OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	The development of the fast optimization method in bulk crystal growth process using data science-integrated transport phenomena
Author(s)	竹原, 悠人
Citation	大阪大学, 2023, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/95946
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　　名　（　竹原　悠人　）	
論文題名	The development of the fast optimization method in bulk crystal growth process using data science-integrated transport phenomena （データ科学を融合した移動速度論によるバルク結晶育成プロセスの高速最適化手法の構築）

論文内容の要旨

化学工学における製造プロセスでは装置内の移動現象が製品の品質を大きく左右するため、移動現象の解析と制御は非常に重要である。一般的な製造プロセスでは装置内の移動現象を直接観察することが困難であるため、これまで経験に基づいたブラックボックス的な制御や数値計算による解析と制御法の提案が行われてきた。しかし、数値計算自体に時間がかかることに加え、製造プロセスには多くの操作パラメータが存在するため、それらを最適化することは長大な時間と費用を要する。さらに装置内の物理量は分布を有し、それら自身が強い非線形性を示すために、最終製品品質の向上に必要な移動現象の特定も同様に困難である。そこでこれらの制御法の提案と解析をデータに基づいた高度な手法へと転換することで、対象のプロセスに顕在する重要な移動現象を抽出し、その制御を可能にする高速な最適化手法の構築を目指した。

本研究では上記の問題を有するプロセスの一例として、バルク結晶成長プロセスを選んだ。バルク結晶成長プロセスは液相から結晶を作製するプロセスであり、液相の流れ、温度、濃度分布が結晶品質に影響を与える。はじめに、迅速な制御手法の提案を可能とする高速な最適化をベイズ最適化により実行した。次に、結晶成長速度に影響を与える移動現象の自動抽出を説明可能機械学習により実現した。最後に高速な解析手法をPhysics Informed Neural Networkを実現した。これらの手法を組み合わせることにより、実験中にプロセスを解析し、その結果に基づいた制御手法を迅速に提案することが可能となる。本結果は結晶成長プロセスだけでなくあらゆるプロセスにも適用可能であるため、化学工学における制御を革新するものとなりうる。

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　　名　（　竹原　悠人　）		
	（職）	氏　　名
論文審査担当者	主 査　教 授	岡野　泰則
	副 査　教 授	北河　康隆
	副 査　教 授	境　慎司
	副 査　研究員	沓掛 健太朗　（理化学研究所 革新知能統合研究センター）

論文審査の結果の要旨

化学工学における製造プロセスにおいて、装置内の流動、伝熱、物質移動等の諸移動現象は最終製品の品質に重要な影響を及ぼすことが広く知られている。そのため、所望の品質の製品を製造するためにはこれらの移動現象の理解と厳密な制御が必須である。しかしながら一般的に、製造プロセスでは装置内の移動現象を直接観察することが困難であるため、これまで経験に基づいたブラックボックス的な制御や数値計算による解析と制御法の提案が行われてきた。しかし、現状の数値計算には多大な時間を要するため、その場観察手法として使用することは困難であり、加えて製造プロセスには多くの操作パラメータが存在するため、それらを最適化するためには経験に基づいた試行錯誤や装置内をブラックボックスとして取り扱う制御手法が用いられているのが現状である。これに対し、本論文では化学工学で古くから用いられてきた移動速度論に新たに人工知能に代表されるデータ科学を融合することにより、諸移動現象のその場観察を行いつつ高度な制御を行う手法の開発に取り組んだ。ここではプロセスの一例として、バルク結晶成長プロセスを選んだ。

まず炭化ケイ素（SiC）の磁場印加液相成長法についてについてベイズ最適化を適用した。これにより125通りの試行をわずか20%の試行で最適なパラメータの組み合わせを選定することに成功した。バルク結晶成長プロセスは液相から結晶を作製するプロセスであり、液相の流れ、温度、濃度分布が結晶品質に影響を与える。はじめに、迅速な制御手法の提案を可能とする高速な最適化をベイズ最適化により実行した。次に、結晶成長速度に影響を与える移動現象の自動抽出を説明可能機械学習により実現した。手法としては畳み込みNeural Networkを適用し、数値データを使わずとも、液相内のどの部分の移動現象が重要であるかを抽出することに成功した。その結果従来重要であるとされていた結晶真下の境界層だけではなく、結晶からはるか離れた深部の上昇流も結晶濃度の均一性に重要な影響を及ぼすことが分かった。最後に数値計算自体の高速化をPhysics Informed Neural Network（PINNs）を用いて実現した。これにより、実験中のプロセスをその場で解析し、その結果に基づいた制御手法を迅速に提案することが可能となることを示した。

本研究及び本論文はこれまでの移動速度論とは一線を画した正に新しい移動現象論の構築とも言えるものであり、博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。