

令和 6 年 6 月 8 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01681

研究課題名（和文）深層視覚運動学習による単結晶育成自動化の方法論の確立とその実証

研究課題名（英文）Automatic crystal growth by visuomotor learning

研究代表者

原田 俊太（Harada, Shunta）

名古屋大学・未来材料・システム研究所・准教授

研究者番号：30612460

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、浮遊帯域溶融法（FZ法）による単結晶育成の自動化を目指し、強化学習を用いた制御システムを開発しました。具体的には、観測画像から融液の状態を推定し、熟練オペレータの操業データを基にアルゴリズムを構築しました。ガウス混合モデル（GMM）により状態遷移モデルを構築し、Proximal Policy Optimization（PPO）アルゴリズムを用いて制御モデルを開発しました。結果として、FZ結晶成長の品質向上と高精度な自動制御が実現されました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

学術的意義：本研究は、強化学習を用いて浮遊帯域溶融法（FZ法）の単結晶育成を自動化する新たなアプローチを提供し、製造プロセスの効率化と高精度化に寄与します。ガウス混合モデル（GMM）とProximal Policy Optimization（PPO）アルゴリズムの融合により、結晶成長の理論的理解と実践的応用の架け橋となります。

社会的意義：本研究の成果により、高品質な単結晶の安定供給が可能となり、半導体デバイスの性能向上や製造コストの削減が期待されます。また、製造現場における熟練技術者の不足問題を緩和し、製造業全体の競争力強化に貢献します。

研究成果の概要（英文）：In this study, we aimed to automate single crystal growth using the Floating Zone (FZ) method by developing a control system based on reinforcement learning. Specifically, we estimated the state of the molten zone from observation images and built algorithms based on the operational data of skilled operators. We constructed a state transition model using the Gaussian Mixture Model (GMM) and developed a control model using the Proximal Policy Optimization (PPO) algorithm. As a result, we achieved improved quality and high-precision automatic control of FZ crystal growth. Further demonstration experiments with actual equipment are planned for the future.

研究分野：結晶成長

キーワード：単結晶育成 浮遊帯域溶融法（FZ法） 強化学習 ガウス混合モデル（GMM） プロセスインフォマティクス 自動化

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

結晶成長は複雑な現象であり、理論、実験、シミュレーションによって基礎学理が構築されている。しかし、製造現場や研究室では「職人技」が必要とされる芸術的側面が存在する。本研究では、この「職人技」を定量化し、ロバストではない条件でも安定した単結晶育成を実現する方法論を構築することを目指す。浮遊帯域溶融法 (FZ 法) は、坩堝を必要とせず、高純度の単結晶を育成する方法であり、高耐圧デバイス用 Si ウエハの製造にも利用されている。実際の育成では、オペレータがカメラで融液帯をモニターし、出力や上下軸の昇降速度を調整することで望ましい成長形状を実現する。この過程には融液の状態やネッキング操作などに熟練した技術が求められる。本研究では、FZ 法による単結晶育成に着目して研究を進めた。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、強化学習を用いて単結晶育成の自動化を実現することである。観測画像から融液の状態を推定し、熟練オペレータの操業データを基にアルゴリズムを構築することで、「見て」「判断し」「制御する」能力を持つシステムを開発する。

### 3. 研究の方法

最初に FZ 法による単結晶育成の操業データを収集する。このデータには、融液帯の形状や操業パラメータ (例えば、加熱電力や上下軸の昇降速度など) が含まれている。本研究では構築する操業予測モデルや操業制御モデルの検証を行うために FZ 法による結晶成長を模したエミュレータプログラムを作成し、手動で制御することによりデータの作成を行った。

次に、収集した操業データを用いて、状態遷移モデルを GMM により構築した。GMM は観測されたデータから融液帯の状態を推定するために使用され、次の時刻における融液帯の状態を予測するためのモデルである。その後、GMM により予測された状態を基に、Proximal Policy Optimization (PPO) という強化学習アルゴリズムを用いて制御モデルを構築した。PPO は、現在の状態から望ましい入力パラメータを推定し、そのパラメータに基づいてシステムを制御するためのモデルである。強化学習アルゴリズムの訓練には、オペレータが操作した実際のデータを含む教師データを用いた。これを基に強化学習モデルを訓練し、評価を行った。訓練過程では事前学習を行い、モデルが安定して学習できるようにした。最後に、実証実験の結果を分析し、提案する方法がオペレータの手動操作と比較してどの程度有効であるかを評価した。また、モデルの改善点や今後の課題についても検討した。

### 4. 研究成果

#### 4.1. GMM による状態遷移モデルの構築

本研究では、まず FZ 法による単結晶育成のオペレーターデータを基に、ガウス混合モデル (GMM) を用いて状態遷移モデルを構築した。GMM は、収集したデータから融液帯の状態を推定し、次の時刻における融液帯の状態を予測するために使用される。本研究で用いたデータには、融液帯の形状や操業パラメータ (加熱電力や上下軸の昇降速度など)

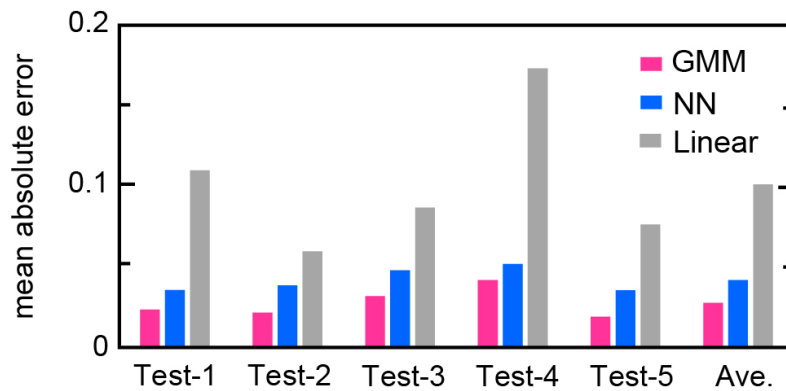


図 1. 学習に使用していない検証用データにおける GMM、ニューラルネットワーク (NN)、線形回帰モデルの平均絶対誤差[1]。

が含まれており、これらを入力とすることで、次の状態を高精度に予測するモデルを構築した。GMM による予測は、融液帯の複雑なダイナミクスを捉えることができ、状態遷移の精度を向上させるための重要な役割を果たした。次に、混合ガウス回帰を用いて FZ 結晶成長プロセスの操作軌道を学習し、その効果を検証した結果を紹介する。10 個の操作データのうち、半分を学習データとして、残り半分をテストデータとして利用した。実際の FZ 結晶成長を模擬するため、エミュレータプログラムを用いてネッキング操作を行い、その後は一定の直径で結晶成長を継続する操業軌道を準備した。GMM だけでなく、ニューラルネットワークや線形回帰モデルでも学習を行い、学習に使用していないデータセットで検証を行ったところ、線形回帰やニューラルネットワークに比べて、GMM が実際の操作軌道をより正確に再現していることが確認された (図 1)。このように、GMM を活用した回帰は、限られたデータからでも効果的に学習を行うことが可能なため、大量のデータを取得することが困難な製造プロセスの分析に適していることが示唆された。

#### 4.2 . 強化学習による制御モデルの構築

GMM により予測された状態遷移モデルを基に、Proximal Policy Optimization (PPO) という強化学習アルゴリズムを用いて制御モデルを構築した。PPO は、現在の状態から望ましい入力パラメータを推定し、そのパラメータに基づいてシステムを制御するためのモデルである。強化学習アルゴリズムの訓練には、オペレータが操作した実際のデータを含む教師データを用いた。訓練過程では、事前学習を行い、モデルが安定して学習できるように工夫した。

エミュレータプログラムを用いて、提案するアルゴリズムの性能を評価した結果、PPO による制御モデルは、オペレータの手動操作と比較して高精度な制御が可能であることが示された (図 2)。具体的には、融液帯の状態を正確に予測し、適切な操作パラメータを自動的に調整することにより、単結晶育成の品質が向上した。また、事前学習の効果により、訓練が効率的に進み、モデルの安定性が向上した。

#### 4.3 . 自動操業 FZ 結晶成長炉のプロトタイピング

本研究において実証された FZ 結晶成長の自動化を実機実証するために FZ 法による結晶成長炉のプロトタイピングを行った。実際に Si 単結晶の製造に用いられる高周波加熱式の FZ 結晶成長炉の操業を強化学習で制御するための操業データ取得、自動制御システ

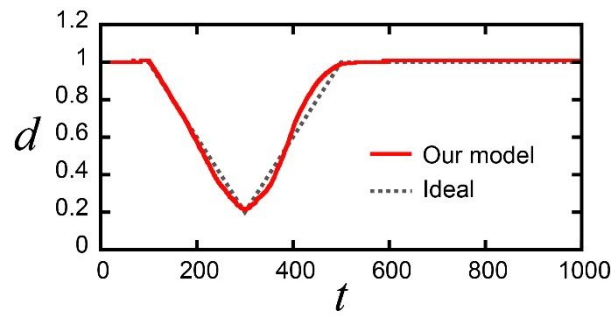


図 2. PPO による自動操作の結果[2]。

ムを構築した。研究期間内に実操作を自動化するには至らなかったが、引き続き Si 単結晶成長の自動操作に取り組んでいく。

#### 参考文献

- [1] R. Omae, S. Sumitani, Y. Tosa, S. Harada, Sci. Tech. Adv. Mater. Methods 2 (2022) 294.
- [2] Y. Tosa, R. Omae, R. Matsumoto, S. Sumitani, S. Harada, Sci. Rep. 2023 13 (2023) 7517.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Omae R., Sumitani S., Tosa Y., Harada S.	4. 巻 2
2. 論文標題 Prediction of operating dynamics in floating-zone crystal growth using Gaussian mixture model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 294 ~ 301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2107884	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 炭谷 翔悟、西田 陽良、原田 俊太	4. 巻 66
2. 論文標題 品質管理へのAI活用の現状と展望	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 システム / 制御 / 情報	6. 最初と最後の頁 161 ~ 166
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11509/isciesci.66.5_161	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tosa Yusuke, Omae Ryo, Matsumoto Ryohei, Sumitani Shogo, Harada Shunta	4. 巻 13
2. 論文標題 Data-driven automated control algorithm for floating-zone crystal growth derived by reinforcement learning	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7517
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-023-34732-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 原田 俊太、土佐 祐介、大前 遼、松本 遼平、炭谷 翔悟	4. 巻 51
2. 論文標題 混合ガウスモデルと強化学習を用いたFZ結晶成長の自動制御	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 日本結晶成長学会誌	6. 最初と最後の頁 51-1-04
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.19009/jjacg.51-1-04	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 原田俊太, 土佐祐介, 大前遼, 松本遼平, 炭谷翔悟
2. 発表標題 混合ガウスモデルと強化学習による浮遊帯域溶融法による結晶育成自動化の検討
3. 学会等名 第51回結晶成長国内会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 土佐 祐介, 炭谷 翔悟, 大前 遼, 原田 俊太
2. 発表標題 強化学習を用いた浮遊帯域溶融法による結晶成長の自動制御モデルの構築
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大前 遼, 炭谷 翔悟, 土佐 祐介, 原田 俊太
2. 発表標題 混合ガウスモデルを用いた浮遊帯域溶融法における融液状態のダイナミクス推定
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shunta Harada, Yusuke Tosa, Ryo Omae, Ryohei Matsumoto, Shogo Sumitani
2. 発表標題 Data-Driven Modeling and Adaptive Optimization of Floating Zone Crystal Growth Process Applying Gaussian Mixture Model and Reinforcement Learning
3. 学会等名 2023 MRS Spring Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Shunta Harada, Yusuke Tosa, Ryo Omae, Ryohei Matsumoto, Shogo Sumitani
2. 発表標題 Data-Driven Automated Control Algorithm for Floating-Zone Crystal Growth Using Reinforcement Learning
3. 学会等名 ICCGE-20 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 原田俊太
2. 発表標題 製造プロセスの制御への強化学習の応用ー浮遊帯域溶融法による結晶成長を例に
3. 学会等名 半導体の結晶成長と加工および評価に関する産学連携委員会第3回「DX と AI がもたらす半導体基板製造の革新」(招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関