

# 材料プロセス開発における実践的なベイズ最適化 ～CVD 法によるエピタキシャル Si 成長を例に～

理化学研究所 沓掛健太郎

近年あらゆる分野で、機械学習をはじめとする情報科学技術を援用した研究開発が進められている。機械学習には様々な目的・手法・応用があるが、そのひとつに、「次のデータをどの条件で取得すべきか」という問題に対して、得られる結果の予測確率に基づいて条件を決めるアプローチがある。このうち、データ取得と次の条件決定を交互に繰り返す逐次最適化において、目的とするパラメータの値を最大化（もしくは最小化）するための方法がベイズ最適化 [1]である。ベイズ最適化は、これまでに取得したデータから有望であると予測される条件で実験を行うこと（活用）と、まだ実施していない条件で実験を行うこと（探索）とをバランス良く行うことが特徴であり、より少ない実験回数でより良い条件を得ることができる。従来、機械学習のハイパーパラメータ調整やシミュレーションでの条件最適化に多く用いられてきたが、材料プロセス条件の最適化など、実際の実験に対しても活用が広がっている。

本講演では、ベイズ最適化を化学気相堆積法（CVD）によるエピタキシャル Si 膜の成長プロセス条件の最適化へ応用し、成膜品質を維持しながら、成長速度を約 2 倍に高めた事例 [2]を紹介する。この研究では、限られた実験回数や特性評価に要する時間・コスト、装置エラーが発生する条件などを考慮するため、状況に応じて複数の制約を使用した。さらに、ベイズ最適化による大域的な最適化と、プロセスエンジニアの専門的な知識・経験を生かした局所的な最適化を組み合わせるなど、実践的な応用手法を考案・検討することで目的（成長速度 2 倍）を達成した。

[1] B. Shahriari, et al., Proceedings of the IEEE, 104, 148 (2016).

[2] K. Osada, et al., Mater. Today Commun. 25, 101538 (2020).