

# シミュレーションと機械学習： データ同化、装置設計、 エンジニアの知識抽出

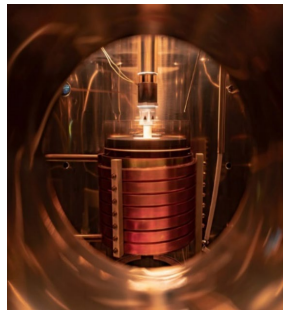
**所属** 理化学研究所  
革新知能統合研究センター  
データ駆動型生物医科学チーム  
**氏名** 沓掛 健太郎

# 本発表の構成

ものづくり開発では、シミュレーションと機械学習の活用が必須に

リアル実験

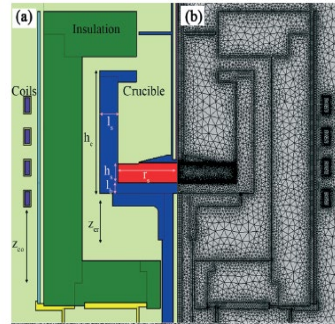
例)  
SiC結晶成長



3日

シミュレーション

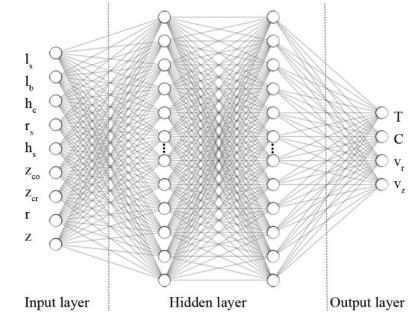
熱流体 & 物質反応 & 電磁場、etc.



3時間

機械学習

高速予測モデル



1秒以下

本発表では3つの技術を説明します

## ① データ同化

多様な誤差を考慮しながらシミュレーション内のパラメータを調節する方法

## ② 装置設計

製品品質に影響のある構造を特定しながら製造装置を設計する方法

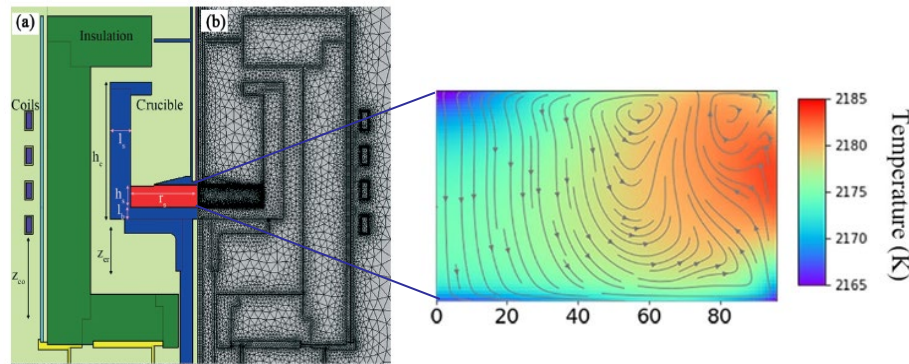
## ③ 知識抽出

エンジニアの知識に基づいて製造条件を最適化する方法

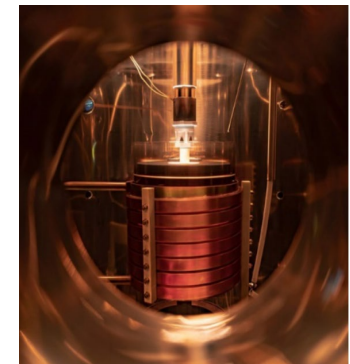
# ①データ同化：従来技術とその問題点

計測データに基づいて、シミュレーションの  
**材料物性値** (SiC溶液、ガス、部材、etc)  
**実験条件** (制御温度、部材形状・位置、etc)  
を補正

シミュレーション



リアル実験



結果を比較

問題点：パラメータを適切に設定しないと無理に合わせこんでしまう  
特に、誤差(ばらつき)の扱いが重要

# ① データ同化：新技術の特徴

シミュレーションで  
表現できる誤差  
(ばらつき)

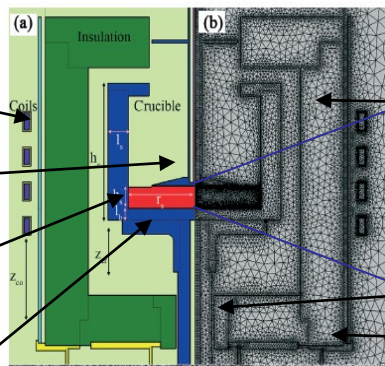
設定温度

種結晶位置・回転数

溶媒組成・高さ

ルツボ位置・回転数

etc.



シミュレーションで  
表現できない誤差  
(ばらつき)

部材の劣化  
部材特性のムラ

軸のブレ

3D→2D変換時の  
図面の簡略化

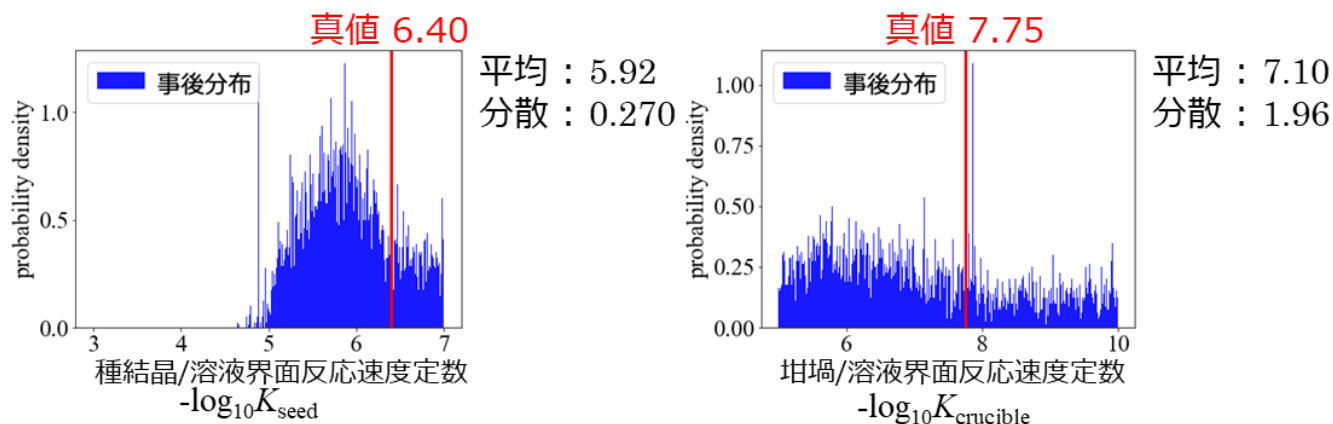
etc.

多様な誤差を考慮したシミュレーションパラメータの推定

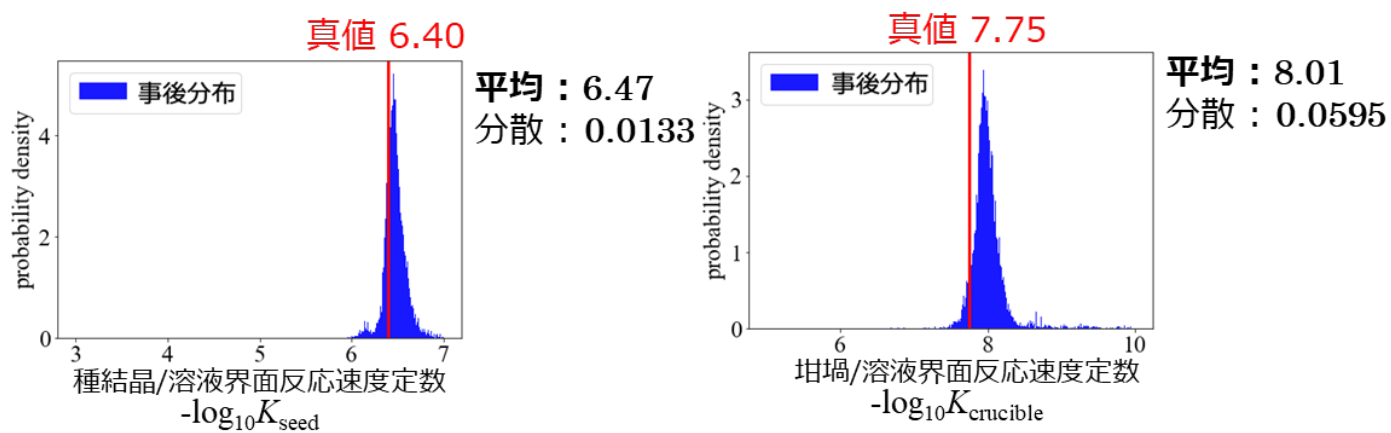
# ① データ同化：新技術の特徴

前頁のSiC結晶成長シミュレーションにて発明手法を検証

➤ 誤差を考慮しない場合（従来法）



➤ 誤差を考慮する場合（提案法）



より合理的なデータ同化パラメータ値を取得可能

## ①データ同化 想定される用途

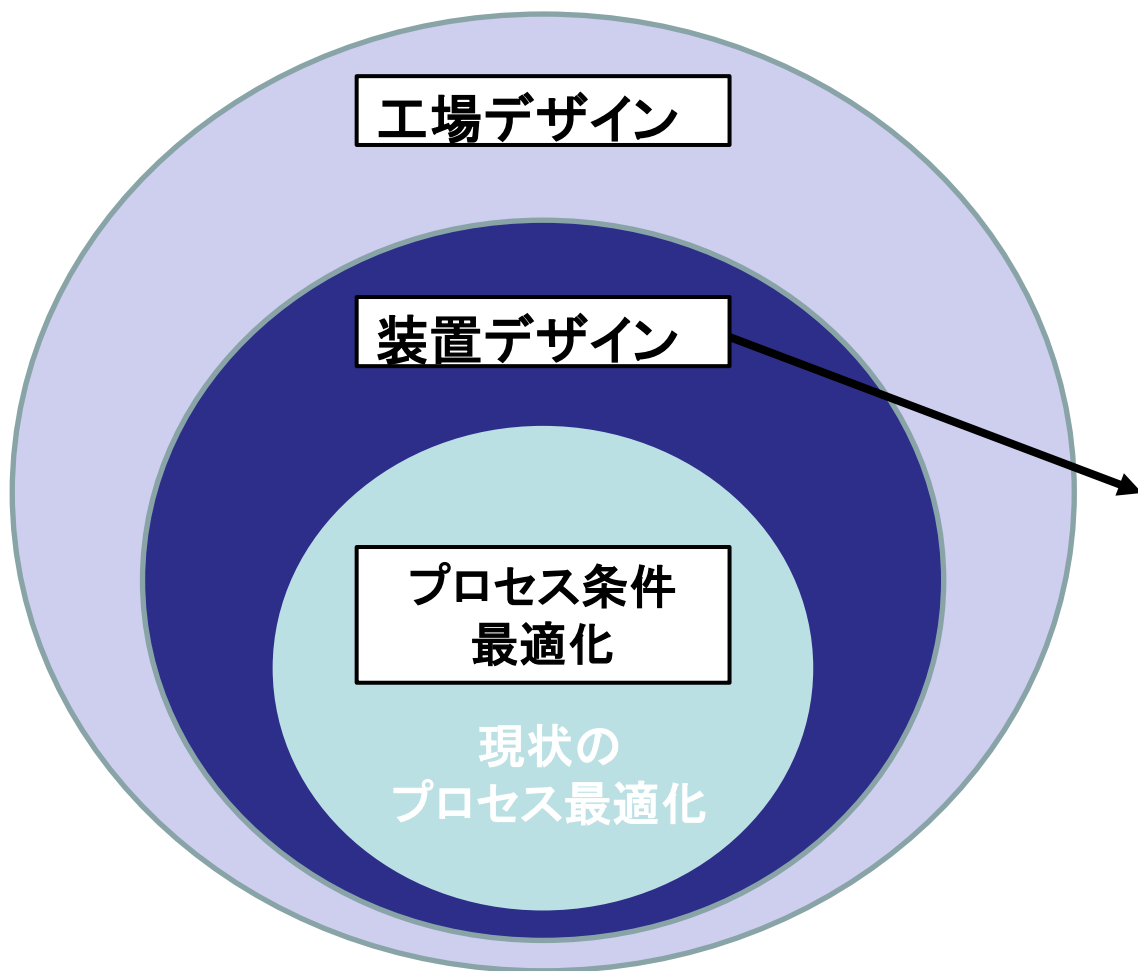
- 本技術は実施例の結晶成長シミュレーションに限らず、製造業におけるあらゆるシミュレーションに適用可能
- 従来よりも実験結果をより良く再現するシミュレーションが実現
- 誤差のモデル化はロバスト評価・設計にも活用可能

## 実用化に向けた課題

- 誤差のモデル化に、実験とシミュレーションの知識が必要
- 個別のシミュレーションの系に対して、多少プログラムを作りこむ必要がある

## ②装置設計：従来技術とその問題点

□材料製造プロセス開発の集合関係



高品質な材料を製造するには  
装置デザインを含めたプロセス最適化が必要

### 課題

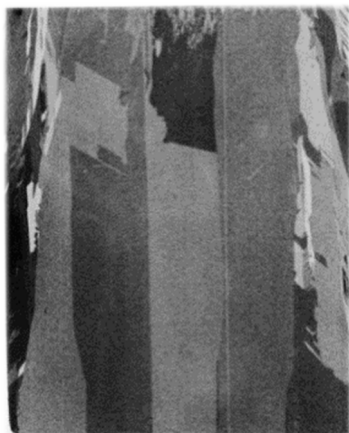
- ・製造プロセスを特徴付けるパラメータ空間が  
広大かつ複雑
- ・設計者の経験に大きく依存

膨大な装置設計変数から製品品質に影響  
する構造パラメータを特定して最適化する  
ことが困難であった

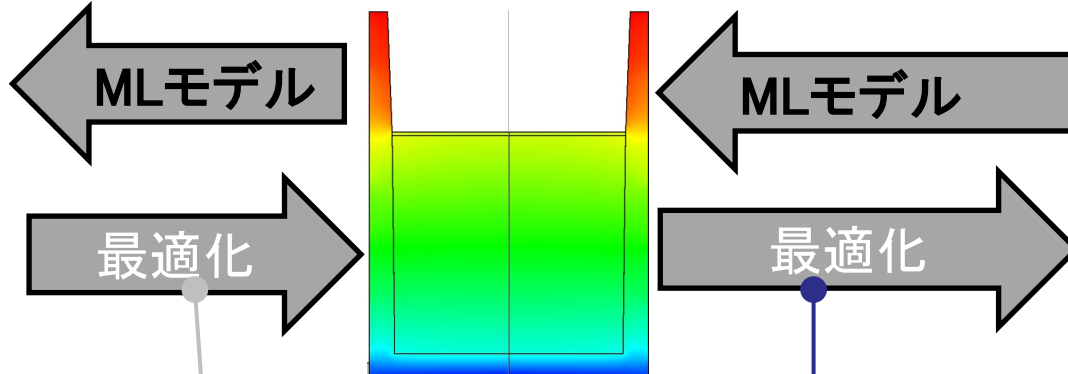
## ②装置設計：新技術の特徴

□太陽電池用多結晶シリコンインゴットの成長

高品質結晶



結晶周囲の  
最適温度分布推移



成長炉の設計



Step01

高品質な結晶を成長する  
最適な温度分布推移を求める



Step02

最適な温度分布推移を実現する  
成長炉構造を求める

### 2段階のモデル化&最適化



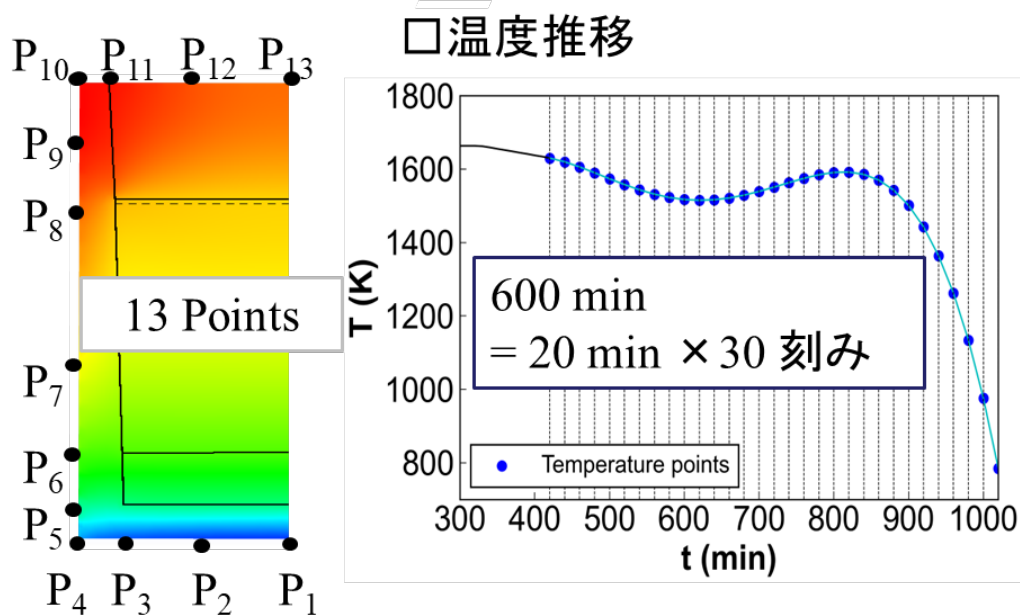
## ②装置設計：新技術の特徴

### Step01

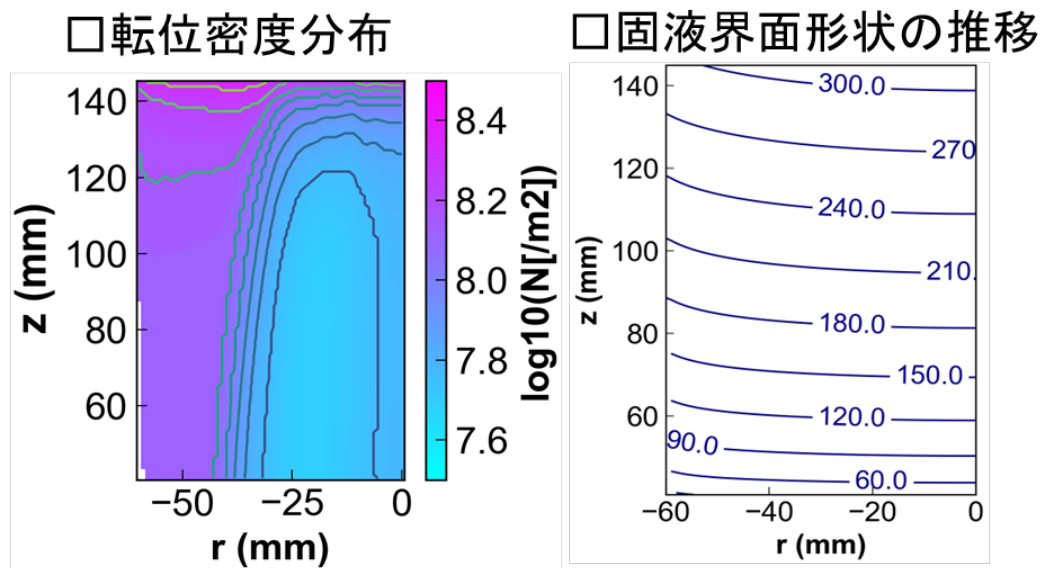
高品質な結晶を成長する  
最適な温度分布推移を求める

- ・フルモデルに比した計算時間の短縮
- ・設計指針の獲得

説明変数： 坩堝周囲の温度分布推移



目的変数：平均・最大転位密度  
結晶成長完了時間



## ②装置設計：新技術の特徴

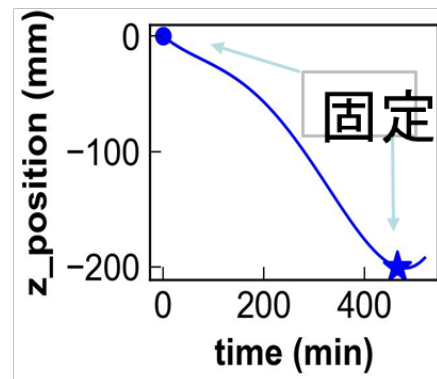
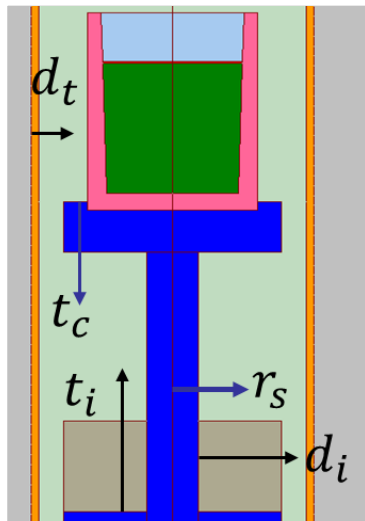
### Step02

最適な温度分布推移を実現する  
成長炉構造を求める

- ・フルモデルに比した計算時間の短縮
- ・重要構造の特定

説明変数：装置構造と坩堝移動速度

装置構造パラメータ: 5      坩堝移動推移: 3変数

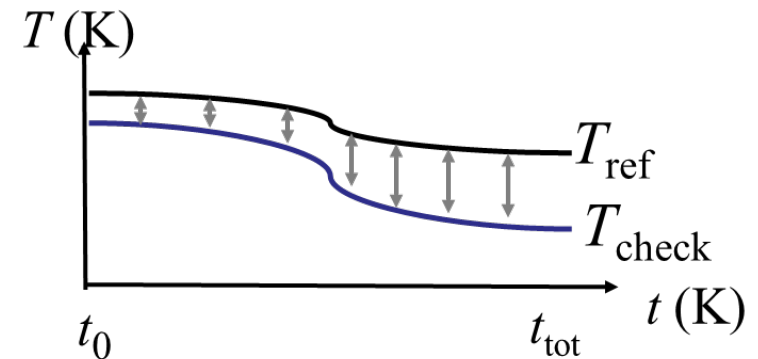


$$z = at^4 + bt^3 + ct^2 + At$$

A: 定数

目的変数：最適温度分布推移との温度差

坩堝上部・側壁・下部それぞれの $\Delta T$ (3つ)



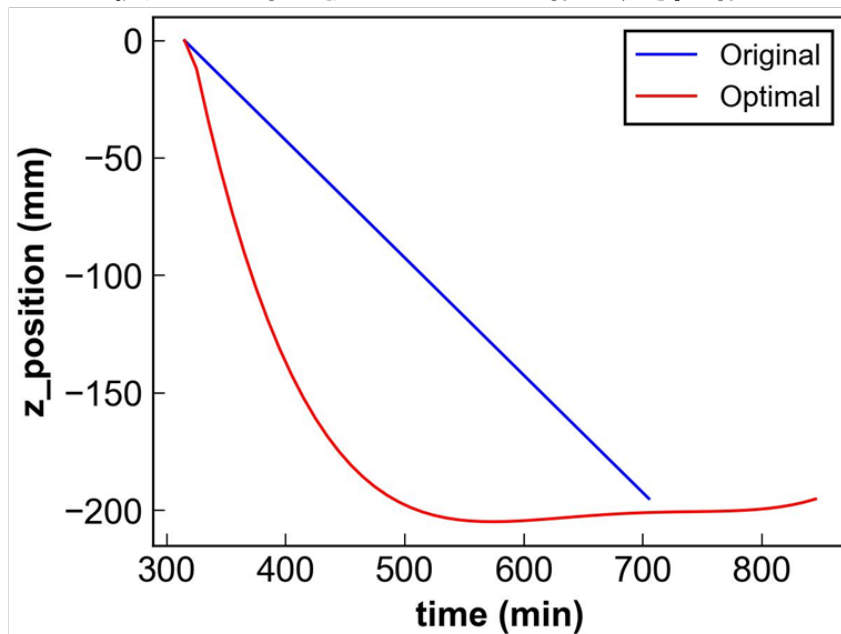
$$\Delta T = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sqrt{\frac{1}{t_{tot}} \sum_t (T_{check,t} - T_{ref,t})^2}$$

## ②装置設計：新技術の特徴

### □最適化前後の装置構造の変化

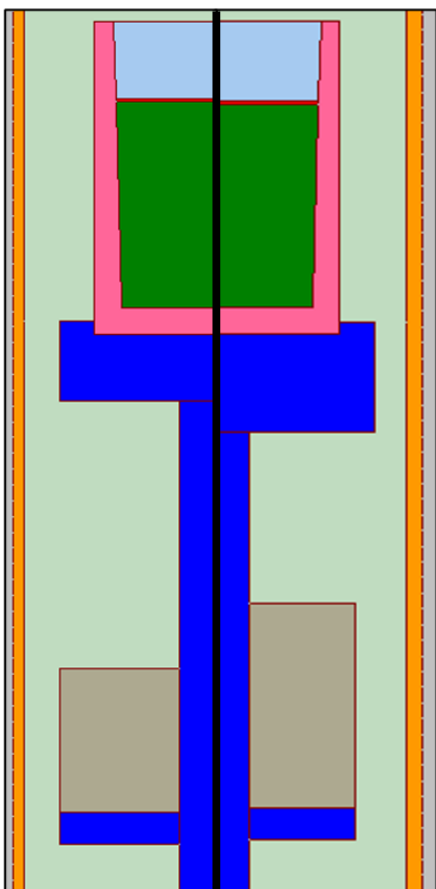
種類	炉心管幅 $d_t(\text{mm})$	坩堝台厚み $t_c(\text{mm})$	断熱材幅 $d_i(\text{mm})$	断熱材厚み $t_i(\text{mm})$	サセプター径 $r_s(\text{mm})$
Original	7.00	50.00	96.00	91.00	22.50
Optimal	9.80	70.86	83.83	131.08	20.00

### □最適化前後の坩堝移動推移の比較



➤ 装置構造・プロセス条件を同時に最適化

Original    Optimal



## ② 装置設計 想定される用途

- 本技術は実施例の結晶成長シミュレーションに限らず、製造業におけるあらゆるシミュレーションに適用可能
- 装置構造最適化において、重要構造の特定、計算時間の短縮、シミュレーション回数の削減が可能に
- 設計支援ツールや自動設計ツールへ発展

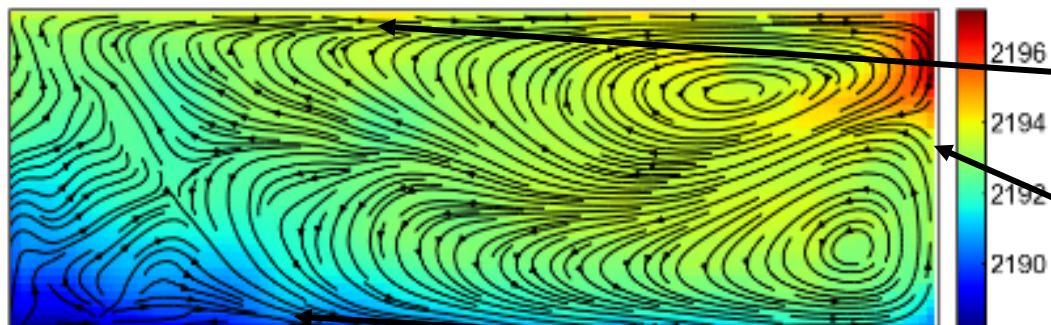
## 実用化に向けた課題

- 2 段モデル化に、装置と物理現象の知識が必要
- 効率的な教師データ作成に工夫が必要

### ③ 知識抽出：従来技術とその問題点

最適化の対象は非常に高次元

従来の目的関数



表面の流れは均一  
表面の温度は均一  
過飽和度は適切な範囲

側面の温度は均一

底面の温度は均一 など

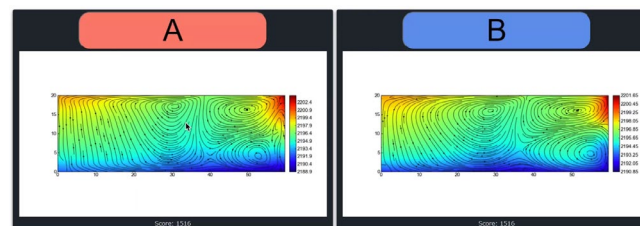
SiC結晶成長における坩堝内の温度と流れ分布



エンジニアは、  
望ましい流れ・温度についての  
暗黙知を持っている

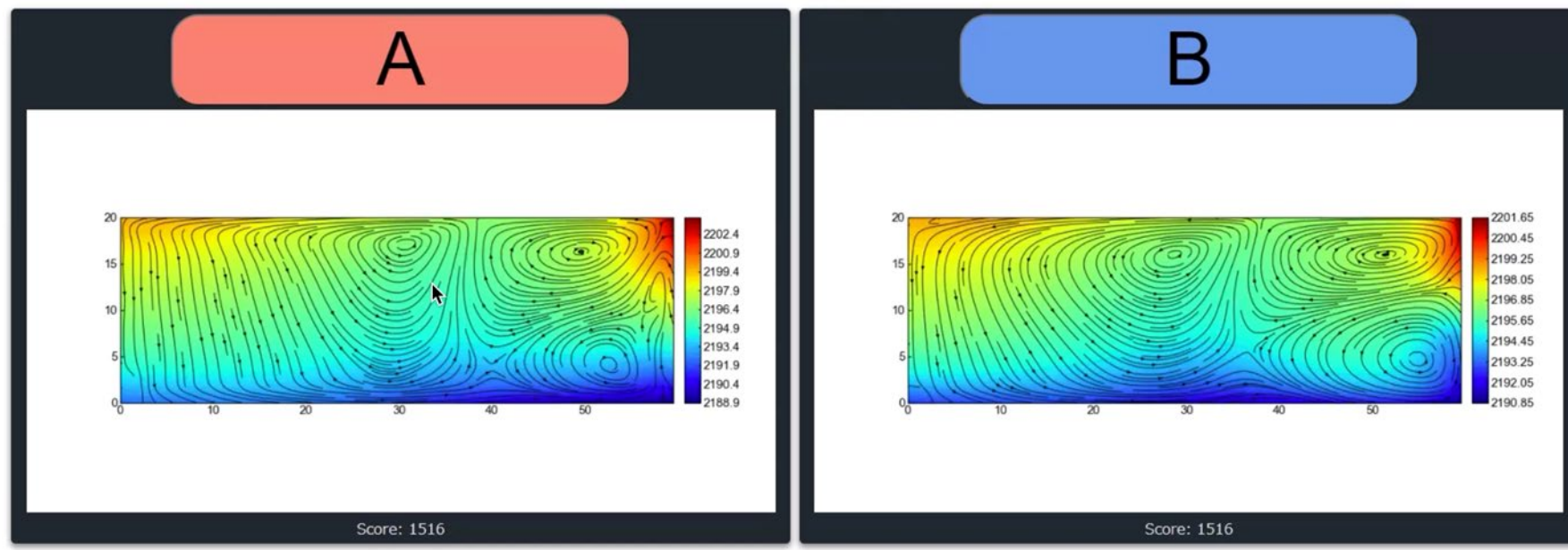
しかし、すべてを数式で表  
すことは困難

一対比較によるスコア付け



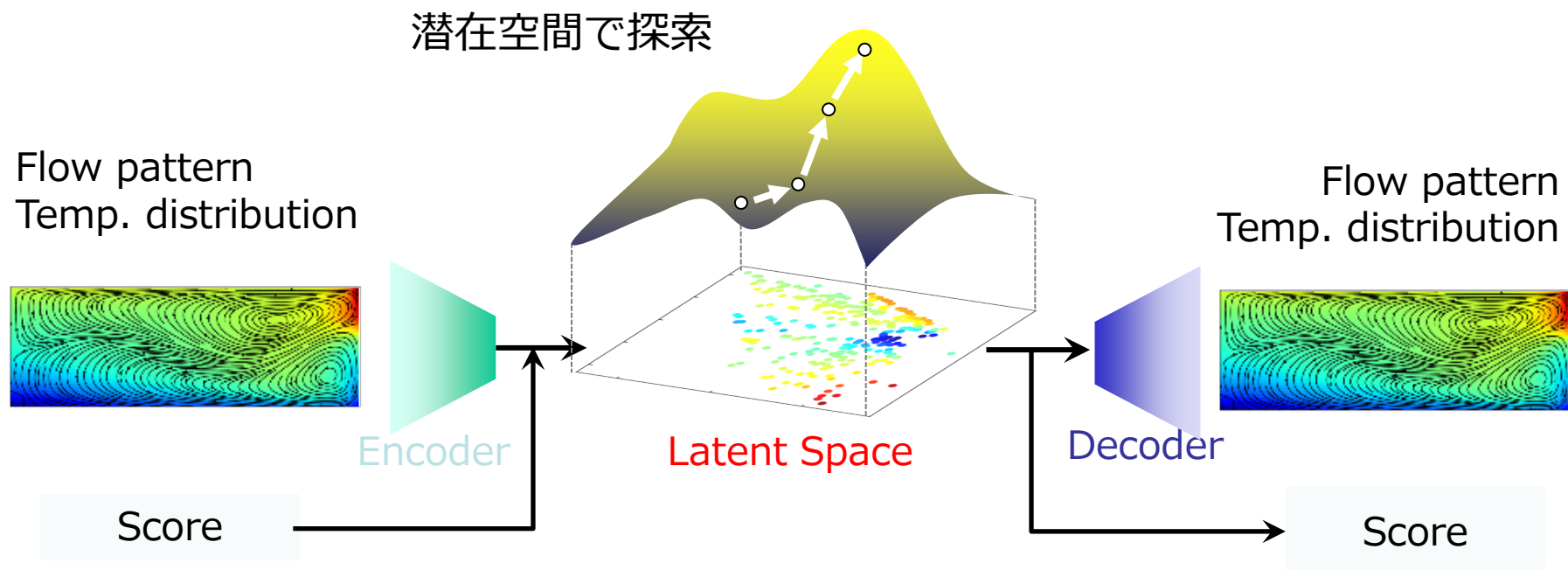
どちらが良いかを判断することは容易

### ③知識抽出：新技術の特徴



一対比較によって、エンジニアの暗黙知をスコア化

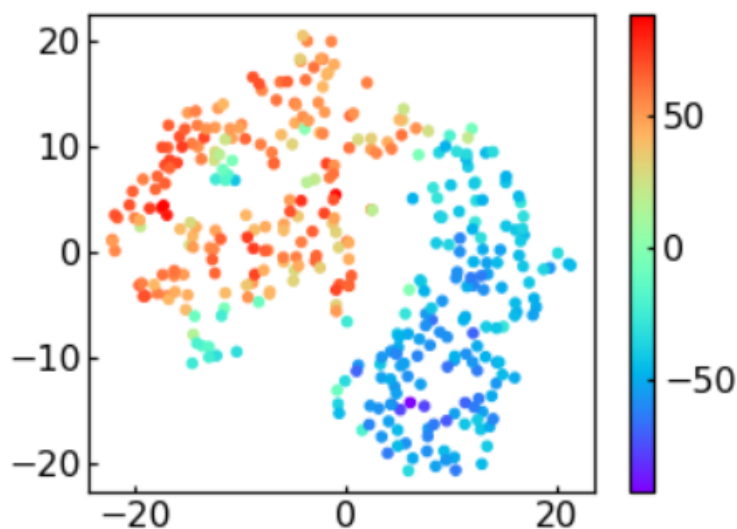
### ③知識抽出：新技術の特徴



スコアを用いて構築した潜在空間で  
望ましい状態を実現する製造条件を探索

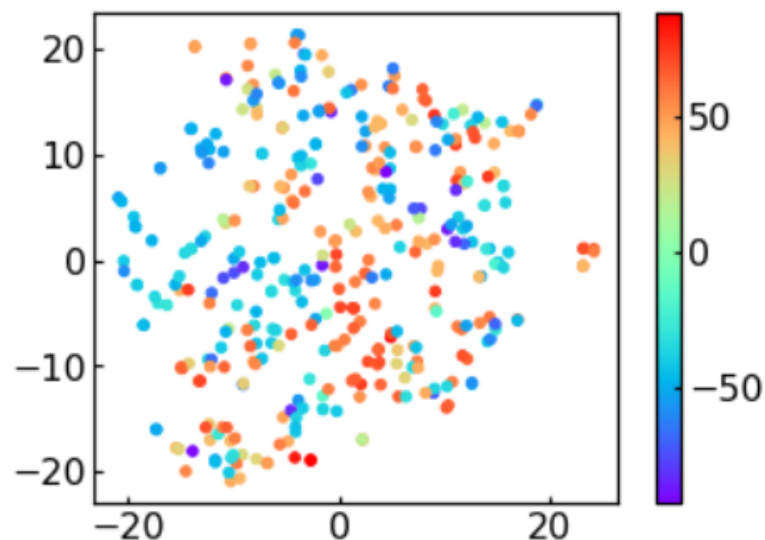
### ③知識抽出：新技術の特徴

VAEの低次元空間（7次元）



- ✓ 潜在空間で近いスコア同士が  
近くに集まるように学習されている

実験パラメータ空間（7次元）



- ✓ 実験パラメータ空間でスコアは  
ばらついて分布している

**潜在空間で探索することで、良い条件の発見が容易に**



### ③知識抽出：新技術の特徴

従来の実験条件を用いて作製したSiC結晶

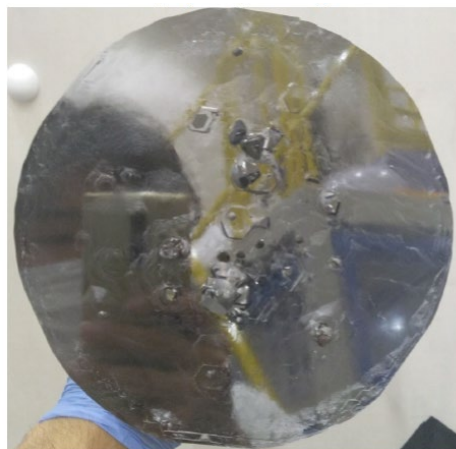


長時間の成長



荒れた結晶表面

最適化された実験条件を用いて作製したSiC結晶



長時間の安定した成長



厚く かつ スムースな表面の結晶を実現

成長厚み：1.7~2.6 mm

**発明手法によって、エンジニアが望ましいと考える状態を  
実現することで、理想的な結晶が得られた**

## ③ 知識抽出 想定される用途

- 本技術は実施例の結晶成長応用に限らず。製造業におけるあらゆるシミュレーション・実験に適用可能
- エンジニアが思い描く理想的な状態を実現する製造条件を取得可能
- 熟練技術者の知識のデータ化、見える化、継承とその知識を活かした最適化

## 実用化に向けた課題

- 一対比較スコア付けの高精度化と回数の低減
- 最適化に対してより良い潜在空間構築手法を研究中

## 企業への期待

- シミュレーションを用いた製品・プロセス開発を実施中の企業、熟練技術者の技術継承に課題を抱えている企業には、本技術の導入が有効と思われる。
- 本発明を実際の製品・プロセス開発へ展開したい企業との**共同研究・技術指導・特許ライセンス**を希望

# 本技術に関する知的財産権

- 発明の名称 : 推定装置、推定方法、及び推定プログラム
  - 出願番号 : 特願2022-134361, PCT/JP2023/030749
  - 出願人 : 国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人東海国立大学機構
  - 発明者 : 沓掛健太郎, 竹内一郎, 竹野思温, 宇治原徹, 太田壮音, 烏山昌幸
- 
- 発明の名称 : 設計最適化装置、設計最適化方法、プログラムおよび記録媒体
  - 出願番号 : 特願2023-116245
  - 出願人 : 国立大学法人東海国立大学機構、国立研究開発法人理化学研究所
  - 発明者 : 宇佐美德隆, 田中博之, 沓掛健太郎
- 
- 発明の名称 : 学習方法、学習装置、学習プログラム、制御方法、制御装置、及び制御プログラム
  - 出願番号 : 特願2022-027201, PCT/JP2023/005091
  - 出願人 : 国立大学法人東海国立大学機構、国立研究開発法人理化学研究所
  - 発明者 : 磯野優, 宇治原徹, 角岡洋介, 高石将輝, 竹内一郎, 沓掛健太郎

# お問い合わせ先



**株式会社理研鼎業** (りけんていぎょう)

新技術説明会事務局

Email: [senryaku@innovation-riken.jp](mailto:senryaku@innovation-riken.jp)