解を求めるには, いわゆる目的関数を定義する必要がある. しかし多く場合, この定義が難しい. 例えば, 数値化が容易なものであればよいが, 素材プロセスの場合は, いわゆる職人技のような数値化・言語化が困難な「暗黙知」を条件として設定する必要がある場合がある. 我々は, 最近, 暗黙知を抽出し, 暗黙知の曖昧さを考慮した最適化手法の開発を行ってきた. さらにこの方法を用いれば, 暗黙知の意味を解析したり, また試行錯誤によって暗黙知が変化する過程なども明らかにすることができる.

本研究は, 名古屋大学, 名古屋工業大学, 産総研, 理化学研究所, 株式会社 UJ-Crystal, アイスクリスタル株式会社との共同研究として実施された. また, NEDO プロジェクト(人と共に進化する次世代人工知能に関する技術開発事業), NEDO プロジェクト(マテリアル先導研究)の支援のもと実施された.