

半導体製造における装置データを用いた
プロセス制御および要因分析の高度化に関する研究

2025 年

平井 都志也

目次

第一章 序論	5
1.1 研究の目的	5
1.2 研究の背景	6
1.2.1 自動化における課題	6
1.2.2 半導体開発の歴史	7
1.2.3 装置データの収集	10
1.2.4 測定データの活用	11
1.2.5 装置データの活用	13
1.2.6 データ活用のトレンド	15
1.2.7 半導体業界における従来の開発実績	17
1.3 論文の構成	19
第二章 局所的重み付け PLS を用いた半導体仮想計測	21
2.1 研究の背景と目的	21
2.2 対象装置と特徴	22
2.2.1 ドライエッチ装置	22
2.2.2 CMP 装置	24
2.2.3 Equipment Engineering System	27
2.2.4 Virtual Metrology	27
2.3 Virtual Metrology 構築	30
2.3.1 ジャストインタイムモデリング (JIT モデリング)	30
2.3.2 PLS と VIP	31
2.3.3 局所的重み付け PLS (LW-PLS)	33
2.4 実データによる検証	36
2.4.1 ドライエッチ装置向け Virtual Metrology 構築	36
2.4.1.1 代表値	36
2.4.1.2 外れ値除外	37
2.4.1.3 入力変数選択	38
2.4.1.4 Virtual Metrology による代替計測	39
2.4.2 CMP 装置向け Virtual Metrology 構築	42
2.4.2.1 入力変数選択	42
2.4.2.2 Virtual Metrology による推定	43
2.5 考察	45
2.6 まとめ	46
第三章 多変量解析による半導体製造装置の異常検知	48
3.1 研究の背景と目的	48
3.2 対象装置と特徴	49
3.3 異常検知のための特徴量	50
3.3.1 装置データ	51
3.3.2 特徴量	53

3.4 実データによる検証	58
3.4.1 単変量検知モデル	59
3.4.2 多変量検知モデル	60
3.5 考察	62
3.6 まとめ	63
第四章 半導体製造条件決めにおける評価実験の最適化のための実験計画	65
4.1 研究の背景と目的	65
4.2 対象装置と特徴	65
4.3 実験計画の手法	66
4.3.1 実験計画	67
4.3.2 D 最適計画	68
4.3.3 決定的スクリーニング計画	68
4.4 評価のための仮想装置モデル	69
4.4.1 仮想装置モデルの構築	69
4.4.2 仮想装置モデルを用いた評価手順	71
4.5 検証	73
4.5.1 実験計画	73
4.5.2 少数因子実験計画	74
4.5.3 予測モデルと最適化	74
4.5.4 実験結果 (18 因子)	75
4.5.5 少数因子実験結果 (9 因子)	76
4.6 考察	77
4.7 まとめ	78
第五章 平均値置換寄与による製造装置の異常原因因子の特定	80
5.1 研究の背景と目的	80
5.2 対象装置と特徴	81
5.3 原因因子特定の手法	83
5.3.1 T^2 統計量・Q 統計量と寄与	83
5.3.2 RBC	84
5.3.3 ランダムフォレスト重要度	84
5.3.4 平均値置換寄与	85
5.4 実データによる検証	88
5.4.1 評価用データ	88
5.4.2 テストデータのサンプリング	90
5.4.3 評価指標	90
5.4.4 結果	92
5.5 考察	94
5.6 まとめ	95
第六章 結論	96
6.1 本研究のまとめ	96
6.2 今後の課題	97

謝辭	99
略語一覽	101
参考文献	103

第一章 序論

1.1 研究の目的

半導体の装置データを収集するためのインターフェースであるEDA(Equipment Data Acquisition)が導入される以前の半導体製造は、ウェハを加工した後の製品出来栄の測定データと目標値との差が最小になるように、製造条件を調整し装置を制御してきた。例えば、回路を描画するシステムである露光装置の露光エネルギー量を増減すると、線幅が変化する。線幅への効果において露光エネルギー量が支配的であった時代は、比較的容易に良品が得られていた。しかし、半導体の微細化が進むと、これまで線幅への影響が軽微であった装置部品の消耗などの因子の影響が顕在化してきた。これにより一つの因子のみによる管理では、十分な製品出来栄を得ることが難しくなっている。

一つの因子のみを制御すれば良品が作れるのなら、半導体製造装置の大部分は無人化できる。しかし、多くの因子が制御に影響を及ぼしている近年の装置は、装置メーカーの専門家であっても、取り扱いが容易ではない。化学・物理といった半導体のドメイン知識しか持たない工場エンジニアが、この対処を強いられている。

装置はレシピ中のパラメータを着工毎に調整する必要があり、履歴データからパラメータを算出するR2R control(Run-to-run control)が用いられる。ウェハを平坦化するシステムである化学機械研磨(Cheical Mechanical Polishing: CMP)装置の研磨時間を着工毎に増減させ、目標の膜厚に仕上げるのに使われる。微細化により、これまでは無視できていた研磨パッドの消耗やスラリの温度が、膜厚の増減に影響を与えるため、これらを含めた制御が必要となってきた。これらの因子は装置の制御に使われているが、EDA経由でホストに収集することで、R2R controlや異常監視に利用できる。

本研究の目的は、半導体製造において、装置データを分析することで、異常検知・原因特定・予測・最適化を高精度に実現するためのモデリング戦略を検討し、半導体製造のCore Systemである製造装置に対し、その機能を補完するFab-wide Control Systemを構築することで、無人化を推進し半導体の微細化に寄与する。

Fab-wide Control Systemの構築とは、製品出来栄の測定データとEDAから取得される装置データからモデルを構築し、プロセス制御を実現することである。製造条件の変更だけでは補えない、装置の劣化といった要因を特定し装置を正常状態に戻すことを支援する。

本研究は半導体に限らず、リチウムイオンバッテリーといった先端的处理へのモデリングの適用を想定しており、これらの事例も交えつつ、多くの製造処理へ容易に応用でき汎用的な手法の構築を目指している。

1.2 研究の背景

半導体の進化とともに、あらゆる分野でAIによる自動化が進み、やがて多くの雇用が奪われると危惧されているが、少なくとも著者が属する半導体業界では人が減ったという実感はない。これは半導体業界における自動化が、必ずしも完全無人化には至っていないことによる。本章では、エンジニアの手助けを不可欠とする半導体製造装置の自動化の課題に触れ、その解決のために製造装置のモデル化を進める必要性、またモデルの精度を左右する装置データを高精度で大量に収集する方法、さらにそれらを実装するコンピュータシステムについて述べる。

1.2.1 自動化における課題

技術の進化により、10年後には既存の職業の25%以上がAIやロボットに置き換わり、大量の技術的失業を生むと言われているが、これは今に始まった話ではない。これまで自動化により職務の一部を代行されることで、人間の労働は失われてきた。しかし関連分野に新たな雇用を生み出し、失業者が増えるどころか減ってきている。

例えば銀行のコンピュータ化により、現金の預け払いは支店窓口から自宅でのオンライン決済やコンビニのATMに置き換わり、窓口担当者は減少してきた。しかし顧客をバックアップするサポート担当やコンサルティング担当の増加により、雇用はむしろ増えており、併せて顧客の利便性も高まる好循環を生んできた。自動化は雇用を失うのではなく、業務を置き換えることで、人間を過酷な労働から解放し、オフショアやワーケーションといった多様な就業形態を生み、むしろ社会の豊かさを増している。

考慮すべきは、業務スタイルの変化により人が十分対処できない部分を手助けする、Fab-wide Control Systemを用意することである。窓口担当者が、これまでに経験したことのない金融の専門知識が必要となった際に、瞬時に情報を提供してくれるタブレット端末を持つことで、抵抗なく職務移行することができる。これを欠いてしまうと、せっかくの自動化も機能せず、逆に合理性を失ってしまう。

半導体業界でも、実社会を上回る速度で自動化が行われてきた。微細化を実現するた

めの装置の自動化により、多くの業務が失われてきた。しかし配置変更により工場の従業員は解雇されるどころか、むしろ増加の一途にある。これまでクリーンルームでウェハを手搬送していた従業員が、自動化された後はオフィスでコンピュータに向かい、装置を遠隔制御するようになってきた。

1.2.2 半導体開発の歴史

半導体産業は短期的に好況・不況の波を繰り返しながら成長する特異な業種である。猛威を振るったコロナ禍においては、テレワークの増加によるノートパソコンの需要増加、公共交通機関を避けるための自家用車の需要増加により、一時は半導体不足による操業停止といった事態が生じ、反面ノートパソコンの需要が一巡すると急速に半導体の需要が低下する事態に見舞われた。しかし、IoT・AI・5G・ビッグデータといった世界的なデジタル移行を追い風に、中長期的な視点において半導体需要は高いものと推察され、2023年に6,000億ドルとされる市場規模は2032年に20,000億ドルまで成長すると予測される[1]。

半導体の性能を決定する製造装置によるウェハの処理(プロセス)は、主にトランジスタを作る素子形成と素子同士をつなぐ配線形成に分けられ、各々を繰り返すことで1,000を超える工程を経て製造される。Fig. 1に半導体ウェハ処理の流れを示す。

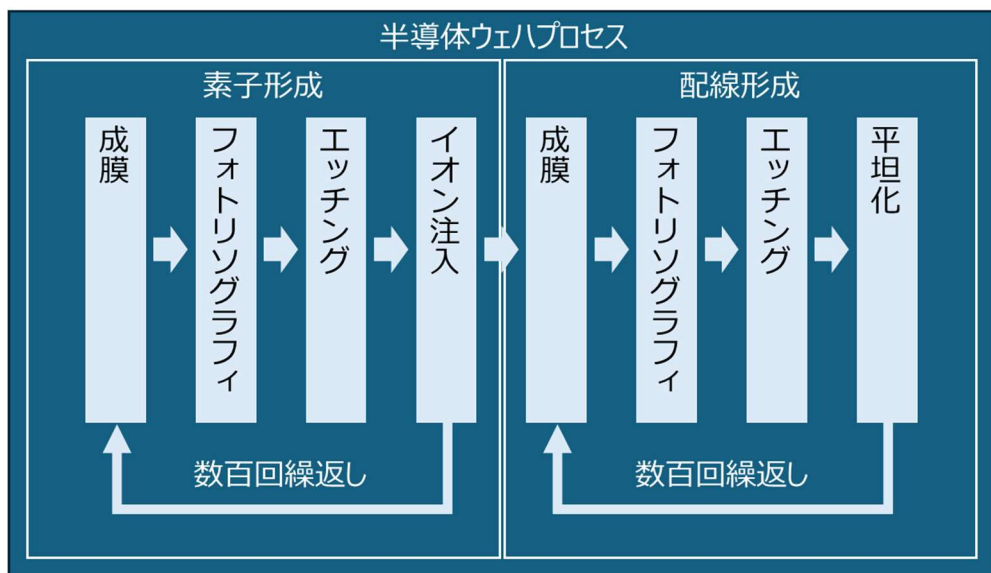


Fig. 1 半導体ウェハ処理

このように同じ工程を数百回繰返し製造されるため、その中の1台の装置に異常があるとウェハ処理全体に影響を及ぼし、生産性の低下による収益の悪化を招くことになる。そのため、製造装置には高い信頼性が要求される。

加えて半導体は、微細化を追求することで1枚のウェハから取れる収率が高くなり、収益を向上することができる。この微細化を説明するのに、インテル社の創業者のひとりゴードン・ムーア氏が提唱した、ムーアの法則と呼ばれる指標がある。Fig. 2は各年の先端マイクロチップに実装されたトランジスタの集積化の推移を示している。ムーアの法則は、半導体のトランジスタの集積が18~24か月で2倍になると定義しており、実際その通りに微細化が進んできた。半導体デバイスメーカーは他社に遅れをとることがないように、この法則に従い設計を進めているため、潮流に追従できない会社は集積化で後れを取り、収益が下がることで淘汰されてきた。

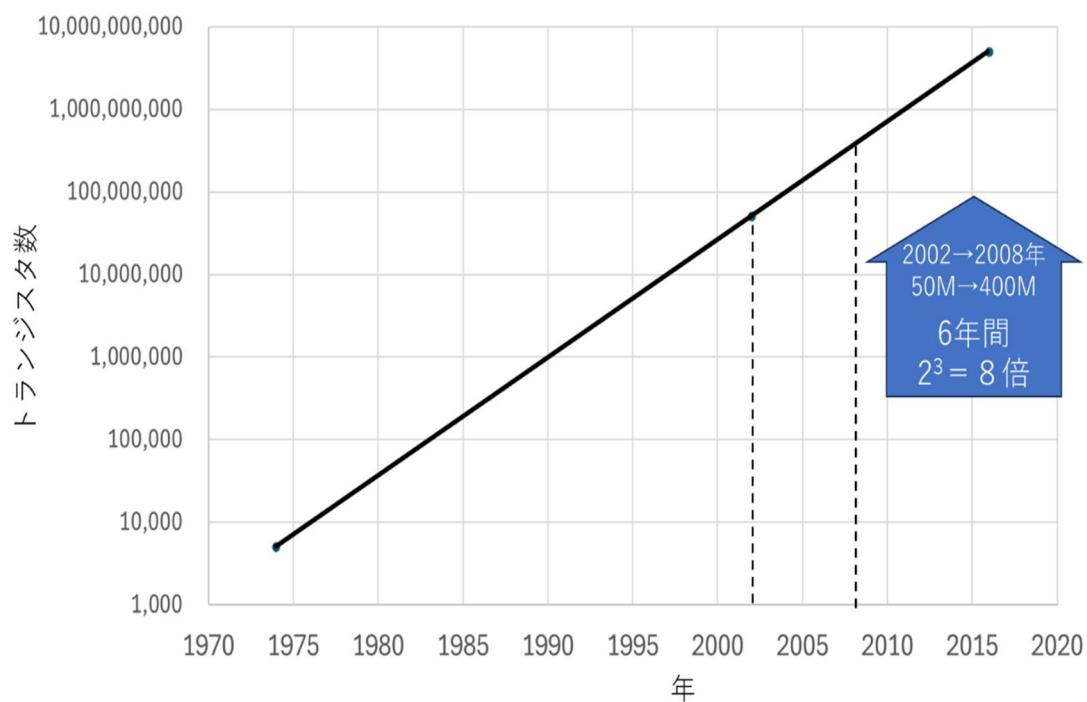


Fig. 2 トランジスタの集積化の推移

高い信頼性と微細化への追従を余儀なくされた半導体デバイスメーカーは、製造装置に対して高い性能を要求することとなり、装置の価格は高価となる。最先端の露光に用いられる高NA(開口数)極端紫外線露光装置(Extreme Ultraviolet: EUV)は、Fig. 3に示すように、反射型レチクルを採用するなどの技術採用が必要となり1台3億5000万ユーロ

(約550億円)の投資を要する。高い信頼性と微細化のためにこの装置を購入した半導体デバイスメーカーは、装置の償却費に見合う生産性が要求されることから、製造装置の稼働率を高い水準に維持することが強く求められる。

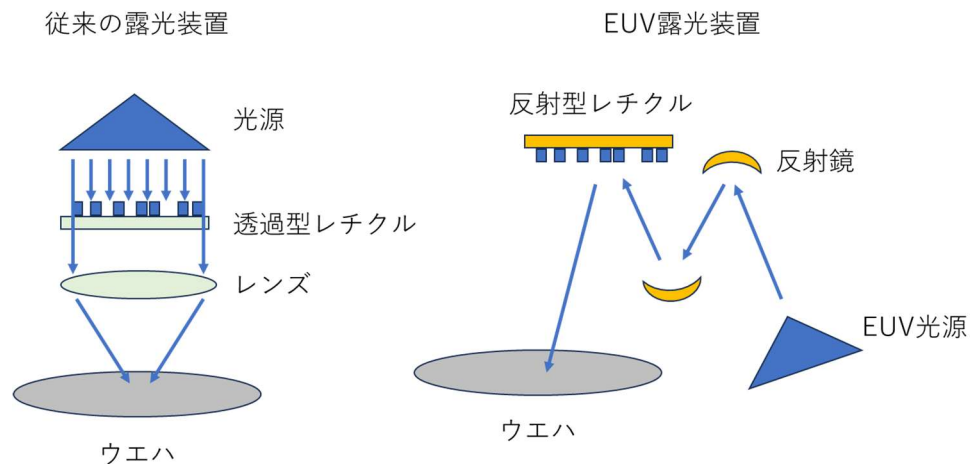


Fig. 3 EUV露光装置の露光原理

製造装置とは別に、生産性の向上を目的に半導体の回路を形成するシリコンウエハの大口径化も進められてきた。Fig. 4はシリコンウエハの口径の変移である。現在主流の半導体は、直径300mm径のシリコンウエハを用いて製造されている。1970年代にインテル社は50mm径のシリコンウエハでメモリを製造していた。その後1980年代に入ると150mm、1990年代に200mm、2000年代に300mmウエハが導入され現在に至っている[2]。

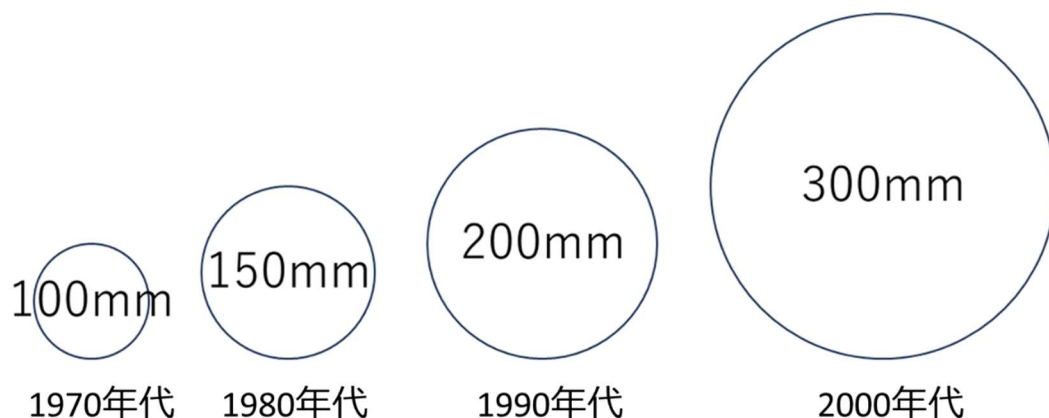


Fig. 4 シリコンウエハ直径の変移

その後も大口径化の検討は進み、450mm ウェハの導入が計画された歴史があるが、2027年に世界最先端のロジック半導体の量産を計画するRapidus社においても300mm ウェハを採用することから、大口径化は300mmで節目を迎えたと言える。

1.2.3 装置データの収集

90年代までの半導体製造装置は、装置メーカーが技術を秘匿するために大半の装置データを公開していなかった。筆者は半導体の微細化を目の当たりにする中で、人の感覚に頼る装置制御はいずれ限界が来ると考え、装置から精度の高いデータを十分な量取得し、それをモデル化することで工場のホストシステムから装置を制御する必要性を感じた。この課題に取り組むべく、著者は国内コンソーシアムであるSelete社に出向し、同社メンバと共にEDAの開発を進め、世界の主要デバイスメーカーに働きかけ、共同で2004年EDAの国際SEMI(Semiconductor Equipment and Materials International)規格を成立させた。

EDAの普及は、国内外のデバイスメーカーが300mm ウェハを採用する工場を立ち上げる時期(2001~2005年)と重なり、装置メーカーにとって300mm ウェハという新たなプラットフォーム開発に取り組む必要性から、その1テーマとして取り込まれた。EDAは製造装置の生産性を高めることを目的として、装置の処理状態、稼働状態などのデータを収集し、ネットワークを経由してデータ解析アプリケーションに提供するインターフェースの標準規格となり、今日においても半導体製造における、データ収集の基盤となっている[3]。

Fig. 5はEDAを検討する際に、国策プロジェクトとして半導体技術開発を進めていたSelete社が検討した、装置データ収集のイメージである[4]。EDAが導入されるまでの半導体工場は、基幹システムに位置づけられるMES(Manufacturing Execution System)が装置との間でGEM(Generic Model for Communications and Control of Manufacturing Equipment)と呼ばれる通信規格を用いて生産指示を行い、製造後はその実績である装置データを収集していた。ところがGEMによる通信は、MESからの制御指示を送信することに重きを置いたため、装置データの収集も可能ではあったものの、活用に十分な量のデータを集めるものではなかった。GEMに代わる新たなインターフェースであるEDAのデータ量は、GEMの数百倍になることが想定されたため、収集先であるEES(Equipment Engineering System)サーバや、経路となるネットワークは、生産指示を担うMESから独立した系統を用意し、ウェハ流動の遅延を生じることがないように配

慮した。

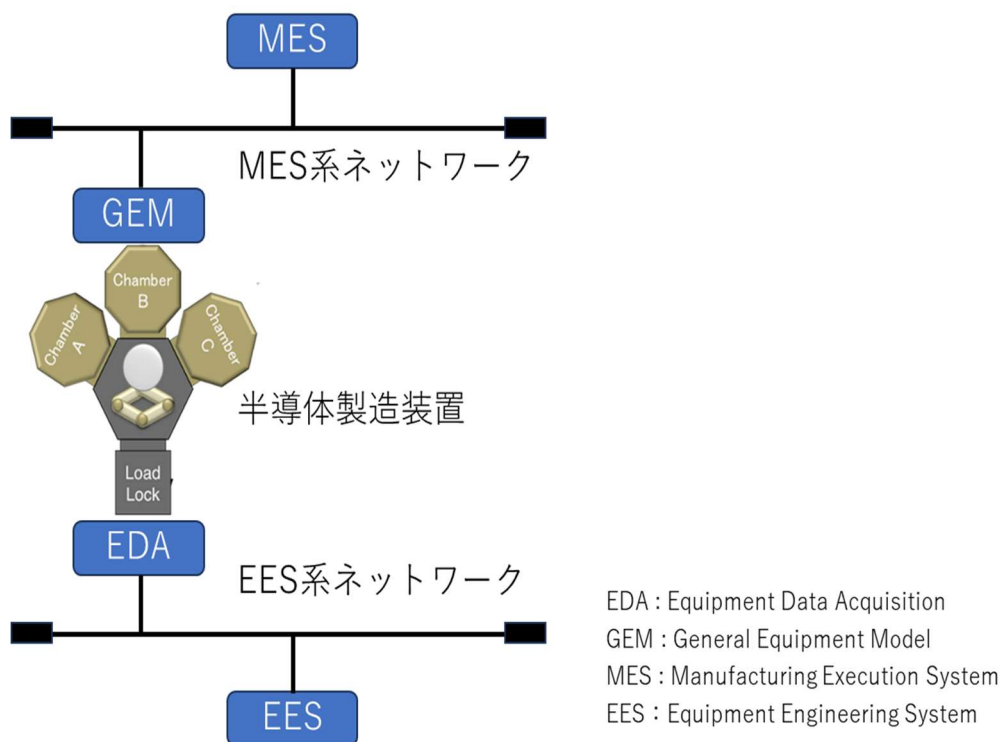


Fig. 5 EDAを用いた装置データ収集構造

EDA経由で入手した膨大なデータは、AIや機械学習を用いたデータ解析への利用を目的の一つとしているが、装置データをモデル化する手法は、半導体業界で一般化される以前から、化学業界や鉄鋼業界でも実用化されていた[5-9]。これらの業界では1990年代になると、人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network: ANN)が非線形モデルを構築する手段として広く適用されるものと考えられていた。しかし当時の製造装置は、製造条件を大きく変化させることでこれまでの出来栄えとの継続性を失うことを嫌気し、狭い範囲での操作に留まっていたことから、多くの場合に線形モデルで十分な結果が得られていた。特に米国の半導体デバイスメーカーでは、部分的最小二乗回帰(Partial Least Squares Regression: PLS)が仮想計測において実用的なツールとして活用されていた。

1.2.4 測定データの活用

EESサーバを備えるようになった300mmウェハ以降の半導体業界では、装置データを

利用することで、管理の厳正化を実現する仕組みの開発が推進されてきたが、EESが導入される以前は、工程内で製品出来栄えの測定データを用いて、装置の製造条件を自動算出し制御する、APC(Advanced Process Control)やR2R controlの仕組みにより工程能力の向上に取り組んできた。これらの仕組みは加工後の測定データから制御パラメータを算出するもので、回帰分析が広く用いられてきた。APCやR2R controlが算出する製造条件の精度は、製品出来栄えを左右し、生産性に影響をもたらすため、半導体デバイスメーカー各社は他社を凌駕する工程能力を確保すべく、演算アルゴリズムの開発にしのぎを削ってきた。

半導体製造を含む化学産業は複数の因子が影響する処理であり、全ての装置データに管理限界を設けて管理することが求められるが、先端半導体製造に用いられる装置から取得されるデータは1万点に上ることもあり、Shewhart管理図を用いて各変数を独立に管理する方法は現実的ではない。加えて、変数を個別に管理する方法では、変数間の相関関係は無視されてしまう。変数間の相関関係を捉えた管理を実現するためには主成分分析(Principal Component Analysis: PCA)などの多変量解析を利用する必要がある[10,11]。主成分分析は教師無しモデルであるため、全ての変数が入力変数として扱われる。半導体製造を制御するためには、運転条件であるレシピパラメータを出力変数、製品出来栄えの測定データを入力変数とした統計モデルを用いる必要がある。そこで重回帰分析を用いることでモデルを構築することが可能となるが、重回帰分析は多重共線性の問題を回避できないという致命的な欠点を持つ。そこで、先ほどの主成分分析の主成分を入力変数として、線形回帰モデルを構築するPCR(Principal Component Regression)を採用することでこれを回避することができる。しかし、上述の通り主成分分析は入力変数のみに着目して主成分を選択し、線形回帰モデルを構築するため、主成分が出力変数の推定に役立つ保証はない。これらの問題を回避する方法としてPLSがある。PLSは入力変数の線形結合で与えられる潜在変数(Latent Variables: LV)を入力とする線形回帰手法であり、入力変数間の相関を捉えつつ、かつ出力変数との相関も大きくなるような潜在変数を選択するため、主成分分析より少ない潜在変数で高い推定精度を実現できると報告されている。

以上のように製造業界においては重回帰分析に始まり、後に多重共線性による精度の悪化を防ぐべくPCRやPLSの適用を試み、再帰的にパラメータを更新して最小二乗法の解を推定する再帰的最小二乗法を用いることで工程能力を高め、歩留まりを向上することで収益の向上を図ってきた[12,13]。処理がより複雑さを増す中、非線形な処理に対処すべくサポートベクターマシン[14]やガウス過程回帰[15]、更にはオートエンコーダー

を用いた意思決定ベースの仮想計測(Virtual Metrology: VM)のフレームワークが提案[16]され、ニューラルネットワークの活用が見られるようになってきた[17-22]。例えば化学反応と機械作用を複雑に組み合わせて制御するCMP装置[23-26]や、微細な化学反応の制御が求められる成膜装置[27]においては、早い段階からこれらの演算手法の試行が行われ報告されてきている。

一方、演算手法とは別に、演算に使用されるサンプルに重み付けをすることで処理特有の経時変化や、処理間差に対処する方法が提案されてきた。直前の測定データを演算に用いる方法から、過去数回のウェハの測定データを移動平均(Moving Average: MA)する方法、過去のデータの影響を指数関数的に減らしていく指数移動平均(Exponentially Weighted Moving Average: EWMA)、出力推定が要求される入力変数との類似度に応じて測定データに重みを付ける局所重み付けPLS(Locally Weighted Partial Least Squares: LW-PLS)[28,29]などが利用されてきた。

適用される工程毎に特異な条件に対処することも求められている。製品の微細化により多くの制約を受ける露光装置のデザインルール毎の製品特性への対応[13]、ドライエッチ装置においてプラズマが処理毎に変化することによる、モデルと実装置の不一致から生じる制御性能への影響の軽減[30]などの目的でEWMAの適用が試みられている[31-33]、また装置に限定されないノイズへEWMAにより対処[34-36]する手法が報告されている。また処理だけでなく、装置の機差[37]、製品の設計間差[38-42]へもEWMAによる対応がとられている。加えてAPCやR2R controlは、製造装置とは異なる測定装置のデータを扱うため、対象ウェハと同一条件で処理された過去の測定データを用いる必要があるが、製品の流動によりどれだけの時間が経過するか保証できない。化学反応による成膜変異が顕著な化学的気相成長(Chemical Vapor Deposition: CVD)装置における膜厚計測との時間差への適用[43]をはじめ、多くの処理においてタイムラグへの対処にもEWMAが活用されている[44-47]。

1.2.5 装置データの活用

EESが導入される以前は製品出来栄えの測定データを用いて、装置の製造条件を自動算出し制御する、APCやR2R controlにより工程能力を確保することが主であったが、微細化により、処理の変動を測定データのみで判断することは難しくなっている。半導体製造で代表的な測定器であるCD-SEMは、電子線を回路パターンの穴(ビアホール)に打ち込み径を測定するが、最先端デバイスにおけるパターンの径は10nmを下回り、

ビアホールのアスペクト比は20:1となり、CD-SEMの電子線の径である数ナノメートルでは穴底まで正確に測定することが困難となっている。

そこでこれまでの測定データに加えて、EESに収集される装置データも加味することで測定誤差を低減することが求められてきた。装置データを説明変数とし、測定データを目的変数として将来の測定データを推定するモデルを構築することで、測定データ自体を推定するVMや、装置の挙動の変化からの確なメンテナンス時期を推定するPdM(Predictive Maintenance)といった仕組みが開発されてきた[48]。先端デバイスメーカーでは、誤測定を嫌いVMで工程管理することもある。

VMやPdMは、装置データから加工後の測定データなどを算出するもので、回帰分析が多く用いられてきた。従来のR2R controlにおける製造装置のドリフトに対処するために多変量PLSによるVMを加味した制御は特徴的である[49]。重回帰分析やPCR[50]、PLS[12,28,51,52]、再帰的最小二乗法[53]に加えて、機械学習を用いることで過学習を防ぎながら、推定精度の向上を期待したランダムフォレストの適用[54-58]や、非線形な処理のモデル化にニューラルネットワークを利用している[59-64]。これらはウェハ面内の均一性に非線形要素が含まれるCMP装置[65]やCVD装置[66]、ドライエッチ装置[67]において2000年ころから多用されている。特にCMP装置のように、非線形な処理ドリフトの制御に高い性能を発揮する畳み込みニューラルネットワーク(Convolutional Neural Network: CNN)ベースのモデルがこの頃から試用され始めている[68-75]。撮像機器から取得されるデータをこれらのモデルに組み込む上で、古くから画像処理に利用されてきたCNNを用いることで[76]、親和性の高い効率的なモデルを実現してきている[64,77,78]。

EDAで多量のデータを収集し、ニューラルネットワークによるモデル化が現実となったことで、半導体のプロセス制御における主流の演算手法になると期待された。しかし、トロント大学のスーパービジョンや敵対的ネットワークによる生成学習、LSTM(Long Short-Term Memory)による時系列学習、試行錯誤で報酬最大化を行う深層強化学習などにより進歩してきたのは、画像生成、音声認識といった限られた領域への応用であった。さらにDNN(Deep Neural Network)でも知識ベースでも、大量のデータの学習に依存する知能システムの挙動を、それとは別の方法で適切に修正する方法は現時点では未解明なままである[79]。加えて1週間～1カ月、短いものでは1日単位で消耗部品を交換する半導体向け製造装置においては、そのたびにハイパーパラメータのチューニングが必要となることから、ニューラルネットワークの実用化には、未だ多くの

課題が残されており、半導体プロセス制御においては時間を要すると筆者は考える。

1.2.6 データ活用のトレンド

Fig. 6は300mmウェハが導入された2000年以降の、半導体製造におけるデータ活用に関する論文の、ジャーナルへの掲載数の推移である。Fig. 6a)は2004年にEDAのSEMI規格が登録される以前に主流であった、工程内の加工後の測定データを用いた、APC, R2R controlの推移である。2004年のEDAの登場以後は、特にR2R controlにおいて以前に比べて掲載数が減少していることがわかる。Fig. 6b)はEDAが登場する以前は実現が困難であったVMとPdMの推移である。EDAが実装された2004年以後に積極的に開発され、論文が投稿されてきたことがわかる。

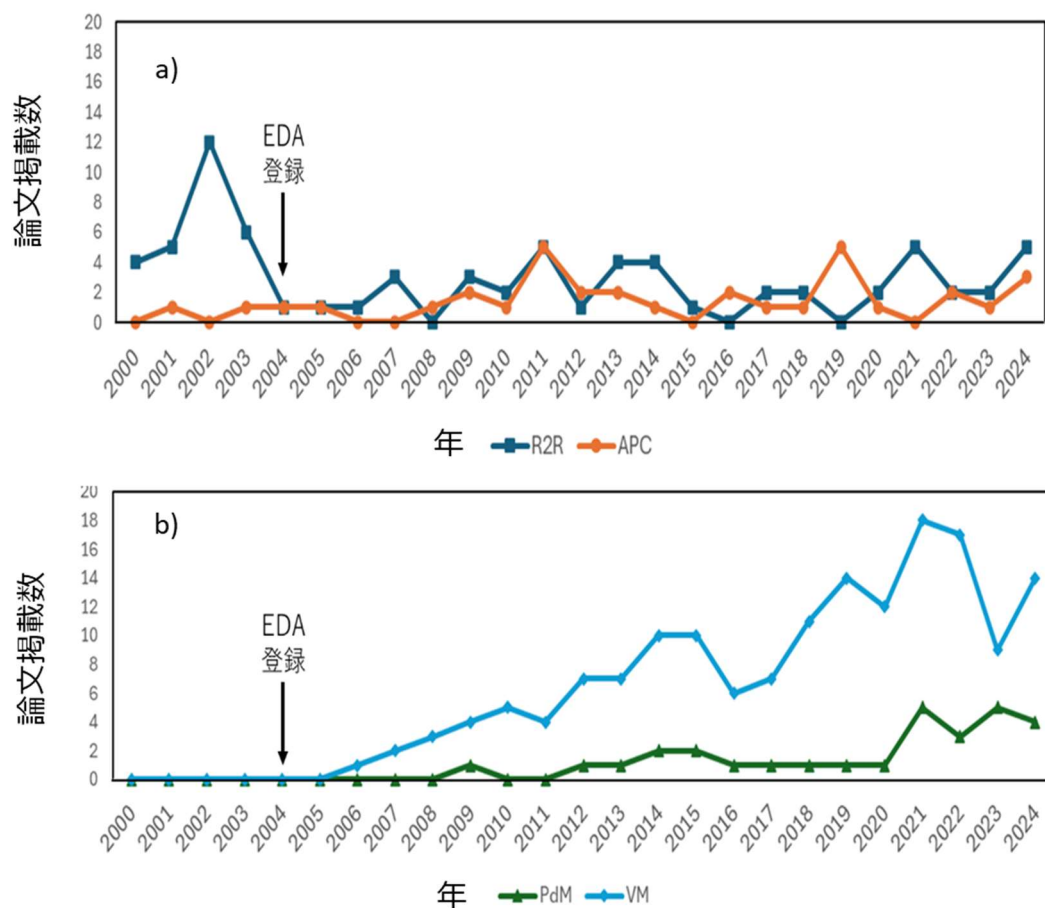


Fig. 6 データ活用の目的の変化

Fig. 7はオランダTIOBE Software社が、月次で発表する人気プログラミング言語ランキング “TIOBE Programming Community index” で提示された指数の変移イメージである[80]。半導体製造をモデル化する上で、プログラミング言語は不可欠であり、時代によって使用される言語は変化している。EDAが導入された2004年頃は、Java, C, C++といった言語が広く利用されていたが、2018年頃からはPythonの利用が急拡大している。Pythonには機械学習に特化したTensorFlowやKeras, 統計に特化したSciPy, データ分析に特化したNumPyなど、さまざまなライブラリが揃っており、Pythonの普及は半導体におけるプロセス制御技術の進化に少なからず貢献している。

特に、正常データに比べて発生頻度が低い異常データを十分に集められない場面で、敵対的生成ネットワーク(Generative Adversarial Network: GAN)を活用した事例が複数報告されてきているのが特徴的である[25,81-83]。Pythonの普及は、これらの実装を容易にしていると考えられる。GANに限らず、ニューラルネットワークの半導体製造への適用は、Pythonの普及と歩調を合わせるように拡大している。

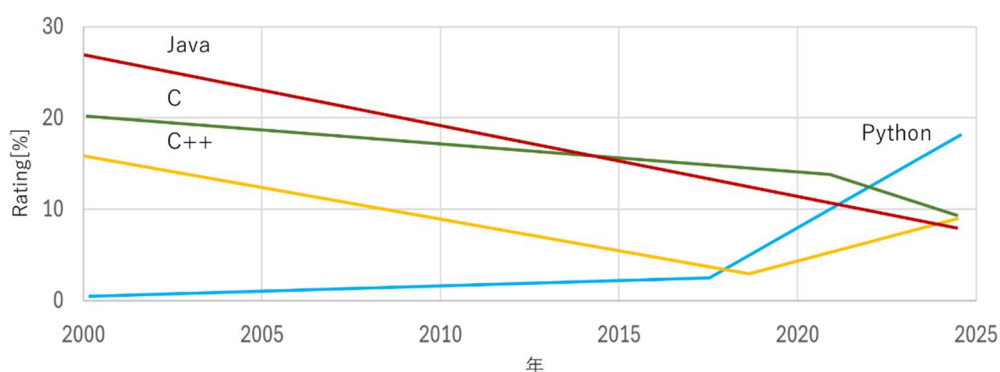


Fig. 7 プログラミング言語の人気変移

Fig. 6に示す論文が取り上げた新規技術を、プロセスモニタ機器などのハードウェアに依存したものと、製品出来栄えの測定データや装置データなどの数理解析によるもの、数理解析の中でも特にニューラルネットワークを用いたものの3種に分類しFig. 8にまとめる。

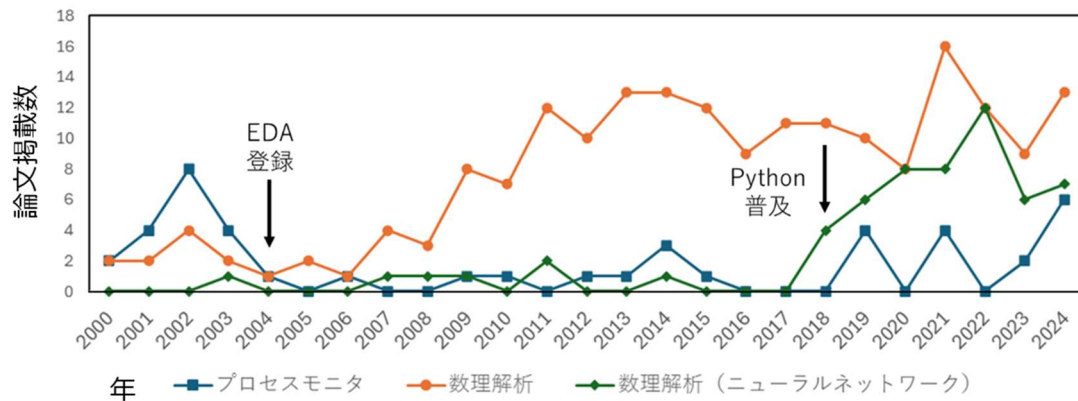


Fig. 8 新規技術の推移

EDAが実装される2004年以前は、装置に実装したプロセスモニタ機器から取得されたデータで、直接装置を制御する手法が主に用いられてきた。EDA導入後は、装置データと製品出来栄えの測定データとを組み合わせる統計処理しモデル化した上で、処理を制御する手法が多く報告されている。その後Pythonの普及により、画像データからCNNを使ってモデル化し、製造条件を改善する用途が見られる。ニューラルネットワークを用いることで、サイバー空間における非構造化モデルアプローチを効率的に補完することが可能になったが、やはり直接的な因果関係の解釈は不十分で、モデル化に用いるには注意を要する[7]。

VMによりバーチャルな全数検査により、実測定データの代わりにR2R controlに用いることで、枚葉制御であるVM-APC(Virtual Metrology Advanced Process Control)が可能となった[84,85]。EDAからの装置データを利用したプロセス制御は、製造DX(Digital Transformation)を現実のものとした[86]。

1.2.7 半導体業界における従来の開発実績

AMAT社のJames Moyneのグループは、R2R controlをEDAの装置データから構築し、製造条件を自動算出する仕組みを研究している[87-89]。彼らが提案する”online Bayesian Auto-Regression eXogenous (ARX)”は、サンプルの鮮度と有用性に基づいて重要度を評価し、演算に用いるデータを選別し削減することで演算の効率化を実現している[90]。本手法はCMP装置に適用された。処理モデルを構築する際に、サンプルを選別することは重要なことであるが、同手法ではサンプルの発生時点でサンプルの重要度を

評価してしまうことから、製造装置が部品の消耗や化学薬品の劣化に追従できるかを併せて評価すべきと筆者は考える。

GLOBALFOUNDRIES社のDetlef Pabstのグループは、重み付き移動平均によるR2R controlを露光に適用している[91]。半導体の製造においては、付加価値を生まない製品出来栄えの測定の頻度を下げることが一般的に行われている。しかし製品出来栄えの測定はR2R controlの目的変数となるため、測定頻度の低下はR2R controlの推定精度に影響を与えてしまう。そこでR2R controlの精度を維持するために、EWMAのパラメータを測定頻度に対して調整を行うことを提案している。測定の頻度は、R2R controlの精度に影響を与えるが、測定頻度が低い場合こそ、サンプル中の類似度の高いデータに重きを置いた推定を行うべきと筆者は考える。

TSMC社のKeung Huiのグループは、最先端処理である3D fine-structuresを多変量最適制御により制御する研究に取り組んでいる[92-97]。半導体が3D構造となったことで、これまでのターゲットのみを狙った制御では不十分となり、ターゲットと均一性の双方を同時制御することが必要となった。しかし入力変数の数が出力変数の数よりも少ないため、従来のAPCでは対処できない。そこで多変量最適制御を開発し、トレンチ深さを制御するドライエッチに適用した[98]。最適制御のためのパラメータチューニングは非常に複雑となるため、より影響度が高い変数を適切に選択し、制御に用いるべきと筆者は考える。

Panasonic社の今井のグループは、EDAから収集された装置データから導き出される推定モデルを用いて、装置の異常をいち早く検知し生産性を向上する研究に取り組んでいる[99,100]。VMによって副生成物の発生を推定し、そこからボイドの発生を推定するという独自技術を確立し、歩留まりの向上に寄与させている[101]。副生成物の発生は装置の多くの部位に起因するため、取得できるデータから多数の特徴量を抽出し、それらの組み合わせにより原因因子を特定すべきと筆者は考える。特に国内の半導体工場においては、現場のエンジニアが容易に原因究明に取り組める、解釈性への配慮が不可欠である。

東京エレクトロン社の守屋のグループは、装置データから製造条件を最適化する研究を行っている。プラズマ援用原子層堆積(Plasma-Enhanced Atomic Layer Deposition: PE-ALD)における面内均一性の最適化を実現している[102]。また田中のグループはベイズ最適化により、処理条件と用いる材料を適切に組み合わせることで、高いエッチレートを実現する条件を見出すことに成功した[103]。最適化モデリングの際に、データ

中に含まれる管理限界を超えるばらつきによりモデルの精度が悪くなり、誤った推定結果を得ることがある。特に成膜装置は、因子間の交互作用や、各因子の2次項(1変数の2乗項)効果が顕著に表れる装置であることから、因子間の交絡の影響を最大限考慮した実験計画を用いるべきと筆者は考える。

IBM社はGAA(Gate All Around)ナノシートFETによる微細化を進化させるべく、単一露光EUVの適用を報告した[104]。日本Rapidus社、台湾TSMC社、韓国Samsung社、米Intel社などにより、最先端ロジック半導体の開発競争が繰り広げられており、2nm世代から0.3nm世代までの道筋が見えつつある。今後半導体の微細化はナノメートルから、オングストロームに移行してゆき、チップ面積当たりの素子数は更に多くなることで、演算処理性能を高めてゆくことが期待されている。半導体技術における世界最大級の国際会議IEDM(International Electron Devices Meeting)において報告された集積化のロードマップの中で、注目すべき指標をFig. 9にまとめる。同様の報告を行っているIRDS(International Roadmap for Devices and Systems) More Moore Ground Rules 2024では、10 Å以下のNodeに対してeq(equivalent)が併記されている。

Year	2022~23	2024~25	2027~28	2029	2031	2033	2035
Node	3nm	2nm	14Å	10Å	7Å	5Å	3Å
Transistor	2~1Fin	GAA NS	GAA NS Extension	CFET	2 nd Gen. CFET	3 rd Gen. CFET	2D material stack
Poly Pitch[nm]	45		42		39		36
Min. Metal Pitch[nm]	23		20	18	16	14	12

Fig. 9 ロジック半導体の集積化ロードマップ

国際ロードマップが示す通り、半導体の微細化は2035年に向けて更に進化してゆくことから、更なるプロセス制御の進化が求められる。

1.3 論文の構成

以下に第二章以降の論文構成を示す。

第二章では、局所的重み付けPLSを用いた半導体仮想計測を提案する。装置部品と化

学薬品の劣化やメンテナンスにより、装置状態がドリフトし、製品特性の仮想計測が困難になる課題について述べ、その影響を最小限に抑えるために局所的重み付けPLSを用いた半導体製造向けプロセス制御手法を開発・適用するとともに、装置状態の変化を受けにくい説明変数を選択することで、高い推定精度を維持できることを示す。

第三章では、多変量解析による半導体製造装置の異常判定を提案する。納入後のトラブルを避けるべく製造装置には高い信頼性が求められており、従来の終点のみによる良否判定では装置の異常をもれなく検知することが難しいことを指摘し、時系列データから特徴量を抽出し、多変量解析でよりの確に装置の異常を検知できることを示す。

第四章では、半導体製造条件の決定における評価実験の最適化のための実験計画法を提案する。半導体成膜装置の熱作用による、高次項・交互作用項の影響を指摘したうえで、従来の単一因子実験における課題に対し、D最適計画と決定的スクリーニング計画を用いることで、最小限の実験回数で最適な製造条件を導き出すことを示す。なお、複数の実験計画を実機で評価するのはコスト的に困難なことから、既存データを用いて生成した仮想装置モデルを対象装置と見立てて検証を行った。

第五章では、平均値置換寄与による製造装置の異常原因因子の特定を提案する。リチウムイオンバッテリーの製造工程において発生する異常の原因因子の絞り込み能力を向上するのに、従来手法である再構築寄与(Reconstruction-based contribution: RBC)よりも、現場のエンジニアが解釈しやすい手法として、各因子を平均値に置き換え、その置換前後の異常検知指標の変化量である平均値置換寄与(Mean-value Replacement Contribution: MRC)を用いることで、より正確に原因因子を特定できることを示す[105]。

第六章では、本研究のまとめと今後の課題について述べる。

第二章 局所的重み付け PLS を用いた半導体仮想計測

2.1 研究の背景と目的

本章の目的は、ドライエッチ装置とCMP(Chemical Mechanical Polishing)装置の装置特性が大きく変化した場合でも、製造エンジニアがエッチレートを高精度に推定することができるFab-wide Control Systemとしての仮想計測(Virtual Metrology: VM)を開発することである。VMの推定精度に影響を与える装置メンテナンスと消耗部品交換による装置状態変化への対応を典型的なこれら2機種の装置に対し検討することで、他の製造装置へのVMの展開が容易になる。

半導体は1000を超えるウェハ処理を経て製造される。ウェハ処理終段の製品全数の特性テストにおいて、異常が検知された場合、ウェハ処理中の加工寸法の測定結果と照合する。しかし多くの半導体デバイスメーカーは寸法測定を抜き取り検査しているため、異常となったウェハが測定されていないことがある。例えば、1ロットとして同時加工されるウェハが25枚の場合、抜き取り検査対象は2枚程度のため、残りの23枚の原因究明は困難を極める。

加えて半導体の微細化により、製造装置の能力は品質保証に耐えうるレベルの限界に近づいている。ウェハ単位で発生する加工結果の差を減らし、品質を保証するためにウェハ毎に加工条件を変更することが必要となる。全てのウェハのウェハ処理中の加工寸法の測定結果が必要となる。そのために測定作業を増加すると製造期間の延長と測定装置の追加購入が必要となる。コスト競争力を維持するためにはいずれも避けなければならない。

微細化に不可欠なマルチパターンニングや、フラッシュメモリの3次元構造化といった、近年の半導体の進化は、主にドライエッチ装置により実現されている。本章では露光装置を越え最大の売り上げとなったドライエッチ装置を取り上げる。ドライエッチ装置はウェハに回路を描く代表的な製造装置である。装置はウェハが置かれたチャンバを真空にし、ガスを流してプラズマ励起し、ウェハに回路を描く。ウェハは真空チャンバ内でエッチされるためエッチレートをモニタリングするのはとても難しい。ウェハ処理の可視化のためにOES(Optical Emission Spectroscopy)技術が開発されてきた。OESとEES(Equipment Engineering System)は高精度で加工寸法を推定するVMの構築に必要とされる[106,107]。しかしながら、現在のVMの推定精度は装置メンテナンスによる装

置特性の変化により低下してしまう[108]。エッチレートとは、露光終了時の規格寸法 (critical dimension: CD) とエッチ終了時の実寸法との差をエッチ時間で除算した値である。ドライエッチVMの設計は、ZengとSpanos [109]によって研究された。彼らは装置劣化への対処の重要性に着目し、バックプロパゲーションニューラルネットワーク (Back Propagation Neural Network: BPNN) によるVMを提案し、工場の実データを用いて他の手法との比較を行った。メンテナンスを頻繁に実施する半導体製造装置においてニューラルネットワークを用いるとリモデリングが頻発し、エンジニアの負担が大きくなってしまう。装置の制御域を考慮すると、VMに用いるデータを適切に選択する方が効果的であると著者は考える。

本研究では適応型VMを開発するために、局所的に重み付けされた部分最小二乗法 (Locally weighted partial least squares: LW-PLS) を検討している。LW-PLSはジャストインタイム (Just-in-time: JIT) モデリング手法の一種であり、処理特性の変化に対応できる適応型モデリング手法として製薬および石油化学に適用されてきている[5,7-9]。LW-PLSと従来の逐次更新モデル (Sequential Update Model: SUM) をドライエッチ装置の実際の産業データに適用し、その推定性能を比較する。

またドライエッチ装置とともに、半導体製造において重要度を増すCMP装置を取り上げる。CMP装置はウェハ表面に形成されたシリコン酸化膜を数10nmレベルで平坦化し、焦点深度が浅い露光に対応させたり、銅配線形成を実現する工程である。CMP装置は消耗部品の交換頻度が高く、装置状態が頻発にシフトすることからVMを難しいものになっている。

2.2 対象装置と特徴

まず本章で取り上げるドライエッチ装置とCMP装置の構成と、これらを用いることで実現される半導体製造過程をまとめる。

2.2.1 ドライエッチ装置

Fig. 10にドライエッチ装置の概要を、Fig. 11にエッチ対象の薄膜形成からドライエッチまでの処理のイメージを示す。

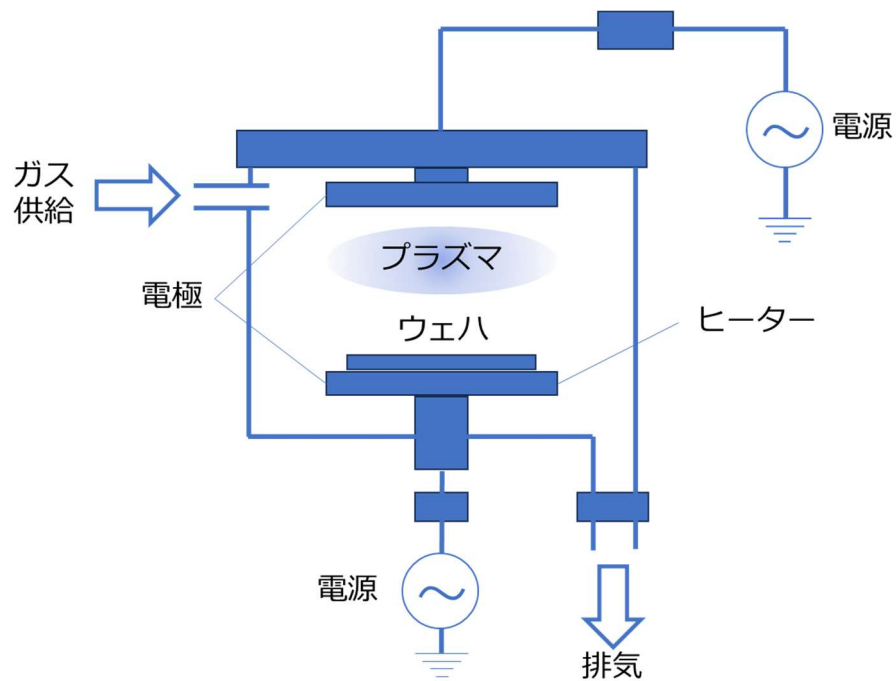


Fig. 10 ドライエッチ装置

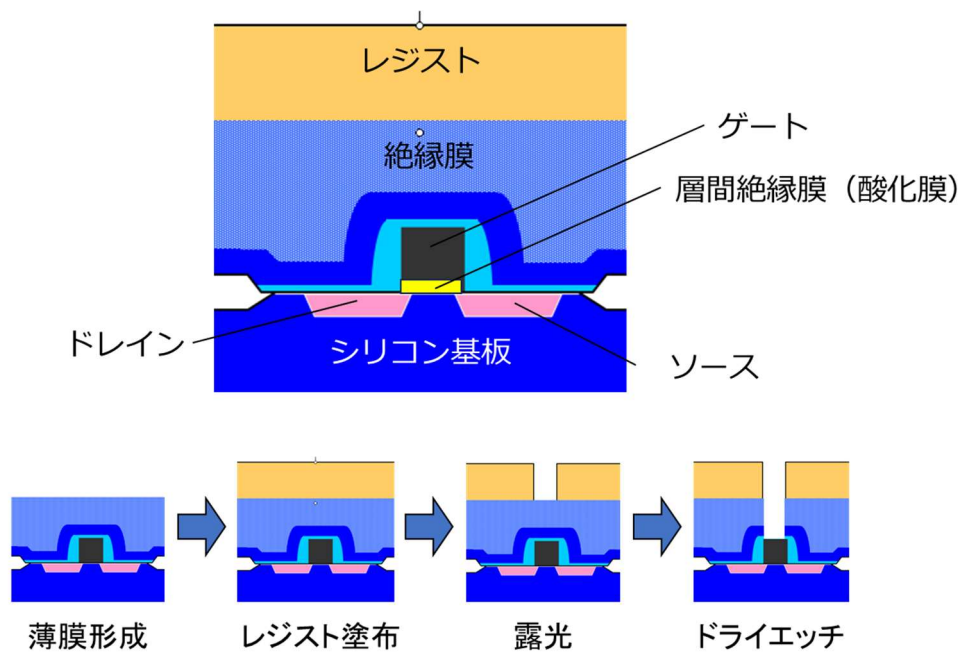


Fig. 11 薄膜形成からドライエッチまでの処理

薄膜形成された後に、レジスト塗布装置においてウェハ全体に薄くレジストを塗布し、

露光装置において写真製版の原理を用いて微細なパターンを焼き付ける。その後硬化した部分のレジストを薬液で除去することで部分的に絶縁膜が露出する。このウェハをドライエッチ装置に投入し、レジストパターン通りに露出させた絶縁膜を腐食加工すると、素子や配線になるパターンが出来上がる。

ドライエッチ装置は、ウェハを加工するチャンバ内を真空にし、エッチガスを流した上で、高周波を掛けプラズマ状態にし、腐食を行う。低温状態でエッチできることがドライエッチの利点であるが、プラズマの発生状態は計測することが難しいため、果たして所望のエッチ状態になっているかを正確に把握することは難しい。プラズマの発生状態を左右する因子としては、電極にエネルギーを供給する電源、真空状態を形成するポンプ、チャンバ側壁に堆積した副生成物などが挙げられ、加えてヒーターによるウェハの加熱によりエッチレートが左右されるといった多変量の要因が、制御を複雑化している。

ドライエッチに対しては、エッチレートの変化をEESデータから推定し、R2R controlに役立てる方法が用いられている[107]。ラジカル密度の変化をOES信号から推定し、EESデータによるエッチレート推定値と対比することで、エッチレートを正確に推定することに成功している。しかし、プラズマ状態は一定せず、常に変化することから、ラジカル密度を正確に推定することは難しく、エッチレートの推定精度を担保するためにはより簡便で高速な計測手段が求められる。

同様にウェハ内の薄膜の厚みの分布であるエッチプロファイルのリアルタイム監視を実現すべく、OESと電圧電流(VI)プローブから取得した外部センサデータに、EESデータを加味したVM技術の開発が進められている。エッチプロファイルの変動を評価するのにシミュレーションを用いるのは有益であるが、膨大な計算時間が必要となることから、短時間でのエッチプロファイルの導出には適さない。J.-W. Kwonらは、チャンバ側壁の残留物の蓄積の影響を受ける電子密度や温度と、OESやVIプローブによる計測値でプラズマモデルを構築し、リアルタイムの仮想計測を実現した[6]。本研究の観点から、OESとVIプローブで説明できるプラズマの現象は限定的であり、かつOES、VIプローブといった高価なセンサを、数十台ある量産工場のドライエッチ装置に実装することはコスト的に見合わず、量産工程での採用は難しいと著者は考える。

2.2.2 CMP 装置

半導体デバイスは高集積化に伴い配線層の多層化が進められてきた。配線層が幾重にも重ねられると、配線のある部分と無い部分でおのずと凹凸が生じる。一方高集積化に

伴う微細化のために露光においては解像度の向上が求められ光の波長を短くする必要がある。波長を短くしてゆくと焦点深度は浅くなるため、焦点を合わせるには露光面の平坦化が求められ、1991年にIBM社よりCMP技術が提案された。この技術を応用したダマシン配線技術が開発され、現在も配線材料として主流である銅配線が実現された。

CMP装置により、真に平坦に加工されるウェハは洗浄が容易で、ダスト起因の多くの欠陥の発生頻度を下げることができる。更に薄膜形成時における下地形状に対する段差被覆性(ステップカバレッジ)の問題を除外し、露光やドライエッチの歩留まりを向上させる。酸化物CMPでは、層間絶縁膜中の結晶性混入物や異物などによる、特定の欠陥発生頻度を低下させる。金属CMPでは、従来のドライエッチと比較して、配線短絡の発生率を減らすことができる[110]。

Fig. 12にCMP装置の概要を、Fig. 13にその処理を示す。CMPの登場により、半導体の配線材料は銅が主流となった。これまでのアルミニウムは、銀、銅について電気伝導率が高く、スパッタリングで成膜しエッチで加工することが可能であり生産性が高いことから、配線材料として主に使用されてきた。しかし微細化の進行によりアルミニウム配線の配線抵抗値が上昇するとともに、エレクトロマイグレーション寿命が低下するという問題が生じてきた。

そこで電気伝導率がアルミニウムより高く、電流密度の許容値も高い銅を配線材料として利用することとなった。ただし銅はCVDやスパッタによる成膜や、エッチによるパターン加工が難しい。そこで電気メッキによる銅薄膜成長とCMPによる配線技術デュアルダマシン(dual damascene)が1993年にIBM社から提案された[111]。

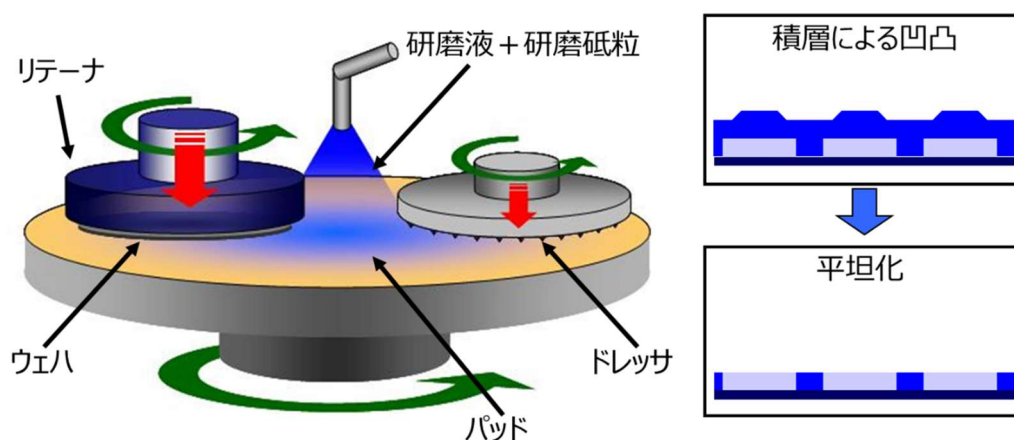


Fig. 12 CMP 装置

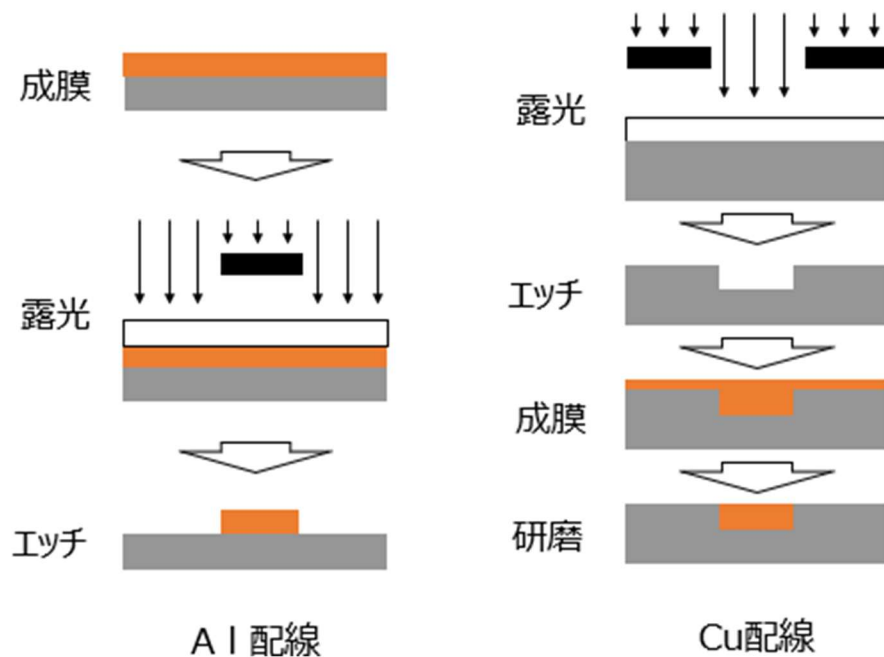


Fig. 13 Al 配線と銅配線処理

CMP装置においては、 SiO_2 などの超微粒子を含むスラリーを回転テーブルに取り付けられたパッド上に流しながら、自転するヘッドに保持されたウェハを研磨パッドに押し付けることで、ウェハ表面を研磨し平坦にする。 SiO_2 砥粒を懸濁させたスラリーはアルカリ性で、シリコン酸化膜であるウェハを溶解する性質がある。また SiO_2 砥粒をウェハに押し当てることで機械的に遊離砥粒加工される。砥粒は液体中に分散しているため砥粒の切り込みを直接制御することはできない。そこでウェハを押し付ける圧力やテーブルの回転速度によって余剰膜の除去量を制御し平坦化する。除去量は圧力に比例するというプレストンの経験則が成り立ち、砥粒とウェハの間の動摩擦係数を一定と仮定すれば、圧力に摩擦係数を掛けた値とテーブルの回転速度の積で表すことができる[112]。CMPは、この遊離砥粒による機械的研磨に加えて、前述の化学的研磨が組み合わせられた平坦化技術であり、特に化学的作用によりウェハの表面に形成された改質層の凸部を優先的に上から順次除去してゆくと、少ない加工量でウェハ全面を均一に平坦化することが可能となる。

CMPによる研磨量は、前工程である成膜の膜厚と、CMPによる研磨後の残膜との差分により決まる。成膜時の膜厚には少なからずばらつきがあるため、その影響を吸収すべく研磨時間を調整することで研磨後の残膜の厚みを規格範囲に収める。研磨レートが

一定であれば、成膜の膜厚から研磨時間を算出すればよいが、研磨レートはスラリや研磨パッドの温度、研磨パッドやドレッサの経時変化、成膜時の膜質により変化するため、常に研磨レートの変動を監視してゆく必要がある。例えば、製品ウェハとは異なる研磨レートモニター専用ウェハを定期的に加工し、研磨前後の膜厚計測値の差を研磨時間で除すことにより研磨レートを算出する方法が取られる。しかし、生産性が高く求められる半導体デバイスの製造装置で、製品以外のモニター専用ウェハを加工することは避ける必要があるため、これを用いない制御方式が求められAPC(Advanced Process Control)が活用されてきた[113-115]。

2.2.3 Equipment Engineering System

EESは装置サプライヤとシステムサプライヤによってドライエッチ装置に実装される。Fig. 14はEESを中心としたシステムによって監視および制御されるドライエッチ装置の構成を示している。装置は複数のチャンバを持っており、各チャンバにおいてウェハが加工されている時に、RF(Radio Frequency)パワー、ガス流量、圧力、温度などの状態が計測される。計測された信号はEESによって収集され装置の挙動を確認するのに用いられる。

EESは装置データをリアルタイムに収集・分析して装置の状態を確認し、異常が検知された場合はMESに通知する。通知を受けたMESは装置に停止指示を出す。また装置データはAPCに通知され、ウェハ毎の加工条件の算出に利用されたり、YMS(Yield Management System)に送られ、製品特性、ウェハ処理内の加工寸法との照合に活用されたりする。

2.2.4 Virtual Metrology

抜き取り検査対象とならないウェハの加工寸法は、装置データから推定されることが望まれる。装置データから製品特性を推定する技術としては、ソフトセンサが石油化学産業を中心に利用されてきた。ソフトセンサ開発の歴史は、加納と藤原によって最近の産業応用とともにまとめられている[5]。ソフトセンサは装置内部の温度、圧力、ガス流量といった測定の容易な信号から、測定の困難な製品特性を推定するものである。この技術は半導体の製造に転用され加工結果の推定に用いられ、測定を代替するようになった。半導体の製造ではVMと呼ばれる。

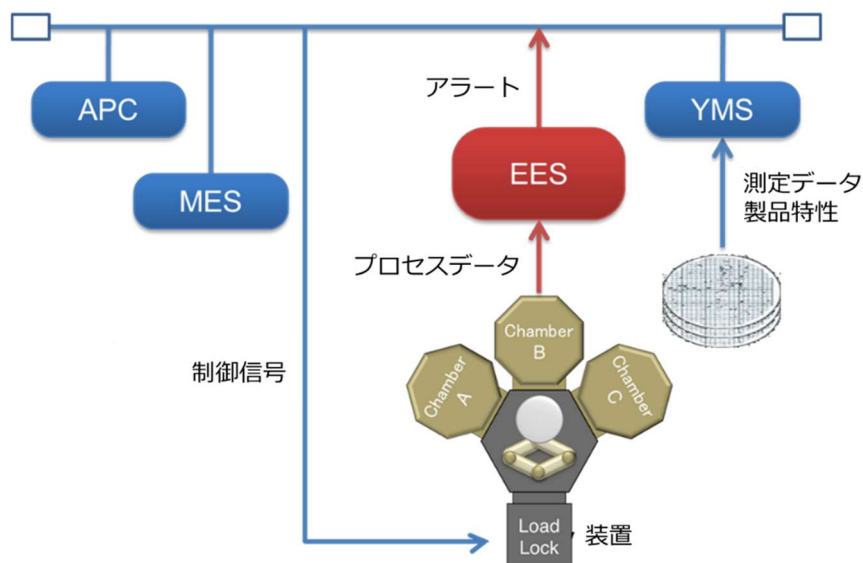


Fig. 14 EES中心のシステムで制御されるドライエッチ装置.
EES, MES, APC, YMSが統合されている

VMは装置データから枚葉で加工寸法を推定することができる. VMによって抜き取り検査のサンプルサイズを増加させることなく, 枚葉プロセス制御を可能にするとともに, 枚葉での装置モニタリングを実現する[116].

半導体の膜厚や線幅といった測定結果が出るまでの時間遅れは, Wafer to wafer制御の性能を悪化させる. EESは圧力やパワー, 温度といった装置の履歴データをウェハ単位で収集することが可能である. EESによりVMは測定の時間遅れの影響を受けることなく品質を推定することができる[117].

さらに工場全体を俯瞰した制御の方法が提案されている[118,119]. 工場ベースのコントローラはウェハ処理終段の機能確認テストで得られた製品特性を使って工程毎の最適な目標寸法を決定する. この目標寸法を実現するために, VMデータを使ったWafer to wafer制御が実施される[120].

更に機能確認テストにおける製品特性の変化を, VMモデルを用いてエンジニアが判断するといった手法が提案されている[121].

VMが解決すべき課題として, 例えばドライエッチ装置は工場オペレータによって, 消耗部品の交換やチャンバクリーニングといったメンテナンスが施される. これにより装置特性にシフトが生じエッチ後の出来栄の推定精度が低下する. そのため装置特性

の変化に対応して高い推定精度を維持できるVMの構築が求められる。

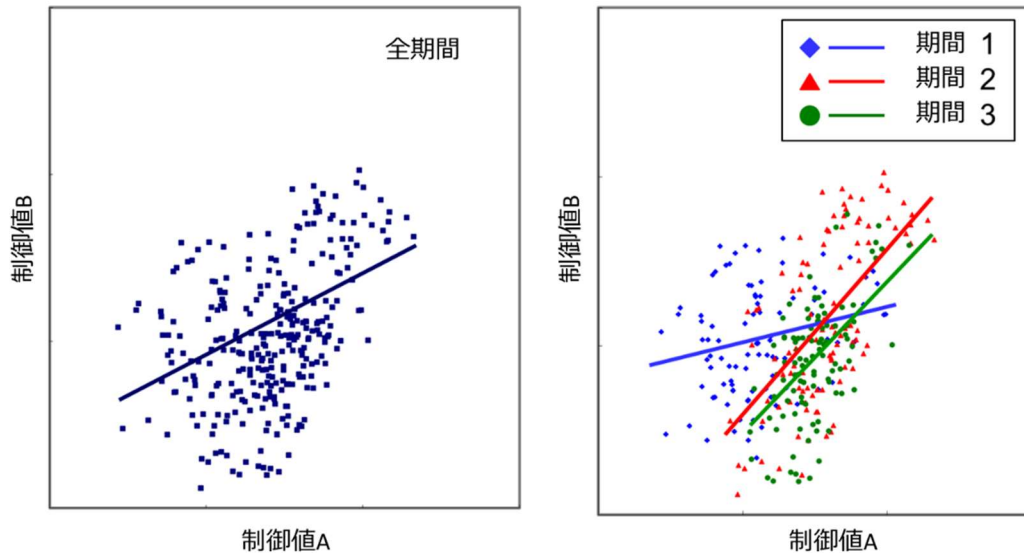


Fig. 15 ドライエッチ装置の稼働状況の変動と推移

Fig. 15は、ある1台の製造装置において、同じ処理条件のある2種の制御変数の関係が時間的に変化するイメージを示したものである。同じ条件で処理されていても、消耗部品の交換や他の製造装置における処理状態の微妙な変化によって、変数間の関係には連続して一定方向に変化するドリフトや、連続するサンプル間で値が移行するシフトが発生する。一般的にVMに用いられる加重移動平均法(Weighted Moving Average: WMA)は、過去の観測値に異なる重みを与えて予測値を算出する手法である。これは、直近のデータにより大きな重みを与え、古いデータの影響を相対的に小さくすることで、経時的な変動に敏感に対応することを目的としている。しかし、上記事例のように処理状態の急激な変化や非定常性への適応が困難であるため、半導体製造のように複雑な工程においては推定を誤ることがある。

そのため、VMの推定精度を保証するためにモデル再構築を頻繁に行う必要がある。モデルを再構築する方法のひとつとしてDMW(dynamic moving window)の手法が提案された[122]。従来の固定ウィンドウのスキームに対しDMWでは、モデルに新しいサンプルを追加し、類似度を見ながらクラスタリングを行うことで、推定精度を向上させる。

モデルメンテナンスはVMに特有の問題ではないが、様々な産業において重要な問題

である。日本の化学プロセス制御に関するアンケート調査[123]によれば、ソフトセンサの最も重要な問題は、装置特性の変化に対処し、長期間にわたって高い推定精度を維持するためのモデルメンテナンスであった。ソフトセンサやVMの推定性能が時間の経過とともに悪化し、そのため面倒なモデルの再構築が頻繁に必要になると、その応用は広がらない。モデルメンテナンスの問題は、VMを設計する際に解決しなければならない課題である。

2.3 Virtual Metrology 構築

本研究ではVMの構築に、JITモデリングのひとつである局所的重み付けPLS(LW-PLS)を用いる。製造装置では強い相関をもつ信号が多数あるので、多重共線性に対処するために局所モデルの構築にPLSを用いる。

2.3.1 ジャストインタイムモデリング(JIT モデリング)

JITモデリング、またはJIT学習は、装置特性の変化や非線形性に対処するために提案され、仮想計測[124]だけでなく処理モニタリング[125]にも使用されている。JITモデリングは、怠惰学習[126-129]としても知られている。JITモデリングでは、推定を行う際に、その測定が行われた加工条件(クエリ)の周囲の過去のデータからローカルモデルを構築する。このアプローチは、グローバルモデルがうまく機能しない場合に役立つ。文献[124]では、さまざまなJITモデリング手法がレビューされている。

JITモデリングは、1)新しい入力変数と出力変数が利用可能になると、それらをデータベースに格納する、2)推定が必要な場合にのみ、クエリの近傍にあるサンプルからローカルモデルを構築し、出力変数を推定する、3)構築されたローカルモデルは推定に使用した後に破棄されるという特徴がある。JITモデリングでは、ローカルモデリング用のサンプルをその都度適切に選択する必要があり、オンライン計算負荷が大きくなる傾向がある。

クエリの近傍を選択する簡単な方法は、k最近傍法(k-Nearest Neighbor: k-NN)である。ただk-NNより洗練された方法で近傍を選択することで、JITモデリングの推定能力を向上させることができる。また、ローカルモデルを構築する簡単な方法は加重平均[130]であり、近傍の数が限られている場合は、他のローカルモデリング方法よりも適している。ただし、MRA(Multiple regression analysis)やPLSなどの局所線形回帰(Local Linear Regression: LLR)を採用することで、推定性能はより向上できる。

データベースに格納されている各サンプルを使用するかどうか選択する代わりに、サンプルの重要度に応じて優先順位を付けることで、すべてのサンプルを使用することができる。重要度は、クエリとサンプル間の類似度、つまりクエリとサンプル間の距離によって評価する。優先順位付けは、類似度がバイナリ $\{0,1\}$ の場合に、サンプルを使用するかどうかを決定するのと同じである。したがって、JITモデリングは、ローカル加重回帰(Local Weighted Regression: LWR)[131]としても知られている。

LWRは、クエリと入力変数の類似度に応じて、ローカルモデルを構築する。類似度の付け方としては、距離や回帰係数が用いられ、入力変数がクエリにどれだけ類似しているかを判断し、重み付けする。したがってLWRは、緩やかな変化だけでなく急激な変化にも対処できる。さらに、LWRは全てのデータを使用して一つの回帰モデルを作るのではなく、クエリの周辺区間に基づいてモデルを構築するため、非線形性にも対処できる。通常LWRは、WMAよりも優れた性能を発揮する。

LWRで正確なモデルを構築するには、類似性を適切に定義する必要がある。たとえば重森ら[132-134]は、LWRに基づいて目標品質を確保するための最適な製造条件を決定できる鉄鋼製品の品質設計システムを開発した。このシステムでは、入力変数がクエリにどれだけ類似しているかの重みをグローバルMRAモデルの回帰係数として定義する。開発されたシステムは、JFEスチールの西日本製鉄所で8年以上運用されている。しかし多重共線性が存在する半導体製造においてMRAモデルは安定性を欠くため、この手法をそのまま用いることはできない。

LWRにおける類似性は、一般的にユークリッド距離またはマハラノビス距離に基づいて定義される。これまでに提案された他の類似度測定法としては、距離と角度、距離とグローバルモデルによって導出された出力推定値[135-138]、入力変数間の相関[139-140]、加重ユークリッド距離[7,8,139,141,142]などがある。半導体製造において長期間運用してゆくには、類似性は容易にメンテナンスができ、かつ計算負荷も小さくしなければいけない。

2.3.2 PLS と VIP

PLSは共線性の問題に対処できる線形回帰法であるため、処理変数の相関性が高いさまざまな業界でモデリングツールとして使用されている。

出力変数が1つのPLSでは、入力変数 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ と出力変数 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$ は次のように分解され

る.

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E} \quad (1)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}\mathbf{b} + \mathbf{f} \quad (2)$$

$\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{N \times R}$ は潜在変数行列で、その列は潜在変数 $\mathbf{t}_r \in \mathbb{R}^N (r=1,2,\dots,R)$ である、 $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{M \times R}$ は $\mathbf{X}$ のローディング行列で、その列はローディングベクトル $\mathbf{p}_r$ である、 $\mathbf{b} = [b_1, b_2, \dots, b_R]^T$ は $\mathbf{y}$ のローディングベクトル、 $\mathbf{E}$ と $\mathbf{f}$ は誤差である、 N, M, R はそれぞれサンプルサイズ、入力変数の数、採用された潜在変数の数を表す。

反復非線形部分最小二乗法(Nonlinear Iterative Partial Least Squares: NIPALS)アルゴリズムは、PLSモデルの構築に使用できる[143]。1番目から $(r-1)$ 番目の潜在変数 $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_{r-1}$ 、ローディングベクトル $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_{r-1}$ 、 $b_1, b_2, \dots, b_{r-1}$ が与えられているとする、 r 番目の残差入力と残差出力は次のように記述できる。

$$\mathbf{X}_r = \mathbf{X}_{r-1} - \mathbf{t}_{r-1}\mathbf{p}_{r-1}^T \quad (3)$$

$$\mathbf{y}_r = \mathbf{y}_{r-1} - b_{r-1}\mathbf{t}_{r-1} \quad (4)$$

本式では、 $\mathbf{X}_1 = \mathbf{X}$ 、 $\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}$ である。潜在変数 $\mathbf{t}_r$ は $\mathbf{X}_r$ の列の線形結合、すなわち $\mathbf{t}_r = \mathbf{X}_r \boldsymbol{\omega}_r$ である、 $\boldsymbol{\omega}_r \in \mathbb{R}^M$ は r 番目の重みベクトルである。PLSは、制約 $\|\boldsymbol{\omega}_r\| = 1$ の下で $\mathbf{y}_r$ と $\mathbf{t}_r$ の共分散を最大化することを目指す。ラグランジュ乗数法を使用すると、 $\boldsymbol{\omega}_r$ は次のように導出される。

$$\boldsymbol{\omega}_r = \frac{\mathbf{X}_r^T \mathbf{y}_r}{\|\mathbf{X}_r^T \mathbf{y}_r\|} \quad (5)$$

r 番目の負荷 $\mathbf{p}_r$ と b_r は次の通り

$$\mathbf{p}_r = \frac{\mathbf{X}_r^T \mathbf{t}_r}{\mathbf{t}_r^T \mathbf{t}_r} \quad (6)$$

$$b_r = \frac{\mathbf{y}_r^T \mathbf{t}_r}{\mathbf{t}_r^T \mathbf{t}_r} \quad (7)$$

最後に、採用された潜在変数の数 R に達するまで上記の手順が繰り返される。 R はクロスバリデーションによって決定できる。

VIP(Variable Importance in the Projection)はPLSによる回帰分析において、各説明変数の目的変数への寄与を表し、変数選択に使用できる[144]。したがって、VIPは射影における変数の重要性とも呼ばれる。VIPは、各説明変数と目的変数との相関の割合から求まる重みの二乗和の平方根である[143]。PLSに特化し軽量な変数選択法であるVIPにより変数を選択した後に、より一般的な変数選択法であるSHAP(SHapley Additive exPlanations)などにより、VIPでは見えない複雑な寄与関係进行评估し、更に変数を絞り込むこともできる。

m 番目の変数のVIPは次のように定義される。

$$V_m = \sqrt{\frac{M \sum_{r=1}^R (b_r^2 \|t_r\|^2 (\omega_{mr} / \|\omega_r\|)^2)}{\sum_{r=1}^R b_r^2 \|t_r\|^2}} \quad (8)$$

ω_{mr} は r 番目の潜在変数 t_r の重みベクトルの m 番目の要素である。 $V_m > \mu$ を満たす変数を入力変数として選択する。VIPの二乗の平均は1に等しいため、 $\mu = 1$ が変数選択の基準として提案されている[145]。しかし著者の経験から、推定性能を向上させるには μ を適切に調整する必要がある。

2.3.3 局所的重み付け PLS (LW-PLS)

LW-PLSはLWRの1つであり、PLSは局所モデリングに使用される。LW-PLSは、入力変数が少ない場合でも、安定した局所モデルを構築できるため、従来のLWRよりも優れている。本節ではLW-PLSについて説明し、その産業応用を通して製品出来栄の推定において、高い能力を発揮することを実証する。これにより、クエリとサンプル間の類似性の適切な定義が、推定性能を向上させるために重要であることが明らかになる[5,7,8]。

入力変数と出力変数の n 番目のサンプル($n=1,2,\dots,N$)は次のように表される。

$$\mathbf{x}_n = [x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nM}]^T \quad (9)$$

$$\mathbf{y}_n = [y_{n1}, y_{n2}, \dots, y_{nL}]^T \quad (10)$$

M と L はそれぞれ入力変数と出力変数の数であり、 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ と $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ はそれぞれ n 行目が $\mathbf{x}_n^T$ と $\mathbf{y}_n^T$ である入力変数行列と出力変数行列である。

LW-PLSでは、 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{Y}$ はデータベースに保存される。クエリ $\mathbf{x}_q$ の出力推定が必要な場合、

$\mathbf{x}_q$ と $\mathbf{x}_n$ の類似度 ω_n が計算され、類似度行列 $\mathbf{\Omega} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ でサンプルに重み付けしてローカルPLSモデルが構築される.

$$\mathbf{\Omega} = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N) \quad (11)$$

クエリ $\mathbf{x}_q$ に対応する出力推定値 $\hat{y}_q$ は次のように計算される.

1. 潜在変数の数 R を決定し, $r=1$ とする.
2. グローバルな線形モデルにおける入力変数に対する回帰係数の絶対値を重みとして類似度行列 $\mathbf{\Omega}$ を計算する.
3. $\mathbf{X}_r \mathbf{Y}_r \mathbf{x}_{q,r}$ を計算する.

$$\mathbf{X}_r = \mathbf{X} \mathbf{1}_N - [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_M] \quad (12)$$

$$\mathbf{Y}_r = \mathbf{Y} \mathbf{1}_N - [\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_L] \quad (13)$$

$$\mathbf{x}_{q,r} = \mathbf{x}_q - [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_M]^T \quad (14)$$

$$\bar{x}_m = \sum_{n=1}^N \omega_n x_{nm} / \sum_{n=1}^N \omega_n \quad (15)$$

$$\bar{y}_l = \sum_{n=1}^N \omega_n y_{nl} / \sum_{n=1}^N \omega_n \quad (16)$$

$\mathbf{1}_N \in \mathbb{R}^N$ は全要素が 1 のベクトルである.

4. $\hat{\mathbf{y}}_q = [\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_L]^T$ と設定する.
5. $\mathbf{X}$ の r 番目の潜在変数を導出する.

$$\mathbf{t}_r = \mathbf{X}_r \mathbf{w}_r \quad (17)$$

$\mathbf{w}_r$ は $\mathbf{X}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{Y}_r \mathbf{Y}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{X}_r$ の最大固有値に対応する固有ベクトルである.

6. $\mathbf{X}$ の r 番目のローディングベクトルと回帰係数ベクトルを導出する.

$$\mathbf{p}_r = \frac{\mathbf{x}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{t}_r}{\mathbf{t}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{t}_r} \quad (18)$$

$$\mathbf{q}_r = \frac{\mathbf{y}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{t}_r}{\mathbf{t}_r^T \mathbf{\Omega} \mathbf{t}_r} \quad (19)$$

7. $\mathbf{x}_q$ の r 番目の潜在変数を導出する.

$$t_{q,r} = \mathbf{x}_{q,r}^T \mathbf{w}_r \quad (20)$$

8. $\hat{\mathbf{y}}_{q,r}$ を $\hat{\mathbf{y}}_q + t_{q,r} \mathbf{q}_r$ に更新する.
9. $r=R$ なら終了. そうでない場合は

$$\mathbf{X}_{r+1} = \mathbf{X}_r - \mathbf{t}_r \mathbf{p}_r^T \quad (21)$$

$$\mathbf{Y}_{r+1} = \mathbf{Y}_r - \mathbf{t}_r \mathbf{q}_r^T \quad (22)$$

$$\mathbf{x}_{q,r+1} = \mathbf{x}_{q,r} - t_{q,r} \mathbf{p}_r \quad (23)$$

10. $r=r+1$ に設定し、ステップ 5 に戻る.

ステップ 3 では $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{x}_q^T$ の各列から各変数の加重平均を減算して、クエリを多次元空間の原点に近づける.

LW-PLS の推定能力は、クエリ $\mathbf{x}_q$ とサンプル $\mathbf{x}_n$ 間の類似度 ω_n の定義に依存する. 類似度は重み付きユークリッド距離 d_n に基づいて定義される.

$$\omega_n = \exp\left(-\frac{d_n}{\sigma_d \varphi}\right) \quad (24)$$

$$d_n = \sqrt{(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_q)^T \mathbf{\Theta} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_q)} \quad (25)$$

$$\mathbf{\Theta} = \text{diag}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M) \quad (26)$$

σ_d は $\{d_n\}$ の標準偏差, φ は局所化パラメータ, $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ は重み行列, θ_m は m 番目の入力変数に対する重みであり, 本研究においては全ての元データから PLS モデルを作成した際の回帰係数の絶対値である. 類似度は, φ が小さいときに急激に減少し, φ が大きいときに緩やかに減少する. LW-PLS の推定性能は, $\varphi = \infty$ のときに LW-PLS が PLS と同等になるため, 局所化パラメータ φ が適切に調整されている限り, PLS の推定性能よりも高い, または少なくとも同等である. 言い換えれば, LW-PLS は PLS を特別なケースとして含んでいる. LW-PLS のパラメータはクロスバリデーションによりチューニングする.

LW-PLS に基づくソフトセンサと, 市販のモデル予測制御(MPC)ソフトウェアを統合した推定制御システムが開発され, 石油化学プロセスに適用した事例では, 運用コストと環境負荷が大幅に削減され, さらに推定制御システムの実装は, モデルメンテナンスの負担軽減にも貢献したことが報告されている[9].

一般に, LW-PLS を使用して正確な推定を実現するには, 重み θ_m を適切に決定する必要がある. たとえば, 重みなしで構築された LW-PLS モデルの入力変数の回帰係数の絶対値が, 重みとして使用された[7]. 別の手法として Kim らは, 複数の LW-PLS モデルの回帰係数を, 重みとして使用した. 重みは, クエリ周辺の出力に対する入力の非線形効

果の強さに対応している必要がある。そこで類似度の計算において、各入力変数に重み付けする[142]。半導体製造装置特有の非線形性に対処すべく本研究においても、グローバルPLSモデルの回帰係数を重みとしたLW-PLSモデルを採用した。この重み付け手法を使用することで推定性能を向上することを目指す。特にKimらの研究に対し、半導体製造装置特有のメンテナンス等によるオフセットに対処すべく、VIPによる変数選択とLW-PLSによる非線形性への適応の効果を逐次評価し、最適な実運用点を見出すことで半導体製造という応用分野への適用性を検証する。

2.4 実データによる検証

本研究ではドライエッチ装置とCMP装置の履歴データを使用してVMを構築し検証する。

2.4.1 ドライエッチ装置向け Virtual Metrology 構築

ドライエッチ装置向けVMを構築するためには、測定データの適切な前処理が重要である。この節では、VMの入力変数として使用される代表値の導出、外れ値の除外、入力変数の選択方法について説明する。

2.4.1.1 代表値

ドライエッチ装置は温度や、圧力、RFパワー、ガス流量を測定するために1000種近いセンサを装備している。その信号はOES信号と共に100msec以上の高い分解能でEESに格納され、リアルタイムに代表値が算出される。代表値は平均値や標準偏差、積分値、微分値などを含んでいる。

ドライエッチ装置での1枚のウェハの処理ステップの例をFig. 16に示す。この例ではウェハは16レシピステップで処理される。EESにはエンジニアが有益と判断した数百種類の時系列信号が登録され、さらに平均、中央値、最大値、最小値、レンジ、標準偏差、積分値、微分値、サンプルサイズの9種類の統計量に変換される。これらの統計量は代表値として使用され、16レシピステップで400種の信号を収集し、9種の統計量を算出するドライエッチ装置であれば総数は57,600代表値になる。

時系列データから特徴量を抽出する課題に対してY. Yaoらは、データを複数のフェーズに自動的に分割し、より良いモニタリング性能を達成すべく、多相バッチ処理のモニ

タリング手法を提案している[146]. ただFig. 16に示すように, 半導体製造における装置データは, あらかじめレシピステップ(フェーズ)がわかっているため, フェーズ分割技術は必要にならない.

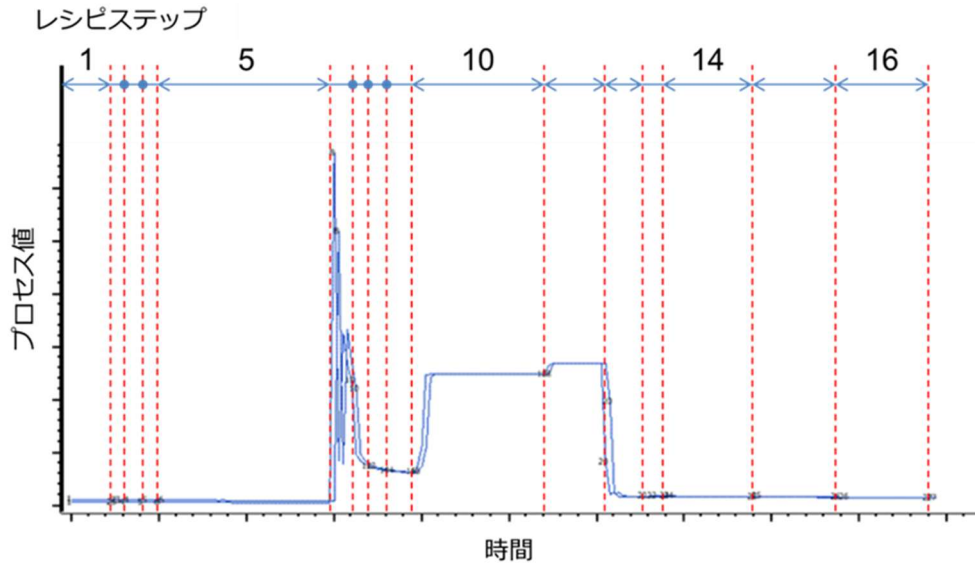


Fig. 16 代表的な処理変数のレシピステップ毎挙動

2.4.1.2 外れ値除外

ドライエッチ装置ではアーク放電が発生することで, 装置内に大電流が流れることがあり, 大電流による装置データのオフセットは装置状態を誤認させることがある. EESではオフセットした装置データを除外するために, Hampel法やホテリング T^2 統計量[147]を用いて装置状態の誤認を防止する[148]. ホテリング T^2 統計量の演算式を以下に示す. ホテリング T^2 統計量は, 入力値 $\mathbf{x}=[x_1, x_2, \dots, x_M]$ と入力値平均 $\bar{\mathbf{x}}$, 分散共分散行列 $\mathbf{S}$ から(27)式により算出できる. (28)式により自由度 $(p, n-p)$ のF分布を用いた99%信頼限界を算出し, これを超えるサンプルを外れ値として除去した.

$$T^2 = (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \quad (27)$$

$$T_{\text{crit}}^2 = \frac{p(n-1)}{n-p} F_{p, n-p}(0.99) \quad (28)$$

2.4.1.3 入力変数選択

EESにより算出された代表値を，VMの入力変数として用いる．推定精度の向上と計算負荷の低減のために，入力変数を選択する必要がある．本研究では変数選択にVIPを用いた[149]．

Table 1 選択された代表値のVIP

信号名	統計量	VIP
Exposure	Mean	3.47
Temperature	StdDev	1.25
RFPower	StdDev	1.21
Flow	Mean	1.08
GasPressure	Mean	1.02
Flow	StdDev	0.94
GasPressure	Range	0.91
Voltage	Mean	0.72
Pressure	Mean	0.51
Position	Mean	0.46

エンジニアの物理的な知見から，EESによって収集された約400の処理信号の中から50の信号を選択し，VMモデルに使用した．この選択は，エンジニアが持つ定性モデルに依存しており，モデルはドライエッチの変数間の関係を説明できる．本研究では，統計的な観点からは重要ではない可能性がある場合でも，開発されたモデルがエンジニアの知識と一致するように，エンジニアによって選択されたすべての信号を使用した．次に，選択された信号ごとに9つの統計量(平均値，中央値，標準偏差，分散，範囲，標準誤差，最大値，最小値，サンプルサイズ)を計算した． T^2 統計量を算出し，入力変数の数とサンプルサイズから99%信頼区間を用いて外れ値を除去し，VIPに基づいて変数選択を行った．Table 1は信号名と統計量の組み合わせで選択された10個の代表値と，対応するVIPを示す．これら10個の代表値は，重要度が無視できないとされるVIP>1の信号に，VIPは1以下であるが，処理に関する知識に基づいてエンジニアによって選択された5信号を追加した．

2.4.1.4 Virtual Metrology による代替計測

ドライエッチ装置の最適エッチレートは、SUMによって推定されている。SUMは、装置の状態変化に対応するために、クエリに対して直近の期間に処理された100枚のウェハデータを使用して、MRAモデルを構築する。新たなクエリが来ると、直近の期間の処理ウェハ100枚を使用してモデルを構築し、期間内のエッチ量の目標値との差分をモデルに入力し、エッチレートを算出する。SUMはクエリにおける装置状態を考慮せず、直近のサンプルからエッチレートを算出するため、メンテナンス等で装置状態にドリフトやシフトが発生した際には、変化の影響を受けることになる。

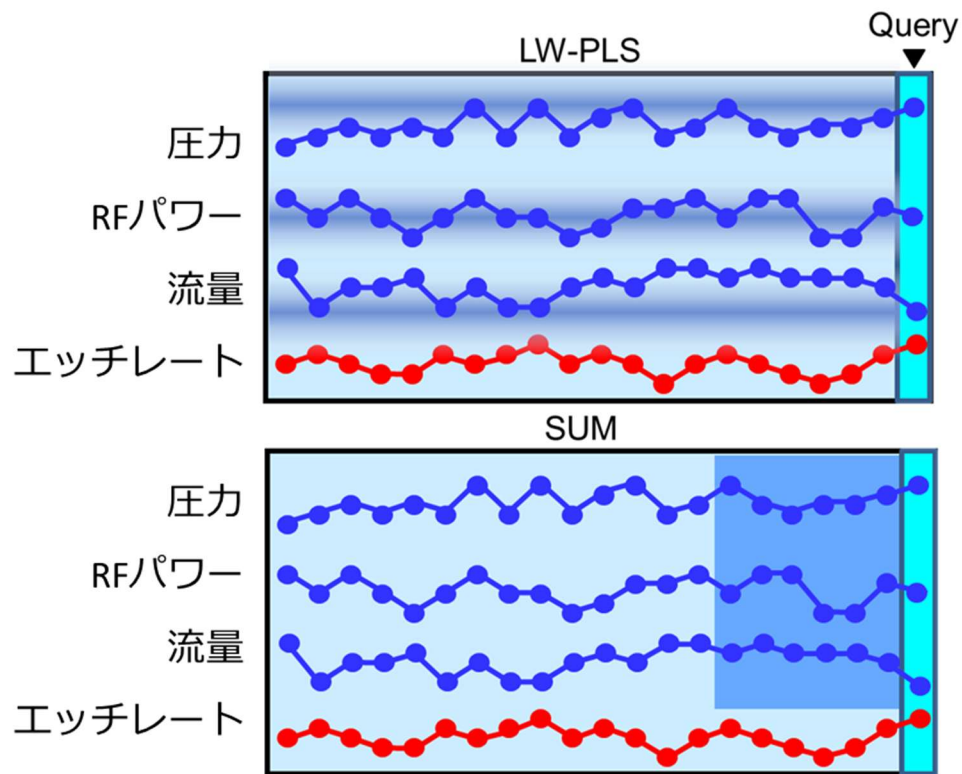


Fig. 17 LW-PLSとSUMの重み付けの手法

Fig. 17は、SUMとLW-PLSの演算におけるデータの優先順位付けイメージを示している。LW-PLSでは、合計200個のサンプルがデータベースに保存され、類似度に基づいて d_n が小さいサンプルが優先される。 ω_n はFig. 17で色のグラデーションとして表現されて

いる。

一方、SUMでは最近のサンプルが優先される。サンプルとクエリの類似性に関係なく Fig. 17の濃い色で示されているように、SUMは連続的に最新のデータに基づいてモデルを更新する。したがって、LW-PLSは装置特性の段階的な変化だけでなく、突然の変化に対しても精度が向上する。さらに、LW-PLSは外れ値がクエリからの距離が遠くなるため自動的に無視されことから、SUMよりも外れ値の影響が少なくなる。

ウェハは、様々な反応ガスを使用して高温、高電圧の条件下で処理され、回路が形成される。ウェハが加工される間に励起プラズマは機器の部品にも損傷を与えてしまう。その結果、これらの機器のメンテナンスのために、部品を交換する必要がある。さらに、ウェハから除去された材料が排気口をふさぎ、チャンバに流れ込んで堆積する。堆積した材料は、エッチに影響する可能性があるため、機器のメンテナンス時に取り除く必要がある。

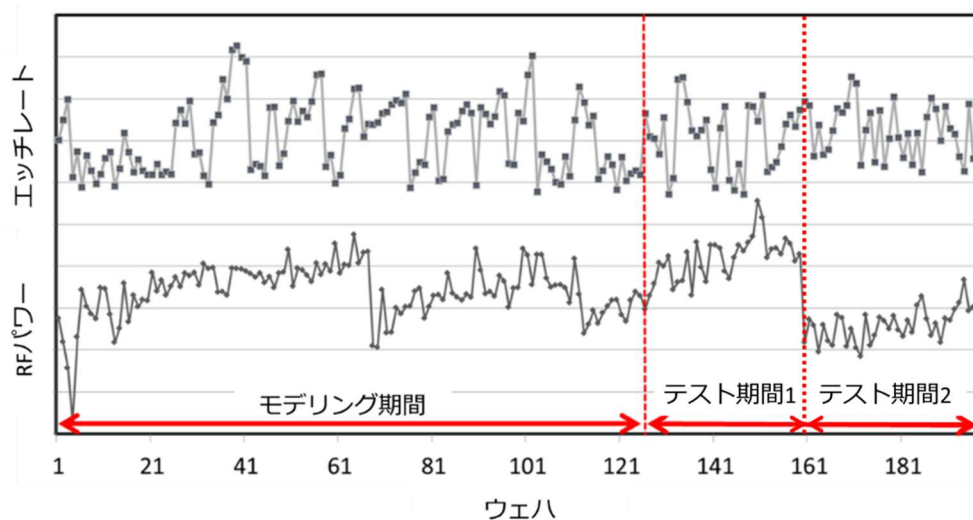


Fig. 18 モデル構築とモデル検証に使用したデータ

Fig. 18はドライエッチ装置の実際の運転データを示す。RFパワー実値には、メンテナンスによるものと思われるシフトが2カ所見られる。左側のモデリング期間のデータにはシフトを1カ所含んでおり、これを用いてモデルを構築する。右側のテスト期間のデータもシフトを1カ所含んでおり、これを境にテスト期間1、テスト期間2を設けてVMモデルを検証した。

VMは、たとえメンテナンスにより処理信号がシフトしたとしても、高い推定能力を維持することが求められるため、評価にはメンテナンスを含むデータを用いた。

LW-PLSとSUMを実際のドライエッチ装置のエッチレートを推定するVMに適用した。用いるデータは変数ごとに平均0、分散1に変換し標準化した。LW-PLSの2つのチューニングパラメータ、すなわち局所化パラメータと潜在変数の数はleave-one-out cross validation(LOOCV)によって $\varphi=1.2$ 、 $R=6$ に決定した。Fig. 19に推定結果を示す。この結果提案されたLW-PLSに基づくVMが、SUMベースの従来のVMよりも優れた性能を発揮している。メンテナンスを挟むテスト期間1、テスト期間2においても、LW-PLSに基づくVMはエッチレートを推定することができた。

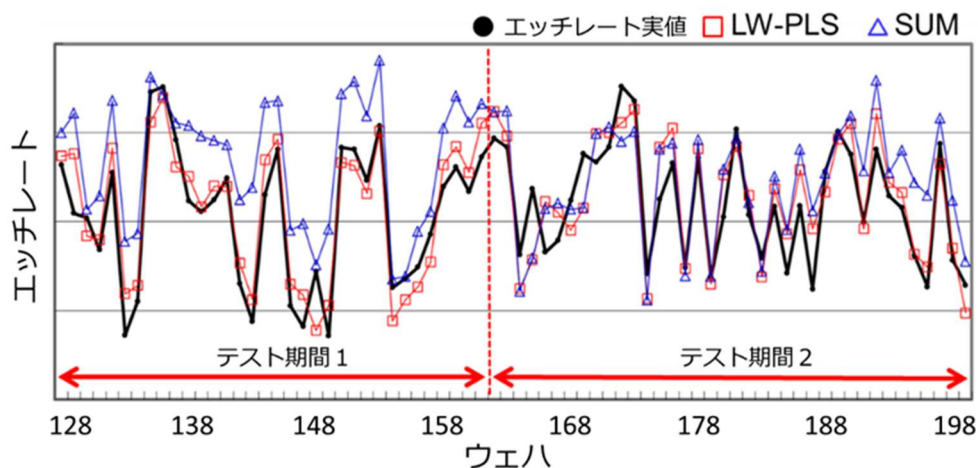


Fig. 19 LW-PLSとSUMによるエッチレートの推定結果

Table 2はLW-PLSの推定精度をSUMとANNモデルと比較した結果である。ANNモデルは、JITモデルとの比較のために構築した。この三層ANNには5つの隠れノードがあり、活性化関数にはシグモイド関数を用いた。LW-PLSの二乗平均平方根誤差(Root-Mean-Square Error: RMSE)は、SUMとANNのRMSEの約55%と85%であることが確認されており、LW-PLSの推定性能はSUMとANNよりも大幅に高いことがわかる。

Table 2 LW-PLS, SUM, ANNの推定精度の比較：
実測値と推定値の相関係数と二乗平均平方根誤差(RMSE)

手法	期間	相関係数	RMSE
LW-PLS	Test1	0.92	0.0015
	Test2	0.86	0.0018
	1+2	0.90	0.0017
SUM	Test1	0.88	0.0037
	Test2	0.77	0.0024
	1+2	0.79	0.0031
ANN	Test1	0.88	0.0019
	Test2	0.76	0.0022
	1+2	0.83	0.002

2.4.2 CMP 装置向け Virtual Metrology 構築

メンテナンスが複雑なCMP装置向けのVMを構築した。この節ではメンテナンスへの対応を考慮した入力変数の選択方法と、モデリング精度の検証結果を示した上で、テストデータを用いて他の手法との推定精度の比較を行った。

2.4.2.1 入力変数選択

半導体のウェハの平坦度を決定するCMP装置の実績データに局所回帰を適用し、研磨レートを推定するVMを構築する。

CMPにおいては100項目以上の説明変数から、まず半導体プロセス知見により約半分の50項目に絞込みを行った。これらの説明変数に対し、メンテナンスを複数含むデータを用いて研磨レートを目的変数としたPLSモデルを構築し、各説明変数のVIPを算出した。メンテナンスの影響を受ける説明変数はVIPが小さくなるため、メンテナンスに対して影響を受けにくい説明変数を選択することができる。

Table 3 選択された代表値のVIP

選択	代表値	ステップ+統計量	VIP
○	step_ID	1Ave	3.45
○	pressure_A_act	1Ave	1.60
○	motor_current	1Ave	1.47
○	conditioner_pressure	2Ave	1.43
○	air_flow_X	1Std	1.41
○	conditioner_pressure_act	2Ave	1.39
○	conditioner_motor_curent	2Ave	1.37
○	air_flowA	1Ave	1.23
○	pressure_Y_act	1Ave	1.09
	slurry_air_pressure	1Ave	1.07
	conditioner_pressure	2Std	1.04
○	pad_temp	1Ave	1.02
	pressure_X_act	1Ave	1.00
	air_flow_Y	1Std	0.98
	air_flow_X	1Ave	0.90

VIPの算出結果のうち目的変数に対する貢献度が高いとされる1以上の項目をTable 3に示す。研磨レート推定に対して物理的に影響しないとエンジニアが判断したslurry_air_pressureとconditioner_pressure, pressure_X_actは除外した。

Table 3で選択と示す項目にて、まず実績データの先頭100枚分を用いてデータベースを構成し、その後逐次モデルを更新しながら局所回帰にて検証演算を実施した。

2.4.2.2 Virtual Metrology による推定

ドライエッチ装置と比較してCMP装置はパッド、ドレッサ、リテーナなど交換部品の種類が多く、その各々の交換時期もまちまちである。そのため、メンテナンスの頻度とそれに伴う装置特性のドリフトやシフトの回数と変移の仕方が不規則になる。そこでテスト期間の推定精度の評価を行う前に、モデリング期間におけるモデリング精度自体の見極めをおこなうこととした。その上でモデリング期間のデータ(100枚分)からVIP変数選択後にLW-PLSでモデルを構築し、テスト期間のデータでVMモデルの推定精度を検証した。頻繁にメンテナンスを施す装置においても、その影響が少ない説明変数を選

択することで、高い推定能力を維持することが求められる。評価にはメンテナンスを含むデータを用いた。

Fig. 20にモデリング精度の検証結果を示す。研磨レート実値には、消耗部品の交換によるものと思われるドリフトやシフトが10数か所見られる。モデリング期間の100枚分の実績データからLOOCVのため1枚選択し、残りの99枚でモデルを構築し、選択した1枚の研磨レートを推定する検証を100回繰返した。結果は相関係数=0.972、RMSE=0.881となり、研磨レートのドリフトやシフトに対しても推定値の目立った逸脱は見られなかった。

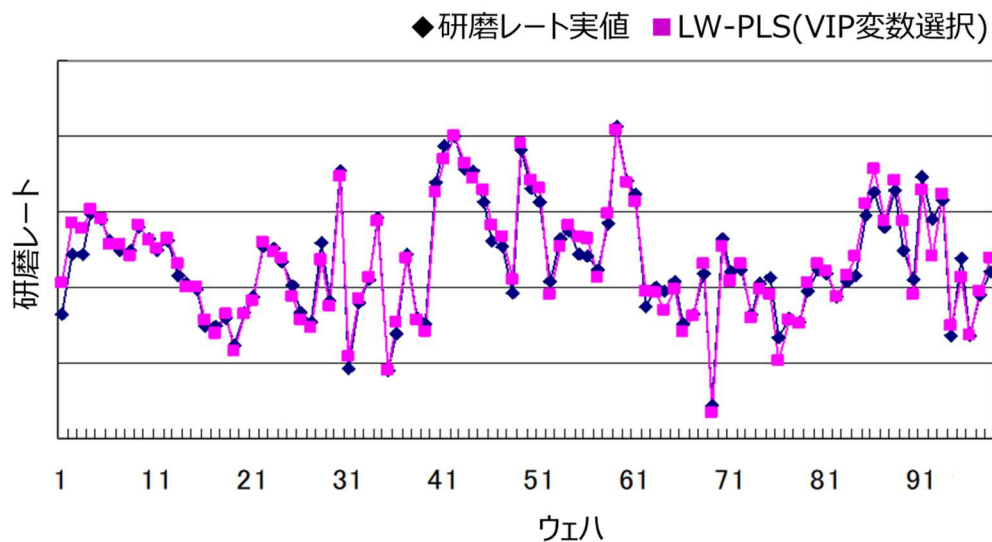


Fig. 20 モデリング期間の研磨レート推定結果

次に提案手法と他の手法の推定精度を比較するために、4種のアプローチでテスト期間の研磨レートの推定を行った。提案手法であるVIP変数選択後にLW-PLSでモデルを構築するのに対して、PLSの代わりに重回帰分析を用いて重み付き局所重回帰分析(LW重回帰分析)を行ったもの、重み付き局所重回帰を行わずにVIP変数選択後にPLSを行ったもの、変数選択も重み付き局所重回帰も行わずにPLSを行ったものを比較する。

- ・ LW-PLS(VIP変数選択)[提案手法]
- ・ LW重回帰分析(VIP変数選択)
- ・ PLS(VIP変数選択)

・ PLS

まず実績データの先頭100枚分を用いてデータベースを構成し、その後逐次モデルを更新しながら検証演算を実施した。実測値と推定値の相関係数とRMSEをTable 4に、提案手法であるLW-PLS(VIP変数選択)の実測値と推定値の比較をFig. 21a)に、PLS(VIP変数選択)の実測値と推定値の比較をFig. 21b)に示す。

Table 4 局所回帰とVIP変数選択による推定の比較

手法	相関係数	RMSE
LW-PLS(VIP 変数選択)	0.981	0.064
LW 重回帰分析(VIP 変数選択)	0.983	0.071
PLS(VIP 変数選択)	0.981	0.086
'PLS	0.963	0.141

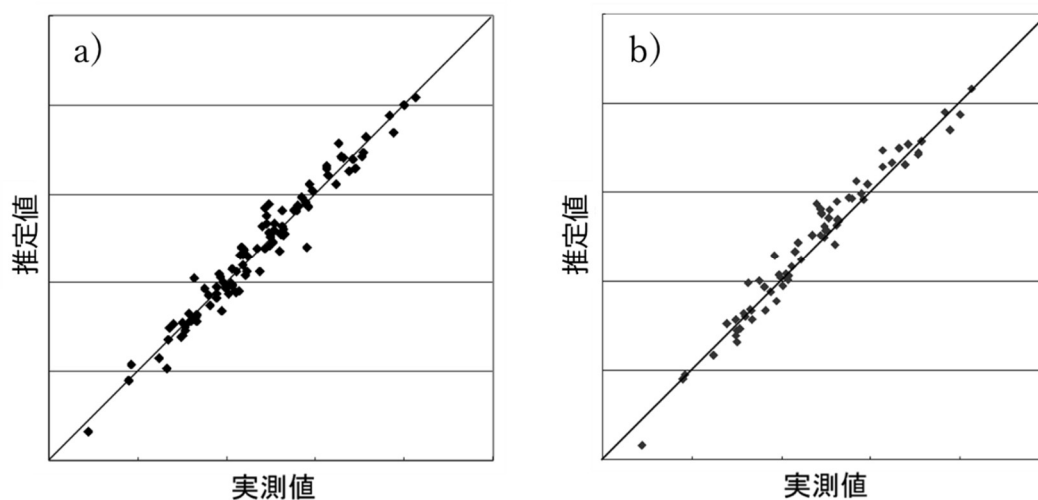


Fig. 21 a)LW-PLS(VIP変数選択)の推定値と実測値の比較, b) PLS(VIP変数選択)の推定値と実測値の比較

2.5 考察

ドライエッチ装置の評価において、メンテナンス前とメンテナンス後の異なる期間での推定性能の変動は、LW-PLSを採用することで低減されている。LW-PLSを使用した場合、実測値と推定値の相関係数 R は0.06、RMSEは0.0003変化した。一方、SUMを使

用した場合、 R は0.11変化し、RMSEは0.0013変化した。ANNを使用した場合、 R は0.12変化し、RMSEは0.0003変化した。SUMとANNの推定性能は、テスト期間1において差が見られるものの、テスト期間2においてその差は小さい。ドライエッチ装置における推定性能は装置メンテナンスによる影響よりも、むしろメンテナンス前後で変化した装置の状態に対して、双方のモデルが用いるサンプルデータが、推定精度を高めるのに適していたかによるものと考えられる。SUMが推定に用いた直近データは、テスト期間1においては不適であったが、テスト期間2においては比較的適していたことで、双方の推定精度に差が出たと考えられる。それに対しLW-PLSは、クエリに近いデータに重きを置くことで、テスト期間1,2の双方において高い推定精度が得られたと考える。

結果として、LW-PLSはSUMやANNよりもドライエッチ装置に対して堅牢であり、LW-PLSに基づくVMはより高い推定性能を達成できている。

CMP装置の評価においては、Fig. 21に示すLW-PLS(VIP変数選択)とPLS(VIP変数選択)の推定値と実測値に顕著な差は見られない。一方Table 4の相関係数とRMSEは、VIPで変数選択した3モデルが良好な結果を示している。これはCMP装置のように複数種類の交換部品を、各々異なる時期に交換することで、頻繁に装置特性のドリフトやシフトが発生する装置で研磨レートを安定して推定するには、このドリフトやシフトの影響を比較的受けない説明変数をVIPにより選択して推定することが有効であったと考えられる。PLS(VIP変数選択)とPLSの相関係数とRMSEに顕著に差が見られることから、CMP装置においても重み付き局所回帰は効果的であったが、それ以上にVIPによる説明変数選択が推定精度向上において効果的であったと考えられる。

2.6 まとめ

半導体製造装置は装置メンテナンスにより装置特性が頻繁に変化するため、VMの推定精度は著しく低下する。本研究では、装置の自動化に対処すべくメンテナンス実施時でも高い推定精度を実現するために、製造エンジニア向けFab-wide Control SystemとしてLW-PLSを用いたVMを開発した。

ドライエッチ装置においてはLW-PLSを適用することで、従来手法であるSUMに対し推定誤差を半減させることができた。SUMは直近のサンプルから推定を行うため、装置メンテナンスによる装置状態変化時に推定精度が変化してしまう課題が見られたが、LW-PLSはクエリに近いサンプルに重きを置いて推定するため、装置の状態変化による影響を最小限に抑え、装置メンテナンスによる推定精度の低下を防ぐのに有効であるこ

とが示された。

CMP装置においては、複数の消耗部品の交換による頻繁な装置状態の変化に対して、VIPによる変数選択により、装置状態の変化の影響を比較的受けない信号に限定して推定を行うことが有効であることが解った。CMP装置で選択された代表値のうち最もVIPが高かったstep_IDは、消耗材の使用時間に比例する値であることから、経時的変化をモデルに反映するのに寄与したものと考え、これによりドリフトやシフトを含む実データにおいても十分な精度の推定を実現していることから、CMP装置の課題解決に対し有益な手段となることを実証した。

このように、Kimらの提案手法[142]に対し、本研究では半導体製造装置特有のシフトやドリフトへの適用を検討することで、VIPによる変数選択とLW-PLSによる非線形性への対処が効果的であることを示し、提案手法はロバスト性が有ることを明示することができた。

VIPによる変数選択とLW-PLSによる非線形な装置状態の変化への対応を併用することは、半導体製造装置の変動に対する追従性を高め、VMの推定精度維持に有効である。本研究により、半導体製造でも最も典型的な2装置であるドライエッチ装置とCMP装置向けのVMを開発することができたことから、これらのモデルを横展開することで、工場全体の装置に容易に実装することができる。

第三章 多変量解析による半導体製造装置の異常検知

3.1 研究の背景と目的

半導体の微細化が進むことで、半導体製造装置自体の要求加工精度も、ますます高くなっている。製造工程を安定させるためには、さまざまなプロセス制御技術が採用されてきた[150]。そのような技術の1つに、測定が困難な寸法を推定することを目的としたVM(Virtual Metrology)がある。そこには半導体製造装置や材料の特性の経時変化に対処するために、ジャストインタイムモデリングアプローチが使用されてきた。たとえばLW-PLS(Locally Weighted Partial Least Squares)は、半導体業界を含む多くの業界で使用されている[28,151,152]。

しかしこれらの制御技術をもってしても、設計ルールの継続的な微細化により、半導体デバイスの不良を未然に防ぐことは困難になっている。そのため各故障の原因となる装置挙動を素早く捉え、原因を究明し、早期に改善することで故障率を最小化する仕組みを確立する必要がある[153]。

今井のグループは、EDA(Equipment Data Acquisition)から収集された装置データから導き出される推定モデルを用いて、装置の異常をいち早く検知する手法をいくつか提案している[99-101]。しかし多くの半導体製造装置は、非線形かつ時間変動性が強いことから、線形近似や単変量モデルでは複雑な劣化挙動を十分に再現することは困難である。多くの因子から特徴量を抽出し、その組み合わせから良否判定するのが効果的であると著者は考える。

本章の目的は、半導体工場に数百ある製造装置の、圧力、ガス流量、温度、パワーといったアクチュエータ挙動の相関関係が変化したときにいち早く検知し、その原因を究明するための新しい特徴量を提案する。半導体製造における品質維持に欠かせない装置の重要な部位のセンサ信号をEDAで取得し、その時系列データと製品出来栄えの測定値から、特徴量を算出する。それらを組み合わせて、品質管理担当者が異常装置を見極め、改修のための部位を容易に特定できるFab-wide Control Systemとしての多変量検知モデルを構築する。検知能力の向上により、従来手法では検知することができなかった異常の検知確度を高める。

3.2 対象装置と特徴

コンピュータのCPUを構成する基本回路に使用される構造として、現在主流となっているのが相補型金属酸化膜半導体(Complementary Metal-Oxide-Semiconductor: CMOS)であり、その構造をFig. 22に示す。CMOSは、MOS構造(金属と半導体の間に薄い酸化膜が挟まれた構造)のP型トランジスタとN型トランジスタを組み合わせた構造をしている。トランジスタはソース、ゲート、ドレインの3つの電極を持つスイッチのようなもので、半導体に加える不純物を変えることで、P型とN型の二種類のトランジスタをつくることができる。CMOSは消費電力が小さく、集積度を高められるといった特徴を持つが、微細化の進化に伴い、配線間や層間を益々狭くする必要が生じ、酸化膜(層間絶縁膜)を製造する成膜装置は、より重要度を増しつつある。特にALD(原子層堆積)装置は、原子レベルでの精密な薄膜形成を可能にすることから、次世代デバイスの開発に不可欠な存在である。本章ではこの成膜装置を取り上げる。

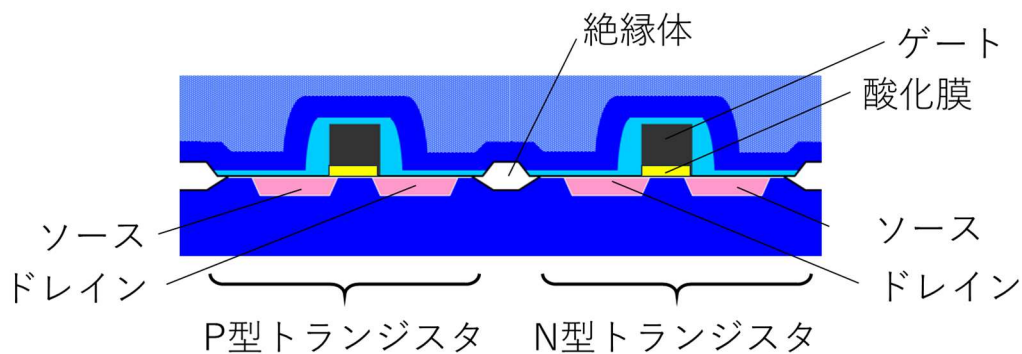


Fig. 22 CMOS 半導体の構造

Fig. 23はバッチ式成膜装置の概略図である。搬送容器であるFOUP(Front-Opening Unified Pod)からロボットハンドでウェハを取り出し、ロードエリアに引き込む。その後、ボートに積載し、炉に投入する。金属膜など、装置内での移載中にウェハが酸素にさらされると品質が劣化するため、ロードエリアの酸素濃度を下げる必要がある。酸素濃度を所望のレベルまで下げられない装置は異常として修理される。このように、酸素濃度は装置性能を示す最も重要な指標の一つである。

ロードエリアの酸素濃度を下げるのに、窒素による置換を行うが、窒素による酸素の

置換能力は装置毎に少しずつ異なり、このわずかな違いが装置毎の性能の差を生み、結果的に製品特性に影響する。窒素の圧力以外にも、ロードエリアの状態など、酸素濃度を左右する要素が存在するため、現在行われているロードエリア全体の酸素濃度を一か所で計測し異常を検知する方法は、部品の取り付けの差異により生じるリークなどを見落とすリスクがある。そこでより厳密に異常を検知すべく、複数の信号を使用することで異常を検知することが望まれる。本研究では、ロードエリアの圧力と酸素濃度の両方から異常な装置を検知する方法を提案する。

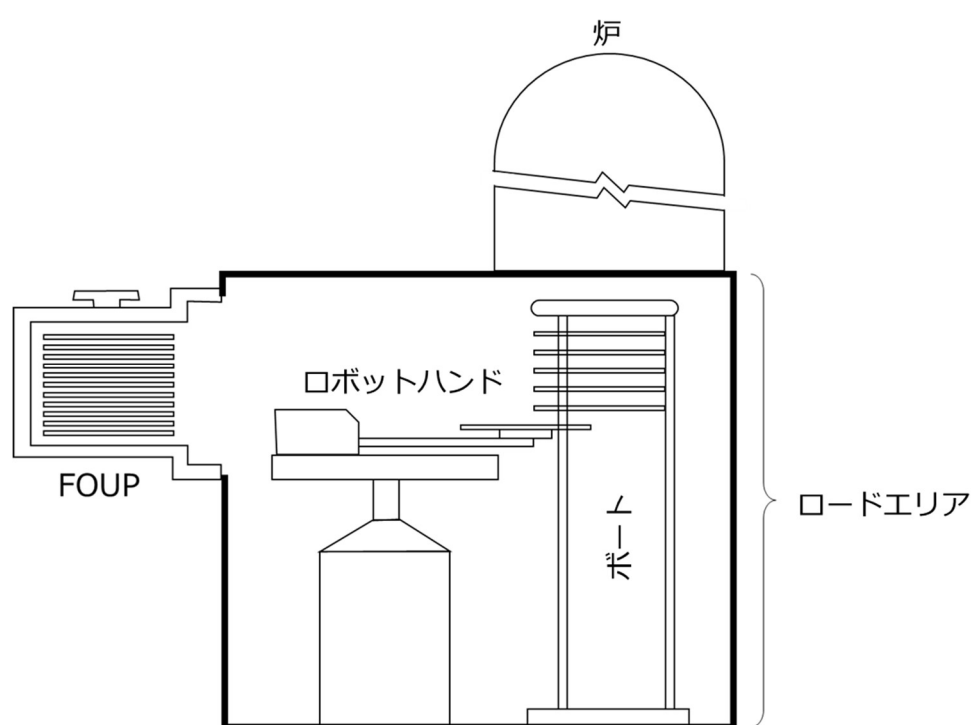


Fig. 23 成膜装置の概略図

3.3 異常検知のための特徴量

本節ではモデル構築に用いた目的変数と説明変数について述べ、その時系列データの全体ないしは分割したものを単変量・多変量にて統計値を算出し、抽出した特徴量について説明する。

3.3.1 装置データ

ロードエリアの酸素濃度が規定以上に高まると製品の出来栄に悪影響するため、装置稼働している間、酸素濃度と圧力を常に監視し、この期間を監視区間と呼ぶ。正常装置と異常装置の監視区間における酸素濃度と圧力の散布図をFig. 24に示す。これまで監視区間の終了点の酸素濃度のみを使い、圧力を無視して装置の正常・異常を判定していた。

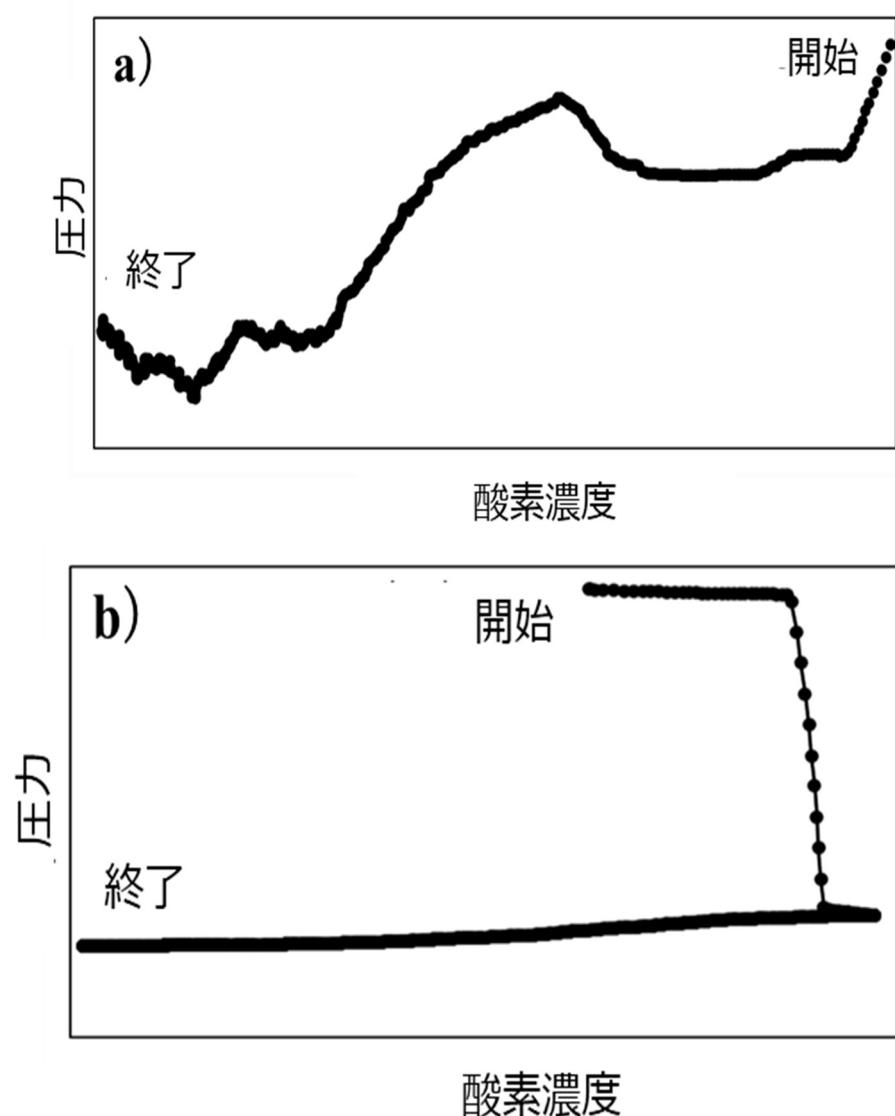


Fig. 24 監視区間における酸素濃度と圧力の散布図：a)正常装置とb)異常装置

酸素濃度の終点の値という1変数による判定に対し、より入力情報を増加させることで判定精度の向上を図ることを検討した。酸素濃度と同時に計測されている圧力を加えて2変数とした。Fig. 24の比較において、正常装置と異常装置における酸素濃度と圧力の始点から終点までの挙動に明らかな差があることから、この時系列データも入力情報として活用した。Fig. 25は監視区間内における酸素濃度の推移を経過時間で4つの区間に分け、各々の期間における統計量を算出して説明変数とした。さらに監視区間をクラスタリングし最適クラスタ数を説明変数とした。

モデル化のための目的変数(正常/異常)は、酸素濃度と圧力の挙動の良し悪しを、品質保証担当者が目視で評価し決定した。

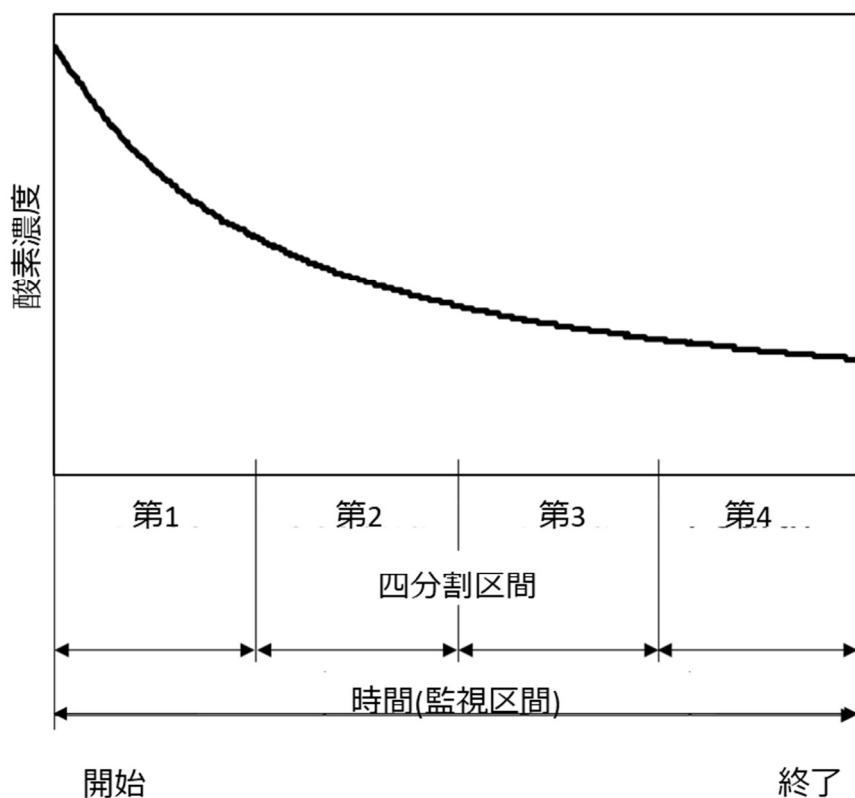


Fig. 25 酸素パージの監視区間の分割

3.3.2 特徴量

半導体製造装置は量産に入る前の試作品の数が少ないため、量産開始時から異常を検知するためには少数サンプルにてモデルを構築することが求められる。そのため、少ないサンプルからより多くの情報を抽出すべく、本研究では装置内の処理が時系列で変移する全体像と時間軸上で分割した領域、さらにはクラスタ状に分類することで特徴量を抽出した。これにより酸素濃度と圧力の2信号から16種類の特徴量(F01～F16)を算出し、その組み合わせで検知モデルを構築した。Table 5では縦に特徴量を、横に前処理を並べ、アスタリスク(*)は、各特徴量を算出するためにどのような前処理を行ったかを示している。

Table 5 特徴量抽出に使用した測定と前処理

	<i>OX</i>	<i>PR</i> _{10MA,d}	<i>OX</i> _{10MA,d}	<i>PR</i> _{100MA,d}	<i>PCI</i>
F01	*	*			
F02	*	*			
F03	*	*			
F04	*	*			
F05	*	*			
F06	*				
F07			*		
F08				*	
F09			*	*	
F10			*	*	
F11			*	*	
F12					*
F13					*
F14					*
F15					*
F16				*	

酸素濃度と圧力の信号は不規則な変動を排除するために移動平均を取った。酸素濃度(OX)については、測定値または10点移動平均(OX_{10MA})をまず算出する。監視区間のサンプルサイズは K である。圧力(PR)については、10点移動平均(PR_{10MA})または100点移動平均(PR_{100MA})を算出する。さらにサンプル間の変位量を見るために、下記式のように10点移動平均、100点移動平均の前後の値の差を算出し $OX_{10MA,d}$, $PR_{10MA,d}$ および $PR_{100MA,d}$ とする。 OX_k および PR_k は OX および PR の k 番目のサンプルであり、算出する差分値は、10点移動平均の場合は10点、100点移動平均の場合は100点隔てた2サンプル間の差分値に比例する。

$$OX_{10MA,d}(k) = \frac{\sum_{i=k-10}^{k-1} OX_i}{10} - \frac{\sum_{i=k-9}^k OX_i}{10} = \frac{OX_{k-10} - OX_k}{10} \quad (29)$$

$$PR_{10MA,d}(k) = \frac{\sum_{i=k-10}^{k-1} PR_i}{10} - \frac{\sum_{i=k-9}^k PR_i}{10} = \frac{PR_{k-10} - PR_k}{10} \quad (30)$$

$$PR_{100MA,d}(k) = \frac{\sum_{i=k-100}^{k-1} PR_i}{100} - \frac{\sum_{i=k-99}^k PR_i}{100} = \frac{PR_{k-100} - PR_k}{100} \quad (31)$$

高周波成分を多く含む装置データにおいて、最も平滑化が望める $OX_{10MA,d}$ と $PR_{100MA,d}$ からさらに主成分分析を行い、第一主成分のスコア(PCI)を特徴量の元データとした。これらが時系列で変移する全体像と時間軸上で分割した領域、さらにはクラスタ状に分類することで特徴量を抽出した。

以下に個々の特徴量の算出方法についてまとめるとともに、16台の装置(E01~E16)にて算出した特徴量をTable 7に示す。

特徴量

F01: $PR_{10MA,d}$ を説明変数とし、酸素濃度(OX)を目的変数とする単回帰係数。サンプルサイズが異なる場合は、出現順で引き当てる。

F02: $PR_{10MA,d}$ を説明変数とし、酸素濃度(OX)を目的変数とする単回帰の推定値の標準誤差。サンプルサイズが異なる場合は、出現順で引き当てる。

F03: $PR_{10MA,d}$ と酸素濃度(OX)の相関係数。サンプルサイズが異なる場合は、出現順で引き当てる。

F04: OX と $PR_{10MA,d}$ の最も出現度数が高い組み合わせの割合.

Table 6は OX と $PR_{10MA,d}$ の出現回数をマトリクス状に配置した例を示している. この装置では出現78回が最大で, 装置毎に測定点の点数が異なることから, それを総サンプルサイズ454で除算する.

F05: F04の最も出現数が高い組み合わせにおける圧力($PR_{10MA,d}$).

例えばTable 6ではF05は50である.

Table 6 OX と $PR_{10MA,d}$ の2次元分布表の例

		OX				
		3	4	5	6	7
$PR_{10MA,d}$	49	0	0	0	0	0
	50	78	68	28	0	0
	51	57	59	52	61	51
	52	0	0	0	0	0

F06: 第1四分割区間における最小酸素濃度.

F07: 第4四分割区間における $OX_{10MA,d}$ の標準偏差.

F08: 第4四分割区間における $PR_{100MA,d}$ の標準偏差.

F09: $OX_{10MA,d}$ と $PR_{100MA,d}$ のk-meansクラスタ分析した際の最適クラスタ数.

クラスタの最適数はccc(3次クラスタリング基準: Cubic Clustering Criterion)[154]を最大化することによって決定した. cccは, n 次元空間におけるクラスタの同じ大きさの n 次元ベクトル空間上の超立方体の集合への近似を指標化している. k-meansクラスタ分析では初期値の違いによりクラスタリング結果に差が出ることが懸念される. その対策として計算リソースを削減できるk-means++[155]や, 繰り返し再現性が高いKKZ[156]が提案されている. KKZはk-means++よりも外れ値に敏感であるため, 本研究ではk-means++を採用した. 分割されたサンプルを視覚で容易に確認できるようにクラスタ数は1~20に限定した.

F10: F09の最大ccc.

F11: 4つの四分割区間におけるサンプルサイズの変位.

これは, Fig. 26の近似直線の傾き. この図では, 縦軸は各四分割区間内のクラスタ数20でk-meansクラスタ分析した際に, 四分割毎にクラスタに属する度数の標準偏差を四分割毎に並べて傾きを算出する.

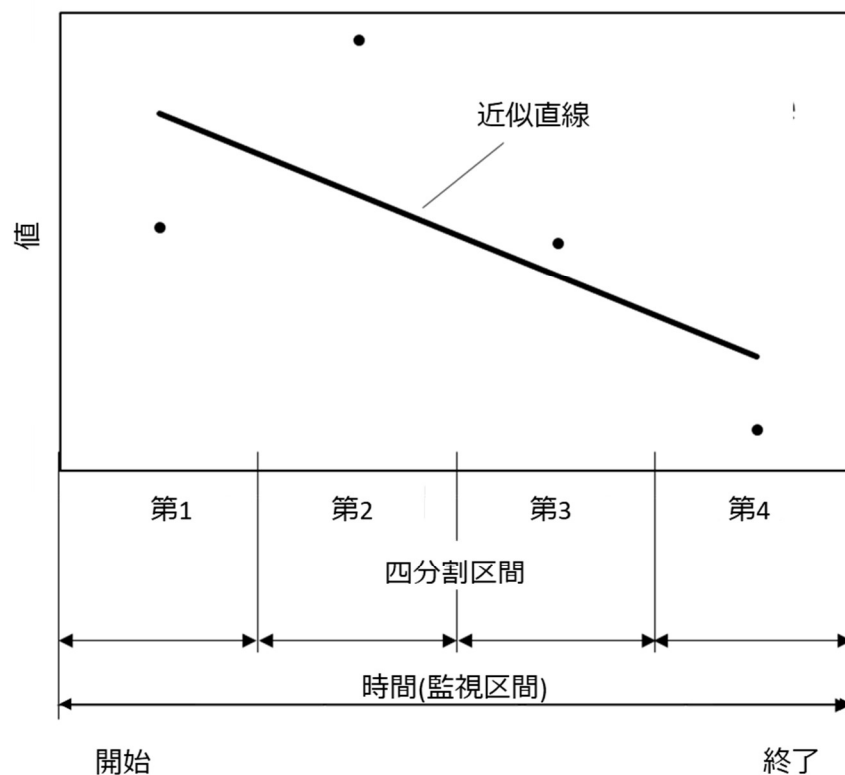


Fig. 26 第1四分割区間から第4四分割区間への変位のイメージ

F12: 第1四分割区間における *PCI* の標準偏差.

圧力の100MAと酸素濃度の10MAのサンプル毎の前後の差分値を標準化した値から第一主成分得点を算出した際の, 第1四分割区間の標準偏差を算出する.

Table 7 装置から取得したデータから計算された特徴量

	F01	F02	F03	F04	F05	F06	F07	F08
E01	0.16	1.4	0.04	39.2	57	19.3	0.004	0.003
E02	3.83	0.9	0.89	28.5	53	17.6	0.005	0.001
E03	2.36	4.4	0.12	19.8	47	11.2	0.005	0.004
E04	9.20	2.0	0.76	26.9	50	8.1	0.005	0.003
E05	7.31	4.3	0.44	11.0	50	10.0	0.005	0.002
E06	9.13	2.2	0.90	13.6	51	11.4	0.005	0.004
E07	4.84	1.4	0.92	22.5	50	7.1	0.005	0.003
E08	7.71	2.1	0.84	19.4	53	14.7	0.007	0.001
E09	10.10	3.2	0.83	16.2	56	10.3	0.005	0.004
E10	8.26	2.9	0.67	35.7	53	7.3	0.005	0.003
E11	5.59	1.7	0.90	17.4	46	8.9	0.005	0.003
E12	7.47	2.8	0.66	20.1	52	5.7	0.004	0.006
E13	5.70	2.9	0.78	15.7	46	12.4	0.006	0.004
E14	7.04	1.7	0.83	30.1	56	7.3	0.004	0.005
E15	5.77	2.1	0.79	24.4	51	5.9	0.005	0.003
E16	9.77	2.3	0.84	16.0	55	10.0	0.006	0.003

	F09	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16
E01	19	-22	7.9	-0.32	-0.31	1.46	1.42	4.2
E02	18	17.1	3.3	-0.16	-0.15	1.00	0.94	6.3
E03	3	-44	6.6	-0.28	-0.28	1.39	1.37	-0.1
E04	3	-28	4.5	-0.23	-0.20	1.46	1.26	-1.7
E05	6	-19	5.0	-0.17	-0.15	0.99	0.84	1.9
E06	15	-26	-2.7	0.01	0.01	0.84	0.81	-2.1
E07	20	-19	2.7	-0.16	-0.16	1.14	1.11	2.6
E08	18	-4.1	4.1	-0.19	-0.18	0.99	0.94	6.1
E09	15	-19	5.3	-0.04	-0.04	0.68	0.60	0.2
E10	20	-23	6.6	-0.25	-0.22	1.37	1.20	2.8
E11	20	-16	5.2	-0.22	-0.21	1.31	1.24	2.0
E12	19	-28	-0.3	-0.09	-0.08	0.96	0.86	-0.1
E13	15	-26	2.8	-0.22	-0.21	1.35	1.32	-1.5
E14	9	-38	6.0	-0.10	-0.09	1.02	0.91	0.4
E15	16	-18	3.9	-0.28	-0.26	1.50	1.37	0.8
E16	19	-35	1.7	-0.14	-0.12	1.05	0.89	1.6

F13: 第1四分割区間の標準偏差を正規化.

圧力の100MAと酸素濃度の10MAの差分値を標準化した値から第一主成分得点を算出し、監視区間の標準偏差を算出し、その標準偏差で第1四分割区間標準偏差を除算する.

F14: 主成分得点標準偏差傾き.

圧力の100MAと酸素濃度の10MAの差分値を標準化した値から第一主成分得点を算出し、その各四分割区間の標準偏差を四分割毎に並べて傾きを求める.

F15: 4つの四分割区間における *PCI* のパーセント変動の変位.

これは、Fig. 26でも近似直線の傾きとして定義される. この図では、縦軸は各区間における *PCI* のパーセント変動であり、これはF13で定義されている.

F16: 4つの四分割区間におけるサンプルサイズの変位.

これは、Fig. 26でも近似直線の傾きとして定義されている. この図では、縦軸は各四分割区間内の20のクラスタに属するサンプルサイズの標準偏差である. クラスタは $PR_{100MA,d}$ のみを使用して構築されている.

3.4 実データによる検証

提案手法の異常装置検知能力を評価すべく、エンジニアが酸素濃度と窒素圧力のデータを目視で確認し、装置の正常・異常を判定し目的変数とした. 監視すべきデータは膨大であるため、通常は1つ1つのデータをエンジニアが分析することは現実的ではない. 今回は提案手法の異常装置検知能力を評価するために詳細に解析し、異常装置の特定を行った.

加えて半導体製造装置は1日当たりの生産台数が非常に少ないため、限られたサンプルサイズによるモデリングを余儀なくされる. 今回構築した異常検知モデルは、試作品16台の装置(正常装置10台, 異常装置6台)のデータを使用した. その汎化性能は、量産が開始されることで入手できた39台の装置(正常装置31台, 異常装置8台)のデータを使用して評価した. 試作品と量産品を加えたデータでモデリングを行えば、モデルの汎化性能の向上が期待できるが、量産の初期段階で装置の異常を判断することが求められるため、試作品のデータのみでモデルを構築する. 用いるデータは変数ごとに平均0, 分散1に変換し標準化する.

試作において収集されたデータから算出した16種類の特徴量を説明変数とし、装置の正常/異常を目的変数としてロジスティック回帰にてROC(Receiver Operating Characteristic)曲線を描き、ROC曲線の下領域として定義されるAUC(Area Under the Curve)を計算した。

3.4.1 単変量検知モデル

16種の特徴量を説明変数とし、正常または異常な装置16台をバイナリ目的変数として使用し説明変数毎にロジスティック回帰を行った。Table 8は検知能力の比較結果をまとめたものである。F06のAUCは0.93で、酸素濃度のみでの異常な装置検知において最も高いAUCとなったことから、これを単変量モデルとして汎化性能の評価に用いる。

Table 8 単変量検知モデルの AUC の比較

特徴量	AUC
F06	0.93
F01	0.67
F09	0.67
F08	0.63
F16	0.61
F02	0.57
F03	0.57
F04	0.57
F14	0.57
F05	0.54
F15	0.53
F07	0.51
F12	0.50
F10	0.47
F13	0.47
F11	0.44

3.4.2 多変量検知モデル

二変量検知モデルは、単変量検知モデルで選択されたF06と別の特徴量を組み合わせで説明変数とし、正常または異常な装置16台をバイナリ目的変数として使用しロジスティック回帰を行った。Table 9は二変量検知モデルのAUCをまとめたものである。F06とF16の組み合わせは、AUC 1.00を達成した。AUCは1.00が最高であるため、一般的にこれ以上の評価は必要ないと考えられるが、本検討のモデル作成に用いたサンプルは16データと必ずしも十分な数でないため、さらなる汎化性能の検証を行うことが適切と考える。二変量検知において2番目に高いAUCを達成したF06とF10の組み合わせに、更に別の特徴量と組み合わせることで二変量検知よりAUCを向上できるか、三変量検知モデルを構築し検証した。Table 10にそのAUCを示す。三変量検知モデルの中で、最も高いAUCはF06, F10, F11の0.967であった。

Table 9 二変量で作成したモデルの検知能力の比較

特徴量 1	特徴量 2	AUC
F06	F16	1.00
	F10	0.95
	F03	0.93
	F07	0.93
	F08	0.93
	F12	0.93
	F13	0.93
	F14	0.93
	F15	0.93
	F01	0.92
	F11	0.92
	F02	0.90
	F04	0.90
	F09	0.90
	F05	0.90

追加検証したF06, F10, F11の三変量モデルがAUC1.0に満たなかったため、更なる追加検証としてF06, F10, F11に別の特徴量と組み合わせで四変量モデルを構築した場合

合のAUCをTable 11に示す. 四変量検知モデルによる追加検証で, 最も高いAUCは0.967で, 三変量検知モデルのAUCと同じであった.

四変量モデルではAUCの向上が見られなかったため, 多変量検知モデルの構築としてはF06,F16の二変量モデルと, F06,F10,F11の三変量モデルを, 汎化性能の評価に用いる.

Table 10 三変量で作成したモデルの検知能力の比較

特徴量 1	特徴量 2	特徴量 3	AUC
F06	F10	F11	0.967
		F01	0.950
		F03	0.950
		F07	0.950
		F08	0.950
		F12	0.950
		F13	0.950
		F14	0.950
		F15	0.950
		F05	0.933
		F02	0.933
		F09	0.933
		F04	0.917

Table 11 四変量で作成したモデルの検知能力の比較

特徴量 1	特徴量 2	特徴量 3	特徴量 4	AUC
F06	F10	F11	F03	0.967
			F07	0.967
			F08	0.967
			F12	0.967
			F13	0.967
			F14	0.967
			F15	0.967

検知モデルは、未知のデータや将来のデータに対しても、高い精度で異常を検知する必要がある。Tables 12,13,14は、本節で選択した3つのロジスティック回帰モデルを量産品である39台の装置(31台の正常装置と8台の異常装置)のデータに適用し、閾値0.5で導出された混同行列である。装置の判定においてはTrue Positiveが大半となり、False PositiveとFalse Negativeの数に大きな差は無いため、閾値は0.5とした。

Table 12 単変量モデルによる異常検知結果(F06 を使用)

	検知結果 OK	検知結果 NG	accuracy
品質判定 OK	29	2	82%
品質判定 NG	5	3	

Table 13 二変量モデルによる異常検知結果(F06, F16 を使用)

	検知結果 OK	検知結果 NG	accuracy
品質判定 OK	29	2	82%
品質判定 NG	5	3	

Table 14 三変量モデルによる異常検知結果(F06, F10, F11 を使用)

	検知結果 OK	検知結果 NG	accuracy
品質判定 OK	29	2	87%
品質判定 NG	3	5	

3.5 考察

装置の動作を表す16種の特徴量を定義し、異常な装置を検知するための3つのモデルを構築し、モデル構築段階ではすべてのモデルについて0.9以上のAUCが得られた。一般的にAUCは0.8以上で良好な判別能力を持つと言われており、構築した3モデルは装置の異常検知に有効であることが証明できた。

単変量モデルに採用された特徴量(F06: 第1四分割区間における最小酸素濃度)は、従

来手法と同様に酸素濃度のみでの判定であることから、従来手法の有効性の一端を示す結果となった。しかし、従来手法が終点を使用したのに対し、F06は第1四分割区間であることから、初動でいかに酸素を置換できるかが異常検知に対して有効であることを示すことができた。

F06と共に二変量モデルに追加された特徴量(F16: 4つの四分割区間におけるサンプルサイズの変位)、さらに三変量モデルに追加された特徴量(F10: F09の最大ccc, F11: 4つの四分割区間におけるサンプルサイズの変位)は、いずれも時系列データから抽出された特徴量であり、従来手法の終点のみによる判定方法とは異なる手法であり、これらの2モデルにおいてもAUCが0.9以上となったことで、提案手法の有効性を示すことができた。

さらに製造現場での製品検査において最も重視される検知精度に関しては、単変量モデルと二変量モデルよりも、三変量モデルの方が87%とわずかに上回る結果となった。これにより多因子(酸素濃度と圧)を時系列で監視する提案手法は、実運用における能力が高いことを示すことができた。

半導体製造装置は市場不良による損害が大きいため、False Negativeを減らすための検査増はむしろ好ましい。3つのモデルを併用することで、より厳しく判断することにより、市場不良を1件でも減らすことは有益である。本研究で用いたサンプルは16台分であり、特徴量が16種あるのに対して十分なサンプルサイズを確保できていない。検知性能をさらに向上させるには、生産が進むことで得られる新たなデータを追加して、モデルを再構築する検討も求められるが、十分なサンプルが蓄積されるまで異常検知ができないことのリスクと対比する必要がある。異常検知に有益な特徴量を早期に絞り込み、必要なサンプルサイズを低減できることも求められる。

3.6 まとめ

本研究では、半導体製造装置の自動化に対処すべく品質管理担当者が異常装置を検知できるFab-wide Control Systemとして異常検知モデルを開発した。ロードエリアの酸素濃度と圧力の挙動から16種類の特徴量を抽出し、それらを組み合わせた単変量・多変量モデルを構築し、装置の異常検知能力を向上させた。これらのモデルは成膜装置のロードエリアに着目し、従来の酸素濃度の終点のみでの監視では困難であった異常を、装置の組み上げ前に検知することを可能にした。

装置の検証に用いるサンプルは試作中の装置16台分であり、特徴量が16種あるのに対してサンプルサイズは十分とは言えない。たとえ少数サンプルであっても早期のモデル適用による異常の検知を実現してゆくことが経営的に有利と判断し導入を実現し、検討不足であるが現場において有効に機能している。しかし、その過程で蓄積されたより多くのデータから再度モデルを構築し、現行利用される少数サンプルにおけるモデルの確からしさを確認することが必要であり、今後実施してゆくべきと考える。

半導体デバイスの設計ルールが進化に伴い、装置に求められる性能は今後さらに高まることが予想されることから、有益な特徴量を早期に絞り込むことで、少ない特徴量での高性能な異常検知モデルを構築してゆくことが求められる。

第四章 半導体製造条件決めにおける評価実験の最適化のための実験計画

4.1 研究の背景と目的

半導体製造において、求める半導体特性を得る製造条件を導出するための実験には、単一因子実験(One Factor Design: OFD)が行われてきた。これは実験結果から技術者が数理解析なしに製造条件を決める上で容易に利用できる方法であるが、主効果のみを指標とすることから、2次項(1変数の2乗項)効果といった影響を無視してしまうという問題がある。

守屋らは成膜装置における面内均一性において、変数選択と予測誤差の計算を繰り返すことによる装置パラメータの最適化を提案した[102]。田中らはベイズ最適化により、処理条件と用いる材料の組み合わせから、高いエッチレートを実現する条件を見出す手法を提案した[103]。これらの最適化モデリングにおいては、装置データに含まれる装置アクチュエータの管理限界を超えるばらつきにより誤った推定結果を得ることが危惧される。特に成膜装置は、因子間の交互作用や、各因子の2次項効果が顕著に表れる装置であることから、因子間の交絡の影響を最大限考慮した実験計画を用いるべきと筆者は考える。

本章の目的は、成膜条件を最適化する際に、D最適計画、あるいは決定的スクリーニング計画を用いることで、これらの問題に対処した装置モデルをEDA(Equipment Data Acquisition)にて取得された時系列の装置データにより構築し、プロセスエンジニアが最適化された成膜条件を導き出せるFab-wide Control Systemとしての仕組みを開発することである。

4.2 対象装置と特徴

半導体製造装置は「バッチ式」と「枚葉式」という二つに分類することが出来る。バッチ式装置は、一度に多くのウェハを処理できるので大量生産に適しており、枚葉式装置はウェハを一枚ずつ処理するため、個別の作業が可能となる特徴がある。たとえばバッチ式の装置を使用すると、200～300枚のウェハを同時に処理することができるため、製造コストを大幅に削減することが可能となる。反面ウェハ個別に緻密な処理を施す

ことが難しくなる場合がある。枚葉式装置では1枚のウェハに対して処理を行うため、ウェハ毎のより厳正な品質管理が可能となるが、生産効率は低下する。すなわち300枚のウェハを長時間かけて1回処理するのと、1枚のウェハを短時間ではあるが300回処理する方式を上手に使い分ける必要がある。

さらにバッチ式と枚葉式は、サイクルタイムへの影響を考慮する必要がある。これまでバッチ式が主流とされていた、バッチ式成膜装置や洗浄装置において、枚葉式を採用することで、サイクルタイムを $3/4 \sim 1/5$ に短縮することが出来ると報告されている[157]。この考え方は、国内先端のロジック半導体製造の現場にも適用されており、ロジック半導体においては重視され、サイクルタイムの短縮において不可欠な方式と言える。

本章では第三章に続きバッチ式成膜装置を取り上げる。成膜装置は、膜種によっては炉内において 800°C 近い温度にウェハを熱する製造工程であり、成膜に用いるガスが温度によって「密度」「粘性」「拡散係数」が変化するため、2次項効果を含めた補正関数が必要になったり、他の因子と交互作用を起こしたりする。そのため製造条件を決める実験においては、2次項効果と交互作用項を考慮した評価を実施することが望まれる。そのため交絡が極力小さくできる実験計画を立案する必要がある。従来手法である単一因子実験計画では、これらを十分に考慮できない可能性が有るため現場の実データを用いて単一因子実験の課題を明らかにする。

加えて、バッチ式の成膜装置は、1回の実験に8時間近くを要するため、多くの因子を網羅的に検証するには、膨大なコストを要する。量産時の生産性においては問題にならない処理時間であるが、評価実験においては致命的な不利益となる。

以上より、交互作用や2次項効果を考慮しつつ、効率的な実験を実現する手法の採用が求められる。

4.3 実験計画の手法

実験の因子数が多く、交互作用や2次項効果が想定される場合は、古くから行われてきた直交表にこれらの効果を加味した対策を施してきたが、実施する実験回数が増加する問題が生じてきた。半導体製造においては、実験コストを最小限にするため、より実験回数を減らすことが求められる。なお、本研究では応答の2次項効果を含むモデルの構築を想定しており、そのため各因子は最低3水準で設計される必要がある。本節で

は、他の実験計画に比べて因子数に対して実験回数を少なくすることが期待できるD最適計画と決定的スクリーニング計画について概要を述べる。

4.3.1 実験計画

実験を計画する場合、対象とする因子(要因)が少なければ、完全実施要因計画を使用することもできる。例えば、4因子2水準の完全実施要因計画では、 $16(=2^4)$ 回の実験で各因子の主効果と2因子間交互作用をすべて求められる。しかし、要因が増えると多くの実験が必要となる。そのため、一部実施要因計画を使用して実験回数を減らす。一部実施要因計画としては直交表が一般的であり、例えば、4因子2水準に対して使われることの多いL8直交表を使用すれば、半分の8回の実験で主効果を求めることができる。しかし、最適化を目的とする実験では主効果以外に交互作用と2次項効果も求める必要があるため、3水準以上の実験計画が必要となる。

多因子の3水準直交表は大規模となり、交互作用を含めた評価を行うには効率が良くない。そのため、多因子での実験では、最初に2水準の直交表やPlackett-Burman計画などを使用した実験を実施して因子をスクリーニングしたのち、中心複合計画やBox-Behnken計画のような応答曲面計画[158]を用いて最適化のための実験を実施する方法も用いられる。しかし、これらの計画を用いても多因子では実験の回数が多くなることは避けられず、特に実験回数に制約の多い実機実験では、より効率のよい計画が必要となる。

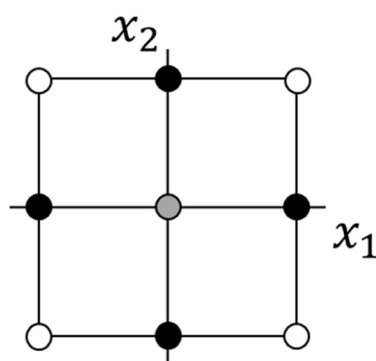


Fig. 27 2 因子デザイン

いわゆる単一因子計画は、一つずつの因子の最適水準を探りながら逐次的に実施される場合が多いが、製造現場で一般的に使用される単一因子計画は、例えば2因子の場合、Fig. 27の中心点といわゆる軸上点(●)を実験点とする配置で行う実験計画となっており、この計画では主効果は交互作用および2次項効果の影響を受けない。また、交互作用同士は完全に交絡し、2次項効果間では一様な部分交絡となる。

4.3.2 D最適計画

直交表に代わり、多因子でも実験回数がそれほど増加しないという要請に応え得る計画として最適計画がある。最適計画は、特定の要因効果を指定して、その要因効果の推定に必要な計画とすることで、最小実験回数の計画を得る。各種の最適計画が提案されているが、D最適計画(D-Optimal Design: DOP)[158]は製造業界で良く使われる。D最適計画は線形回帰モデルの母数の推定量の分散を小さくするという基準に基づいている、応答ベクトルを y 、計画行列を X とする線形回帰モデル

$$y = X\beta + \varepsilon, \quad E(\varepsilon) = 0, \quad V(\varepsilon) = \sigma^2 I \quad (32)$$

において、未知母数ベクトル β の最小二乗推定量、およびその分散共分散行列は

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (33)$$

$$V(\hat{\beta}) = (X^T X)^{-1} \sigma^2 I \quad (34)$$

で与えられる。なお、 E は期待値を表す。 β を推定するには、 $V(\hat{\beta})$ が小さいほうが良いが、 σ^2 は実験の誤差で決まるので、 $(X^T X)^{-1}$ が小さい計画が望ましい。このため、行列式 $\det(X^T X)^{-1}$ を最小にするという基準でD最適計画は作られている。

4.3.3 決定的スクリーニング計画

最適計画以外の計画として、近年、下記の特徴を持つ決定的スクリーニング計画(Definitive Screening Design: DSD)[159]が提案されている。

- ・ 実験回数は最小で $2m+1$ (m は因子の数)
- ・ 主効果と 2 因子交互作用は直交する
- ・ 2 因子交互作用同士は完全には交絡しない
- ・ 2 次項効果と主効果は直交する

- ・2次項効果は2因子交互作用と完全には交絡しない
- ・因子の数が12以下であれば、3個以下の効果を含む全ての2次項モデルが推定できる

決定的スクリーニング計画を使用した製造条件最適化の事例としては、オレンジ色素の光触媒分解における材料特性6因子の最適化[160]、紙材のレーザー切断工程の4つの工程条件の最適化[161]などへの適用が報告されている。半導体分野では、BGA (Ball Grid Array)の8パラメータ有限要素解析[162]の事例がある。

4.4 評価のための仮想装置モデル

想定されるモデルが交互作用と2次項効果を含む場合、精度の高いモデルを構築するためには、それに応じた十分な回数の実験を行う必要がある。また、単一因子実験は、交互作用がなく局所最適が全体最適になるような場合以外は好ましくないといった報告もある[163]。

そこで実験計画の検討に当たっては、単一因子実験に加え、予測性能の向上が期待される実験計画も用い、実験回数は単一因子実験と同等な実験計画を候補とすることにした。本研究では因子数に対して実験回数が少ないD最適計画と決定的スクリーニング計画を用いる。

バッチ装置の実験には8時間程度かかり多大なコストを要するため、評価のための実験回数は最小限にとどめる必要がある。このことから評価に際しては、既存のデータを基に仮想装置モデルを構築し、このモデルを実機の代替として使用することとした。

本節では、その仮想装置モデルの構築方法と実験計画の比較評価手順について述べる。

4.4.1 仮想装置モデルの構築

仮想半導体製造装置モデルの構築には、JMP Pro (SAS Institute Inc.)のブースティングニューラルネットワーク[164]を使用した。これはニューラルネットワークを弱学習器として、ブースティングによる学習を行う手法である。反復ごとに学習の目標出力をそれ以前の出力誤差で調整しながら、ニューラルネットワークを順次接続して、最終的に並列ノード構成のニューラルネットワークを構築する。すなわち、全体のノード数が弱学習器のノード数と反復回数の積となるような大きなニューラルネットワークとすることで、全体としての予測性能の向上が期待され、ディープラーニングと同等の性能

をより少ない学習コストで達成可能なことが報告されている[165]. 弱学習器として隠れ層が一層で活性化関数がTanh関数, 線形関数, Gauss関数の3種類を並列にしたニューラルネットワークを用いた. Fig. 28に例として応答Y0のニューラルネットワークのイメージ図を示す.

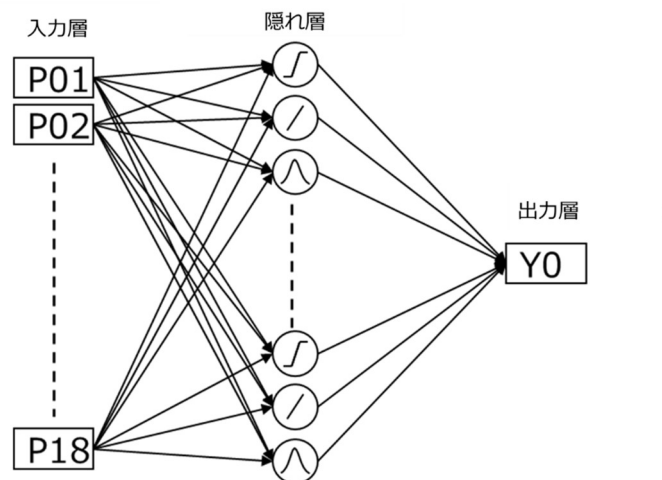


Fig. 28 18入力による応答Y0のニューラルネットワーク

仮想装置モデルの入力変数は, 製造装置の炉内温度, 成膜時間, 圧力, ガス流量から選択されたTable 15に示すP01からP18までの計18因子とし, 出力変数は3か所のウェハ配置ごとの成膜レートY1, 膜厚均一性Y2, 膜質Y3の9個の応答に, ウェハ間膜厚均一性Y0を加えた, Table 16に示す10種類の特性(応答)とし, 応答ごとにモデル化した.

Table 15 仮想装置モデルの処理因子(18 入力変数)

P01	Temp	
P02	GasA	Time1
P03		Pressure1
P04 – P10		Flow1 – Flow7
P11	GasB	Time2
P12		Pressure2
P13 – P18		Flow8 – Flow13

Table 16 仮想装置モデルの応答(10 出力変数)

Y0	Wafer-to-wafer uniformity
Y11, Y12, Y13	Processing rate
Y21, Y22, Y23	Wafer uniformity
Y31, Y32, Y33	Film property

仮想装置モデル構築用の実験データは、予備実験の結果得られた48データと、従前の実験で取得されていた32データを合わせた80データとした。モデル構築手順を以下に示す。

- 1) ハイパーパラメータ(反復回数と隠れ層のノード数)を決める。
- 2) データを5分割し、各々のデータからモデル作成し検証を行う。
 - 2.1) 全データを5等分し、各分割を順に検証用データ、残りを学習用データとしてモデルを構築する。
 - 2.2) 各モデルを対応する検証用データに適用して、損失関数を求める。
 - 2.3) 5つの検証損失を合算し、損失関数が最小となるパラメータ設定を選択する。
 - 2.4) 選択されたパラメータ設定に基づいて全データで最終モデルを学習し、学習用データおよび検証用データに対する決定係数を求める。
- 3) 学習用データと検証用データに対する決定係数が共に 0.9 以上であれば終了する。そうでなければ、ハイパーパラメータを更新して2)に戻る。

この手順を用いて応答ごとに仮想装置モデルを構築した。これらのモデルから予測値を算出した結果をFig. 29に示す。10種の応答に対し、おおむね良好な予測値が算出できている。

4.4.2 仮想装置モデルを用いた評価手順

4.4.1節に記載の方法で構築した仮想半導体製造装置モデルを実機だとみなして、複数の実験計画法を比較評価する手順を以下に示す。

- 1) 実験計画を作成する。
- 2) 作成した実験計画に従い、仮想装置モデルを対象とした実験を行い、応答を得る。

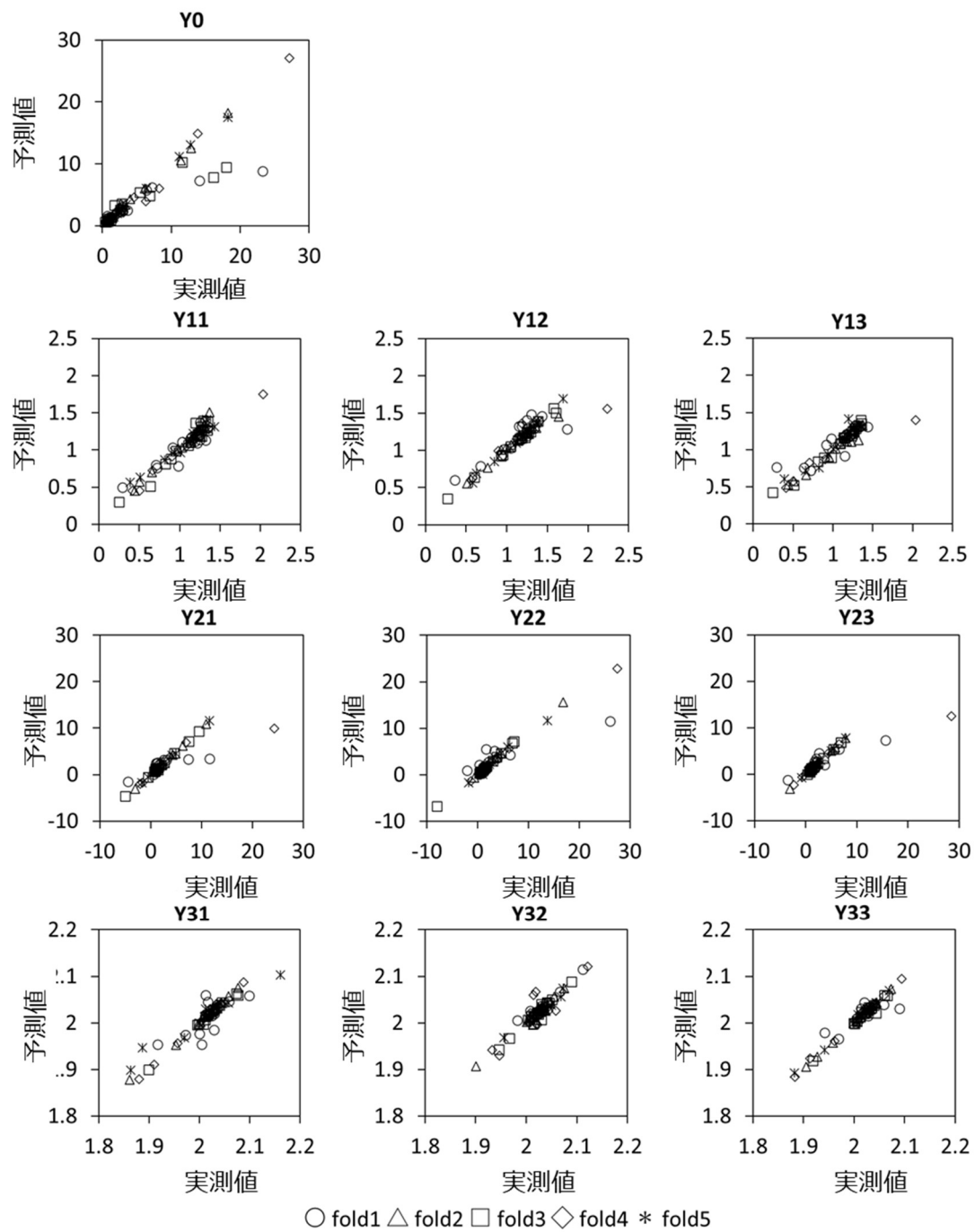


Fig. 29 10 応答の散布図: サンプルを 5 分割, 各 16 サンプルにて交差検証

- 3) 実験データを用いて、18 個の因子から 10 個の応答を予測するモデルを構築する。
(モデル構築方法については 4.5.3 節に記載)
- 4) 目標値(顧客が求める膜特性)に予測モデルの応答を近づける製造条件を求める。
- 5) 仮想装置モデルに求めた最適製造条件を入力し、その応答を得る。
- 6) 2)から 5)の手順を 1 回の試行として、ニューラルネットワークの初期乱数値を変えてこの試行を 10 回繰り返し、得られた仮想装置モデルの応答と目標値との誤差に基づいて、実験計画の有効性を比較評価する。評価には RMSE を用いる。

実際の装置には機差が有るため、試行を10回繰り返すことで、異なる特性を持つ装置に対する実験計画の有効性を評価できるようにした。10個の仮想装置モデルを構築するのに際し、試行ごとに異なる乱数シード値を与えることで、異なる5分割交差検証のデータセットを生成し、各々のデータセットを用いてブースティングニューラルネットワークモデルを構築した。

4.5 検証

比較評価する実験計画は、D最適計画、決定的スクリーニング計画、それらに従来手法である単一因子計画を加えた3手法とし、18因子を使用する計画と、実験回数の削減を目的により少ない9因子を使用する計画の6種類で検証した。

4.5.1 実験計画

Table 15に示すP01からP18までの18因子で下記の実験計画を作成した。因子の3水準の下限の水準値および上限の水準値は過去の実験条件を考慮して設定した。中間の水準値は下限値と上限値の平均値に設定した。

- ・ D 最適計画：実験回数 37 回(DOP37)
- ・ 決定的スクリーニング計画：実験回数 37 回(DSD37)
- ・ 単一因子計画：実験回数 37 回(OFD37)

4.5.2 少数因子実験計画

さらに少ない因子での実験計画を実施することを想定した実験計画を評価する．技術者の知見により，効果の大きいと思われるTable 17に示す9因子を選択し，下記の実験計画を作成した．

- ・ D最適計画：実験回数19回(DOP19)
- ・ 決定的スクリーニング計画：実験回数19回(DSD19)
- ・ 単一因子計画：実験回数19回(OFD19)

Table 17 予測モデルの処理因子(9 入力変数)

P01	Temp	
P02	GasA	Time1
P03		Pressure1
P04, P05, P06		Flow1, Flow2, Flow3
P11	GasB	Time2
P12		Pressure2
P13		Flow8

仮想半導体製造装置モデルは，18因子のモデルとなっているため，実験計画に使用していない残りの9因子については，中間水準に固定した．

4.5.3 予測モデルと最適化

実験計画に従って得られる実験データを用いて，応答ごとにガウス過程回帰(Gaussian Process Regression: GPR)による予測モデル構築を行った．ガウス過程回帰は以下のような特徴を持つノンパラメトリックな手法であり，不確実性を考慮しながらノイズの多いデータにも適している[166]．

- ・データの確率モデルを使用して推論を行う.
- ・カーネルの選択によりデータ点の集合から滑らかな曲線(関数)を推定する. 本研究ではベースラインと考えるガウスクーネル (JMP Proのパラメータ: $\theta = 0$, ナゲット使用) を使用した.
- ・ガウス過程を使用してデータ点間の関係性を表現する.
- ・カーネル関数を定義して入力変数間の類似性を測り, 予測分布を計算する.

複数(計10個)の応答は同時に最適化する必要があり, JMP Proの満足度関数を使用する方法[167]を採用した. i 番目の応答 Y_i は0から1の範囲の個別の満足度関数 d_i ($0 \leq d_i \leq 1$) に変換される. d_i は応答 Y_i が目標値 Y_{it} に一致する時に $d_i(Y_i)=1$ となり, 目標値から外れるほど $d_i(Y_i)=0$ に近づく. 次に, 総合満足度 D を次のように個々の満足度関数の幾何平均を使用して求める.

$$D = (d_1 \times d_2 \times d_3 \times \cdots \times d_k)^{\frac{1}{k}} \quad 0 \leq D \leq 1 \quad (35)$$

k は応答の数を示す. D は複数の応答の組み合わせの結果であり, その値は目標値への近さの度合いを表す. 総合満足度 D は0から1の値をとり, 値が1に近いほど, 目標値と一致していることを示す. D を最大化する目的関数, 18個または9個の因子を最適化変数として, 各因子の下限と上限の水準範囲内の制約条件で最適化を行って最適製造条件を求めた.

4.5.4 実験結果(18 因子)

仮想装置モデル構築と実験計画法比較評価を10回繰り返した結果を述べる.

18因子を使用した実験計画の各応答のRMSEをTable 18に示す. 各応答の単位が異なるので, 各応答内での比較評価となる. ()内は各回の試行で, 目標値と応答の差の絶対値が3種類の実験計画の中で最小となった回数を表す. 最適条件を正しく見つけられる実験設計手法として, 従来手法であるOFDに対し, 提案手法であるDOP,DSDのいずれが適しているかを明らかにする.

Table 18 18因子での結果

太字は各応答の最低RMSE, ()内は各試行の実験設計の中で絶対誤差が最小であった回数.

	DOP37		DSD37		OFD37	
Y0	1.424	(4)	1.902	(1)	1.862	(5)
Y11	0.095	(5)	0.124	(3)	0.131	(2)
Y12	0.146	(1)	0.099	(7)	0.103	(2)
Y13	0.097	(0)	0.070	(6)	0.103	(4)
Y21	0.699	(6)	2.513	(2)	1.517	(2)
Y22	1.733	(7)	2.581	(1)	1.607	(2)
Y23	0.783	(4)	1.177	(3)	1.079	(3)
Y31	0.019	(2)	0.029	(2)	0.025	(6)
Y32	0.015	(5)	0.026	(2)	0.024	(3)
Y33	0.016	(4)	0.027	(3)	0.028	(3)

Y12, Y13ではDSD37, Y22ではOFD37, それ以外の7応答ではDOP37でRMSEが最小という結果となった. 差の絶対値が最小となった回数が10回の試行中5回以上であるのは, DOP37で4応答, DSD37で2応答, OFD37で2応答という結果となった

DOP37はY31を除く6応答でRMSEが最小で回数が最多という組合せとなり, DSD37は2応答でRMSE最小・回数最多の組合せとなったが, OFD37ではRMSE最小・回数最多の組合せはなかった.

4.5.5 少数因子実験結果 (9 因子)

同様に9因子を使用した実験計画の各応答のRMSEをTable 19に示す.

Y11, Y12, Y22, Y23ではDOP19, Y0, Y31, Y32, Y33ではDSD19, Y13, Y21ではOFD19でRMSEが最小という結果となった. DOP19とDSD19は5応答で10回の試行中4回以上の試行で差の絶対値が最小となった.

RMSE最小・回数最多の組合せはDOP19, DSD19でそれぞれ4応答あったが, OFD19ではRMSE最小・回数最多の組合せはなかった.

Table 19 9因子での結果(太字の数字と括弧内の数字はTable18と同じ)

	DOP19		DSD19		OFD19	
Y0	0.939	(3)	0.737	(6)	0.929	(1)
Y11	0.194	(5)	0.205	(3)	0.227	(2)
Y12	0.065	(6)	0.085	(3)	0.102	(1)
Y13	0.141	(3)	0.159	(4)	0.130	(3)
Y21	1.775	(6)	1.746	(1)	1.648	(3)
Y22	0.858	(4)	1.350	(3)	1.429	(3)
Y23	0.761	(5)	1.157	(3)	1.116	(2)
Y31	0.693	(3)	0.684	(6)	0.701	(1)
Y32	0.699	(3)	0.695	(4)	0.702	(3)
Y33	0.695	(3)	0.690	(5)	0.697	(2)

4.6 考察

RMSEが小さく、目標値と応答の差の絶対値の小さい試行の回数が多い実験計画が、より望ましい実験計画と考えられ、D最適計画、決定的スクリーニング計画は一部の応答を除き、概ねそのような条件を満たした。本評価結果について以下にまとめる。

18因子の実験計画では、D最適計画が決定的スクリーニング計画よりも目標値と応答の差の絶対値が小さい結果となったが、このことは評価に用いたデータにおける予測モデルにおいて、D最適計画と決定的スクリーニング計画の2次項効果における交絡の違い、すなわち2次項効果への適応性によるものと想定している。ある応答について、予測モデルでの2次項効果の寄与が大きければ、交絡の小さい実験計画ほど、2次項効果の推定が確からしくなり、目標値と応答の差の絶対値を小さくすることができたのではないかと考えられる。

9因子の実験計画においては、D最適計画と決定的スクリーニング計画とも4つの応答でRMSEが小さく、目標値と応答の差の絶対値が最小となった回数も多いという結果となったが、これは双方の交絡の差が小さくなったためと考えられる。

また、因子数が9の場合、因子数が18の場合よりも決定的スクリーニング計画の性能が相対的に向上しているのは、因子の数が12以下であれば、3個以下の効果を含む全ての2次項モデルが推定できるという、決定的スクリーニング計画の特徴が現れているとも考えられる。すなわち因子数が18の場合よりも2次項モデルの推定がより確からしくなっているとも考えられる。

単一因子計画ではRMSEと目標値と応答の差の両方を満足するような結果は得られなかったが、応答によっては他の実験計画よりもRMSEや、差の絶対値が小さくなる場合があった。

応答が主効果だけでなく、交互作用や2次項効果の影響を受けている場合、単一因子計画では予測性能が劣ることとなるが、D最適計画の2次項効果間の交絡は一様ではなく因子ごとに異なり、単一因子計画の交絡よりも大きい場合がある。また、決定的スクリーニング計画の2次項効果間の交絡は単一因子計画同様、一様な部分交絡となっているが、単一因子計画よりも交絡の程度が大きいため、特定の因子の2次項効果の影響が大きい場合、D最適計画や決定的スクリーニング計画よりも単一因子計画が上回る性能となることが有り得ると考えられる。

4.7 まとめ

本検討では、交互作用や2次項効果を考慮することが不可欠である成膜装置において、難度を増す顧客要求特性を満足する製造条件を導き出すための、プロセスエンジニア向けFab-wide Control Systemとして実験計画手法を提案した。2水準で構成された直交配列では、2次項を含むモデルの推定が困難であるため、本研究では3水準の計画を採用している。これにより、因子の非線形効果や交互作用を評価することを可能にした。従来手法である単一因子計画と、実験計画の手法であるD最適計画と決定的スクリーニング計画で作成した実験計画により、得られた製品の特性と顧客が求める特性との差から計画の比較を行った。

仮想装置モデルの10の応答に対して最適化を行う中で、10個中7個の応答において単一因子実験と比べて、実験計画法による手法は2割以上RMSEが小さくなる特性を得た。このことから製造条件間の交互作用や2次項効果が多い成膜装置において、顧客が求める目標値との差を最小とする製造条件を得るには、応答の網羅性が高い実験計画法による実験データ取得が最適解を得るのに効果的であると言える。また、因子数が18の場合は10個の特性のうちD最適計画が最も目標値に近い特性が多く得られたのに対して、

因子数が9の場合はD最適計画と決定的スクリーニング計画で最も目標値に近い特性の数が同数という結果だった。加えてD最適計画や決定的スクリーニング計画よりも単一因子計画が上回る性能となるケースが有ったことも興味深い結果である。以上より、あらゆる因子数に対して万能である計画手法は存在しないと捉え、用いる因子の数に対して最適な計画手法を都度選択することが重要であり、どのように手法を選択するかは、今後の課題である。

デザインルールの進化に伴い、今後半導体製造装置の要求性能が更に高まることが予想される。半導体成膜における課題である、熱の影響と実験コストの低減に向け、今回評価した実験計画の手法を取り込むことで、最小限の実験回数で交互作用・2次項効果の影響を含む評価結果を導くことができる。

第五章 平均値置換寄与による製造装置の異常原因因子の特定

5.1 研究の背景と目的

半導体と共に、官民の双方が日本経済の起爆剤として期待しているのがリチウムイオンバッテリーであり、政府の重点経済政策にも挙げられ、トヨタやパナソニックなどの企業が精力的な開発活動を行っている。リチウムイオンバッテリーも多くの処理課題を持つ技術で、半導体に適用してきたプロセス制御技術が有効に機能している。本論文の最後に、他業種への適用事例として、リチウムイオンバッテリー製造におけるプロセスの制御技術を取り上げる。

リチウムイオンバッテリー製造において装置データを収集し、それらがどのようにバッテリー品質に影響するかを推定することで、適切な製造条件を見極めることができる。しかし、この作業は、熟練のエンジニアが実験と慣れない数理解析作業を多大な工数を割いて行なう必要があり、現場では過度な実験を減らすことが強く求められている。

バッテリーの製造現場においては、品質維持のために製造装置よりEDA(Equipment Data Acquisition)同等のインターフェースにて取得できる信号値をマハラノビス距離(Mahalanobis Distance: MD)を用いて監視し、異常サンプルが発生した場合には、その原因を突き止め対処している。その際、異常サンプルに対する装置データの寄与の大きさから、原因となっている因子を特定する。特定された因子によっては、さらに詳細な原因の追究が求められ、手間のかかる実験を伴う場合があることから、特定される因子は極力限定されることが望まれる。

装置データといった複数の因子について、それらの異常サンプルへの寄与を算出する手法は、これまでに多数報告されている[151,152,168-171]。しかし、その有効性は明らかになっていない。筆者もこれまでにPLS-VIP(Partial Least Squares-Variable Importance in Projection)[145]やランダムフォレスト重要度[172]を用いて、リチウムイオンバッテリー製造における原因因子の特定に取り組み、たとえば塗布工程における温度管理などの問題解決を実施してきた。しかし、用いた手法は解析対象であるバッテリー特性と、それに影響を及ぼす処理パラメータとの関係が十分に説明できる試作品においてのみ有効性を発揮するもので、あらゆる試作品に対する原因因子の特定におい

て、成果をあげられたとはいえない。

複数の因子に対してPCAを適用し、重要な主成分で張られる部分空間でのマハラノビス距離の二乗である T^2 統計量と、その主成分空間との距離の二乗である Q 統計量を用いて原因因子を特定する方法として、AlcalaとQinは再構築寄与(Reconstruction-based contribution: RBC)[173,174]を提案した。RBCは、古典的な寄与を改良したもので、 T^2 、 Q といった指標を最小化するようにサンプルを各因子方向に平行移動させて、この変化量から寄与を算出し原因因子を特定する。しかしRBCの算出は複雑で、多くの計算リソースを要すると共に、現場のエンジニアにおける解釈性が悪いことから、その後の改善作業への適用が困難になっている。エンジニアが容易に取り扱える手法を用いることが、現場における過度な実験を減らすことに寄与すると筆者は考える。

本章の目的は、原因因子の絞り込み能力を高め、RBCよりも解釈性が高い寄与を算出すべく、各因子の値を平均値に置き換え、その置換前後の指標の変化量によって定義される平均値置換寄与(Mean-value Replacement Contribution: MRC)により、装置エンジニアが早期に異常原因因子を特定できるFab-wide Control Systemを提案することである。この手法は計算工数を抑えつつ、より高い精度で原因因子を特定する手法である。

5.2 対象装置と特徴

リチウムイオンバッテリーはスマートフォンや車などに使用される角形や、掃除機や電動工具などに使用される円筒形など、さまざまな大きさや形状をしているが、Fig. 30に示すように、中身は正極と負極の各電極をセパレーターで挟んで巻き取った構造をしている。

セパレータはプラスとマイナスが接触することを防ぎ、リチウムイオンを透過させることができる膜になっている。また電池の中はリチウムイオンを伝導させる事が可能な電解液で満たされていて、正極と負極の間にセパレータが配置されている。正極はアルミ箔にコバルト系リチウム、マンガン系リチウム、ニッケル系リチウムといった材料を塗布、負極は銅箔にグラファイトなどを塗布した後に乾燥し、体積密度を高めるために圧縮する。電解質(電解液)は液体のまま注入されるが、ポリマーを加えてゲル状にした電解質を使用する場合は、電極に電解質を塗布した後にやはり乾燥させる。

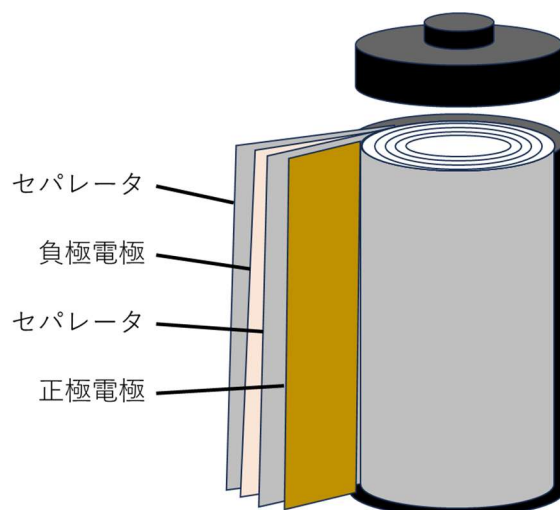


Fig. 30 リチウムイオンバッテリーの構造

電極とセパレーターを緻密に巻き取ることで、小型でありながらも広い電極面積を確保し、高出力を実現している。すなわちスマートフォンのように、限られたスペースの中にどれだけ広い面積の電極を収納するかでバッテリーの容量が決まるため、容積当たりの蓄電容量を最大化すべく、製造技術を駆使し、いかにバッテリーの能力を高めるかで各社しのぎを削っている。

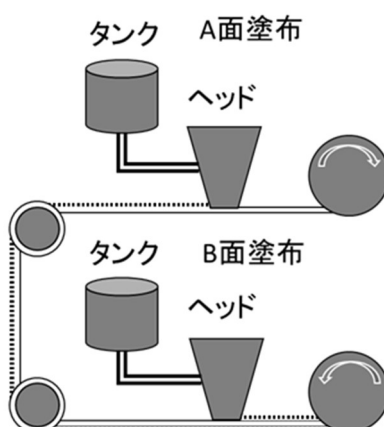


Fig. 31 塗布装置のイメージ

一方、高いエネルギーを持つリチウムイオンバッテリーは発火の危険性がある。特に製造過程における異物混入による導通で、発火するといった事故を避けるために、安全性に対する処理の仕組み作りも同時に求められている。

Fig. 31に塗布装置のイメージを示す。本塗布装置は、リール状に巻き取られた基材となる箔の表面(A面)と裏面(B面)に対して順に塗料を塗布し、A面とB面の塗布用に独立した塗布ヘッドと塗料を保管するタンクを配している。

5.3 原因因子特定の手法

製造過程における異常を早期に検知し、不良の発生を防ぐことは生産性を高める上でとても重要である。しかし、異常を検知した際は、改善のためにその発生原因を知ることができなければ、生産性の悪化を招くこととなる。本節では原因因子を特定するための解析手法をまとめる。

5.3.1 T^2 統計量・Q 統計量と寄与

異常特定指標として広く用いられている T^2 統計量および Q 統計量の概要について述べる [11]。まず正常状態の測定データに対して PCA を適用し、採用する主成分の数 R を決定して PCA モデルを構築する。この PCA モデルを用いて T^2 統計量と Q 統計量を計算する。 T^2 統計量は次式で定義される。

$$T^2 = \sum_{r=1}^R \frac{t_r^2}{\sigma_{t_r}^2} \quad (36)$$

$\sigma_{t_r}^2$ は第 r 主成分得点 t_r の分散であり、 T^2 統計量は主成分空間での原点からのマハラノビス距離の二乗に対応している。また、 T^2 統計量を用いた寄与は次式で定義される。

$$C_p^{[T^2]} = t^T \cdot (x_p \cdot \gamma_p) \quad (37)$$

t は主成分得点からなる R 次元の行ベクトル、 x_p は任意のサンプルにおける第 p 変数の値、 γ_p は負荷量行列の第 p 行 (第 p 変数に関する係数ベクトル) の転置ベクトルである。主成分で張られる部分空間については、 T^2 統計量による管理が有効であるが、その直交補空間については、残差から計算される Q 統計量を用いる。

$$Q = \sum_{p=1}^p (x_p - \hat{x}_p)^2 \quad (38)$$

$\hat{x}_p$ は x_p を主成分によって再構築した値である．また，このQ統計量を用いた寄与は次式で定義される．

$$C_p^{[Q]} = (x_p - \hat{x}_p)^2 \quad (39)$$

すべての主成分を採用する場合には，Q統計量は使わずT²統計量のみで異常特定を行う．このとき，T²統計量はマハラノビス距離の二乗と一致する．

5.3.2 RBC

AlcalaとQinが提案したRBCの計算手順を以下に示す．

- 1) 正常データを用いてPCAモデルを構築する．
- 2) 異常発生時のサンプルにおいて，T²統計量・Q統計量を計算する．
- 3) ある原因因子の値のみを除去して，T²統計量・Q統計量が最小になる値を求める．
この操作を再構築と呼ぶ．
- 4) 再構築後の指標を求める．
- 5) 再構築前後の指標の変化量をRBCとする．
- 6) この操作を全ての原因因子に対して行う．

5.3.3 ランダムフォレスト重要度

ランダムフォレストではサンプルデータから，重複を許してランダムにデータを選ぶブートストラップサンプリングによりデータを選択した上で決定木を構築する．サンプルデータは重複ありで選択するため，選ばれなかったものが存在し，これをOOB(Out-Of-Bag)と呼ぶ．

構築された決定木にOOBを入力し推定した際の誤り率と，OOBを任意の説明変数に対してランダムに並べ替えた後に，決定木で推定した際の誤り率の差をその説明変数の重要度と呼び，その値が大きいほど目的変数への影響度が高いといえる[175]．

5.3.4 平均値置換寄与

提案する平均値置換寄与(MRC)による原因因子の特定手法について述べる．提案手法では，RBCのようにサンプルを各原因因子方向に平行移動するのではなく，各原因因子を平均値に置き換え，置き換え前後の指標の変化量によって定義される平均値置換寄与を各原因因子の寄与とする．

Fig. 32は5種類の処理において，塗布装置から取得されたセンサ信号の2つの統計量 x_1, x_2 を模した擬似データをプロットしたものである．今回の解析では，センサ信号をそのまま使用するのではなく，その平均値，最大値，最小値などの統計量を代表値として使用する． x_1, x_2 はそのような代表値である．各グラフの中心付近にある楕円状の点の集まりは2つの代表値の正常領域であり，その外側に擬似的に規格範囲外の値を取った異常サンプル(製品不良となったサンプル)各5点(A～E)を配した．例えば x_1 の正常領域の標準偏差の3倍の値 L とし，異常サンプルの座標はA(0, L)，B(- $L/2$, L)，C(- L , L)，D(- L , $L/2$)，E(- L , 0)となる．

正常領域に含まれるデータからPCAモデルを構築し，異常サンプル(A～E)のマハラノビス距離を算出する．マハラノビス距離の代わりに T^2 統計量・ Q 統計量を用いることもできるが，本節ではマハラノビス距離による算出例を示す．

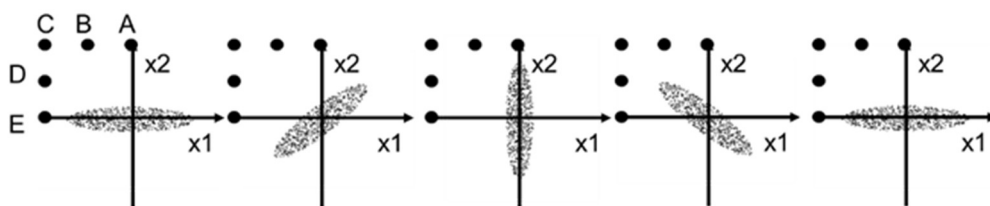


Fig. 32 平均値置換寄与の遷移

はじめに正常領域が x_1 軸とほぼ平行(0度)となるケースで，まずA～Eのマハラノビス距離を算出し，さらにA～Eの代表値 x_1 を平均値に置き換えた場合のマハラノビス距離を算出した．置換前後のマハラノビス距離の差が代表値 x_1 のMRCである．続いて正常領域を軸に対して45度ずつ回転させ，0～180度において代表値 x_1 のMRCを算出した．これらの計算結果をTable 20に示す．

Table 20 5種類の正常空間における異常サンプルの特性. a)異常サンプルのマハラノビス距離, b)異常サンプルを平均値に置き換えたマハラノビス距離, c)変数間の関係が変わった場合の平均値置き換え寄与, d)正常空間における x_1 の標準偏差

a)

	0°	45°	90°	135°	180°
A	131.6	70.5	8.2	70.2	130.4
B	133.6	149.0	41.2	25.5	132.5
C	139.7	262.8	139.6	16.4	138.8
D	41.1	149.0	133.6	25.8	40.8
E	8.0	69.0	131.6	70.5	8.2

b)

	0°	45°	90°	135°	180°
A	131.6	70.5	8.2	70.2	130.4
B	131.6	70.5	8.2	70.2	130.4
C	131.6	70.5	8.2	70.2	130.4
D	33.0	17.9	2.1	17.7	32.4
E	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

c)

	0°	45°	90°	135°	180°
A	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
B	2.0	78.5	33.0	-44.7	2.2
C	8.1	192.3	131.4	-53.8	8.4
D	8.0	131.1	131.5	8.1	8.3
E	8.0	69.0	131.6	70.5	8.2

d)

	0°	45°	90°	135°	180°
x_1 standard deviation	3.5	2.6	0.8	2.5	3.5

正常領域を45度、90度回転させた際に、サンプルC,D,EのMRCが100を超えている。これらは正常領域の長手方向からサンプルC,D,Eが比較的遠い位置にあり、かつ x_1 軸に対して平均値で置換した際の指標の変化量が大きくなるためであり、正常領域との関係性を顕著に表わしていると考えられる。

また、135度におけるサンプルB,CのMRCは負の値を取っている。これらのサンプルは正常領域から比較的近い位置にあるため、 x_1 を平均値に置き換えた場合、逆に正常領域から遠ざかるため、MRCは負の値を取る。さらにサンプルDは x_1 を平均値に置き換えることで、正常領域を挟んで反対側に位置することとなり、寄与は小さくなる。

Table 21 変数間の関係が変化した時の RBC

	0°	45°	90°	135°	180°
A	0.0	92.7	0.0	92.7	0.0
B	6.6	227.2	6.6	17.5	6.4
C	26.2	421.1	26.2	1.6	25.9
D	26.1	246.7	26.1	37.0	26.0
E	26.0	118.7	26.0	118.7	26.0

さらにMRC法をRBC法と比較する。Fig. 32に示した塗布装置から取得されたセンサ信号の2つの代表値(x_1 , x_2)を使って、RBCを算出した結果をTable 21に示す。

原因因子を特定する上で、寄与がいくつ以上であれば原因因子であると判断できる基準値は明らかではない。そのため、原因因子を特定する際は、RBCやMRCといった指標を用いるのとともに、抽出された原因因子によっては、より詳細な原因の追究のために実験を伴うことがある。そのため、RBCやMRCにより求められる寄与から、原因因子を特定するのと同様に、原因因子ではないことを明らかにすることは実験回数を減らす上で有益である。

x_1 は詳細な原因の追究が求められる因子だと仮定する。どちらの手法においても、 x_1 の寄与が0近辺の値を取る場合、 x_1 は原因因子でないと判断できる。5種の正常領域について、 x_1 の寄与が0を中心にその標準偏差の範囲内にある場合に x_1 は原因因子ではないと判断することとして、RBCとMRCの双方について、5種の正常領域に対する各5点の

異常サンプル計25サンプルが0を中心にその標準偏差の範囲内にいくつあるか、すなわち詳細な実験を回避できたサンプルサイズを比較する。

まず、正常領域0度においてAという異常サンプルが発生した場合、どちらの手法も x_1 の寄与は0.0であり、 x_1 が異常Aの原因因子ではないことがわかる。同じく正常領域45度に対しAという異常サンプルが発生した場合、MRCは0.0となり $0 \pm$ (正常領域の標準偏差)の範囲内にあるが、RBCは92.7となり $0 \pm$ (正常領域の標準偏差)の範囲外にあるため、実験にて検証することとなる。

同様にほかの正常領域に対し、 x_1 がA,B,C,D,Eを異常とした原因因子でないか確認すると、RBCは合計4サンプルにおいて、MRCは合計7サンプルにおいて x_1 の寄与が $0 \pm$ (正常領域の標準偏差)の範囲内となり、MRCがより多くのサンプルにおいて実験を回避できていることがわかる。

加えて、平均値というリチウムイオンバッテリーエンジニアにとって解釈が容易な指標を用いて、原因因子を特定する平均値置換寄与は、その後にエンジニアが取り組むバッテリー自体の性能分析の際に、原因因子の影響を平均値との比較で評価することを可能にし、実務上の有用性が高いと考えられる。

5.4 実データによる検証

塗布装置の実処理データを用いて、従来の解析手法と比較し提案する平均値置換寄与の有効性を検証する。

Table 22に示す通り、本塗布装置には、処理を監視するためのセンサが9種実装されており、その出力変数から算出した統計量を解析に利用した。B面のタンク圧力は、センサの故障によりデータを取得できていなかったため、用いなかった。

また代表値には平均値を用いたが、ポンプモータートルクは、エンジニアの知見からタンク内の塗料の残量、温度などによる影響を受けると考えられており、処理分析に有益と考え最大値と最小値をあわせて用いた。

5.4.1 評価用データ

Fig. 33は、塗布装置において帯状の部材に対して一定間隔で塗料を塗り(塗布した1区間をパターンと呼ぶ)、塗布された塗料の質量をパターン毎にプロットしたものである。今回解析に用いた部材には572回の塗布(572パターン)が行われ、その中から先頭

10パターンの全てと、11パターン以降は8パターン毎に抜き取り、合計80パターンを測定した。グラフ左側が塗布開始時のパターンで、右側が終了時のパターンである。

Table 22 塗布装置センサと統計量

シンボル	センサ(9kinds)	統計量(13kinds)
a	A-side tank pressure	Average
b	A-side pump motor torque	Average
c		Maximum
d		Minimum
e	B-side pump motor torque	Average
f		Maximum
g		Minimum
h	A-side feed motor torque	Average
i	A-side paint temperature	Average
j	A-side oil temperature	Average
k	B-side feed motor torque	Average
l	B-side paint temperature	Average
m	B-side oil temperature	Average

塗布質量には規格の上下限值が決められており、グラフ中に横の破線で示している。この部材の場合は、塗布初期に管理下限値を超えているパターンがあり、初期に塗布質量が低めになる傾向を示している。このように、塗布初期に低めの質量を示す部材は全体の約5%存在し、部材不良発生リスクがあることが判明している。このため、塗布初期の低塗布質量傾向の原因因子を特定し、対策することが生産性向上のために求められる。

塗布初期に塗布質量が低くなる部材においては、Fig. 33と同様、約100パターンにおいて過渡的な変動が見られ、さらに先頭約50パターンにおいて変化がより顕著に現れる。そこで、1～99パターン(20サンプル)をテストデータ、100パターン以降(60サンプル)を正常データと定義し寄与の算出を行う。用いるデータは変数ごとに平均0、分散1に変換し標準化する。

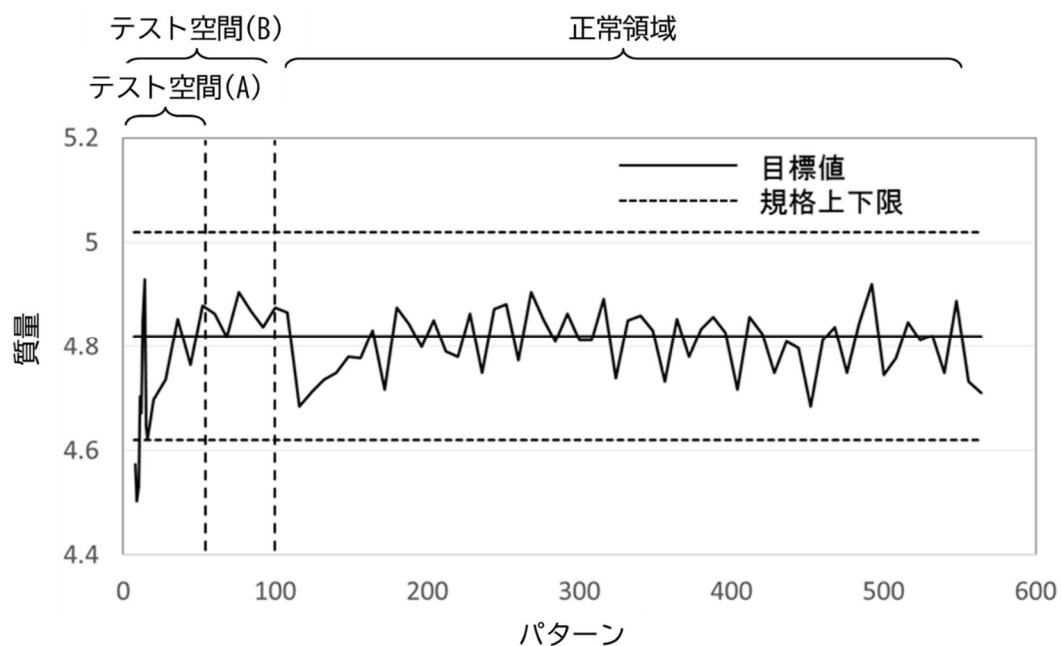


Fig. 33 パターン毎の質量

5.4.2 テストデータのサンプリング

Fig. 33において正常領域とした60サンプルのうち、ランダムに40サンプルをモデル構築用に、残りの20サンプルはモデルの確かさを評価するためのモデル検証用に振り分ける。代表値の数に対して今回モデル構築用に取得できたサンプルサイズが小さいことからブートストラップサンプリング(重複を許したランダムサンプリング)によって25サンプルを選定したモデル構築を50回繰り返して同様の解析を行った。

モデルからテストデータ(20サンプル)に対して原因因子ごとに寄与を算出し、平均によって比較した。

5.4.3 評価指標

提案手法の原因因子特定能力を評価するため、エンジニアがデータを分析し、処理異常の原因因子を究明した。通常は部材数も監視すべき原因因子数も膨大であるため、1つ1つのデータをエンジニアが分析することは現実的ではない。今回は提案手法の原

因因子特定能力を評価するために、手作業にて膨大なデータを詳細に解析し、原因因子を特定することを試みた。

塗布工程ではFig. 33に示すパターン毎の質量が規格上下限の範囲内に入るようにすることが求められる。質量は、テスト空間(B)(1～99パターン)においては正常領域とは異なる挙動を示している。特にテスト空間(A)(1～50パターン)においては、テスト空間(B)以上に異なる挙動を示している。この状態はごく一部の部材に現れる現象であるが、塗布質量を規格上下限の範囲に入れるための制御において余裕がなくなるため、部材不良発生リスクを高めることになる。そのため現場においては、その原因因子を特定し改善することが求められる。

Table 22に示した通り、塗布装置に設置された9種のセンサより収集したセンサ信号から13種の統計量を算出した。全ての代表値のトレンドグラフをエンジニアが観察し、知見から原因因子を特定した。特定した2つの原因因子「(e)B面ポンプモータートルク_平均値」の挙動をFig. 34に、「(i)A面塗料温度_平均値」をFig. 35に示す。

(e)は塗布質量と同様に、テスト空間(A)においてより顕著に低い値を示している。(i)は塗布質量とは逆にテスト空間(A)に対し著しく高い値を示している。

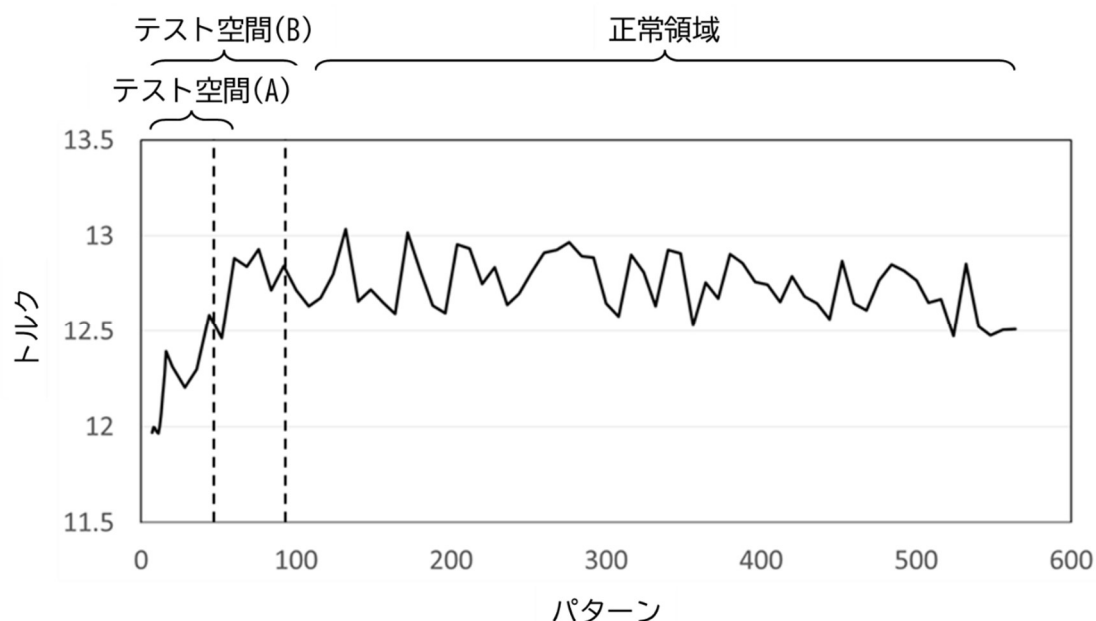


Fig. 34 代表値(原因因子候補)の挙動「(e)B面ポンプモータートルク_平均値」

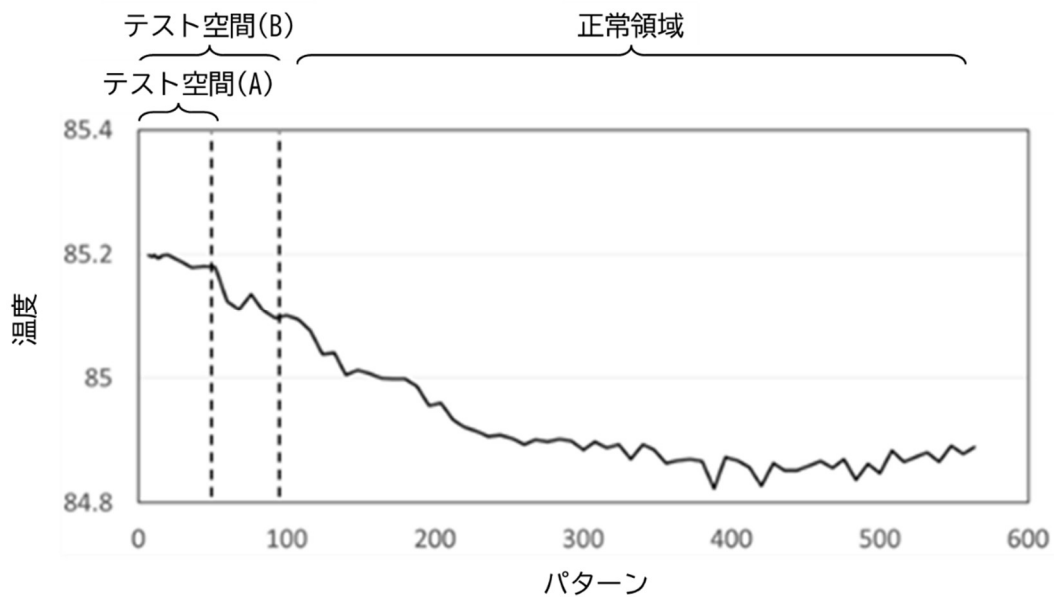


Fig. 35 代表値(原因因子候補)の挙動「(i)A面塗料温度_平均値」

以上2つの代表値のテスト空間(A)の、正常領域に対する平均値の差をTable 23に示す。2つの代表値は、他の全ての代表値に対し比較的高い値を示していることから、エンジニアの知見を数値的にも示すことができ、原因因子である可能性が高いと考えられる。

Table 23 テスト空間(A)(1～50パターン)と正常領域の各々の平均値の差の比較

シンボル	センサ(9種)	統計量 (13種)	標準化後の各空間の 平均値の差
e	B-side pump motor torque	Average	2.36
i	A-side paint temperature	Average	2.25

5.4.4 結果

提案した平均値置換寄与による原因因子の特定能力を、 T^2 寄与、 Q 寄与、RBC、ランダムフォレスト重要度と比較し評価を行う。

平均値置換寄与による原因因子の特定結果をFig. 36a)に示す。指標としてMD、 T^2 統

計量を用いた場合に、4.3節でエンジニアが最も異常が疑われると特定した「(e)B面ポンプモータートルク_平均値」と「(i)A面塗料温度_平均値」を、最も寄与が高いと特定している。今回の評価に用いた部材の場合、Q統計量は正常データとテスト空間との間に大きな差がなかったため、平均値に置換しても寄与に変化が現れなかったと考えられる。

平均値置換寄与でも指標としてQ統計量を用いた場合には、「(k) B面フィードモータートルク_平均値」が最も寄与が高いとする結果となった。

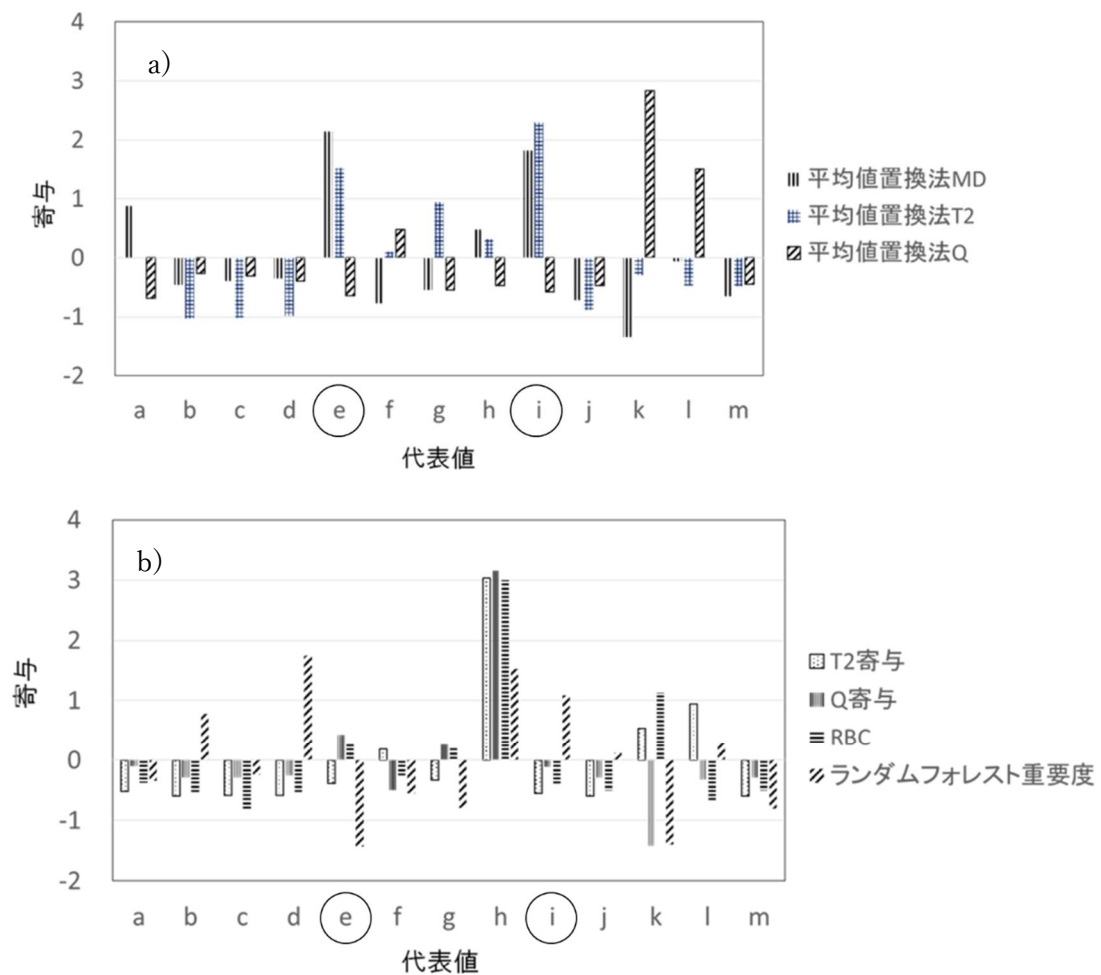


Fig. 36 a)平均値置換寄与を用いた原因因子の特定結果 b)リファレンス手法による原因因子の特定結果

リファレンス手法による原因因子の特定結果をFig. 36b)に示す。T²寄与, Q寄与, RBC, ランダムフォレスト重要度においては「(h) A面フィードモータートルク_平均値」が最も寄与が高いとする結果となった。

5.5 考察

「(h) A面フィードモータートルク_平均値」のトレンドをFig. 37a)に, 「(k) B面フィードモータートルク_平均値」のトレンドをFig. 37b)に示す。

「(h) A面フィードモータートルク_平均値」はテスト空間(B)(1~99パターン)において, 正常領域より高い出力を, 「(k) B面フィードモータートルク_平均値」はテスト空間(B)(1~99パターン)において, 正常領域より低い出力を示しているが, 全領域(1~572パターン)において一様に下降ないしは上昇傾向を示しており, テスト領域(A)ないしは(B)に特化した異常挙動が現われていないことから, 全般的なトレンドが塗布質量と密接な関係をもつと判断したもので, 代表値の寄与は高くないと考えられる。

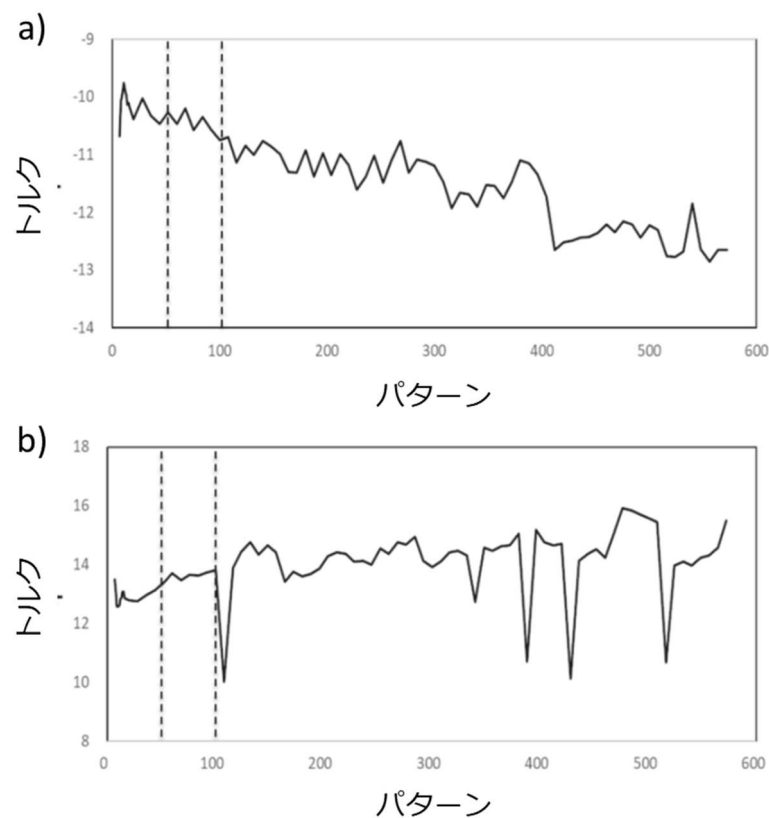


Fig. 37 a) 代表値(原因候補要因)「(h) A面フィードモータートルク_平均値」の挙動.
b) 代表値(原因候補要因)「(k) B面フィードモータートルク_平均値」の挙動.

「(h) A面フィードモータートルク_平均値」の挙動は右肩下がりを示しており、塗布質量は右肩上がりという反比例の傾向を示していることから、従来の指標は寄与を誤って高く評価したと考えられる。しかし、「(h) A面フィードモータートルク_平均値」は、塗布質量の1~99パターンで下降傾向を示さない部材(全体の95%)においても、同様に右肩下がりの傾向を示しており、原因因子とは考えにくい。このことから平均値置換寄与が、センサ信号間の比例関係による影響を受けていないことが裏付けられる。

5.6 まとめ

本研究においては、塗布装置センサ信号の代表値による解析から、処理を安定化させるべく、装置エンジニアが早期に異常原因因子を特定できるFab-wide Control Systemとして平均値置換寄与による特定手法を開発した。

あらかじめエンジニアが特性値である塗布質量のパターンごとのトレンドに対する、全センサ信号のトレンドをグラフで比較し、塗布初期の低塗布質量傾向への影響が疑われる原因因子を特定し、「(e) B面ポンプモータートルク_平均値」および「(i) A面塗料温度_平均値」の2つの代表値を真の原因と想定し、評価を行った。

提案した平均値置換寄与に加えて、 T^2 寄与、Q寄与、RBC、ランダムフォレスト重要度を用いた代表値の寄与を求め比較評価したところ、平均値置換MDと平均値置換 T^2 において、予めエンジニアが特定した2つの代表値を原因因子として特定することができた。

平均値置換寄与は、複雑な最適化を必要とせず、全変数について平均値との単純な置換と再計算だけで済むことから、エンジニアが直感的に異常への寄与を把握することができ、計算量も少ない。しかし変数毎の置換のため、仮に装置に交互作用がある場合に考慮できず、誤った寄与を示す可能性がある。また、置換先である平均値が主成分空間においてプラス側であるかマイナス側であるかはわからない。そのため、特定した原因因子を改善するのにその因子を増加させるのが良いか、減少させるのが良いかを把握することはできない。以上より、提案手法は装置内部の系を十分に把握したエンジニアが限定的に利用することが望まれる。

第六章 結論

6.1 本研究のまとめ

半導体製造装置は、微細化の追求により複雑さを増しており、多くの場合無人化には至ってなく、エンジニアの支援を必要とする。さらに装置メンテナンスや消耗材の交換は、装置の状態を不規則に変化させてしまうため、定常状態に戻す作業は困難を極めていく。化学・物理といった半導体のドメイン知識しか持たない工場エンジニアが、そこへの対処を強いられており、半導体製造装置の自動化は多くの課題を抱えてきた。

本研究を通し、半導体製造における装置データを分析することで、異常検知・原因特定・予測・最適化を高精度に実現するためのモデリング戦略を検討した。その結果から、ドメイン知識しか持ち得ない工場エンジニアが、製造現場の自動化に対処できるよう、モデルを活用したFab-wide Control Systemを開発し、現場へ導入してきた。本節では各章ごとに研究成果をまとめ、解決に至らなかった課題を次節にまとめる。

第二章では、局所的重み付けPLSを用いた半導体仮想計測を提案した[28,29,108]。装置部品と化学薬品の劣化やメンテナンスにより、装置状態がドリフトし、製品特性の仮想計測が困難になる課題について述べ、その影響を最小限に抑えるために局所的重み付けPLSを用いた半導体製造向けプロセス制御手法を開発・適用するとともに、装置状態の変化を受けにくい説明変数を選択することで、高い推定精度を維持できることを示した。このシステムは製造現場に導入されており、収益向上に貢献している。

第三章では、多変量解析による半導体製造装置の異常検知を提案した[105]。納入後のトラブルを避けるべく製造装置には高い信頼性が求められており、従来の終点のみによる良否判定では装置の異常をもれなく検知することが難しいことを指摘し、時系列データから特徴量を抽出し、多変量にて異常を検知する判定法を開発し、実装置に適用したことを示した。

第四章では、半導体製造条件の決定における評価実験の最適化のための実験計画法を提案した[176]。半導体成膜装置の熱作用による、高次項・交互作用項の影響を的確に捉えることとの重要性を指摘したうえで、従来の単一因子実験における課題を解決すべく、D最適計画と決定的スクリーニング計画を用いることで、最小限の実験回数で最適な製造条件を導き出すことを示した。なお、複数の実験計画を実機で評価するのはコスト的に困難なことから、既存データを用いて生成した仮想装置モデルを対象装置と見立

てて検証を行った。

第五章では、平均値置換寄与による製造装置の異常原因因子の特定を提案した[153]。リチウムイオンバッテリーの製造工程において発生する異常の原因因子の絞り込み能力を向上するのに、従来手法である再構築寄与(Reconstruction-based contribution: RBC)よりも、現場のエンジニアが解釈しやすい手法として、各因子を平均値に置き換え、その置換前後の異常検知指標の変化量である平均値置換寄与(Mean-value Replacement Contribution: MRC)を用いることで、より正確に原因因子を特定できることを示した。

本研究では半導体デバイスの微細化を実現するために求められる自動化において、それを取り扱うエンジニアが正しく対処できるよう、装置から取得される多量のデータを活用したFab-wide Control Systemを提案してきた。

多くの半導体デバイスメーカーが淘汰される中、EDA(Equipment Data Acquisition)から有益なデータを取得し制御を実現することで生き残った国内半導体メーカーの総力で、2022年にRapidus社を国策として誕生させることができた。世界最先端の半導体デバイスの製造に、日本がふたたび取り組む機会を得たことに、少しでも寄与できれば本研究は意義があったと言える。

6.2 今後の課題

本研究では、異常検知・原因特定・予測・最適化の高精度化に向けた成果を生み出す反面、多くの課題を明らかにした。

第二章ではLW-PLSによる制御で良好な結果を得たドライエッチ装置と、VIPによる変数選択が寄与したCMP装置という半導体製造の多面性が明らかとなった。装置状態の非線形性への対処や、消耗部品の交換による変動への影響を数値化しモデルに組み込むことが望まれる。

第三章では時系列データから製造過程を網羅的に異常監視すること示したが、「第1四分割区間における最小酸素濃度」の寄与が最も大きかったことから、酸素濃度のみの単変量による異常検知の有効性は否定できず、個々の装置構造からメカニズムを明らかにした上で適用する必要性が示された。また三変量による検知精度が最も良かったことから、採用されたccc(3次クラスタリング基準)が示す指標を分解し、他のモデルへの適用性を高めることが課題となる。

本評価で装置の検証に用いたサンプルは装置16台分で、特徴量が16種あるのに対して

サンプルサイズが十分とは言えない．今後蓄積されるデータから再度モデルを構築し，現行利用される少数サンプルにおけるモデルの確からしさを確認すべきと考え，今後の課題とする．

第四章ではD最適計画と決定的スクリーニング計画の有効性は示せたものの，因子の数によっては単一因子計画が有効となる場面が有ることも明らかとなった．使われるサンプルに対し，必要最低限の実験回数の中で，適切な手法を選択する基準の確立は課題となる．

第五章では平均値置換寄与による異常原因因子の特定の有効性を示すことができたが，装置の交互作用を考慮することはできず，原因因子の改善方向も把握できないことから，本研究成果を利用できるエンジニアは限定的となる．平均値置換寄与に改善方向を提示する指標を追加することが課題となる．

半導体デバイスの微細化を支えるFab-wide Control Systemを提案できていることから，これらの課題解決にも引き続き精力的に取り組んでゆく．

謝辞

本論文は、私がこれまでに所属した企業と本学との共同研究を通して実施した、研究成果をまとめたものであり、その間つねに懇切丁寧なご指導とご鞭撻を賜った加納学教授に心から感謝する。

加納教授とは、2008年10月の日本学術振興会143委員会の研究会で出会い、当時委員会の幹事の任にあたられていた加納教授は、初めて参加する私に対し、丁寧にプロセス制御の基礎をご指導いただき、その技術の有用性を私に確信させた。翌年には当時所属していたソニー株式会社と本学との共同研究を立ち上げ、半導体製造向けの制御の実現に向けた研究活動を開始し、その後も私が所属した延べ3社において共同研究を行い、ご指導いただいたお陰で、本研究の成果を生み出すに至ったことを大変感謝している。

株式会社村田製作所においては、リチウムイオンバッテリー開発における本学との共同研究を立ち上げ、その製造に対する歩留まり向上のための制御技術を導入し、当時人手による制御を自動化することで、生産性の向上に寄与し、村田製作所におけるバッテリービジネスの早期立ち上げに貢献することができた。共にアルゴリズムを検討し、システム開発を手助けしてくれた村田製作所の伊藤仙和氏をはじめ、プロセス開発部のエンジニアに感謝する。

株式会社KOKUSAI ELECTRICにおいては、半導体製造装置向けのデータサイエンスという、これまでとは異なる分野での試みに対し、本学との共同研究として取り組んだ。半導体製造装置は世界中でも限られた市場であり、サンプルサイズを多く取れないという、データサイエンスにとって大きなハンディを抱えた研究であった。加納教授は現場目線の洞察力から、異常原因の特定手法を提案され、コストメリットがある成果を上げるに至った。共にデータ解析にあたり、難題をいくつも解決してくれたDX推進部の志賀優規氏、ならびに現場での課題を丁寧に解説し、解決策を現場に展開してくれた品質保証部の清水充氏、井村英二氏をはじめ、協力いただいた多くの同社エンジニアに感謝する。

前述の通り、半導体製造装置においては省サンプルという、厳しい解析環境が立ちほだけり、そのため評価を行う際の実験回数には多くの制約が存在した。顧客要求に対し1日でも早く加工条件を導き出すことが望まれる現場の課題解決にあたり、加納教授より決定的スクリーニング計画の導入を促され、再度本学との共同研究にて検討してきた。これまでエンジニアが主に使用していた単一因子実験に対して、提案手法は実験効率を

飛躍的に向上させるものであり、先行するライバル他社に対して、開発効率面で大きな優位性を得るに至った。共同研究に参画し、実験計画法に対する多くの知見を導入したフリーランスの坂寄寛幸氏、また共に解析作業に取り組んだDX推進部の川岸隆之氏をはじめ、実験に協力いただいた同社のプロセスエンジニアに感謝する。

本論文をまとめるに当たっては、60歳を過ぎ、かつ本業での職務をこなしつつの研究活動となり、楽しい中にも苦勞の多いものであった。そのような状況にありながらも、研究を進めるにあたり協力やアドバイスをくださった、社内外の多くの支援者のお陰でここまでまとめあげることができた。現在所属するRapidus株式会社の支援と、京都大学情報学研究科の関係者のご支援、心の支えとなった家族、謝辞には書ききれない全ての関係者に感謝申し上げる。

略語一覧

略語	フルスペリング
ANN	Artificial Neural Network
APC	Advanced Process Control
ARX	online Bayesian Auto-Regression eXogenous
AUC	Area Under the Curve
BGA	Ball Grid Array
BPNN	Back Propagation Neural Network
ccc	Cubic Clustering Criterion
CMOS	Complementary Metal-Oxide-Semiconductor
CMP	Chemical Mechanical Polishing
CNN	Convolutional Neural Network
CVD	Chemical Vapor Deposition
DMW	Dynamic Moving Window
DOP	D-Optimal Design
DSD	Definitive Screening Design
DX	Digital Transformation
EDA	Equipment Data Acquisition
EES	Equipment Engineering System
EUV	Extreme Ultraviolet
EWMA	Exponentially Weighted Moving Average
FOUP	Front-Opening Unified Pod
GAA	Gate All Around
GAN	Generative Adversarial Network
GEM	Generic Model for Communications and Control of Manufacturing Equipment
GPR	Gaussian Process Regression
IEDM	International Electron Devices Meeting
JIT	Just-In-Time
k-NN	k-Nearest Neighbor
LLR	Local Linear Regression
LOOCV	leave-one-out cross validation
LSTM	Long Short-Term Memory
LV	Latent Variables
LW-PLS	Locally Weighted Partial Least Squares
LWR	Local Weighted Regression
MA	Moving Average

MD	Mahalanobis Distance
MES	Manufacturing Execution System
MRA	Multiple regression analysis
MRC	Mean-value Replacement Contribution
NIPALS	Nonlinear Iterative Partial Least Squares
OES	Optical Emission Spectroscopy
OFD	One Factor Design
OOB	Out-Of-Bag
PCA	Principal Component Analysis
PCR	Principal Component Regression
PdM	Predictive Maintenance
PE-ALD	Plasma-Enhanced Atomic Layer Deposition
PLS	Partial Least Squares Regression
PLS-VIP	Partial Least Squares-Variable Importance in Projection
R2R	Run-to-Run
RBC	Reconstruction-Based Contribution
RF	Radio Frequency
RMSE	Root-Mean-Square Error
ROC	Receiver Operating Characteristic
SEMI	Semiconductor Equipment and Materials International
SUM	Sequential Update Model
VIP	Variable Importance in the Projection
VM	Virtual Metrology
VM-APC	Virtual Metrology Advanced Process Control
YMS	Yield Management System

参考文献

1. FORTUNE BUSINESS INSIGHTS, “半導体・エレクトロニクス／半導体市場,” *FBI102365*, 2025 年 5 月 26 日.
2. 服部 毅, “450mm をめざす道程,” サイエンス リポート, *TELESCOPE magazine*, 東京エレクトロン, 2015 年 4 月 30 日.
3. アルバート フチガミ, “次世代 SEMI Equipment Data Acquisition (EDA) スタンダードより良く, より効率的なデータ転送のための HTTP/2 技術の適用,” *SEMI PEER Group*, 2018 年 5 月 18 日.
4. International SEMATECH-JEITA/Selete Collaboration, *Equipment Engineering Functions Guidebook*, Version 2.5, 2002.
5. M. Kano and K. Fujiwara, “Virtual sensing technology in process industries: Trends and challenges revealed by recent industrial applications,” *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 46, no. 1, pp. 1–17, 2013.
6. J.-W. Kwon, H.-S. Kim, D.-H. Seol, S.-K. Kim, and J.-W. Park, “Development of virtual metrology using plasma information variables to predict Si etch profile processed by $\text{SF}_6/\text{O}_2/\text{Ar}$ capacitively coupled plasma,” *Materials*, vol. 14, no. 11, article 3005, 2021.
7. S. Kim, Y. J. Lee, H. S. Kim, and C. O. Kim, “Estimation of active pharmaceutical ingredients content using locally weighted partial least squares and statistical wavelength selection,” *International Journal of Pharmaceutics*, vol. 421, no. 2, pp. 269–274, 2011.
8. H. Nakagawa, S. Kim, M. Kano, and S. Hasebe, “Evaluation of infrared-reflection absorption spectroscopy measurement and locally weighted partial least-squares for rapid analysis of residual drug substances in cleaning processes,” *Analytical Chemistry*, vol. 84, no. 8, pp. 3820–3826, 2012.
9. S. Kim, M. Kano, Y. J. Lee, and C. O. Kim, “Long-term industrial applications of inferential control based on just-in-time soft sensors: Economical impact and challenges,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 52, no. 35, pp. 12346–12356, 2013.
10. 加納 学, “データ駆動型アプローチによる製造技術強化 —いかにプロセス特性変化に対応するか,” システム制御情報学会誌, 第 54 巻, 第 3 号, pp. 80–85, 2010 年.

11. 加納 学, “多変量統計のプロセス管理—相関関係に着目した異常検出方法—,” *検査技術*, 第 15 卷, 第 4 号, pp. 10-17, 2010 年.
12. J. Chen and F. Wang, “PLS-based dEWMA run-to-run controller for MIMO non-squared semiconductor processes,” *Journal of Process Control*, vol. 17, no. 4, pp. 309-319, 2007.
13. Z. Zhong, J. Sun, Y. Yu, and Z. Hou, “Adaptive cautious regularized run-to-run controller for lithography process,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 34, no. 3, pp. 387-397, 2021.
14. C. S. Teo, Y. K. Tan, S. H. Ong, and A. T. S. Ho, “Geometric error compensation for multi-axial precision motion systems using support vectors,” *Asian Journal of Control*, vol. 7, no. 1, pp. 56-62, 2005.
15. J. Wan and S. McLoone, “Gaussian process regression for virtual metrology-enabled run-to-run control in semiconductor manufacturing,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 31, no. 1, pp. 12-21, 2018.
16. C.-F. Chien, C.-H. Su, and Y.-M. Hsieh, “Decision-based virtual metrology for advanced process control,” *Computers & Industrial Engineering*, vol. 169, no. 13, Article 108245, 2022.
17. Z. N. Mevawalla, J. R. Moyne, and D. M. Tilbury, “Neural network modeling for advanced process control using production data,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 24, no. 2, pp. 214-224, 2011.
18. M. Maggipinto and A. Beghi, “DeepVM: A deep learning-based approach for 2D input data virtual metrology,” *Journal of Process Control*, vol. 84, pp. 24-34, 2019.
19. T. Tsutsui and T. Matsuzawa, “Virtual metrology model robustness against chamber condition variation using deep learning,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 32, no. 4, pp. 145-153, 2019.
20. J. H. Lee, Y. H. Kim, and H. D. Lee, “A new intelligent SOFM-based sampling plan for advanced process control,” *Expert Systems with Applications*, vol. 20, no. 2, pp. 609-619, 2001.
21. M. Zhu and T. Pan, “DRL-dEWMA: a composite framework for run-to-run control in the semiconductor manufacturing process,” *Neural Computing & Applications*, vol. 36, no. 3, pp. 24-34, 2024.
22. M. Zhu and T. Pan, “Deep reinforcement learning-assisted extended state observer,” *Transactions of the Institute of Measurement and Control*, vol. 46, no. 12, pp. 428-433, 2024.

23. K. B. Lee and C. O. Kim, "Recurrent feature-incorporated convolutional neural network," *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 31, no. 1, pp. 73–86, 2020.
24. M. Zhu and T. Pan, "Distributional reinforcement learning for run-to-run control," *Neural Computing & Applications*, vol. 35, no. 26, pp. 22937–22949, 2023.
25. S. Kim, J. Jang, and C. O. Kim, "Run-to-run controller using least squares GANs," *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 32, no. 8, pp. 2267–2280, 2021.
26. J. Yi, C. Kim, and J. H. Park, "Neural network-based uniformity profile control," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 16, no. 4, pp. 609–619, 2003.
27. M. Tom, D. Kim, H. Lee, and Y. Choi, "Machine learning-based run-to-run control of thermal atomic layer etching," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 168, article 108044, pp. 1–10, 2022.
28. T. Hirai and M. Kano, "Adaptive virtual metrology design," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 28, no. 2, pp. 137–144, 2015. (2 章の一部に引用)
29. 平井 都志也, 加納 学, "局所回帰モデルによる半導体プロセスドライエッチ工程の品質管理," *計測自動制御学会 制御部門大会*, 2011 年. (2 章の一部に引用)
30. Y. Zheng, H. Jiang, M. Zhu, and Y. Liu, "Model quality evaluation in semiconductor manufacturing process," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 30, no. 1, pp. 124–131, 2017.
31. S.-K. S. Fan, B. C. Jiang, C.-H. Jen, and C.-C. Wang, "SISO run-to-run feedback controller using triple EWMA smoothing for semiconductor manufacturing processes," *International Journal of Production Research*, vol. 40, no. 13, pp. 3093–3120, 2002.
32. R. Rajagopal and E. D. Castillo, "An analysis and MIMO extension of a double EWMA run-to-run controller for non-squared systems," *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, vol. 10, no. 4, pp. 417–428, 2003.
33. A. Chen and E. A. Elsayed, "Design and performance analysis of the exponentially weighted moving average mean estimate for processes subject to random step changes," *Technometrics*, vol. 44, no. 4, pp. 436–444, 2002.

34. A.-C. Lee, Y.-R. Pan, and M.-T. Hsieh, "Output disturbance observer structure applied to run-to-run control," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 24, no. 1, pp. 45–53, 2011.
35. N. S. Patel and S. T. Jenkins, "Adaptive optimization of run-to-run controllers: The EWMA example," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 13, no. 1, pp. 97–107, 2000.
36. E. D. Castillo and R. Rajagopal, "A multivariate double EWMA process adjustment scheme for drifting processes," *IIE Transactions*, vol. 34, no. 12, pp. 1055–1068, 2002.
37. F. He, K. Wang, and W. Jiang, "A general harmonic rule controller for run-to-run process control," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 22, no. 2, pp. 232–244, 2009.
38. S.-K. S. Fan, Y.-C. Liu, T.-H. Lin, and Y.-J. Chang, "A new double exponentially weighted moving average run-to-run control using a disturbance-accumulating strategy for mixed-product mode," *IEEE Transactions on Automation Science and Engineering*, vol. 18, no. 4, pp. 1210–1219, 2021.
39. L. Chen, T. Huang, X. Guan, and Q. Wang, "Performance assessment of run-to-run control in semiconductor manufacturing based on IMC framework," *International Journal of Production Research*, vol. 47, no. 15, pp. 4231–4245, 2009.
40. C.-C. Chang, Y.-T. Lin, and T.-L. Su, "An adaptive-tuning scheme for G&P EWMA run-to-run control," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 25, no. 2, pp. 312–320, 2012.
41. C.-H. Jen, Y.-C. Lee, and Y.-J. Chang, "Integration of run-to-run control schemes and on-line experiment to deal with the changes in semiconducting dynamic processes," *International Journal of Production Research*, vol. 49, no. 19, pp. 5801–5815, 2011.
42. A. V. Prabhu and T. F. Edgar, "Performance assessment of run-to-run EWMA controllers," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 20, no. 4, pp. 366–374, 2007.
43. S. Adivikolanu and E. Zafiriou, "Extensions and performance/robustness tradeoffs of the EWMA run-to-run controller by using the internal model control structure," *IEEE Transactions on Electronics Packaging Manufacturing*, vol. 23, no. 1, pp. 56–68, 2000.

44. J. Zhang, H. Jiang, and W. Cao, "Minimum entropy based run-to-run control for semiconductor processes with uncertain metrology delay," *Journal of Process Control*, vol. 19, no. 10, pp. 1688–1697, 2009.
45. D.-S. Lee and A.-C. Lee, "Two-dimensional pheromone propagation controller applied to run-to-run control," *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, vol. 66, no. 5–8, pp. 917–936, 2013.
46. R. P. Good and S. J. Qin, "On the stability of MIMO EWMA run-to-run controllers with metrology delay," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 19, no. 1, pp. 78–86, 2006.
47. J. Wang, S. Qin, and T. Edgar, "Recursive least squares estimation for run-to-run control with metrology delay and its application to STI etch process," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 18, no. 2, pp. 309–319, 2005.
48. 前川 耕司, "姿を現わしつつある米国の DX : 第 3 部 APC と Industry 4.0 (3) APC 出席," 2020 年 8 月 14 日.
49. A. A. Khan, J. R. Moyne, and D. M. Tilbury, "Virtual metrology and feedback control for semiconductor manufacturing processes using recursive partial least squares," *Journal of Process Control*, vol. 18, no. 10, pp. 961–974, 2008.
50. S. Park, J. H. Lee, and J. W. Park, "Enhancement of the virtual metrology performance for plasma-assisted oxide etching processes by using plasma information (PI) parameters," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 28, no. 3, pp. 352–361, 2015.
51. S.-K. S. Fan and Y.-J. Chang, "An integrated advanced process control framework using run-to-run control, virtual metrology and fault detection," *Journal of Process Control*, vol. 23, no. 7, pp. 933–942, 2013.
52. S.-K. S. Fan and Y.-J. Chang, "Multiple-input multiple-output double exponentially weighted moving average controller using partial least squares," *Journal of Process Control*, vol. 20, no. 6, pp. 734–742, 2010.
53. M. Maggipinto, A. Beghi, and S. Bortolussi, "Run-to-run control and state estimation in high-mix semiconductor manufacturing," *Annual Reviews in Control*, vol. 31, no. 2, pp. 241–265, 2007.
54. P. W. Huang and K.-J. Chung, "Task failure prediction for wafer-handling robotic arms by using various machine learning algorithms," *Measurement and Control (London)*, vol. 54, no. 5–6, pp. 136–143, 2021.

55. K. Suthar, A. Sharma, and B. Mishra, "Next-generation virtual metrology for semiconductor manufacturing: A feature-based framework," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 127, pp. 140–149, 2019.
56. C.-H. Jen, Y.-C. Lee, and Y.-J. Chang, "Data-driven virtual metrology and retraining systems for color filter processes of TFT-LCD manufacturing," *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 71, article 115001, 2022.
57. Z. Li, S. Zhang, X. Zhao, and Y. Zhang, "Prediction of material removal rate for chemical mechanical planarization using decision tree-based ensemble learning," *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, vol. 141, no. 3, 031003-1–031003-7, 2019.
58. M. Ismail, Y. Wang, A. A. Daghistani, and W. A. Alasmay, "Quality monitoring in multistage manufacturing systems by using machine learning techniques," *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 33, no. 8, pp. 2471–2486, 2022.
59. X. Jia, J. Chen, and C. Liu, "Adaptive virtual metrology for semiconductor chemical mechanical planarization process using GMDH-type polynomial neural networks," *Journal of Process Control*, vol. 62, pp. 28–37, 2018.
60. J. Joo, K. Lee, and J. Kim, "Virtual metrology modeling for wafer edges via graph attention networks," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 36, no. 3, pp. 297–306, 2023.
61. H.-W. Xu, Y. M. Hsieh, S. H. Lee, and C. Y. Wang, "Data-driven adaptive virtual metrology for yield prediction in multibatch wafers," *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 18, no. 12, pp. 7158–7167, 2022.
62. S. Kang, "On effectiveness of transfer learning approach for neural network-based virtual metrology modeling," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 31, no. 1, pp. 87–95, 2018.
63. J. E. Choi and S. J. Hong, "Machine learning-based virtual metrology on film thickness in amorphous carbon layer deposition process," *Measurement: Sensors*, vol. 16, article 100165, 2021.
64. C.-H. Su, C.-T. Yang, and T.-C. Hsiao, "Enhancement of diffraction-based overlay model for overlay target with asymmetric sidewall," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 33, no. 3, pp. 357–366, 2020.

65. W.-T. Yang, Y.-C. Chiu, and C.-C. Wang, "A physics-informed run-to-run control framework for semiconductor manufacturing," *Expert Systems with Applications*, vol. 155, article 113424, 2020.
66. M.-H. Hung, W.-Y. Hsieh, and C.-H. Lee, "A novel virtual metrology scheme for predicting CVD thickness in semiconductor manufacturing," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 12, no. 3, pp. 295–303, 2007.
67. J. E. Choi, D. H. Seol, and C. Y. Kim, "Virtual metrology for etch profile in silicon trench etching with SF₆/O₂/Ar plasma," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 35, no. 1, pp. 128–136, 2022.
68. C.-Y. Hsu, C.-H. Chien, Y.-C. Lin, and J.-C. Wang, "Temporal convolution-based LSTM with attention mechanism for remaining useful life prediction," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 35, no. 2, pp. 244–252, 2022.
69. C. Liu, X. Jia, H. Zhao, and Y. Li, "Two-stage transfer learning for fault prognosis of ion mill etching process," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 34, no. 2, pp. 212–220, 2021.
70. S.-X. Kao and C.-F. Chien, "Deep learning based positioning error fault diagnosis of wire bonding equipment," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 36, no. 4, pp. 444–452, 2023.
71. K. B. Lee and C. O. Kim, "Recurrent feature-incorporated convolutional neural network for virtual metrology," *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 31, no. 1, pp. 444–452, 2020.
72. Y.-M. Hsieh, C.-H. Su, and C.-C. Wang, "Convolutional neural networks for automatic virtual metrology," *IEEE Robotics and Automation Letters*, vol. 6, no. 3, pp. 5720–5727, 2021.
73. X. Wu, F. Liu, X. Song, and J. Guo, "Development of convolutional neural network-based Gaussian process regression," *Control Engineering Practice*, vol. 96, pp. 104343-1–104343-9, 2020.
74. Y.-M. Hsieh, C.-H. Su, and C.-C. Wang, "Keep-important-samples scheme for training CNN-based virtual metrology models," *IEEE Robotics and Automation Letters*, vol. 9, no. 9, pp. 7931–7938, 2024.
75. S. Kang, "Rotation-invariant wafer map pattern classification with CNNs," *IEEE Access*, vol. 8, pp. 170650–170658, 2020.
76. 岡谷 貴之, "画像認識のための深層学習の研究動向," *人工知能*, 第 31 巻, 第 2 号, 2016 年.

77. H. Zhu and P. Blackborow, “Laser-driven light sources for nanometrology applications,” *Journal of Microelectronic Manufacturing*, vol. 2, no. 1, article 9020104, 2019.
78. U. Amato, F. Buonocore, M. Cimaglia, and R. Masciullo, “Predictive maintenance of pins in the ECD equipment for Cu deposition,” *Sensors (Basel)*, vol. 23, no. 14, article 6249, 2023.
79. 國吉 康夫, “人工知能の将来と人間・社会,” *科学技術社会論研究*, 第 16 号, 2018 年.
80. TIOBE Software, “TIOBE Index for August 2024,” 2024 年 8 月.
81. H.-H. Hsiao and K.-J. Wang, “GAGAN: Global attention generative adversarial networks for semiconductor advanced process control,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 37, no. 1, pp. 45–54, 2024.
82. J. E. Choi, D. H. Seol, and C. Y. Kim, “Generative adversarial network-based fault detection in semiconductor equipment with class-imbalanced data,” *Sensors (Basel)*, vol. 23, no. 4, article 1889, 2023.
83. S. Kim, J. Jang, and C. O. Kim, “A run-to-run controller for a chemical mechanical planarization process using least squares generative adversarial networks,” *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 32, no. 8, pp. 2267–2280, 2021.
84. S. Umeda, K. Nogi, D. Shiraishi, and A. Kagoshima, “Advanced process control using virtual metrology to cope with etcher condition change,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 32, no. 4, pp. 423–430, 2019.
85. V. Maitra, Y. Su, and J. Shi, “Virtual metrology in semiconductor manufacturing: Current status and future prospects,” *Expert Systems with Applications*, vol. 249, article 123559, 2024.
86. 前川 耕司, “姿を現わしつつある米国の DX : 第 3 部 APC と Industry 4.0 (5) TEL の VM,” 2020 年 8 月 14 日.
87. J. Moyne, “Introduction to the Special Section on Advanced Process Control,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 23, no. 2, pp. 149–150, 2010.
88. J. Moyne, “Big data capabilities applied to semiconductor manufacturing advanced process control,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 29, no. 4, pp. 283–291, 2016.

89. J. Moyne, "A methodology to develop and implement digital twin solutions for manufacturing systems," *IEEE Access*, vol. 9, pp. 44247–44265, 2021.
90. J. Moyne, "An online virtual metrology model with sample selection for the tracking of dynamic manufacturing processes with slow drift," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. PP(99), pp. 1–9, 2019.
91. R. P. Good, D. Pabst, and J. B. Stirton, "Compensating for the initialization and sampling of EWMA run-to-run controlled processes," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 23, no. 2, pp. 78–86, 2010.
92. K. Hui, "On the decomposition of bias terms in mixed multi-product multi-tool APC operations," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 31, no. 4, pp. 405–413, 2018.
93. K. Hui, "Forging basic elements of cyber-physical systems in Industry 4.0 with parametric characterization for FDC," *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 14, no. 2, pp. 632–640, 2018.
94. K. Hui, "Target and uniformity controls of WLP in SSL/LED manufacturing," *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, vol. 7, no. 8, pp. 1324–1332, 2017.
95. K. Hui, "A review of variance amplifications by advanced process control," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 28, no. 3, pp. 467–475, 2015.
96. K. Hui, "On the dynamics of topological patterns in statistical imputation," *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 36, no. 5, pp. 960–972, 2014.
97. K. Hui, "Case of small-data analysis for ion implanters in the era of big-data FDC," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 26, no. 1, pp. 22–30, 2013.
98. K. Hui, "Advanced process controls of underdetermined systems of feature profiles in semiconductor manufacturing," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 32, no. 2, pp. 198–206, 2019.
99. S. Imai, "Advanced semiconductor manufacturing using big data," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 28, no. 4, pp. 598–607, 2015.
100. S. Imai, "Distributed database and application architecture for big data solutions," *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 13, no. 6, pp. 2857–2865, 2017.

101. S. Imai, "Interconnection failure caused by bath degradation in copper electroplating and its VM-FDC using mathematical model," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 22, no. 4, pp. 432–437, 2009.
102. T. Moriya, "Machine learning approaches for process optimization," *2018 International Symposium on Semiconductor Manufacturing (IEEE)*, pp. 1–6, 2018.
103. F. Tanaka, "Materials informatics for process and material co-optimization," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 32, no. 4, pp. 444–449, 2019.
104. I. Seshadri, D. S. Brown, and P. J. Kyaw, "Scaling opportunities for gate-all-around: A patterning perspective," in *Proceedings of the 2023 International Electron Devices Meeting (IEDM)*, pp. 13.3.1–13.3.4, 2023.
105. T. Hirai, Y. Shiga, M. Shimizu, E. Imura, and M. Kano, "Anomaly detection of semiconductor processing equipment using equipment behaviour," *SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration*, vol. 16, no. 1, pp. 332–337, 2023. (3 章の一部に引用)
106. J. V. Ringwood, J. C. Scanlan, and B. S. McCarthy, "Estimation and control in semiconductor etch: Practice and possibilities," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 23, no. 1, pp. 87–98, 2010.
107. M. Fukasawa, H. Yamashita, and Y. Suda, "Prediction of fluctuations in plasma wall interactions using an EES," in *International Symposium on Dry Process (DPS)*, pp. 247–248, 2008.
108. T. Hirai and M. Kano, "Quality control for semiconductor dry etch process through locally-weighted regression model," *SICE Control Division Conference*, 2011. (2 章の一部に引用)
109. D. Zeng and C. J. Spanos, "Virtual metrology modeling for plasma etch operations," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 22, no. 4, pp. 419–431, 2009.
110. H. Landis, D. W. Greve, R. G. Southwick, J. T. Bucchignano, and M. K. Jain, "Integration of chemical-mechanical polishing into CMOS integrated circuit manufacturing," *Thin Solid Films*, vol. 220, no. 1–2, pp. 1–7, Nov. 1992.
111. C. W. Kaanta, A. R. Neureuther, R. J. Zuleeg, and R. L. Kammlott, "Dual damascene: A ULSI wiring technology," *Proceedings of the 8th International IEEE VLSI Multilevel Interconnection Conference, 1991*, pp. 144–152, 1991.

112. 黒河 周平, “半導体プラナリゼーション CMP 技術の展望,” *精密工学会誌*, 第 84 巻, 第 3 号, 2018 年.
113. 森澤 利浩, 小林 裕通, 武田 行生, “CMP-APC Based on Nonlinear Process Model (2nd Report): Run-to-Run Control of Oxide-film CMP with Ceria Slurry,” *精密工学会誌*, 第 77 巻, 第 9 号, 2011 年.
114. 森澤 利浩, 小林 裕通, 武田 行生, “CMP-APC Based on Nonlinear Process Model (1st Report): Polishing Process Modeling of Oxide-film CMP with Ceria Slurry,” *精密工学会誌*, 第 77 巻, 第 3 号, 2011 年.
115. 玉置 研二, 金子 俊一, “消耗部材劣化の影響を予測する半導体 CMP プロセス制御,” *制御論文*, 第 48 巻, 第 6 号, 2012 年.
116. P. Chen, J. Moyne, and D. M. Tilbury, “Virtual metrology: A solution for wafer-to-wafer advanced process control,” *IEEE International Symposium on Semiconductor Manufacturing*, p.155-157, 2005.
117. M.-F. Wu, C.-H. Su, and C.-C. Wang, “Performance analysis of EWMA controllers subject to metrology delay,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 21, no. 3, pp. 413–421, 2008.
118. J. Moyne, “Making the move to fab-wide APC,” *Solid State Technology*, vol. 47, no. 9, pp. 47–52, 2004.
119. S. J. Qin, L. Wang, and C. H. Han, “Semiconductor manufacturing process control and monitoring: A fab-wide framework,” *Journal of Process Control*, vol. 16, no. 3, pp. 179–191, 2006.
120. A. A. Khan, J. R. Moyne, and D. M. Tilbury, “An approach for factory-wide control utilizing virtual metrology,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2007, vol. 20, no. 4, pp. 364-375 2007.
121. T.-H. Pan, C.-L. Hung, and H.-Y. Chen, “A virtual metrology system for predicting end-of-line electrical properties using a MANCOVA model with tools clustering,” 2011.
122. W.-M. Wu, F.-T. Cheng, and F.-W. Kong, “Dynamic-moving-window scheme for virtual-metrology model refreshing,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 25, no. 2, pp. 238–246, 2012.
123. M. Kano and M. Ogawa, “The state of the art in chemical process control in Japan: Good practice and questionnaire survey,” *Journal of Process Control*, vol. 20, no. 9, pp. 969–982, 2010.
124. M. Kano and K. Fujiwara, “Virtual sensing technology in process industries: Trends and challenges revealed by recent industrial

- applications,” *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 46, no. 1, pp. 1–17, 2013.
125. M. Kano and Y. Nakagawa, “Data-based process monitoring, process control, and quality improvement: Recent developments and applications in steel industry,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 32, no. 1–2, pp. 12–24, 2008.
 126. C. G. Atkeson, A. W. Moore, and S. Schaal, “Locally weighted learning,” *Artificial Intelligence Review*, vol. 11, no. 1–5, pp. 11–73, 1997.
 127. O. Maron and A. W. Moore, “The racing algorithm: Model selection for lazy learners,” in *Lazy Learning*, D. W. Aha, Ed., Dordrecht: Springer Netherlands, pp. 193–225, 1997.
 128. G. Bontempi, M. Birattari, and H. Bersini, “Lazy learning for local modelling and control design,” *International Journal of Control*, vol. 72, no. 7–8, pp. 643–658, 1999.
 129. M. Birattari, G. Bontempi, and H. Bersini, “Lazy learning meets the recursive least squares algorithm,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, MIT Press, pp. 375–381, 1999.
 130. D. Kibler, D. W. Aha, and M. K. Albert, “Instance-based prediction of real-valued attributes,” *Computational Intelligence*, vol. 5, no. 2, pp. 51–57, 1989.
 131. W. S. Cleveland, “Robust locally weighted regression and smoothing scatterplots,” *Journal of the American Statistical Association*, vol. 74, no. 368, pp. 829–836, 1979.
 132. H. Shigemori, M. Kano, and S. Hasebe, “Optimum quality design system for steel products through locally-weighted regression model,” *Journal of Process Control*, vol. 21, pp. 293–301, 2011.
 133. 茂森 弘靖, 長尾 亮, 平田 直人, 南都 康司, 池田 犀也, 水島 成人, 加納 学, 長谷部 伸治, “局所回帰モデルを用いた鋼材の品質制御,” *計測自動制御学会論文集*, 第44巻, pp. 325–332, 2008年.
 134. 茂森 弘靖, 南部 康司, 長尾 亮, 荒木 義, 水島 成人, 加納 学, 長谷部 伸治, “制約付き局所回帰モデルを用いた鋼材の平面形状制御,” *計測自動制御学会論文集*, 第46巻, pp. 472–479, 2010年.
 135. S. Chang, E. Baughman, and B. McIntosh, “Implementation of locally weighted regression to maintain calibrations on FT-NIR analyzers for industrial processes,” *Applied Spectroscopy*, vol. 55, no. 9, pp. 1199–1206, 2001.

136. C. Cheng and M. Chiu, "A new data-based methodology for nonlinear process modeling," *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 13, pp. 2801–2810, 2004.
137. Z. Ge and Z. Song, "Online monitoring of nonlinear multiple mode processes based on adaptive local model approach," *Control Engineering Practice*, vol. 16, no. 12, pp. 1427–1437, 2008.
138. Z. Wang, T. Isaksson, and B. R. Kowalski, "New approach for distance measurement in locally weighted regression," *Analytical Chemistry*, vol. 66, no. 2, pp. 249–260, 1994.
139. K. Fujiwara, M. Kano, S. Hasebe, and A. Takinami, "Soft-sensor development using correlation-based just-in-time modeling," *AIChE Journal*, vol. 55, no. 7, pp. 1754–1765, 2009.
140. K. Fujiwara, M. Kano, and S. Hasebe, "Development of correlation-based clustering method and its application to software sensing," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 101, no. 4, pp. 130–138, 2010.
141. 金 尚弘, 加納 学, 長谷部 伸治, "非線形システムを対象とした適応的な PLS モデル構築手法," *SICE 制御部門大会*, 2011 年.
142. S. Kim, R. Okajima, M. Kano, and S. Hasebe, "Development of soft sensor using locally weighted PLS with adaptive similarity measure," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 124, pp. 43–49, 2013.
143. S. Wold, M. Sjöström, and L. Eriksson, "PLS-regression: A basic tool of chemometrics," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 58, no. 2, pp. 109–130, 2001.
144. S. Wold, E. Johansson, and M. Cocchi, *3D QSAR in Drug Design: Theory, Methods, and Applications*, ESCOM, 1993, pp. 523–550.
145. I.-G. Chong and C.-H. Jun, "Performance of some variable selection methods when multicollinearity is present," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 78, pp. 103–112, 2005.
146. Y. Yao and F. Gao, "A survey on multistage/multiphase statistical modeling methods for batch processes," *Annual Reviews in Control*, vol. 33, no. 2, pp. 172–183, 2009.
147. H. Hotelling, "The generalization of Student's ratio," *Annals of Mathematical Statistics*, vol. 2, no. 3, pp. 360–378, 1931.

148. Y.-T. Huang and F.-T. Cheng, “Automatic data quality evaluation for the AVM system,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 24, no. 3, pp. 445–454, 2011.
149. S. A. Lynn, J. Ringwood, and N. MacGearailt, “Global and local virtual metrology models for a plasma etch process,” *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 25, no. 1, pp. 94–103, 2012.
150. M. Okada and Y. Haga, “Wafer warpage classification adapted to pragmatic equipment operation,” in *AEC/APC Symposium Asia*, 2019.
151. M. Kano and Y. Nakagawa, “Data-based process monitoring, process control and quality improvement: Recent developments and applications in steel industry,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 32, no. 1–2, pp. 12–24, 2008.
152. M. Kano, S. Hasebe, I. Hashimoto, and H. Ohno, “Evolution of multivariate statistical process control: Application of independent component analysis and external analysis,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 28, no. 6–7, pp. 1157–1166, 2004.
153. 平井 都志也, 伊藤 仙和, 加納 学, “平均値置換寄与による異常原因因子の特定,” *計測自動制御学会論文集*, 第 57 巻第 2 号, pp. 86–91, 2021 年. (5 章の一部に引用)
154. SAS Institute, *SAS Technical Report A-108: Cubic Clustering Criterion*, 1992.
155. D. Arthur, “k-means++: The advantages of careful seeding,” in *Proceedings of the 18th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, pp. 1027–1035, 2007.
156. I. Katsavounidis, C.-C. J. Kuo, and Z. Zhang, “A new initialization technique for generalized Lloyd iteration,” *IEEE Signal Processing Letters*, vol. 1, no. 10, pp. 144–146, 1994.
157. 小池 淳義, “多品種, 少量, 超短時間半導体生産方式の研究,” 東北大学, 博士論文 (工学), 2002 年.
158. C. F. J. Wu and M. S. Hamada, “Experiments: Planning, Analysis, and Optimization,” *Hoboken, NJ: Wiley*, 2021.
159. B. Jones and C. J. Nachtsheim, “A class of three-level designs for definitive screening in the presence of second-order effects,” *Journal of Quality Technology*, vol. 43, no. 1, pp. 1–15, 2011.

160. B. K. Shukla, R. B. Patel, and P. B. Patel, "Photocatalytic degradation of orange G dye using bismuth molybdate: Optimization and modeling via definitive screening designs," *Molecules*, vol. 27, no. 7, article 2309, 2022.
161. I. Pincjer, D. Belavic, and M. Ciglar, "Optimization of tensile strength in the paper material cutting process based on CO₂ laser process parameters," *Materials*, vol. 16, no. 7, article 2719, 2023.
162. N. R. E. G. Lim, K. Y. Lim, and C. Y. Wong, "Finite element analysis on the factors affecting die crack propagation in BGA under thermo-mechanical loading," *Engineering Failure Analysis*, vol. 116, article 104717, 2020.
163. G. E. P. Box and N. R. Draper, *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, Wiley, 1987.
164. C. M. Gotwalt, "JMP neural network methodology," SAS Institute, Cary, 2011.
165. A. Tohry, M. A. M. Aris, and N. A. M. Amin, "Advanced modeling of HPGR power consumption based on operational parameters by BNN," *Powder Technology*, vol. 381, pp. 280–284, 2021.
166. 持橋 大羽, "ガウス過程と機械学習," 講談社, 2019 年.
167. D. J. Obermiller, "Multiple response optimization using JMP," *Dow Chemical Company, Midland, MI*, 2000.
168. P. Nomikos, "Detection and diagnosis of abnormal batch operations based on multi-way principal component analysis," *ISA Transactions*, vol. 35, pp. 250–266, 1996.
169. B. R. Bakshi, "Multiscale PCA with application to multivariate statistical process monitoring," *AIChE Journal*, vol. 44, pp. 1596–1610, 1998.
170. M. Kano, H. Ohno, S. Hasebe, and I. Hashimoto, "Comparison of multivariate statistical process monitoring methods with applications to the Eastman Challenge Problem," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 26, pp. 161–174, 2002.
171. S. Wold, N. Kettaneh, and H. Martens, "Multi-way principal components and PLS-analysis," *Journal of Chemometrics*, vol. 1, pp. 41–56, 1987.
172. H. W. Wang, X. Li, and J. Liu, "Application of improved random forest variables importance measure to chronic gastritis diagnosis," in *IEEE International Symposium on IT in Medicine and Education*, pp. 62–66, 2008.
173. H. H. Yue and J. S. Qin, "Reconstruction-based fault identification using a combined index," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 40, no. 20, pp. 4403–4414, 2001.

174. C. F. Alcala and J. S. Qin, “Reconstruction-based contribution for process monitoring with kernel principal component analysis,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, no. 17, pp. 7849–7857, 2010.
175. L. Breiman, “Random Forests,” *Machine Learning*, vol. 45, no. 1, pp. 5–32, 2001.
176. 平井 都志也, 川岸 隆之, 坂寄 寛幸, 加納 学, “半導体製造における成膜条件最適化を対象とした実験計画法の比較,” *計測自動制御学会論文集*, 第 61 巻第 5 号, pp. 278-284, 2025 年. (4 章の一部に引用)

半導体製造における装置データを用いた
プロセス制御および要因分析の高度化に関する研究

2025 年

平井 都志也