

機械学習を用いた
グレイボックスアプローチ

Gray Box Approach with Machine Learning

白谷 正治



Masaharu SHIRATANI

1988年 九州大学工学部

現 在 九州大学大学院システム情報科学研究院

連絡先；〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡744

E-mail siratani@ed.kyushu-u.ac.jp

近年、機械学習や量子アニーリングを用いたプロセスの最適化や制御の重要性が増している。これらの技術の主な目的は、データに基づいて迅速に状態を把握し、制御することや、問題点の発見、新たな可能性の探索である。特に、機械学習や量子アニーリングは、プロセスの物理・化学的な詳細を明示しないブラックボックスアプローチとして機能する。一方、従来の物理・化学プロセスを微分方程式やモデリング、シミュレーションで説明するホワイトボックスアプローチも広く用いられている。これらにはそれぞれ利点と課題があるが、ここではそれらを統合したグレイボックスアプローチの活用を推奨する。

グレイボックスアプローチは、機械学習と従来の物理モデルの長所を組み合わせ、プロセスの理解と制御に新たな視点をもたらす。例えば、プラズマプロセスによる薄膜形成のような応用では、ブラックボックスアプローチではプロセスの入力と結果を直接結びつけるのに対し、グレイボックスアプローチはプロセス内部のパラメータに着目し、それらと結果の関係を段階的に分析する。具体的には、プロセスの入力、内部パラメータ、そして結果との相互の関係を個別に解析し、機械学習を繰り返し適用することで、プロセス全体への理解を深める。さらに、この解析に加えてモデリングやシミュレーションを並行して行うことで、部分的にホワイトボックス的な要素も取り入れることが可能である。

半導体製造の前工程の70%以上を占めるプラズマプロセスにおいても、機械学習の応用への関心が高まっている。機械学習を用いることで、プラズマ表面相互作用に関する包括的な理論モデルが存在しない場合でも、実験結果に基づいてその相互作用やプラズマ誘起表面効果をモデル化することが期待されている。具体例として、TEOSを原材料とするプラズマCVD法を用いたSiO₂薄膜の形成が挙げられる。

TEOSのプラズマCVDでは、TEOSの解離は1) 電子衝突、2) Oとの反応、および3) 準安定Arとの反応など複数の過程が存在し、成膜条件によりこれらの過程の重要性が変化する。また、同時に膜質も変化する。従来の研究開発では試行錯誤的なアプローチが主流であったが、所望の膜質のSiO₂膜を生産性高く作製する条件の探索には多く

の労力が必要であった。この課題を克服するために、機械学習に基づくSiO₂薄膜の特性予測アプローチが提案されている。発光分光法(OES)は、化学的に複雑な反応性プラズマを非侵襲的に測定できる強力な診断ツールの一つである。OESデータには、プラズマの内部パラメータに関する情報が含まれており、薄膜特性の予測において有用である。

例えば、プラズマの発光スペクトルを入力とする勾配ブースティング決定木モデルによる機械学習では、SiO₂薄膜の特性を予測することができる。この方法で、OESデータと薄膜堆積速度や膜中OH密度などとの複雑な相関を捉えることができる。さらに、予測モデルから得られた特徴量の重要度を解析して数理モデルを構築することで、OESデータを膜特性の制御に活用できる。これが、グレイボックスアプローチの一例である。

もちろん、グレイボックスアプローチはブラックボックスアプローチに比べて労力やコストがかかるが、それを補う利点がある。この手法は、装置の単純な最適化にとどまらず、次世代の装置開発や異なる装置・プロセス間の共通点や相違点を把握する際にも有効である。また、装置に依存しない一般的な数理モデルの構築や、より複雑なプロセスの制御にも大きく貢献するだろう。

また、相関と因果関係の明確化も重要である。このために、物理現象の時空間や周波数空間での変化を測定し、それらの相関や因果関係を分析することが求められる。異なる手法で同じ物理量を測定することで、より信頼性の高い相関を得たり、因果関係の確認が可能である。私が研究しているプラズマプロセス分野でも、これらの方法が有効であり、機械学習とこれらを組み合わせることでさらなるブレークスルーが期待される。

最後に、グレイボックスアプローチは、今後の科学技術に大きな貢献が可能であり、化学工学のさらなる発展を目指す、一つの方向性だと考えている。