

エンジニアの知識と機械学習の融合

シリコンエピタキシャル成長プロセスへのベイズ最適化応用

沓掛 健太郎^{*}, 長田 圭一^{**}, 松井 孝太^{***},
山本 純^{****}

逐次最適化のための機械学習法であるベイズ最適化は、探索と活用をバランスよく行う最適化手法として、広く応用されている。本稿では、はじめにベイズ最適化の概要を解説したあと、実際の

実験へのベイズ最適化の応用として、シリコンエピタキシャル膜の成長条件の最適化への適用を紹介する。特に、エンジニアがもつ専門知識や経験の活用を中心に説明する。

1. まえがき

近年、機械学習を活用した研究開発が活発化している。応用物理に関連した分野においても、材料データベースに基づいて未知の材料を探索するマテリアルズインフォマティクスや、計測信号から有用な情報を抽出する計測インフォマティクスなど、さまざまな応用が進められている。これらの機械学習応用では、与えられたデータに対して有用な法則を導くこと（受動学習）が基本形である。

一方、今あるデータから機械学習によってよりよい条件を求めてデータの取得を繰り返す、データをアクティブに取得する能動学習の応用も進んでいる。効率よく逐次的に条件探索を進めることで、より少ないコスト（実験回数）でよりよい結果を得ることができる。マテリアルズインフォマティクス関連の応用では、原子・分子シミュレーションにおける安定構造の最適化¹⁾や、新規材料の効率的な探索²⁾に用いられている。本稿では、能動的なデータ取得に基づく逐次最適化のための代表的な機械学習手法であるベイズ最適化について、概要を解説したあと、筆者らが進めている実際の実験へのベイズ最適化応用の事例として、シリコン (Si) エピタキシャル成長のプロセス条件の最適化³⁾を紹介する。ベイズ最適化の理論的・数学的な解説は専門の論文⁴⁾や教科書⁵⁾に譲り、本稿では実際の実験に应用する際に、どのようにして専門知識を活用するかに焦点を絞って解説する。

2. ベイズ最適化

条件 X を入力し、結果 Y を出力する関数 F を考える。最適化は、 Y を最小（もしくは最大）にする X を求めることである。応用物理に関連した例では、 X を理論モデル式のパラメータ、 Y を実験結果との差とすれば、最適化（いわゆる

フィッティング）によって、実験結果を最もよく表すパラメータ値を得ることができる。また、 X を材料の作製条件、 Y を材料の特性値とすれば、最適化によって特性値を最大にする作製条件を得ることができる。しかし、関数 F が未知である場合に最適化を行うためには、条件 X を変えて結果 Y を求めるといった試行を繰り返す必要がある。結果 Y を観測することは、シミュレーションでは1回の計算を、材料作製では1回の実験を行うことに相当し、それぞれコストがかかるため、できるだけ少ない試行回数でよりよい結果を得ることが望まれる。そのためには、これまでの経験からよいと予測される条件の「活用」と、まだ試行していない未知の条件の「探索」の両方を考慮することが重要である。最適化の手法には、勾配法や遺伝的アルゴリズムなどさまざまな方法があるが、本稿で取り上げるベイズ最適化は、未知関数を推定するだけでなく、推定に対する不確実性を同時にモデリングすることで、活用と探索をバランスよく行うことができる点に強みがあるといえる。ここでは、図1に示すベイズ最適化のフローチャートおよび条件 X が1次元の場合の例を見ながら、ベイズ最適化において最適化が進む様子を説明する。

2.1 実験・評価と問題設定

実験条件パラメータ X が1個（1次元）の系において、ある条件値 X で実験を行い、その結果を評価することで特性値 Y が得られる試行を考える。この試行は図1(b)のように、真の関数（実験者には不明）において、 X に対応する Y を1つ取得する（赤丸を打つ）ことに対応する。ここで今、特性 Y が最小となる条件 X の値を得ることを目的として、最適化を行うことを考える。なお、図1(b)ではすでに4回の初期試行が行われており、ここでのベイズ最適化は5回めの試行から開始する。

^{*} 国立研究開発法人理化学研究所 革新知能統合研究センター 〒103-0027 東京都中央区日本橋 1-4-1 日本橋一丁目三井ビルディング 15階. 分類番号 1.8, 12.6 e-mail: kentaro.kutsukake@riken.jp

^{**} 名古屋大学 未来材料・システム研究所 〒464-8603 名古屋市中種区不老町.

^{***} 名古屋大学 大学院医学系研究科 〒466-8550 名古屋市中昭和区鶴舞町 65.

^{****} グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社 〒745-0862 周南市江口 2-1-32.

Application of Bayesian optimization for experimental conditions of film deposition. Kentaro KUTSUKAKE^{*}, Keiichi OSADA^{**}, Kota MATSUI^{***}, and Jun YAMAMOTO^{****}.

^{*} Center for Advanced Intelligence Project, RIKEN (1-4-1 Nihonbashi, Chuo-ku, Tokyo 103-0027)

^{**} Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University (Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya 464-8603)

^{***} Department of Biostatistics, Nagoya University Graduate School of Medicine (65 Tsurumai-cho, Showa-ku, Nagoya 466-8550)

^{****} GlobalWafers Japan Co., Ltd. (2-1-32 Eguchi, Shunan 745-0862)