

AIを融合した数値解析による移動現象の解明と プロセス最適条件の提案



研究室紹介

岡野 泰 則*

Understandings of transport phenomena and proposal of process optimum conditions
by using numerical simulation with AI technique

Key Words : Numerical simulation, AI, Transport phenomena, Crystal growth, Process optimization

はじめに

化学工学は自然現象や実験室での新たな、時には偶然の発見を実用にまで拡張する正に理から工まで幅広くかつ深く抱合する極めて雄大な学問である。その取り扱う規模は無制限であり、原子、分子、ナノレベルから、気象や深海といった地球規模、さらには宇宙規模にまで及ぶ。また研究対象も、材料、再生医療といった「ものづくり」、環境保全や環境浄化、新エネルギー開発など多岐にわたり、宇宙居住における水や空気、食物などの循環においても化学工学で長年培われた触媒や膜分離などの技術が幅広く使われようとしている。これらの幅広い高度な研究の遂行には、研究手法や測定、観察技術の進展が必須であり、多くの成果が報告されている。

一方、約30年前、実験、理論に続く第三の研究手法として数値解析が注目を浴び、その後の計算機や計算手法の著しい発展により今ではPCなどの安価な計算資源を用いてもかなりの成果を得ることが可能となってきた。これに加え、近年人工知能(AI)が新たな研究手法として極めて有用であることが認識され、第四の研究手法として注目を集めている。特にAIは数値解析や画像データとの相性が良く、化学工学分野においても情報学との融合が積極的に試みられている。

筆者らは以前より、熔融半導体中の流動、温度・

濃度分布¹⁾、iPS細胞培養中の細胞流動に伴うせん断応力²⁾といった通常では直接観察や測定不可能な値の算定に数値解析を用い、その結果に基づく最適装置形状、最適操作条件の提案を行ってきた。本稿ではAIを融合した数値解析による半導体結晶成長に関する筆者らによる最近の研究結果について紹介する。

高温融液物性値の推定と最適結晶成長条件の提案

筆者らは以前国際宇宙ステーション(ISS)を用い、InGaSb混晶半導体バルク結晶成長を行った³⁾。微小重力では自然対流が抑制されるため、移動現象が通常の重力場とは大きく異なるため、装置設計や結晶成長条件の決定には数値解析を活用した。

一般に高温流体中の流体物性は測定が困難で、特に拡散係数は対流の影響を強く受けるため磁場を印加するなど装置が大掛かりになることが一般的である。今回の宇宙実験の主目的は成長速度の結晶方位依存性であり、物性の測定ではないが、結晶成長中の物質移動が拡散律速となることから、成長速度の時間依存性の結果を用いれば拡散係数を逆算することが可能と考えた(データ同化)。最初に従来の報告値を用いて解析を行ったところ、実験結果とは全く異なる成長速度が算出されることを確認した。そこで、種々の拡散係数を用い数値計算を行い、実験結果を良好に説明する拡散係数を見つけるという作業を行うのだが、わずか3本であっても、宇宙実験で得られた異なる成長方位の結晶の成長速度を矛盾なく説明する拡散係数を決定するのは極めて多くの計算回数を必要とする。そこで機械学習の一種を活用したベイズ最適化法を適用することにより、試行回数を大幅に削減し良好に実験結果を説明する拡散係数の決定に成功した⁴⁾。

続いて、高品質結晶作製条件の探索として、固液

* Yasunori OKANO

1960年2月生まれ
早稲田大学大学院 理工学研究科 応用科学専攻
博士後期課程(1989年)
現在、大阪大学大学院 基礎工学研究科 物質創
成専攻 化学工学領域 教授 工学博士
専門/化学工学
TEL: 06-6850-6386
FAX: 06-6850-6386
E-mail: okano.yasunori.es@osaka-u.ac.jp

界面形状が極力平坦な条件で結晶を作製するために、つぼ自体を回転させることを提案した。結晶成長中の固液界面形状のその場観察は不可能であるため、従来の成長では回転は印加しても一定値である。それに対し、筆者らは成長開始時の条件はベイズ最適化を用い設定し、成長中は強化学習を用い常に成長速度を調整することにより成長時を通し、固液界面形状を可能な限り平坦に近づけることを示した⁵⁾。今後はこれまでに得た知見を総合し、地上での成長実験で磁場や回転を加味した解析を行い、最適条件を提案し、実験で実証していく予定である。

TSSG 法による SiC 成長最適条件の提案

炭化ケイ素 (SiC) のバルク結晶はパワーデバイス用材料として注目されている。現在は気相成長による製品が主であるが、将来の生産性、高品質性を考えれば液相からの成長が強く求められている。カーボンをつぼにケイ素の多結晶を充填し、高周波でつぼを加熱することによりケイ素を溶解するとともに、カーボンが融液内に溶け込み、種結晶部で SiC が成長する。この方法を Top-Seeded Solution Growth (TSSG) 法と呼ぶ。本法は化学反応、流動、熱・物質移動を伴う極めて複雑な現象であるとともに、2000°C を超える極めて高温のプロセスであるため諸移動現象の観察、測定は極めて困難である。そこで数値解析が現象の理解、最適成長条件の設定に極めて有用なツールとなりうる。筆者らは、溶液部にカスプ磁界を印加し、結晶回転と組み合わせることにより半径方向の結晶成長速度の均一化を提案することとした。TSSG 法に磁場を印加する実際の実験報告はなされておらず、実験を先導するための数値解析である。しかしながら可変パラメータだけでも印加磁場強度、印加磁場中心位置、つぼ回転数と 3 つ存在し、それぞれ実現可能な範囲で 5 通り変えたとしても、 $5 \times 5 \times 5 = 125$ 通りの組み合わせが存在する。そこで前項同様にベイズ最適化法を適用することにより、24 通りの試行により設定条件内での最適条件を見つけ出すことに成功した⁶⁾。

PINNs による CFD 革命

複数あるパラメータの組み合わせから最適な条件を生み出す組み合わせの選定に、ベイズ最適化法

を適用することにより全ての試行の約 1/3 から 1/4 の試行で最適条件を提案することに成功した。そうすると次に気になるのは、流動を計算する CFD (Computational Fluid Dynamics: 数値流体力学) 部分である。計算機や計算手法の発展に伴い計算速度が速くなったとはいえ、高精度の計算を行うには、計算対象にもよるがスーパーコンピュータを用いても数日要することは通常である。前項の TSSG-SiC の計算においても 1 つの計算で数日を要するため、本来の 125 通りでは約 1 年、24 通りでも約 2 か月を要することとなる。そこで次なる課題として、CFD 部の高速化に取り組むこととした。そのために PINNs (Physics Informed Neural Networks) という方法の適用を提案している。近年、CFD にも Neural Network を適用する方法が適用されており、数日掛かる計算をわずか 0.1 秒程度で結果を提示することが可能となっている。しかし、Neural Network で得た解は流体を律する基礎方程式 (言い換えれば物理法則) を満たすわけではなく、また多くの訓練データの収集が必要であり、そのために多大な時間を有する。一方、ここで適用する PINNs は CFD と Neural Network の両方の利点を有する方法である。すなわち、CFD 同様得られる解は、流体を律する基礎方程式を許容誤差内で満たし、しかも算出速度は Neural Network 同様 0.1 秒程度である。PINNs の概念を図 1 に示す。本法は Neural Network で用いる訓練データが不要だけでなく、格子に依存しないため、結晶成長などのように時間とともに解析領域が変化する系への対応が容易である。この利点を生かすため、筆者らは引き上げ法によるシリコンバルク単結晶のデジタル・ツイン構築に取り組んだ⁷⁾。シリコンのバルク単結晶は経験者の試行錯誤により生産にこぎつけた稀有な産業であるが、生産はノウハウの塊であるため、スケールアップ時に現状の操作条件の単なる外挿では役に立たない。また、シリコンで得た成長条件に関する知見をシリコン以外の物質へ適用することもほぼ不可能である。これは結晶成長を律しているのは固液界面における濃度勾配、温度勾配であるが、これらの値の測定が不可能であることに要因がある。そこで CFD 等の数値解析でこれらの値を予測することが広く試みられてはいるが、前述のように計算時間が膨大であるため、成長中の回転数などの変化

に即時に対応することはできなかった。しかし PINNs を用いれば正確な値が即時に算出可能であるため、操作条件変化に伴う温度・濃度勾配があたかもその場観察のように視覚的に分かるため、数値解析経験が無いオペレーターであっても PC 上で感覚的に現在起こっていることが容易に理解できるようになる。

本法の適用範囲は無敵大であり、これまでの離散化法や格子形状の違いによる数値誤差の蓄積の違いといった特有の知識が無くとも、全ての人が高スーパーコンピューターを使わずとも同じ結果を得ることができる点で既存の数値解析とは異なる、正に CFD 革命といえるものである。

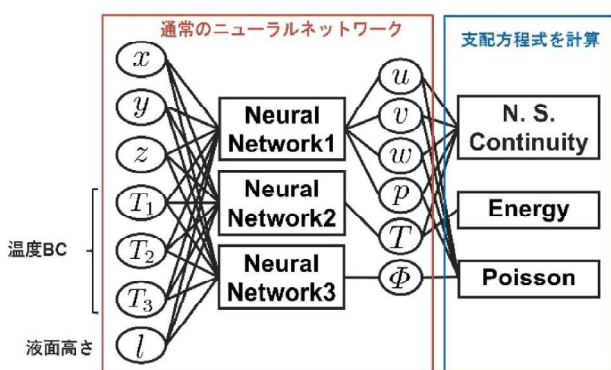


図1 PINNs の概念図

おわりに

筆者らの最近の研究について紹介させていただいた。思えばシリコンのバルク結晶に関する数値解析を始めたのが40年近く前であり、その頃とは計算環境も計算技術も全く異なっている。しかしながら追い求めているところはあまり変わってなく、相変わらず計算に必要な物性値などは不明なものも多い。当時学会で発表する度に、その結果が正しいとどうやって証明するのか、計算条件が実際とかけ離れており、結果は全く役に立たないなどと言われ立往生していたことを思い出す。この辺りも実はあまり変わっていないが、少なくとも計算の役割が実験を寸分なく再現するものであるという意識から、実験を先導するものという意識へと変化してきていることは強く感じている。また当時数値解析に関し

てなされていた議論と同様な議論が近年のAIでも行われている点に歴史の繰り返しを感じる。筆者の学生時代、基礎式を解くには解析しかなく、数学力の乏しい自分には無縁の世界だと思っていた分野が、数値解析、コンピューターの発展により、難しい数学が分からなくとも解析ができ、結果が数値でなく視覚で分かるようになった時の感動は忘れられない。近年はこれに加えAIに代表される情報学の導入によりまた新たな可能性が開かれ、ますます現象の理解と最適化などが容易かつ身近になってきた。それとともに市販ソフトのような中身が完全なブラックボックスなツールやネット上のオープンソースが出現し、誰でも解析できるようになってきている。その弊害として明らかに間違った、あるいは多くの誤差を含む解であっても平気で論文上に掲載されてしまうことも目にするようになった。そのうちこの解の信頼度は何%などというAIも出現するかもしれない。

時代とともに技術は進み、多くのことが可能になるが、当然本当の基礎は不変であり、知りたいこと、成しえたいことはそう簡単には達成できていない。我々は未来永劫真実を追い続けなくては行けないし、そこに尽きない興味がある。言い尽くされた言葉ではあるが、そのためには実験、解析、人工知能といった区分けではなく、物事を俯瞰的に見据える人材の育成が極めて重要である。

引用文献

- 1) T. Yamamoto et al., *J. Cryst. Growth*, **470** (2017) 75.
- 2) L. Wang et al., *J. Chem. Eng. Japan*, **54** (2021) 87.
- 3) Y. Inatomi et al., *npj Microgravity*, **1** (2015) 15011.
- 4) R. Ghritli et al., *J. Cryst. Growth*, **573** (2021) 126280.
- 5) R. Ghritli et al., *Jap.J.Appl.Phys.*, *accepted*.
- 6) Y. Takehara et al., *J. Cryst. Growth*, **532** (2019) 125437.
- 7) <https://www.jsap.or.jp/docs/pressrelease/JSAP-2022autumn-chumoku-09.pdf>