

반도체 공정에서 가상계측 위한 XGBoost 기반 예측모델

한정석^{1,2}, 김형근²¹ 삼성디스플레이, ² 한국방송통신대학교 컴퓨터과학과
hittue@knou.ac.kr, hgrikim@knou.ac.kr

XGBoost Based Prediction Model for Virtual Metrology in Semiconductor Manufacturing Process

Jung-Suk Hahn^{1,2}, Hyunggeun Kim²¹ Samsung Display² Dept. of Computer Science, Korea Open National University

요 약

반도체 성능 향상으로 신호를 전달하는 회로의 단위가 마이크로 미터에서 나노미터로 미세화되어 선폭(linewidth)이 점점 좁아지고 있다. 이러한 변화는 검출해야 할 불량 크기가 작아지고, 정상 공정상태와 비정상 공정상태의 차이도 상대적으로 감소되어, 공정오차 및 공정조건의 허용범위가 축소되었음을 의미한다. 따라서 검출해야 할 이상징후 탐지가 더욱 어렵게 되어, 높은 정밀도와 해상도를 갖는 검사공정이 요구되고 있다. 이러한 이유로, 미세 공정변화를 파악할 수 있는 신규 검사 및 계측 공정이 추가되어 TAT(Turn-around Time)가 증가하게 되었고, 웨이퍼가 가공되어 완제품까지 도달하는데 필요한 공정시간이 증가하여 제조원가 상승의 원인으로 작용한다. 본 논문에서는 웨이퍼의 검계측 데이터가 아닌, 제조공정 과정에서 발생하는 다양한 센서 및 장비 데이터를 기반으로 웨이퍼 제조 결과가 양품인지 그렇지 않으면 불량인지 구별할 수 있는 가상계측 모델을 제안한다. 기계학습의 여러 알고리즘 중에서 다양한 장점을 갖는 XGBoost 알고리즘을 이용하여 예측모델을 구축하였고, 데이터 전처리(data-preprocessing), 주요변수 추출(feature selection), 모델 구축(model design), 모델 평가(model evaluation)의 순서로 연구를 수행하였다. 결과적으로 약 94% 이상의 정확성을 갖는 모델을 구축하는데 성공하였으나 더욱 높은 정확성을 확보하기 위해서는 반도체 공정과 관련된 Domain Knowledge를 반영한 모델구축과 같은 추가적인 연구가 필요하다.

1. 서론

반도체는 웨이퍼(wafer)에 약 600 여개의 개별 제조공정을 적용하여 만들어진다. 이러한 개별공정은 여덟 개의 주요 제조공정으로 분류할 수 있는데, 이를 반도체 8 대 공정이라고 한다. 8 대 공정 중에서 웨이퍼에 회로를 새겨 넣는 포토공정(Photo Lithography), 회로의 구조를 형성하여 패턴을 만드는 식각 공정(Etching), 회로를 구분하고 이를 보호하는 박막을 만드는 증착 공정(Deposition), 그리고 생성된 회로에 전기신호가 전달될 수 있도록 금속선을 연결하는 배선 공정(Metallization)은 회로의 폭을 결정하는 공정으로, 미세화에 따라 공정상태가 민감하게 반응하는 공정이다. 회로의 너비가 축소됨에 따라 이들 공정이 제대로 수행되었는지 확인하기 위해서 상대적으로 더 높은 검사정밀도를 갖는 검사 및 계측 공정이 요구된다. 그러나, 이러한 추가적 검사는 제품의 성능향상과 같이 가치를 증가시키는(value-added) 공정이 아닌 측정

과정의 추가를 의미하는 것이고, 이러한 이유로 제조단가 상승 및 TAT(Turn-around Time) 증가를 수반하여 생산성이 낮아지게 된다. 이뿐만 아니라, 미세화에 기인하는 신규 불량 발현도 생산단가를 높이는 원인으로 작용한다. 이러한 예는 그림 1 에 잘 표현되어 있다. 회로 선폭이 좁아지면서 발생하는 가장 대표적인 문제는 누설전류(Leakage Current) 증가인데, 이는 전하가 이동하는 Source 와 Drain 사이의 거리가 짧아지는 Short Channel Effect 에 의하여 발생한다. 과거의 반도체 제품은 Channel 사이의 거리가 상대적으로 멀었기 때문에 누설전류가 제품의 불량을 야기하는 수준이 아니었지만 지금의 반도체 제품은 누설전류에 매우 취약한 구조를 가질 수밖에 없다. 이렇게 새롭게 발생하는 불량의 가장 큰 특징은 단일 요인에 의하여 발생하는 것이 아니기 때문에 그 원인을 정확히 파악하기 어렵다는 것이다. 즉, 누설전류가 나노미터 수준의 회로 선폭에서 급격히 증가하는 원인은 단일 공정

변수에 의하여 발생하는 것이 아니라, 여러 공정변수의 상호의존성 및 혼합효과에 의하여 발생하기 때문이다. 이와 같은 현상은 반도체 제조라인에서 자주 경험하게 되는데, 새로운 문제가 발생하여 그 원인을 파악하고자 개별 단위공정을 각각 검사하면 모두 공정조건을 만족하여 문제의 원인을 정확히 알 수 없는 경우가 많이 발생한다. 이러한 이유로 단위공정의 검사강화보다는 여러 공정 데이터를 동시에 분석하여야 보다 근원적인 정상공정의 조건 및 비정상 공정의 원인이 되는 여러 공정변수들을 도출해 낼 수 있다.

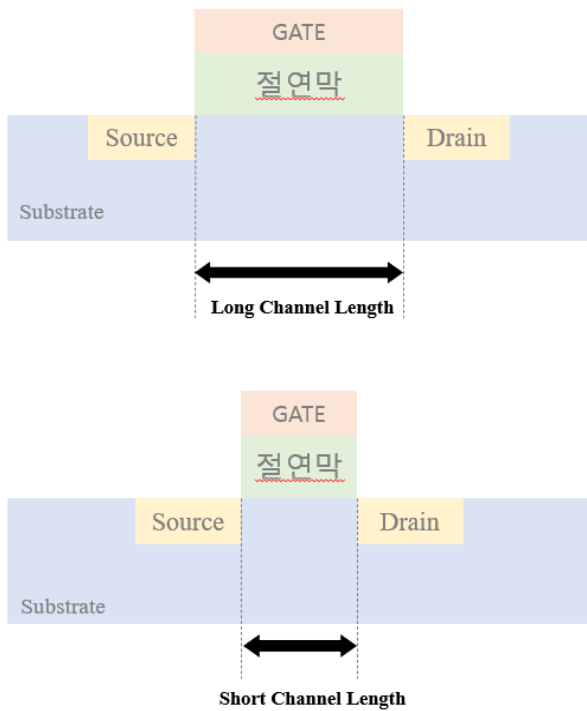


그림 1 회로 미세화에 따른 채널 길이 변화

본 논문에서는 약 600 여개의 공정변수를 설명변수로 하고 목표변수 값은 양품과 불량으로 구성된 반도체 제조 데이터를 이용하여 XGBoost 알고리즘으로 설계된 양품과 불량을 분류하는 모델을 구축하고, 혼동행렬(Confusion Matrix) 및 교차검증 방법으로 모델의 성능 평가한다.

2. 관련연구

2.1 가상계측

가상계측(Virtual Metrology, VM)은, 실제 검사를 수행하지 않고, 제품에 대한 검사 결과를 예측하는 방법[1]으로, 제조공정에서 발생하는 다양한 센서 데이터 및 장비 데이터, 그리고 공정이력 데이터를 기반으로, 제품의 상태를 평가한다. 실제측과 가상계측 사이의 측정 차이는 <그림 2>에서 설명하고 있다. 가상계측의 가장 큰 특징은 공정 데이터를 분석하여, 설

명변수(Explanation Variable)을 추출하고, 모니터링 및 관리가 필요한 지표의 결과값을 계산하거나 최종 완제품 상태의 합격 혹은 불합격 여부와 같은 반응변수(Response Variable) 결과를 도출하는 예측모델(Prediction Model)을 구축하는 것이다. 개별 공정에 대해서도 예측모델을 구축하여 가상계측을 적용할 수 있는데, 공정변수가 많은 단위 공정의 경우, 어떤 조건에서 해당 공정의 수율이 낮아지게 되고, 비정상 공정상태가 발생하는지 데이터로 파악할 수 있다. 이러한 방식은 웨이퍼를 직접 검사하지 않기 때문에 계측과정에서 발생하는 불량 및 잘못된 측정에 의한 loss 가 발생하지 않고, 공정변수 사이의 상관관계 파악하여 이론적으로는 알 수 없는 제조과정 상의 특이사항을 파악할 수 있다. 이렇게 알게 된 정보를 바탕으로 비정상 공정이 발생하는 특이 조건을 파악하여 별도의 관리항목을 도출할 수 있다[2].

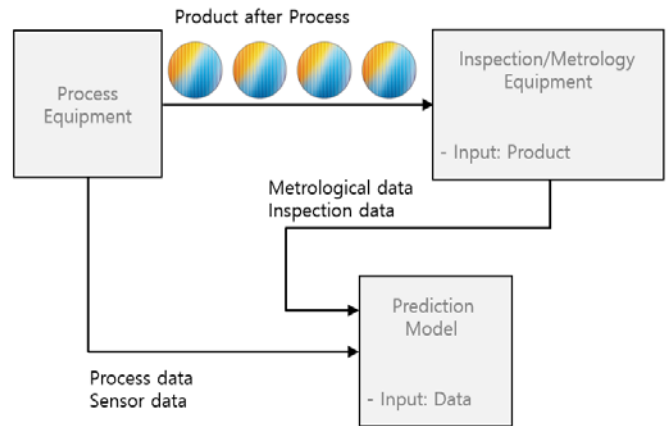


그림 2 실제 검사 및 계측공정과 가상계측 차이

본 논문에서는 단위공정에 대한 예측모델이 아닌 전체 제조과정에서 수집된 데이터를 기반으로 예측 모델을 구축한다.

2.2 XGBoost 알고리즘

기계학습 분야에서 발표되는 최신 알고리즘들의 특징은 기존에 사용되었던 전통적인 알고리즘들의 단점 및 한계를 개선하여 정확도 및 연산시간이 향상되었다는 것이다[3]. XGBoost(eXtreme Gradient Boosting) 알고리즘은 의사 결정나무 기반인 GBM(Gradient Boost Machine) 기반으로 생성되었지만, GBM의 단점을 극복하기 위하여 자체 과적합(Overfitting) 규제기능과 사용자가 설정한 max_depth 까지만 분류하기 위하여, 분류방향의 반대 방향으로 이동하면서 분류이득(positive gain)이 없는 노드를 삭제하는 가지치기(tree-pruning) 기능이 추가되었고, 연산속도 향상을 위하여 병렬 thread 를 사용하고, gradient 의 통계값을 저장하기 위하여 cache 메모리 활용과 같은 하드웨어 자원을 효

울적으로 이용한다. 이 외에도, 알고리즘 내부에 결측치(missing value) 처리 기능, 교차검증기능이 포함되어 있고, 모델의 정확도를 높이는데 이러한 기능이 사용된다. 또한, 목표변수와 모델 평가기준을 사용자가 설정하기가 매우 용이하고, 희소 데이터를 인식하기 위한 근사적 트리 학습(Approximate Tree Learning)의 Weighted Quantile Sketch 활용한다[4]. XGBoost 외에 최신 알고리즘으로 LightGBM 과 CatBoost 알고리즘도 있지만, LightGBM 의 경우, 정확도 면에서는 XGBoost 보다 우수하다는 연구결과가 보고되었지만 과적합이 발생할 확률이 매우 높고, CatBoost 알고리즘은 범주형 자료분석에 특화된 알고리즘[5]이므로 본 논문에서는 예측모델 설계에 XGBoost 알고리즘을 활용한다.

3. XGBoost 기반 예측모델 구축

본 논문의 가상계측 결과의 도출과정은 아래 <그림 3>와 같다. 목표변수는 양품과 불량률 구분하는 항목이고, 설명변수는 반응변수를 제외한 나머지 속성 중에서 다중공선성 제거하기 위하여 선택된 변수들로만 구성하였다. 이 과정에서 150 개를 제외하고 나머지 변수들은 제외되었다. 반도체 공정 특성상 양품이 불



그림 3 예측모델 구축 및 평가 단계

량보다 훨씬 많기 때문에 분석에 사용된 데이터는 불균형 데이터(Imbalanced Data) 성격을 가지게 된다. 이러한 데이터 처리는 크게 Oversampling, Undersampling 방식이 있고, 각각의 방식에도 세부적으로 여러가지 방법이 있으나, 본 논문에서는 SMOTE(Synthetic Minority Over-sampling Technique) 기법을 사용하였다.



그림 4 SMOTE 알고리즘 원리

SMOTE 알고리즘은 개수가 적은 쪽의 데이터를 생성하는 방식으로 데이터의 균형을 맞춘다[6]. XGBoost 알고리즘을 활용하기 위하여 scikit learn 패키지의 XGBClassifier 를 사용하였고, 동일한 패키지의 GridSearchCV 를 사용하여 모델을 구성하는 매개변수(hyperparameter)[7]를 최적화하였다. 구축된 예측모델을 평가하기 위하여 전체 데이터의 30% 정도를 테스트

데이터로 활용하여 혼동행렬(Confusion Matrix)의 정확도(Accuracy)과 정밀도(Precision) 가장 높은 모델을 구축하였다.

4. 실험결과

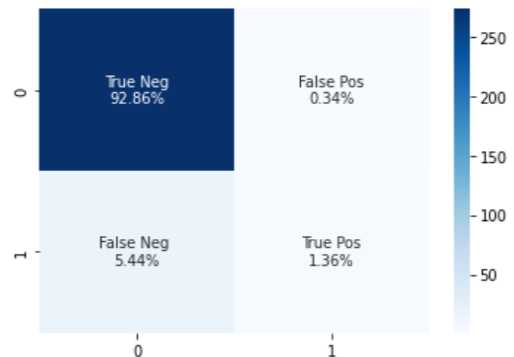
모델의 평가지표는 아래의 세 수식을 이용하였다. 아래 수식에서 TN(True Negative)은 양품을 양품으로 판정한 경우, FP(False Positive)는 불량률 양품으로 판정한 경우, FN(False Negative)은 양품을 불량률로 판정한 경우, TP(True Positive)는 불량률 불량률로 판정한 비율이다. 정확도(Accuracy)는 양품과 불량률 모두 정확하게 분류한 비율로, 이는 약 94% 수준을 보였다. 실제 불량 중에서 불량률로 판정한 비율인 정밀도

$$Accuracy = \frac{TN + TP}{TN + FN + FP + TP} \quad (\text{식 1})$$

$$Precision = \frac{TP}{FP + TP} \quad (\text{식 2})$$

$$Recall = \frac{TP}{FN + TP} \quad (\text{식 3})$$

(Precision)는 80% 이고, 불량이라고 판정한 데이터에서 실제 불량률의 비율인 재현성(Recall)은 20%으로 확인되었다. 정확도가 높고 검출력이 80% 수준을 보인다는 것은 모델의 성능이 나쁘지 않다고 할 수 있으나, 불량률로 판정한 비율에 비하여 실제 불량률 20% 밖에 미치지 않는다는 것은 그만큼 과검(Over Detect)이 심하다고 할 수 있다. StratifiedKFold 알고리즘으로 교차검증을 하였지만 위 결과와 유의미한 차이는 없었다.



$$정확도(Accuracy) = \frac{TP+TN}{TN+FN+FP+TP} = \frac{273+4}{273+1+16+4} = 94\%$$

$$정밀도(Precision) = \frac{TP}{FP+TP} = \frac{4}{1+4} = 80\%$$

$$재현성(Recall) = \frac{TP}{FN+TP} = \frac{4}{16+4} = 20\%$$

그림 5 분류결과에 대한 혼동행렬 및 평가 지수

5. 결론

본 논문에서는 반도체 공정에 XGBoost 알고리즘을 적용하여 제품의 양품과 불량률 분류하는 모델을 구축하였다. 전체적인 정확성과 검출력은 높지만, 재현성이 낮아 이 부분의 개선이 필요하다. 모델의 정확성을 높이기 위해서는 반도체 제조공정의 Domain Knowledge 를 적용하여 중요변수에 가중치를 부여하거나, 공정변수 사이의 관계를 반영할 수 있다. 이와 같은 가상계측 방식으로 예측모델을 구축하면 앞에서 언급한 것과 같이 검사공정을 진행하지 않고 공정결과를 파악할 수 있다. 본 논문에 사용된 데이터 전처리 과정에서 결측치가 많아, 약 30%의 데이터를 분석에 사용할 수 없었다. 이러한 이유로 Test 데이터에 불량인 데이터가 많이 포함되지 않아 데이터 불균형 문제를 완전히 해소할 수 없었다. 재현성(Recall)을 향상하는 방안, 데이터 불균형을 해결하는 방안, 그리고 반도체 공정에 적용되는 물리적, 화학적 이론이 모델에 반영되기 위해서는 추가적인 연구가 필요하다.

참고문헌

- [1] 강필성, 김동일, 이승경, 도승용, 조성준, 이상치 탐지 방법론을 활용한 반도체 가상계측 결과의 신뢰도 추정, *Journal of the Korean Institute of Industrial Engineers*, Vol. 38, No. 1, pp. 45-56, March 2012
- [2] 남원식, 김성범, 반도체 제조 가상계측 공정변수를 이용한 웨이퍼 수율 예측, *Journal of the Korean Institute of Industrial Engineers* Vol. 41, No. 6, pp.572-578, November 2015
- [3] Sreenivasan R. Ramamurthy, Nirmalya Roy, "Recent trend in machine learning for human activity recognition – A survey", Vol. 8, Issue 4, August 2018
- [4] Tianqi Chen, Carlos Guestrin, "XGBoost: A Scalable Tree Boosting System", *KDD'16: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 785-794, Aug 2016
- [5] Essam Al Daoud, "Comparison between XGBoost, LightGBM and CatBoost Using a Home Credit Dataset", *International Journal of Computer and Information Engineering* Vol:13, No:1, 2019
- [6] Nitesh V. Chawla, Kevin W. Bowyer, Lawrence O. Hall, W. Philip Kegelmeyer, "SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique", *Journal of Artificial Intelligence Research* 16 (2002) 321–357
- [7] Andreas C. Muller & Sarah Guido, "Introduction to Machine Learning with Python", Sebastopol CA, O'Reilly Media, Oct. 2016