

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	電磁場逆解析によるリアルタイムモニタリング技術に関する研究： LSIめっき制御および脳機能診断への応用
Title(English)	Studies of real-time monitoring techniques by inverse analysis of electromagnetic field : applications to LSI electroplating control and brain function diagnostics
著者(和文)	岸本喜直
Author(English)	Yoshinao Kishimoto
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第8083号, 授与年月日:2010年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:天谷 賢治
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第8083号, Conferred date:2010/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

平成21年度 学位論文

電磁場逆解析によるリアルタイム
モニタリング技術に関する研究
— L S I めっき制御および脳機能診断への応用 —

Studies of Real-Time Monitoring Techniques
by Inverse Analysis of Electromagnetic Field:
Applications to LSI Electroplating Control
and Brain Function Diagnostics

平成22年2月

指導教員 天谷 賢治 教授

情報理工学研究科 情報環境学専攻
07D54135 岸本 喜直

目次

第 1 章 緒論	5
1.1 電磁場逆解析の概要	5
1.1.1 逆問題と逆解析	5
1.1.2 電磁場逆解析	6
1.2 LSI 製造工程における電気めっきの現状	6
1.3 脳磁図による脳機能診断の現状	7
1.4 本研究の提案手法	8
1.5 本研究の目的	8
1.6 本論文の構成	9
参考文献	11
第 2 章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法	21
2.1 緒言	21
2.2 LSI 電気銅めっきの概要	21
2.3 めっき槽内の電位取得方法	22
2.4 電場の数理モデル	23
2.4.1 数理モデル	23
2.4.2 観測方程式	24
2.5 逆解析手法	25
2.5.1 第 1 次推定：Tikhonov の適切化法による未知量の概値推定	25
2.5.2 第 2 次推定：回帰分析による分極曲線の推定とその解	28
2.6 数値シミュレーションによる数値実験	29
2.6.1 薄膜カソードの数値シミュレーションモデル	29
2.6.2 数値実験条件	30
2.6.3 数値実験結果	31
2.7 電気銅めっき装置による検証実験	38
2.7.1 実験装置と実験手順	38
2.7.2 解析モデル	39
2.7.3 実験結果	39
2.8 結言	47
2.9 付録	48
2.9.1 制約付き Tikhonov の適切化法の解	48
2.9.2 Tikhonov の適切化法に対する Kullback-Leibler の情報量	52
参考文献	56

第 3 章 静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法	59
3.1 緒言	59
3.2 Laplace 電場に誘起される静磁場問題	59
3.2.1 静電場解析	60
3.3 従来の静磁場解析法	61
3.3.1 静磁場の支配方程式	61
3.3.2 ベクトルポテンシャルの積分方程式	61
3.3.3 従来法の問題点	62
3.4 領域積分を必要としない静磁場解析法	62
3.4.1 本手法によるベクトルポテンシャルおよび磁束密度の導出	62
3.4.2 本手法の利点	64
3.5 従来法と本手法における計算精度と計算量の比較	64
3.5.1 解析対象	64
3.5.2 数値計算	64
3.6 結言	67
3.7 付録	68
3.7.1 積分核 $f^*(p, s)$, $g^*(p, s)$ の計算	68
3.7.2 Gauss の発散定理を用いた Biot-Savart の法則の境界積分表示形の導出	71
参考文献	73
第 4 章 磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法	75
4.1 緒言	75
4.2 めっき槽周辺における磁束密度の測定方法	77
4.3 解析対象	77
4.4 観測方程式	78
4.4.1 電場解析	79
4.4.2 磁場解析	80
4.4.3 観測方程式	81
4.5 逆解析手法	82
4.5.1 観測方程式の差分を用いる方法	82
4.5.2 参照分散による Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法	82
4.6 本手法検証用の電気銅めっき装置	83
4.7 数値シミュレーションによる数値実験	85
4.7.1 数値実験条件	85
4.7.2 数値実験結果	86
4.8 電気銅めっき装置による検証実験	94
4.8.1 実験装置と実験手順	94
4.8.2 解析モデル	94
4.8.3 実験結果	94
4.9 結言	109
4.10 付録	110
4.10.1 Bayes 推定と Tikhonov の適切化法の関係	110
参考文献	112

第 5 章 脳磁図における多段階逆解析を用いた脳内神経細胞活動の推定	117
5.1 緒言	117
5.2 MEG における数理モデル	119
5.2.1 電流双極子モデルと Sarvas の式	119
5.2.2 磁気双極子モデル	120
5.3 逆解析手法	120
5.3.1 本逆解析手法の流れ	120
5.3.2 観測方程式	121
5.3.3 第 1 次推定：打ち切り特異値分解による双極子モーメントの概値推定	121
5.3.4 双極子の位置候補点の絞込み	123
5.3.5 第 2 次推定：クラスタ分析による代表双極子の抽出	123
5.3.6 第 3 次推定：滑降シンプレック法による双極子の位置とモーメントの修正	125
5.4 数値シミュレーションによる数値実験	125
5.4.1 電流双極子 2 個の場合	126
5.4.2 多数の電流双極子が分布する場合	128
5.5 磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムによる検証実験	130
5.5.1 磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントム	130
5.5.2 測定手順	132
5.5.3 磁気双極子コイルの推定手順	132
5.5.4 測定結果と本手法による推定結果	132
5.6 結言	139
参考文献	140
第 6 章 結論	147

第 1 章 緒論

1.1 電磁場逆解析の概要

1.1.1 逆問題と逆解析

逆問題および逆解析とは、直接測定することが困難な物理量「未知量」を測定可能な物理量「観測量」と物理現象を数理化したモデル「数理モデル」を使って求める問題とその方法のことをいう（図 1-1）。ここでいう未知量は現象の「原因」、観測量はその「結果」にも置き換えられ、逆問題は「結果から原因を推定する問題」ともいえる。

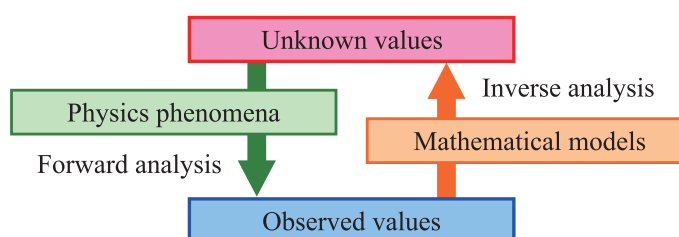


Fig. 1-1: The concept of *Inverse problem*

逆問題の例として、実生活に近いところでは、スイカの熟れ具合を押し量るのに叩いたときの音を聞く、雷の位置を推定するのに稲妻と雷鳴の時間差をはかる、などがある。体温計や体重計、体脂肪計もそれぞれ水銀の膨張量やばねの伸び、人体のインピーダンスを観測量として、数理モデルに相当する変換式を使って体温や体重、体脂肪を推定しており、これらの機器も逆問題の応用例といえる。特に、医療における X 線 CT や MRI は逆問題の応用の成功例として有名である [1]-[4]。また、未知量を設計変数、観測量と数理モデルの残差を目的関数に置き換えた問題は最適化問題となることから、逆問題は最適化問題とも密接な関係にある。

反対に、原因から結果を演繹的に予測する問題を順問題といい、その方法を順解析という。物理現象を数理化すると、原因と結果すなわち問題の順逆は相対的な関係になる。そのため、問題の順逆の方向について、数学的には不適切問題となる方向を逆問題として扱う場合が多い [5]-[8]。不適切問題とは次に挙げる 3 つの条件のうち少なくとも 1 つを欠いた問題のことである。

- (1) 解の存在性：与えられた条件に対して、対応する解が存在すること
- (2) 解の一意性：与えられた条件に対して、対応する解がただ 1 つであること
- (3) 解の安定性：与えられた条件の微小な変動に対して、対応する解の変動も微小であること

すなわち、順問題ではある原因から唯一の結果が演繹的に得られるが、この得られた結果から逆にたどる逆問題では元の原因を演繹的に特定できるとは限らない。

工学において、逆問題とされる問題は大部分が不適切問題となる。工学の逆問題において、不適切性が生じる理由として以下が挙げられる。

- (1) 解の存在性 $\leftrightarrow$ 観測量のデータ数が推定すべき未知量の個数よりも多く、数理モデルを満足する解が存在しない。
- (2) 解の一意性 $\leftrightarrow$ 上記とは逆に、観測量のデータ数が推定すべき未知量の個数よりも少ないために数理モデルを満足する解が複数存在する。
- (3) 解の安定性 $\leftrightarrow$ 実際の測定から得られる観測量に含まれる誤差が、未知量の推定誤差を拡大させる。

したがって、いかにしてこれらの不適切性を解消して合理的な解を導き出すかが、逆問題を解くための手法すなわち逆解析手法に委ねられている [1]-[14]。

1.1.2 電磁場逆解析

1819 年、デンマークの物理学者 Hans Christian Ørsted によって磁針の上に電流を流すと磁針が振れる現象を発表して以来、André-Marie Ampère をはじめとした多くの科学者によって電流と磁気の相互作用についての研究がなされた。フランスの物理学者 Jean-Baptiste Biot と Félix Savart は電流がつくる磁気の強さの関係を定量的に表した。ここで得られた数式は Biot-Savart の法則と呼ばれ、電磁気学の基礎を築いた。後年、イギリスの物理学者 James Clerk Maxwell によって、電流と磁気の現象は電磁気学として一貫した理論体系にまとめ上げられた。電磁気学では、電流は電場、磁気は磁場と呼ばれる物理量によって評価される。

電磁気学の理論は電磁場現象の順解析に相当し、電場ならびに磁場の解析に不可欠であるため、広く利用されている。特に、多くの機械が電子制御となった 21 世紀において、電磁場順解析は工学上非常に重要である。一方、構造物外部の磁場計測の結果から逆解析的に構造物中の電流の流れを推定し、腐食状態や欠陥の有無を調べる非破壊評価も盛んに行われている。心臓の電気信号を測定する心臓磁気計測システムならびに脳波を磁場から逆解析的に調べる脳磁図など、医用工学の分野でも電磁場逆解析を利用した医療機器の開発が進んでおり、電磁場順解析および電磁場逆解析は工学に限らず非常に重要である [15]-[33]。このような電磁場逆解析を利用する観測手法は観測対象外部の磁場から観測対象内部の電場を推定することから、観測対象自身とそれがおかれる環境を破壊することのない無侵襲性の観測を可能とする。

1.2 LSI 製造工程における電気めっきの現状

LSI (Large-Scale Integration, 大規模集積回路) のウェハ上に微細配線を形成するため、電気めっきが一般的に利用されている。近年では多層構造を有するビルドアップ基板などの複雑かつ微細な配線から基盤間をつなぐバンプなどの比較的厚いめっき膜を形成するためにも利用されており、電気めっきはますます重要な役割を担っている [34]-[45]。これら多様な用途に対して、それぞれで最適な電気めっきを行うためには、めっき膜の厚さや品質といった仕上がり具合を支配するめっき表面上の電流密度の監視と制御は不可欠である。例えば、LSI の極細配線を実現するためには、ウェハ面に形成するめっき膜に対して確実なトレンチへの埋め込み性ととともに、数十 nm 以下の均一性の確保が必要となっている。しかし、めっき膜の均一性の確保に関して、以下のような問題がある。

- (1) LSIの微細化に伴い、シード層の薄膜化すなわち高抵抗化が進むため、吸電口に近いほど電流密度が集中しやすく、電流密度が大きくなることで遠いエリアよりも厚くめっきされる。
- (2) 配線の密集部では電流が集中しやすいため、電流密度が大きくなり、厚くめっきされやすい。また、一度めっきされた箇所は電気抵抗が下がり、厚くめっきされる。

これらに対して、従来は電流密度の均一化に重点が置かれ、それぞれの状況に応じて、最適な印加電流量、遮へい板配置、使用溶液などのめっき条件を選択してきた。しかし、最適なめっき条件を得るためには事前に標本による実験を行い、電極と電解液の間に生じる分極特性を調べた上で、めっき表面上の電流密度を数値解析によってあらかじめ見積もっておく必要があった[34]-[37], [44], [45]。したがって、従来の最適化手法はめっき前あるいはめっき後の状態を対象として、めっき条件の設定を行うフィードフォワードな手法といえる。実際のめっき状態の変化に即しためっき条件の最適化を行うためには、めっき状態ならびにそれを支配する電流密度をリアルタイムでモニタリングする技術の確立が望まれる。

電解中のめっき表面の状態を観察するために、電気化学の分野では走査型トンネル顕微鏡 (STM) や Raman 分光法などによるめっき膜厚測定、微小電極を用いためっき膜近傍の電流測定などが一般的に行われている[46]-[51]。また、めっき電流に加え、ウェハ面に電流を印加し、逆解析によってウェハ面上のめっき膜厚分布を推定する研究もなされている[36]。しかし、これらの測定方法にはウェハ面全体のめっき状態を同時に測定できない、装置が大規模になる、めっき槽の電場に影響を与えるなどの問題がある。したがって、フィードバックを目的としたリアルタイムでのめっき状態ならびに電流密度のモニタリングには不向きであるといえる。

以上をまとめると、LSI 製造工程における電気めっきについて、次の課題がある。

- (1) 従来の手法はめっき前あるいはめっき後の状態を対象として、条件の設定を行うフィードフォワードな最適化手法であり、実時間のめっき状態の変化に即したフィードバックな最適化はなされていない。
- (2) (1)を行うための、ウェハ面全体のめっき状態ならびにそれを支配する電流密度をリアルタイムでモニタリングする技術は確立していない。特に、めっき槽内の電場を乱すことなく、無侵襲でモニタリングする手法は未だ存在していない。

1.3 脳磁図による脳機能診断の現状

電磁場逆解析を利用した医療診断技術の1つとして脳磁図 (Magnetoencephalography, MEG) がある。脳磁図は脳機能すなわち脳内の活動状態を調べるための新たな無侵襲診断技術として注目を浴びている[24], [52]-[111]。脳内の神経活動により生じる電流は非常に弱い磁場を誘起する。MEGはこの磁場を脳外に設置した多数の磁気センサによって測定したものである。MEGの医療応用では、測定した脳外磁場から脳内の活動状態を推定し、病変部位の特定するために用いられる。例えば、てんかんの治療において異常放電が始まる脳の部位を立体的に特定するために、MEGの応用が期待されている[60]-[65]。

MEGで得られた磁場から脳内の電流分布を推定する問題は逆問題となる。この逆問題を解くために、(a) 脳内の電流分布と MEGで得られる磁場の関係式すなわち数値モデルの導出、および(b) その関係式を解くための数値的手法が必要であり、現在までに多くの研究がなされている[66]-[111]。

(a) については現在、電流双極子モデルと磁気双極子モデルの2つが提案されている。電流双極

子モデルは脳内の電流発生源を電流双極子と仮定したモデルである。電流双極子モデルを用いる逆解析では Maxwell 方程式から得られる関係式を用いる手法がよく用いられる。球対称な電気伝導度を持つ伝導体に対しては、Sarvas(1987)によって、理論式が導出されている。現在の MEG の逆解析に関する研究では、観測方程式の導出が簡単であることから、この Sarvas の式がよく用いられている [91]-[102]。また、磁気双極子モデルは脳内の電流分布が磁場源の最小要素である微小円環電流の集合であるとするモデルである。磁気双極子モデルを用いる逆解析では電流双極子モデルを用いる場合と異なり、電場の式を解く必要が無く、また MEG で推定できない電流（磁場を作らない電流）成分の基底を除外する必要も無い [103], [104]。

一方、(b)については双極子の位置とモーメントを未知として、これらの値を推定する滑降シンプレックス法が用いられている。滑降シンプレックス法は特に、てんかんなどの病変部位の特定に対して良好な結果が示されている。しかし、推定される解が初期値に大きく依存するという原理的な問題を抱えている。そのため、これらの初期値は利用者の経験によって設定されているのが現状である [24], [56], [73], [74], [112]。

1.4 本研究の提案手法

本研究では、LSI 製造工程における電気めっきを対象に、電磁場逆解析技術を応用し、めっきの質を決定するウェハ面上の電流密度をリアルタイムで監視する手法として、槽内電位逆解析によるめっき電流密度分布推定法および電磁場逆解析による電流密度分布の無侵襲測定法を提案する。これらの手法は観測量として、前者はめっき槽内の電解液の電位分布を、後者はめっき電流によって誘起される磁場分布を利用する点で異なる。また、どちらの手法もその数値問題は不適切問題となる。この不適切性を解消するため、本研究では Tikhonov の適切化法による概値推定とそこから回帰分析によって推定される分極曲線を用いた電流密度の修正からなる 2 段階逆解析手法を導入する。

電磁場逆解析を利用する観測手法には、ソースとなる電場によって誘起される磁場の計算が不可欠である。特に、これら電磁場逆解析技術を前述の LSI 製造工程における電気めっきのモニタリングに応用する際、従来の静磁場解析法では解析対象内の電流をソースとする領域積分を必要とする。そこで、本研究では境界積分方程式の領域積分項を解析的に計算し、境界積分で表すことでソース電流の領域積分を必要としない静磁場の境界要素解析法を提案する。この計算手法により、従来の計算手法よりも高精度かつ高速に磁場を計算する。

さらに、本研究の成果を脳磁図による脳機能診断に応用し、従来の双極子推定手法に関する問題を解決する多段階逆解析手法を提案する。本逆解析手法は打ち切り特異値分解法による双極子分布の概値推定と滑降シンプレックス法による推定解の修正からなる。本手法では、まず双極子の位置候補点を作成した後、候補点における MEG の測定データから打ち切り特異値分解法を用いて推定する。次にクラスタ分析を用い、打ち切り特異値分解法によって鈍って推定される電流双極子の分布を少数の双極子で代表させる。このクラスタ分析によって得られた代表電流双極子を初期値として用い、滑降シンプレックス法を適用することで双極子の位置とモーメントの最終的な推定解を得る。以上の行程により、滑降シンプレックス法における初期値決定に関する問題を解決する。

1.5 本研究の目的

LSI 製造工程における電気めっきのモニタリング技術を確立するため、本研究の目的を次のように設定する。

- (1) 提案する LSI 製造工程における電気めっきのモニタリング手法（槽内電位逆解析によるめっき電流密度分布推定法および電磁場逆解析による電流密度分布の無侵襲測定法）を開発する。
- (2) 上記の手法を数理化したときに生じる不適切性を解消し、合理的な解を導き出すための逆解析手法の開発する。
- (3) 電磁場逆解析を本手法に应用する際に不可欠となる静磁場解析法について、電場の領域積分を境界積分に変換し、従来手法よりも高精度かつ高速な静磁場の計算手法を開発する。
- (4) 順解析によって得られる模擬測定データに本逆解析手法を適用する数値シミュレーションにより、その有効性を検証する。
- (5) 本手法の実現に向けて、検証用の試験装置を作成して種々の条件下で実験を行うことで、本手法の有効性を検証する。
- (6) 以上の電磁場逆解析による電気めっきモニタリングに関する研究から得られた知見および成果を脳磁図による脳機能診断に応用し、従来の双極子推定手法に関する問題を解決する。

1.6 本論文の構成

本論文は以下の全 6 章から構成される。

第1章 諸論

本研究の背景と目的、本論文の構成について述べる。

第2章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法

LSI 製造工程における電気銅めっきについて概説し、めっき槽内の電位を取得する方法について述べる。次に、測定しためっき槽内の電位からめっき表面上の電流密度を推定する手法について詳述する。槽内の電位からめっき表面上の電流密度を得る問題は領域内の物理量から境界上の物理量を求める問題と同義であり、逆問題となる。この逆問題を解くために、電場の数値モデルと Tikhonov の適切化法を用いた解法について述べる。さらに、本手法では推定されためっき表面上の電流密度および電位を用い、電極と電解液の間の分極特性を表す分極曲線を回帰分析によって推定し、その分極曲線に従うように電流密度を修正する。また、本手法の有効性を検討するため、数値シミュレーションによる数値実験と実際の電気銅めっき装置による検証実験を行った。様々な条件に対して本手法を適用し、得られためっき表面上の電流密度の推定結果を示す。

第3章 静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法

Laplace 電場に誘起される静磁場問題を示し、従来の静磁場解析法として、ベクトルポテンシャルを導入した境界要素法と Biot-Savart の法則について述べる。次に本手法の詳細として、ソース電流の領域積分を電位に関する境界積分に変換する手順を述べ、それらを用いたベクトルポテンシャルと Biot-Savart の法則の定式化の手順について述べる。最後に従来法と本手法による計算精度と計算量の比較のため、具体例として Laplace 方程式に支配される立方体の電場領域周辺のベクトルポテンシャルと磁束密度を従来法と本手法を用いて計算し、本手法の有効性を示す。

第4章 磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法

磁気センサによって得られた磁束密度分布のデータから、めっき表面上の電流密度分布を推定する手法の詳細を述べる。逆解析に必要な数値モデルについては、本手法では任意形状の電気銅めっき装置を対象として、電場解析に有限要素法あるいは境界要素法を、磁場解析に第3章で述べた手法を用いる。逆解析手法については基本的に第2章で述べた Tikhonov の適切化法と推定分極曲線を用いた再計算からなる2段階逆解析を用いる。磁場測定では電位測定に比べ、地磁気や磁性体、他の電気機器などによって多くの外乱が含まれやすい。そのため、本手法では第2章で述べた逆解析手法に加え、観測方程式の差分を用いる方法と参照分散による Tikhonov の適切化パラメータの決定方法を導入する。本手法の有効性を検討するため、数値シミュレーションによる数値実験と実際の電気銅めっき装置による検証実験を行った。第2章で述べた手法と同様に、様々な条件に対して本手法を適用し、得られためっき表面上の電流密度の推定結果を示す。

第5章 脳磁図における多段階逆解析を用いた脳内神経細胞活動の推定

脳磁図から脳内の活動状態を調べるためによく用いられる、電流双極子モデルと磁気双極子モデルについて概説する。次に、逆解析手法として、打ち切り特異値分解法による双極子分布の推定方法とクラスタ分析による双極子分布を少数の双極子で代表させる方法について述べる。その後、数値シミュレーションによる数値実験を行った結果を示し、本手法の有効性を示す。本研究ではさらに、本逆解析手法の有効性の検証と MEG センサの校正のため、磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムを開発した。本章ではこの MEG 用ファントムを用いた測定実験を行った結果を示す。さらに、測定結果に対して本逆解析手法を適用することで、その有効性を示す。

第6章 結論

本研究で得られた結果を総括する。

参考文献

- [1] Yamamoto, M., *Introduction to Inverse Problem*, (2002), Iwanami Shoten, Publishers.
- [2] Kubo, S., *Inverse problem*, (1992), Baifukan.
- [3] The Japan Society of Mechanical Engineers ed., *Computer Analysis of Inverse Problems*, (1991), Corona Publishing.
- [4] Murakami, A., Tosaka, N., Hori, M. and Suzuki, M., *Inverse Analysis with FEM/BEM -Application of the Kalman Filter and the Equivalent Inclusion Method-*, (2002), Corona Publishing.
- [5] Groetsch, C.W., *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, (1993), Vieweg Verlag.
- [6] Isakov, V., *Inverse Problems for Partial Differential Equations*, (1998), Springer.
- [7] Tsutsumi, M., *Mathematics in Inverse Problems*, (2000), Kyoritsu Shuppan.
- [8] The Mathematical Society of Japan ed., *Encyclopedic Dictionary of Mathematics, 4th Edition*, (2007), Iwanami Shoten, Publishers.
- [9] Tanabe, K., Statistical Regularization of a Noisy Ill-Conditioned System of Linear Equations by Akaike's Information Criterion, *The Institute of Statistical Mathematics Research Memorandum*, No.60, (1974), pp.1–20.
- [10] Arimoto, S., *Kalman Filter*, (1977), Sangyo Tosho.
- [11] Hansen, P.C., The Truncated SVD as a Method for Regularization, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.27, No.4, (1987), pp.534–553.
- [12] Hansen, P.C., Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve, *Society for Industrial and Applied Mathematics Review*, Vol.34, No.4, (1992), pp.561–580.
- [13] Belge, M., Kilmer, M. and Miller, E.L., Simultaneous Multiple Regularization Parameter Selection by Means of the L-Hypersurface with Applications to Linear Inverse Problems Posed in the Wavelet Transform Domain, *Bayesian Inference for Inverse Problems*, Vol.3459, (1998), pp.328–336.
- [14] Oraintara, S., Karl, W.C., Castanon, D.A. and Nguyen, T.Q., A Method for Choosing the Regularization Parameter in Generalized Tikhonov Regularized Linear Inverse Problems, *Proceedings of the 2000 IEEE International Conference on Image Processing*, Vol.1, (2000), pp.93–96.
- [15] Miller, W.T. and Geselowitz, D.B., Use of Electric and Magnetic Data to Obtain a Multiple Dipole Inverse Cardiac Generator: A Spherical Model Study, *Annals of Biomedical Engineering*, Vol.2, No.4, (1974), pp.343–360.

-
- [16] Amaya, K., Uragou, M. and Aoki, S., New Eddy Current Thickness Sensor and its Boundary Element Analysis, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.64, No.588, (1995), pp.1841-1846.
- [17] Uragou, M., Amaya, K. and Aoki, S., Effective Boundary Element Method for an Axisymmetrical Electromagnetic Field of a Layered Tube, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.63, No.607, (1997), pp.589-594.
- [18] Kojima, F., Okamoto, J. and Ohno, Y., Computational Method for Crack Reconstruction of Steam Generator Materials using FEM-BEM Scheme in Inverse Applied Electromagnetics, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol.63, No.612, (1997), pp.2650-2656.
- [19] Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., *Boundary Element Analysis on Corrosion Problems*, (1998), Shokabo.
- [20] Miyashita, T., Kandori, A., Tsukada, K., Sato, M., Terada, Y., Horigome, H. and Mitsui, T., Construction of Tangential Vectors from Normal Cardiac Magnetic Field Components, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.520-523.
- [21] Tsukada, K., Kandori, A., Miyashita, T., Sasabuti, H., Suzuki, H., Kondo, S., Komiyama, Y. and Teshigawara, K., A Simplified Superconducting Quantum Interference Device System to Analyze Vector Components of a Cardiac Magnetic Field, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.524-527.
- [22] Clemens, M., Thoma, P., Weiland, T. and Van Rienen, U., Computational Electromagnetic-Field Calculation with the Finite-Integration Method, *Surveys on Mathematics for Industry*, Vol.8, No.3-4, (1999), pp.213-232.
- [23] Banks, H.T. and Kojima, F., Boundary Shape Identification in Two-Dimensional Electrostatic Problems using SQUIDS, *Journal of Inverse Ill-Posed Problems*, Vol. 8, No.5, (2000), pp.487-504.
- [24] Baillet, S., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., Electromagnetic Brain Mapping, *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol.18, No.6, (2001), pp.14-30.
- [25] Potthast, R. and Kuhn, L., On the Convergence of the Finite Integration Technique for the Anisotropic Boundary Value Problem of Magnetic Tomography, *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Vol.26, No.9, (2003), pp.739-757.
- [26] Murakami, M., Matsuoka, Y. and Naitou, S., Magnetocardiography, *A Monthly Journal of Medical Imaging and Information*, Vol.35, No.13, (2003), pp.1112-1119.
- [27] Kandori, A., Advanced Technology of Magnetocardiography, *A Monthly Publication of the Japan Society of Applied Physics*, Vol.74, No.5, (2005), pp.580-586.
- [28] Ridha, M., Amaya, K. and Aoki, S., Boundary Element Simulation for Identification of Steel Corrosion in Concrete using Magnetic Field Measurement, *Corrosion*, Vol.61, No.8, (2005), pp.784-791.
-

-
- [29] Nara, T. and Ando, S., Direct Localization of Multiple Magnetic Dipoles for Surface Crack Detection, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, Vol.15, No.4, (2007), pp.403–418.
- [30] Hauer, K.H., Potthast, R. and Wannert, M., Algorithms for Magnetic Tomography -on the Role of a Priori Knowledge and Constraints, *Inverse Problems*, Vol.24, No.4, (2008), pp.045008.1–045008.18.
- [31] Sauer, D.U., Sanders, T., Fricke, B., Baumhoefer, T., Wippermann, K., Kulikovskiy, A.A., Schmitz, H. and Mergel, J., Measurement of the Current Distribution in a Direct Methanol Fuel Cell -Confirmation of Parallel Galvanic and Electrolytic Operation within One Cell, *Journal of Power Sources*, Vol.176, No.2, (2008), pp.477–483.
- [32] Lustfeld, H., Reissel, M., Schmidt, U. and Steffen, B., Reconstruction of Electric Currents in a Fuel Cell by Magnetic Field Measurements, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, Vol.6, No.2, (2009), pp.021012.1–021012.8.
- [33] Lustfeld, H., Reissel, M. and Steffen, B., Magnetotomography and Electric Currents in a Fuel Cell, *Fuel Cells*, Vol.9, No.4, (2009), pp.474–481.
- [34] Aoki, S., Amaya, K., Takazawa, H. and Miyasaka, M., Boundary Element Simulation of Electroplating on Silicon Wafer, *The Journal of the Surface Finishing Society of Japan*, Vol.51, No.4, (2000), pp.425–430.
- [35] Abe, K., Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Proceedings of the 13th Computational Mechanics Conference*, No.00-17, (2000), pp.315–316.
- [36] Abe, K., Amaya, K. and Aoki, S., Monitoring of Electroplating Thickness on Silicon Wafer using Inverse Analysis, *Proceedings of the 14th Computational Mechanics Conference*, No.01-10, (2001), pp.195–196.
- [37] Aoki, S., Amaya, K., Abe, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.68, No.666, (2002), pp.133–138.
- [38] Kodera, T., Okubo, T. and Kondo, K., Uniformity Formation of Pannel Plating by using Convexity -Modification of Cathode Holder, *Journal of Japan Institute of Electronics Packaging*, Vol.7, No.2, (2004), pp.141–146.
- [39] Okubo, T., Kodera, T. and Kondo, K., Uniformity of Patterned Copper Electrodeposit Thickness by using Auxiliary Electrode -Placement of Electrodes at the Edges of the Pattern, *Journal of Japan Institute of Electronics Packaging*, Vol.7, No.4, (2004), pp.322–327.
- [40] Satake, T. and Noji, N., Development of an Electron Beam Inspection System (EBeye), 1st Report, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.15–20.
- [41] Hodai, M., Nakada, T. and Kanda, H., Cu Interconnect Plating System, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.30–33.
- [42] Kuriyama, F., Minami, Y. and Kimura, M., Bump Plating System, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.34–38.
-

-
- [43] Terao, K., Karimata, T. and Sobukawa, H., Development of an Electron Beam Inspection System (EBeye), 2nd Report, *Ebara Engineering Review*, No.211, (2006), pp.21–27.
 - [44] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Development of a Plating Simulation Method for 3-Dimensional Models, *Proceedings of the 2006 Annual Meeting of JSME/MMD*, Vol.06, No.4, (2006), pp.409–410.
 - [45] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Optimization of the Shape of Plating Bath to Planarize Thickness of the Distribution in Semiconductor Plating, *Proceedings of the 2006 JSME Millennium* Vol.06, No.6, (2006), pp.105–106.
 - [46] Osaka, T., Oyama, N. and Ohsaka, T., *Electrochemical Method -Manual of Fundamental Measurements*, (1989), Kodansha.
 - [47] The Surface Science Society of Japan ed., *Illustrated Guide to Thin-Film Technology*, (1999), Baifukan.
 - [48] Osakai, T., Kano, K. and Kuwabata, S., *Basic Electrochemistry*, (2000), Kagaku-Dojin.
 - [49] Haruyama, S., *Electrochemistry for Surface Engineers*, (2001), Maruzen.
 - [50] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Basic Edition*, (2002), Maruzen.
 - [51] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Practice Edition*, (2002), Maruzen.
 - [52] Cohen, D., Cuffin, B.N., Yunokuchi, K., Maniewski, R., Purcell, C., Cosgrove, G.R., Ives, J., Kennedy, J.G. and Schomer, D.L., MEG versus EEG Localization Test using Implanted Sources in the Human Brain, *Annals of Neurology*, Vol.28, No.6, (1990), pp.811–817.
 - [53] Barth, D.S., Empirical Comparison of the MEG and EEG: Animal Models of the Direct Cortical Response and Epileptiform Activity in Neocortex, *Brain Topography*, Vol.4, No.2, (1991), pp.85–93.
 - [54] Cheyne, D., Roberts, L.E., Gaetz, W., Bosnyak, D., Nahmias, C., Christoforou, N., and Weinberg, H., Somatotopic Organization of Human Somatosensory Cortex: A Comparison of EEG, MEG and fMRI Methods, *Proceedings of the 3rd Pan-Pacific Conference on Brain Topography*, Vol.1147, (1997), pp.76–81.
 - [55] Hillebrand, A. and Barnes, G.R., A Quantitative Assessment of the Sensitivity of Whole-Head MEG to Activity in the Adult Human Cortex, *NeuroImage*, Vol.16, No.3, (2002), pp.638–650.
 - [56] Takeda, T., *Brain Engineering*, (2003), Corona Publishing.
 - [57] Simine, E., Gaetz, W., Cheyne, D., Tsotsos, J. and Martinez-Trujillo, J.C., MEG Study of Temporal Parameters and Localization of Brain Responses During the Detection of Transient Changes in the Direction of Moving Stimuli, *Journal of Vision*, Vol.4, No.8, (2004), pp.564.
 - [58] Darvas, F., Pantazis, D., Kucukaltun-Yildirim, E. and Leahy, R.M., Mapping Human Brain Function with MEG and EEG: Methods and Validation, *NeuroImage*, Vol.23, No.1, (2004), pp.289–299.
-

-
- [59] Cornwell, B.R., Carver, F.W., Coppola, R., Johnson, L., Alvarez, R. and Grillon, C., Evoked Amygdala Responses to Negative Faces Revealed by Adaptive MEG Beamformers, *Brain Research*, Vol.1244, (2008), pp.103–112.
 - [60] Mamelak, A.N., Lopez, N., Akhtari, M. and Sutherling, W.W., Magnetoencephalography-Directed Surgery in Patients with Neocortical Epilepsy, *Journal of Neurosurgery*, Vol.97, No.4, (2002), pp.865–873.
 - [61] Fischer, M.J.M., Scheler, G. and Stefan, H., Utilization of Magnetoencephalography Results to Obtain Favourable Outcomes in Epilepsy Surgery, *Brain*, Vol.128, No.1, (2005), pp.153–157.
 - [62] Papanicolaou, A.C., Pataraiia, E., Marshall, R.B., Castillo, E.M., Wheless, J.W., Swank, P., Breier, J.I., Sarakari, S. and Simos, P.G., Toward the Substitution of Invasive Electroencephalography in Epilepsy Surgery, *Journal of Clinical Neurophysiology*, Vol.22, No.4, (2005), pp.231–237.
 - [63] Knake, S., Halgren, E., Shiraishi, H., Hara, K., Hamer, H.M., Grant, P.E., Carr, V.A., Foxe, D., Camposano, S., Busa, E., Witzel, T., Hamalainen, M.S., Ahlfors, S.P., Bromfield, E.B., Black, P.M., Bourgeois, B.F., Cole, A.J., Cosgrove, G.R., Dworetzky, B.A., Madsen, J.R., Larsson, P.G., Schomer, D.L., Thiele, E.A., Dale, A.M., Rosen, B.R. and Stufflebeam, S.M., The Value of Multichannel MEG and EEG in the Presurgical Evaluation of 70 Epilepsy Patients, *Epilepsy Research*, Vol.69, No.1, (2006), pp.80–86.
 - [64] Schwartz, E.S., Dlugos, D.J., Storm, P.B., Della, J., Magee, R., Flynn, T.P., Zarnowa, D.M., Zimmermann, R.A. and Roberts, T.P.L., Magnetoencephalography for Pediatric Epilepsy: How We Do It, *American Journal of Neuroradiology*, Vol.29, No.5, (2008), pp.832–837.
 - [65] Agirre-Arrizubieta, Z., Huiskamp, G.J.M., Ferrier, C.H., Van Huffelen, A.C. and Leijten, F.S.S., Interictal Magnetoencephalography and the Irritative Zone in the Electrocorticogram, *Brain*, Vol.132, No.11, (2009), pp.3060–3071.
 - [66] Barth, D.S., Sutherling, W., Broffman, J. and Beatty, J., Magnetic Localization of a Dipolar Current Source Implanted in a Sphere and a Human Cranium, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.63, No.3, (1986), pp.260–273.
 - [67] Van Veen, B.D. and Buckley, K.M., Beamforming: A Versatile Approach to Spatial Filtering, *IEEE ASSP Magazine*, Vol.5, No.2, (1988), pp.4–24.
 - [68] Liu, T.C. and Van Veen, B.D., Multiple Window Based Minimum Variance Spectrum Estimation for Multidimensional Random Fields, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol.40, No.3, (1992), pp.578–589.
 - [69] Hamalainen, M.S. and Ilmoniemi, R.J., Interpreting Magnetic Fields of the Brain: Minimum Norm Estimates, *Medical and Biological Engineering and Computing*, Vol.32, No.1, (1994), pp.35–42.
 - [70] Cheyne, D., Roberts, L.E., Gaetz, W., Bosnyak, D., Weinberg, H., Johnson, B., Nahmias, C. and Deecke, L., EEG and MEG Source Analysis of Somatosensory Evoked Responses to Mechanical Stimulation of the Fingers, *Proceedings of the 10th International Conference Biomagnetism*, Vol.2, (1996), pp.1130–1133.
-

-
- [71] Van Veen, B.D., Van Drongelen, W., Yuchtman, M. and Suzuki, A., Localization of Brain Electrical Activity via Linearly Constrained Minimum Variance Spatial Filtering, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.44, No.9, (1997), pp.867–880.
 - [72] Phillips, J.W., Leahy, R.M. and Mosher, J.C., MEG-Based Imaging of Focal Neuronal Current Sources, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, Vol.16, No.3, (1997), pp.338–348.
 - [73] Huang, M., Aine, C.J., Supek, S., Best, E., Ranken, D. and Flynn, E.R., Multi-Start Downhill Simplex Method for Spatio-Temporal Source Localization in Magnetoencephalography, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.108, No.1, (1998), pp.32–44.
 - [74] Uutela, K., Hamalainen, M., and Salmelin, R., Global Optimization in the Localization of Neuro-magnetic Sources, *IEEE Transaction on Biomedical Engineering*, Vol.45, No.6, (1998), pp.716–723.
 - [75] Slotnick, S.D., Klein, S.A., Carney, T., Sutter, E. and Dastmalchi, S., Using Multi-Stimulus VEP Source Localization to Obtain a Retinotopic Map of Human Primary Visual Cortex, *Clinical Neurophysiology*, Vol.110, No.10, (1999), pp.1793–1800.
 - [76] Crouzeix, A., Yvert, B., Bertrand, O. and Pernier, J., An Evaluation of Dipole Reconstruction Accuracy with Spherical and Realistic Head Models in MEG, *Clinical Neurophysiology*, Vol.110, No.12, (1999), pp.2176–2188.
 - [77] Mosher, J.C., Leahy, R.M., Shattuck, D.W. and Baillet, S., MEG Source Imaging Using Multipolar Expansions, *Proceedings of the 16th Conference on Information Processing in Medical Imaging*, Vol.1613, (1999), pp.15–18.
 - [78] Mosher, J.C., Baillet, S., Jerbi, K. and Leahy, R.M., MEG Multipolar Modeling of Distributed Sources using RAP-MUSIC, *Conference Record of the 34th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, Vol.1, (2000), pp.318–322.
 - [79] Liu, A.K., Dale, A.M. and Belliveau, J.W., Monte Carlo Simulation Studies of EEG and MEG Localization Accuracy, *Human Brain Mapping*, Vol.16, No.1, (2002), pp.47–62.
 - [80] Hillebrand, A. and Barnes, G.R., The Use of Anatomical Constraints with MEG Beamformers, *NeuroImage*, Vol.20, No.4, (2003), pp.2302–2313.
 - [81] Jerbi, K., Baillet, S., Mosher, J.C., Nolte, G., Garnero, L. and Leahy, R.M., Localization of Realistic Cortical Activity in MEG using Current Multipoles, *NeuroImage*, Vol.22, No.2, (2004), pp.779–793.
 - [82] Chau, W., McIntosh, A.R., Robinson, S.E., Schulz, M. and Pantev, C., Improving Permutation Test Power for Group Analysis of Spatially Filtered MEG Data, *NeuroImage*, Vol.23, No.3, (2004), pp.983–996.
 - [83] Jun, S.C. and Pearlmuter, B.A., Fast Robust Subject-Independent Magnetoencephalographic Source Localization using an Artificial Neural Network, *Human Brain Mapping*, Vol.24, No.1, (2005), pp.21–34.
 - [84] Cheyne, D., Bakhtazad, L. and Gaetz, W., Spatiotemporal Mapping of Cortical Activity Accompanying Voluntary Movements using an Event-Related Beamforming Approach, *Human Brain Mapping*, Vol.27, No.3, (2006), pp.213–229.
-

-
- [85] Dalal, S.S., Sekihara, K. and Nagarajan, S.S., Modified Beamformers for Coherent Source Region Suppression, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.53, No.7, (2006), pp.1357–1363.
- [86] Chen, Y.S., Cheng, C.Y., Hsieh, J.C. and Chen, L.F., Maximum Contrast Beamformer for Electromagnetic Mapping of Brain Activity, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.53, No. 9, (2006), pp.1765–1774.
- [87] Bayless, S.J., Gaetz, W.C., Cheyne, D. and Taylor, M.J., Spatiotemporal Analysis of Feedback Processing During a Card Sorting Task using Spatially Filtered MEG, *Neuroscience Letters*, Vol.410, No.1, (2006), pp.31–36.
- [88] Cheyne, D., Bostan, A.C., Gaetz, W. and Pang, E.W., Event-Related Beamforming: A Robust Method for Presurgical Functional Mapping using MEG, *Clinical Neurophysiology*, Vol.118, No.8, (2007), pp.1691–1704.
- [89] Nara, T., Oohama, J., Hashimoto, M., Takeda, T. and Ando, S., Direct Reconstruction Algorithm of Current Dipoles for Vector Magnetoencephalography and Electroencephalography, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.52, No.13, (2007), pp.3859–3879.
- [90] Lioumis, P., Taulu, S., Kicic, D., Nurminen, J., Kahkonen, S., Nenonen, J. and Montonen, J., Standardization of MEG Sensors by the Signal Space Separation Method, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, No.1300, (2007), pp.237–240.
- [91] Geselowitz, D.B., On Bioelectric Potentials in an Inhomogeneous Volume Conductor, *Biophysical Journal*, Vol.7, No.1, (1967), pp.1–11.
- [92] Grynszpan, F. and Geselowitz, D.B., Model Studies of the Magnetocardiogram, *Biophysical Journal*, Vol.13, No.9, (1973), pp.911–925.
- [93] Sarvas, J., Basic Mathematical and Electromagnetic Concepts of the Biomagnetic Inverse Problem, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.11–22.
- [94] Okada, Y., Lauritzen, M. and Nicholson, C., MEG Source Models and Physiology, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.43–51.
- [95] Stok, C.J., Meijs, J.W.H. and Peters, M.J., Inverse Solutions Based on MEG and EEG Applied to Volume Conductor Analysis, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.99–104.
- [96] De Munck, J.C., Van Dijk, B.W. and Spekreijse, H., Mathematical Dipoles are Adequate to Describe Realistic Generators of Human Brain Activity, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.35, No.11, (1988), pp.960–966.
- [97] Hamalainen, M.S. and Sarvas, J., Realistic Conductivity Geometry Model of the Human Head for Interpretation of Neuromagnetic Data, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.36, No.2, (1989), pp.165–171.
- [98] Mosher, J.C., Leahy, R.M. and Lewis, P.S., EEG and MEG: Forward Solutions for Inverse Methods, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.46, No.3, (1999), pp.245–259.
-

-
- [99] Huang, M.X., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., A Sensor-Weighted Overlapping-Sphere Head Model and Exhaustive Head Model Comparison for MEG, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.44, No.2, (1999), pp.423–440.
- [100] He, S. and Norgren, M., Magnetostatic Image Current and Its Application to an Analytic Identification of a Current Dipole Inside a Conducting Sphere, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.47, No.2, (2000), pp.183–191.
- [101] Teale, P., Benkers, T., Rojas, D. and Reite, M., Determination of the Sphere Origin for MEG Source Modelling in Temporal Regions, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.47, No.7, (2002), pp.1161–1166.
- [102] Kwon, H., Lee, Y.H., Kim, J.M., Park, Y.K. and Kuriki, S., Localization Accuracy of Single Current Dipoles from Tangential Components of Auditory Evoked Fields, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.47, No.23, (2002), pp.4145–4154.
- [103] Nara, T., Suzuki, S. and Ando, S., A Closed-Form Formula for Magnetic Dipole Localization by Measurement of Its Magnetic Field and Spatial Gradients, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.42, No.10, (2006), pp.3291–3293.
- [104] Uehara, G., Higuchi, M., Adachi, Y., Kawai, J., Tanaka, H., Haruta, Y., Miyamoto, M., Shimozu, T. and Kawabata, M., An Error in Magnetic Field of Isosceles-Triangle Coil as a Representation of Equivalent Current Dipole, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.607–610.
- [105] Leahy, R.M., Mosher, J.C., Spencer, M.E., Huang, M.X. and Lewine, J.D., A Study of Dipole Localization Accuracy for MEG and EEG using a Human Skull Phantom, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.107, No.2, (1998), pp.159–173.
- [106] Baillet, S., Riera, J.J., Marin, G., Mangin, J.F., Aubert, J. and Garnero, L., Evaluation of Inverse Methods and Head Models for EEG Source Localization using a Human Skull Phantom, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.46, No.1, (2001), pp.77–96.
- [107] Liehr, M., Haueisen, J., Goernig, M., Seidel, P., Nenonen, J. and Katila, T., Vortex Shaped Current Sources in a Physical Torso Phantom, *Annals of Biomedical Engineering*, Vol.33, No.2, (2005), pp.240–247.
- [108] Flemming, L., Wang, Y., Caprihan, A., Eiselt, M., Haueisen, J. and Okada, Y., Evaluation of the Distortion of EEG Signals Caused by a Hole in the Skull Mimicking the Fontanel in the Skull of Human Neonates, *Clinical Neurophysiology*, Vol.116, No.5, (2005), pp.1141–1152.
- [109] Aubert-Broche, B., Evans, A.C. and Collins, L., A New Improved Version of the Realistic Digital Brain Phantom, *NeuroImage*, Vol.32, No.1, (2006), pp.138–145.
- [110] McVeigh, P., Bostan, A. and Cheyne, D., Study of Conducting Volume Boundary Influence on Source Localization using a Realistic MEG Phantom, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.153–156.
-

- [111] Uehara, G., Miyamoto, M., Adachi, Y., Haruta, Y., Kawai, J., Shimozu, T. and Kawabata, M., An Effect of Electrical Double Layer on MEG Phantom with Saline Water, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.611–614.
- [112] Nelder, J.A. and Mead, R., A Simplex Method for Function Minimization, *Computer Journal*, Vol.7, No.4, (1965), pp.308–313.

第2章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法

2.1 緒言

電気銅めっきは LSI ウェハの微細配線を形成するために一般的に利用されている。近年では多層構造を有するビルドアップ基板などの複雑かつ微細な配線から基盤間をつなぐバンプなどの比較的厚いめっき膜を形成するためにも利用されており、電気銅めっきはますます重要な役割を担っている [1]-[12]。これら多様な用途において、それぞれで最適な電気めっきを行うためには、めっきの仕上がり具合を支配するめっき表面上の電流密度の監視と制御は不可欠である。従来は電流密度の均一化に重点が置かれ、それぞれの状況に対して、最適な印加電流量、遮へい板配置、使用溶液などを選択してきた。しかし、これら最適な条件を得るためには事前に標本による実験を行い、電極と電解液の間に生じる分極特性を調べた上で、めっき表面上の電流密度を数値解析によってあらかじめ見積もっておく必要があった [1]-[4], [11], [12]。

これに対し、本研究では電気めっき中の電流密度の監視に重点を置き、めっき槽内の電位を逆解析することによって、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した。本手法はめっきの条件に応じてリアルタイムで適用でき、得られた電流密度を用いて制御にフィードバックすることができる [13]-[21]。

本論文ではまず、LSI 製造工程における電気銅めっきについて概説し、めっき槽内の電位を取得する方法について述べる。次に、測定しためっき槽内の電位からめっき表面上の電流密度を推定する手法について詳述する。槽内の電位からめっき表面上の電流密度を得る問題は領域内の物理量から境界上の物理量を求める問題と同義であり、逆問題となる [22]-[24]。この逆問題を解くために、電場の数値モデルと Tikhonov の適切化法を用いた解法について述べる。さらに、本手法では推定されためっき表面上の電流密度および電位を用い、電極と電解液の間の分極特性を表す分極曲線を回帰分析によって推定し、その分極曲線に従うように電流密度を修正する。

さらに、本研究では本手法の有効性を検討するため、数値シミュレーションによる数値実験と実際の電気銅めっき装置による検証実験を行った。様々な条件に対して本手法を適用し、得られためっき表面上の電流密度の推定結果を示す。

2.2 LSI 電気銅めっきの概要

図 2-1 に一般的な LSI 用の電気銅めっき装置のモデルを示す。めっき槽外部の電源からアノードに直流電流を供給する。アノードは厚い銅板であり、めっき槽内はめっき電解液（主成分：硫酸銅）で満たされている。LSI ウェハは、実際の工程ではシリコンウェハ表面の二酸化ケイ素絶縁膜上に薄い窒化タンタルなどのバリア層および銅のシード層をスパッタリングなどで作成し、この上に電気めっきを施す（図 2-2）。ウェハの外周には吸電ターミナルが設置されており、シード層およびその上に施されるめっき膜がカソードとなる。

めっきの電場解析では、アノードおよびカソードでの表面のごく近傍における複雑な挙動や、金属表面に存在する狭い溝は陽に考慮せずに、巨視的な電流密度と電位の関係を表す分極曲線がよく用いられる [1]-[4], [11], [12].

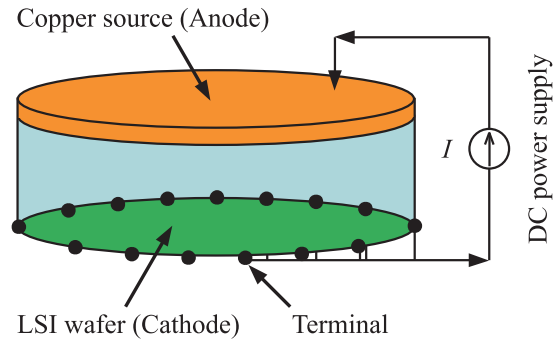


Fig. 2-1: The ordinary electroplating device for LSI fabrication

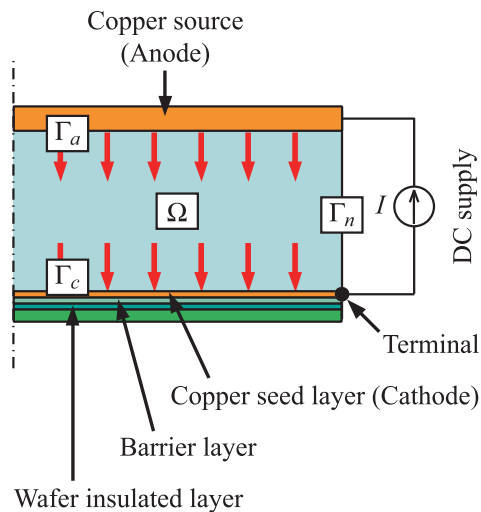


Fig. 2-2: The ordinary electroplating device for LSI fabrication (cross-section view)

2.3 めっき槽内の電位取得方法

めっき槽内の電位は細管を挿入することで測定できる。細管で拾い上げた電解液を参照電極に通し、参照電極とアノードあるいはカソードの電位差から細管先端位置の電位が得られる。このとき接続したアノードあるいはカソードが電位の基準となる [25]-[30].

図 2-3 はカソードを電位基準とした場合におけるめっき槽内の電位測定の概略図である。電位測定用の細管を攪拌パドルに付けることで効率良く測定ができる。

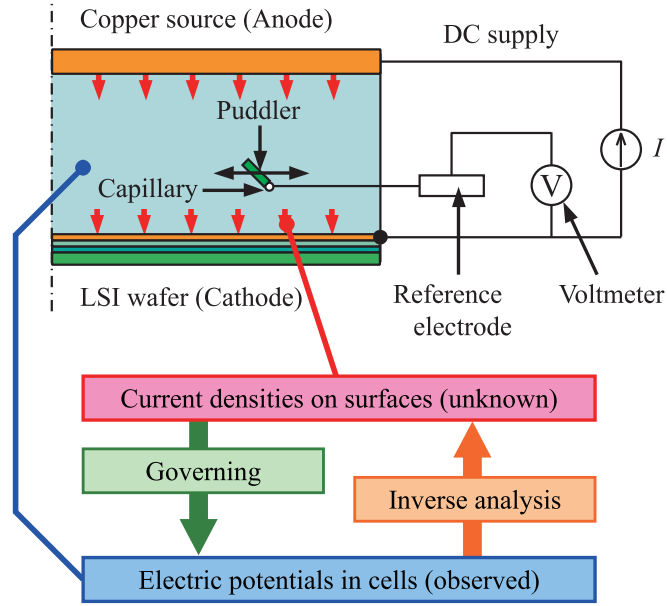


Fig. 2-3: The ordinary electroplating device with the proposed method

2.4 電場の数値モデル

2.4.1 数値モデル

本手法に用いる数値モデルを設定する。図 2-2 に示すように、めっき槽内の電解液が占める領域を Ω とし、 Ω は $\Gamma_n + \Gamma_a + \Gamma_c (\equiv \Gamma)$ で囲まれているとする。ここで、 Γ_n はめっき槽の側壁などの電流密度が既知の境界を、 Γ_a および Γ_c はそれぞれアノードおよびカソード表面境界を表す。

領域 Ω における電位分布を u とし、境界 $\Gamma_a, \Gamma_c, \Gamma_n$ 上の u の値を u_a, u_c, u_n 、境界 Γ を除く領域 Ω 内の u の値を u_i とする。また、 $\Gamma_a, \Gamma_c, \Gamma_n$ における法線方向の電流密度をそれぞれ j_a, j_c, j_n とする。このとき、 j_a が電気めっきによるアノードの減少速度を、 j_c がカソードにおけるめっき膜の成膜速度を決める。 j_a, j_c は境界 Γ を通して領域 Ω に流れ込む電流値を正とする。領域 Ω における電位 u は金属（アノード、カソード）表面近傍を除き、次の Laplace 方程式を満たす。

$$\nabla^2 u = 0 \quad \left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad \text{in } \Omega \quad (2.1)$$

式 (2.1) の境界条件は次式で与えられる。

$$\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \begin{cases} j_a & \text{on } \Gamma_a \\ j_c & \text{on } \Gamma_c \\ j_n & \text{on } \Gamma_n \end{cases} \quad (2.2)$$

ここで、 κ はめっき電解液の電気伝導度であり、 $\partial/\partial n$ は外向き法線方向の微分を表す。

式 (2.1) の両辺に Laplace 方程式の基本解

$$\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|} \quad (2.3)$$

を乗じて領域 Ω で領域積分し、Green の定理を適用して変形すると

$$u_i(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial u(\mathbf{q})}{\partial n} - \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n} u(\mathbf{q}) \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (2.4)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{p}$ は測定点の位置ベクトル、 $\mathbf{q}$ は計算点の位置ベクトルである。さらに、点 $\mathbf{p}$ を境界 Γ 上の任意の点にとると、境界積分方程式として次式が得られる。

$$c(\mathbf{p})u(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial u(\mathbf{q})}{\partial n} - \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n} u(\mathbf{q}) \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (2.5)$$

ここで、 $c(\mathbf{p})$ は境界 Γ の形状により決まる定数であり、式 (2.5) の右辺の境界積分は Cauchy の主値積分によって計算される。

2.4.2 観測方程式

設定した数理モデルを既知量 u_i, j_n と未知量 u_a, u_c, u_n, j_a, j_c を関係づける観測方程式としてまとめる。式 (2.5) を離散化すると次式が得られる。

$$H_a \mathbf{u}_a + H_c \mathbf{u}_c + H_n \mathbf{u}_n = G_a \mathbf{j}_a + G_c \mathbf{j}_c + G_n \mathbf{j}_n \quad (2.6)$$

また、同様に式 (2.4) を離散化すると次式が得られる。

$$\mathbf{u}_i = G_{ia} \mathbf{j}_a + G_{ic} \mathbf{j}_c + G_{in} \mathbf{j}_n - H_{ia} \mathbf{u}_a - H_{ic} \mathbf{u}_c - H_{in} \mathbf{u}_n \quad (2.7)$$

ここで、 $G_a, G_c, G_n, H_a, H_c, H_n$ は境界 Γ と要素の形状に依存する既知行列であり、 $G_{ia}, G_{ic}, G_{in}, H_{ia}, H_{ic}, H_{in}$ は境界 Γ と要素の形状、および u_i の測定位置に依存する既知行列である。 $\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_c, \mathbf{u}_n, \mathbf{j}_a, \mathbf{j}_c, \mathbf{j}_n$ はそれぞれ各節点における $u_a, u_c, u_n, j_a, j_c, j_n$ の値を成分とするベクトル、 $\mathbf{u}_i$ は電位の測定値を成分とするベクトルである。

式 (2.6) と式 (2.7) をまとめると既知量と未知量に関係づける観測方程式として

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (2.8)$$

が得られる。ここで

$$\mathbf{b} = \{ (G_n \mathbf{j}_n)^T \quad (G_{in} \mathbf{j}_n - \mathbf{u}_i)^T \}^T \quad (2.9)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} H_a & H_c & H_n & -G_a & -G_c \\ H_{ia} & H_{ic} & H_{in} & -G_{ia} & -G_{ic} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{x} = \{ \mathbf{u}_a^T \quad \mathbf{u}_c^T \quad \mathbf{u}_n^T \quad \mathbf{j}_a^T \quad \mathbf{j}_c^T \}^T \quad (2.11)$$

と置いた。上添字 T は転置を表す。

式 (2.8) のみでの逆解析は可能であるが、推定解の精度を上げるため、総電流量の条件を制約条件として追加する。めっき槽に印加される総電流量を I とすると

$$\int_{\Gamma_a} j_a d\Gamma = I \quad (2.12)$$

$$\int_{\Gamma_c} j_c d\Gamma = -I \quad (2.13)$$

となる。境界要素法に用いた要素で式 (2.12) と式 (2.13) を離散化すると次式となる。

$$S_a^T j_a = I \quad (2.14)$$

$$S_c^T j_c = -I \quad (2.15)$$

ここで、 S_a, S_c は境界 Γ_a, Γ_c における要素形状に依存する既知ベクトルであり、一定要素を用いた場合は要素面積になる。式 (2.8) と同様にまとめると

$$d = C x \quad (2.16)$$

となる。ここで

$$d = \begin{Bmatrix} I & -I \end{Bmatrix}^T \quad (2.17)$$

$$C = \begin{bmatrix} O_a & O_c & O_n & S_a^T & O_c \\ O_a & O_c & O_n & O_a & S_c^T \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

であり、 O_a, O_c, O_n は零行列である。

2.5 逆解析手法

本逆解析手法の流れを図 2-4 に示す。本手法は次の 2 段階からなる。本手法ではまず、測定電位および電場の数値モデルを用いて、Tikhonov の適切化法によって、アノードおよびカソードなどの電場境界上における電流密度と電位を推定する。これを第 1 次推定解とする^{*1}。

次に、推定精度の向上のため、電流密度と電位の第 1 次推定解を回帰分析することで、電場境界上の分極曲線を推定する。この分極曲線を用い、境界要素法による再計算を行うことで、電場境界上の電流密度と電位を得る。これを第 2 次推定解とし、本手法の最終推定解として採用する^{*2}。

2.5.1 第 1 次推定：Tikhonov の適切化法による未知量の概値推定

まず、測定で得られた槽内電位 u_i から観測方程式（式 (2.8)）を用いて、未知量 u_a, u_c, u_n, j_a, j_c を見積もる。観測方程式を解くにあたって、測定誤差や数値モデルの誤差による感度を低減化するため、観測方程式 (2.8) および制約条件式 (2.16) に対し、制約条件を付加した Tikhonov の適切化法 [22], [23] を適用する。制約条件を付加した Tikhonov の適切化法は次の目的関数 $\Pi(x, \lambda)$ を最小にする $\hat{x}$

^{*1} 第 5 章で用いる打ち切り特異値分解法で推定する方法も考えられる。数値シミュレーションによる検討から、打ち切り特異値分解法による推定解は高周波領域を打ち切られたローパスフィルタをかけられた状態に近い挙動を示す。分布として見た場合は、Tikhonov の適切化法の方がより正解に近い推定解が得られた。なお、打ち切り特異値分解法は推定モデルの自由度が特異値の数に限定される。

^{*2} 2 段階に分けず、始めから分極曲線の関数を未知として推定する方法も考えられる。しかし、この方法では主に以下の課題がある。

- (1) 未知とする分極曲線の関数形の設定が必要である。例えば、本研究のように多項式近似する場合、次数の決定方法が必要である。
- (2) 観測方程式が非線形となり、局所解の発生や計算の増加が見込まれる。加えて、(1) の関数形の設定において、本手法のように多項式の次数を c-AIC で取得する場合には、さらなる繰り返し計算を必要とする。

以上のように、分極曲線を未知として推定する方法には、本手法に比べて多くの課題があり、現実的な方法とはいえない。局所解の発生が問題となる点は第 5 章における双極子推定とも共通する。

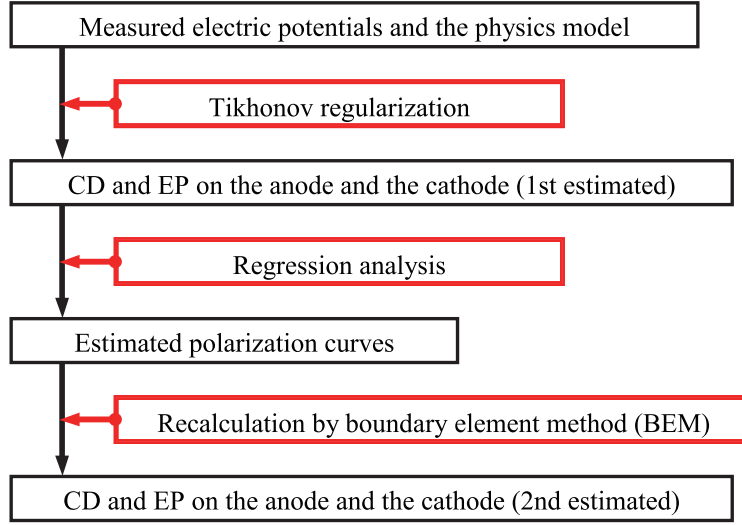


Fig. 2-4: The procedure of the inverse analysis in the proposed method

を $\mathbf{x}$ の推定解として採用する手法である^{*3}.

$$\Pi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_o\|^2 - 2(\mathbf{C}\mathbf{x} - \mathbf{d})^T \boldsymbol{\lambda} \quad (2.19)$$

ここで, $\alpha, \mathbf{x}_o, \boldsymbol{\lambda}$ はそれぞれ Tikhonov の適切化パラメータ, 参照解, Lagrange の未定乗数である.
式 (2.19) の解 $\hat{\mathbf{x}}$ は行列 $\mathbf{A}$ を

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \quad (2.20)$$

のように特異値分解することで

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{V} \{ \mathbf{K} (\mathbf{S}^T \mathbf{U}^T \mathbf{b} + \alpha \mathbf{V}^T \mathbf{x}_o) + \mathbf{J} \mathbf{d} \} \quad (2.21)$$

となる. ここで

$$\mathbf{K} = (\mathbf{E} - \mathbf{J}\mathbf{C}\mathbf{V}) (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{E})^{-1} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{J} = (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{C}^T \{ \mathbf{C}\mathbf{V} (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{C}^T \}^{-1} \quad (2.23)$$

であり, $\mathbf{E}$ は単位行列である. 式 (2.21) の詳細な導出は「2.9.1 制約付き Tikhonov の適切化法の解」を参照されたい.

a. Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法

Tikhonov の適切化パラメータ α の決定には P. C. Hansen の L カープ法や推定誤差の分散行列を利用する方法などがある [22]-[24], [26], [31]-[34]. しかし, 前者の L カープ法では L カープの角が唯一に求まらない場合が多く, 後者の推定誤差は先験情報によって決定する場合が多い. そこで, 本

^{*3}式 (2.19) の第 3 項である拘束条件を外すと, 多くの場合, 適切化に十分な Tikhonov の適切化パラメータの値が大きくなる. Tikhonov の適切化パラメータが大きいは, 数理モデルと誤差を含めた現実のモデルの違いが大きいのことを意味することから, 拘束条件を付与した方が現実のモデルに近づいているといえる.

研究では Tikhonov の適切化パラメータ α の値を決めるために、観測量である電位の測定誤差を用いて、AIC（赤池情報量基準）の基礎である Kullback-Leibler の情報量 [35] を基準とした方法を提案する。本方法では以下のようにして Tikhonov の適切化パラメータ α の値を取得する。

α をある値に設定すると、それに対応した $\hat{\mathbf{x}}(\alpha)$ が式 (2.21) によって得られる。さらに式 (2.8) より、推定解 $\hat{\mathbf{x}}(\alpha)$ から推定誤差の分散

$$\hat{\sigma}^2(\alpha) = \frac{\|A \hat{\mathbf{x}}(\alpha) - \mathbf{b}\|^2}{m} \quad (2.24)$$

が得られる。ここで、 m は $\mathbf{b}$ の次元である。これを用い、 α の値として測定誤差の分散 σ^2 に対する推定誤差の分散 $\hat{\sigma}^2$ のずれを表す量である Kullback-Leibler の情報量を最小化する値を選択する。すなわち目的関数

$$\Psi(\alpha) = \log \hat{\sigma}^2(\alpha) + \frac{2\sigma^2}{m\hat{\sigma}^2(\alpha)} \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \lambda_i^2 K_{ii}(\alpha) \quad (2.25)$$

を最小にする α の値を求めればよい（「2.9.2 Tikhonov の適切化法に対する Kullback-Leibler の情報量」参照）。ここで、 n, λ_i, K_{ii} はそれぞれ $\hat{\mathbf{x}}$ の次元、行列 A の i 番目の特異値、行列 K の i 行 i 列の要素である。式 (2.22) より、行列 K もまた Tikhonov の適切化パラメータ α に依存することに注意されたい。式 (2.25) を最小にする α の値を求めるには、関数の微分が不要な滑降シンプレックス法 [36] が有効である。

b. 参照解 $\mathbf{x}_o$ の設定

参照解 $\mathbf{x}_o$ には真の値 $\mathbf{x}$ により近い値を用いるのが望ましい。本研究では参照解 $\mathbf{x}_o$ に、電位 u_a, u_c, u_n および電流密度 j_a, j_c のそれぞれに対して、各々の平均値 u_{ao}, u_{co}, u_{no} および j_{ao}, j_{co} の計 5 つのパラメータを用いる。電流密度の平均値 j_{ao} および j_{co} は総電流量とアノードおよびカソードの表面積の商である。

電位の平均値を得るためには、等電位条件および等電流密度条件の解を求める。アノード、カソードそれぞれに等電位条件あるいは等電流密度条件を課せるため、条件の組み合わせは 4 通りある（表 2-1）。したがって、それらの平均値を電位の平均値 u_{ao}, u_{co}, u_{no} とする。

Table. 2-1: The combination of the boundary conditions to calculate the averages of the electric potentials on the boundaries

Case	The anode boundary Γ_a	The cathode boundary Γ_c
1	Uniform electric potential	Uniform electric potential
2	Uniform electric potential	Uniform current density
3	Uniform current density	Uniform electric potential
4	Uniform current density	Uniform current density

さらに、参照解 $\mathbf{x}_o$ を得る過程で電位および電流密度の参照分散 σ_x^2 が得られる。参照分散 σ_x^2 もまた、電位 u_a, u_c, u_n および電流密度 j_a, j_c のそれぞれに対する各々の分散 $\sigma_{ua}^2, \sigma_{uc}^2, \sigma_{un}^2$ および $\sigma_{ja}^2, \sigma_{jc}^2$ の計 5 つのパラメータからなる。

本手法では、式 (2.19) を解く前に $\mathbf{x}$ および $\mathbf{x}_o$ をこの参照標準偏差 σ_x で正規化しておく。すなわち

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/\sigma_x, \quad \mathbf{x}_o \rightarrow \mathbf{x}_o/\sigma_x \quad (2.26)$$

これにより、式 (2.19) は Bayes 推定とほぼ同義となる [24], [37].

2.5.2 第 2 次推定：回帰分析による分極曲線の推定とその解

第 1 次推定で推定された u_a, u_c, j_a, j_c を用いてアノードおよびカソードの分極曲線 ($f_a(\bullet)$ および $f_c(\bullet)$) を推定する. $f_a(\bullet)$ および $f_c(\bullet)$ は次式で定義される^{*4}.

$$f_a(j_a) = u_a - \phi_a \quad (2.27)$$

$$f_c(j_c) = u_c - \phi_c \quad (2.28)$$

ここで、 ϕ_a および ϕ_c はアノードおよびカソードの内部電位である.

a. アノードあるいはカソード内部の電位分布を無視できる場合

アノードあるいはカソードに厚みがあるときなどの場合には、アノードあるいはカソード内部の電位分布 (ϕ_a あるいは ϕ_c) がその電解液側の境界電位 (u_a あるいは u_c) 分布に対して無視できる. この場合には、横軸に各節点の電流密度 j_a, j_c を、縦軸に対応する電位 u_a, u_c を描画する. 分極曲線が単調減少する非線形関数となる [26] ことから、アノードおよびカソードのデータ点をそれぞれ最小二乗法により多項式近似する. すなわち

$$\begin{aligned} \sum_k \{f(j_k) - u_k\}^2 &\rightarrow \min. \\ \text{subject to } f(j_{k+1}) - f(j_k) &\leq 0 \\ f(j_k) &= \sum_{l=0}^N a_l j_k^l, \quad j_k \leq j_{k+1} \end{aligned} \quad (2.29)$$

の解 a_l ($l = 1, 2, \dots, N$) を求める. 制約条件は近似曲線の差分が非正値であるとしている. これは分極曲線を折れ線近似して解くことを念頭に置いているためである. 式 (2.29) は典型的な二次計画問題であり、その解は有効制約法 [38] により得られる. ここで、多項式の次数 N の最適値は c-AIC [39] によって得る.

このようにして得られたアノードおよびカソードの分極曲線 ($f_a(\bullet)$ および $f_c(\bullet)$) に従う未知量 u_a, u_c, u_n, j_a, j_c を最終的な推定結果として得る. 第 1 次推定の境界要素法で用いた要素、節点、行列を流用し、次の残差ベクトル

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} H_a & H_c & H_n \\ O_a & O_c & O_n \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_a(j_a) + \phi \\ f_c(j_c) \\ u_n \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} G_a & G_c & G_n \\ S_a^T & O_c & O_n \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} j_a \\ j_c \\ j_n \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ I \end{Bmatrix} \quad (2.30)$$

の各成分をほぼ 0 にする $u_a, u_c, u_n, j_a, j_c, \phi$ を Newton-Raphson 法によって得る [1]-[4], [11], [12], [26]. ここで、 ϕ は印加総電流量 $S_a^T j_a$ を既知量 I とするためのアノードとカソードの間の電位差修正値で

^{*4}本研究では、式 (2.27) および式 (2.28) のように、分極曲線がアノードおよびカソードでそれぞれ 1 本の曲線となるということを先験情報として与えた. しかしながら、分極曲線は電極や電解液の材料だけでなく、攪拌速度やめっきの表面状態などに作用されるため、1 本の曲線に乗らない場合も考えられる. その場合は、第 1 次推定解を用いて電流密度-電位の分極曲線図を描画し、描画した分極曲線図から改めて分極曲線に関する先験情報を与えることで対処すればよい.

ある。局所解への収束を避けるため、分極曲線は折れ線近似し、折れ線の中継点はデータ点 $(j_k, f(j_k))$ とする。

なお、 $j_a = \text{const.}$ すなわち u_a が不定になるときなど、推定された分極曲線の関数 $f(\bullet)$ が不安定になる場合はその逆関数 $f^{-1}(\bullet) = g(\bullet)$ を式 (2.29) と同様の手法で求めればよい。すなわち

$$\begin{aligned} \sum_k \{g(u_k) - j_k\}^2 &\rightarrow \min. \\ \text{subject to } g(u_{k+1}) - g(u_k) &\leq 0 \\ g(u_k) &= \sum_{l=0}^N b_l u_k^l, \quad u_k \leq u_{k+1} \end{aligned} \quad (2.31)$$

の解 b_l ($l = 1, 2, \dots, N$) を求めればよい。また、式 (2.30) については分極曲線の表記を $f(\bullet)$ から $f^{-1}(\bullet) = g(\bullet)$ に入れ替えることによる修正を行うだけでそのまま適用できる。

b. アノードあるいはカソード内部の電位分布を無視できない場合

アノードあるいはカソードが極めて薄い薄膜のときなどの場合には、その内部の電位分布 (ϕ_a あるいは ϕ_c) あらかじめ見積もっておくことで、式 (2.29) に帰着できる。具体的な例は後述の「2.6.1 薄膜カソードの数値シミュレーションモデル」に示す。

2.6 数値シミュレーションによる数値実験

本手法の有効性を検討するため、図 2-1 の LSI 用の円筒型電気銅めっき装置を対象とし、薄膜カソードに流入する電流密度分布 j_c を本手法によって推定する数値実験を行う。

2.6.1 薄膜カソードの数値シミュレーションモデル

カソードとなるシード層の厚さおよびその上に施されるめっき膜厚が極めて薄い場合、その電気抵抗を無視できず、電気めっき時には薄膜カソード内部にも無視できない電位分布が生じる。そこで、本数値実験ではこの薄膜カソードの電気抵抗を考慮に入れて、疑似測定データを得る順解析および本手法の第2次推定を行う。

薄膜カソードはめっき槽に比べて極めて薄いため、その電位は厚さ方向にほぼ一様で2次元的に分布すると仮定できる。このとき、カソードの電気伝導度を κ_c 、めっき膜厚を t_c とすると、カソード内の電位 ϕ_c は次の方程式を満たす [1]-[4]。

$$\nabla_2 \cdot (\kappa_c t_c \nabla_2 \phi_c) + j_c = 0 \quad \left(\nabla_2 = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \right\}^T \right) \quad \text{in } \Gamma_c \quad (2.32)$$

下添字 2 は 2 次元の演算子であることを表す。式 (2.32) の境界条件は次式で与えられる。

$$\phi_c = 0 \quad \text{on electrode} \quad (2.33)$$

$$\kappa_c \frac{\partial \phi_c}{\partial n} = 0 \quad \text{on the other edge} \quad (2.34)$$

電気伝導度と膜厚の積 $\kappa_c t_c$ が一定のとき、式 (2.32) は次の Poisson 方程式

$$\kappa_c t_c \nabla^2 \phi_c + j_c = 0 \quad \left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad \text{in } \Gamma_c \quad (2.35)$$

となるため、各要素において $\kappa_c t_c$ が一定とした有限要素法解析によって、代数方程式

$$K_c(t_c) \phi_c = j_c \quad (2.36)$$

が得られる。ここで、 $K_c(t_c)$ は有限要素法解析によって得られる係数行列である。境界条件を考慮して式 (2.36) を解くと、形式的に

$$\phi_c = K_c^{-1}(t_c) j_c \quad (2.37)$$

と書ける。

本手法の第2次推定では、第1次推定によって u_c, j_c が得られており、式 (2.37) によって ϕ_c が得られる。さらに、横軸に各節点の電流密度 j_c を、縦軸に対応する電位 $u_c - \phi_c$ を描画することで、「2.5.2 a. アノードあるいはカソード内部の電位分布を無視できる場合」と同様の手法でカソードの分極曲線 $f_c(\bullet)$ が推定できる。また、式 (2.30) は次式のように修正される。

$$r = \begin{bmatrix} H_a & H_c & H_n \\ O_a & O_c & O_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_a(j_a) + \phi \\ f_c(j_c) \\ u_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} G_a & G_c - H_c K_c^{-1}(t_c) & G_n \\ S_a^T & O_c & O_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_a \\ j_c \\ j_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta \\ I \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

2.6.2 数値実験条件

電場は軸対称を仮定し、3次元軸対称境界要素法によって、疑似測定データと観測方程式を計算する。図 2-5 に本数値実験に用いる円筒型電気銅めっき装置の境界要素モデルを示す。 r 軸および z 軸を図 2-5 のようにとる。めっき槽の半径を $R = 150$ mm、高さを $h = 10$ mm、印加する平均電流密度を $j_{ave} = 100$ A/m² ($I = j_{ave} \pi R^2$) とし、めっき槽の側壁 Γ_n における法線方向の電流密度を $j_n = 0$ A/m² とする。また、要素には軸対称一定要素 [40] を用い、 r 方向の要素分割数を 150、 z 方向の要素分割数を 100 とした。

めっき電解液の電気伝導度を $\kappa = 25.3$ /Ωm、銅の電気伝導度を $\kappa_c = 6.0 \times 10^7$ /Ωm とする。アノードおよびカソードの分極曲線 $f_a(\bullet), f_c(\bullet)$ には図 2-6 に示す銅-硫酸銅の分極曲線を正解のデータとして用いる。シード層の厚さ（初期めっき膜厚）を $t_c^0 = 20$ nm とし、めっき膜厚の成長は

$$t_c^{i+1} = t_c^i - \frac{M \Delta T}{2 \rho F} j_c^i \quad (2.39)$$

により再現する。ここで、上添字 i は時間ステップ、 ΔT は時間ステップ幅であり、本数値実験では $\Delta T = 1$ s とした。 M は銅の原子量 ($= 63.5$ g/mol)、 ρ は銅の密度 ($= 8.96 \times 10^3$ kg/m³)、 F は Faraday 定数 ($= 9.65 \times 10^4$ C/mol) を表す。カソード面上の電流密度 j_c^i には、疑似測定データを得る順解析では正解値を、本手法による逆解析では推定によって得られた値を用いる。

槽内電位 u_i の測定は、カソード近傍の高さ $z = 2$ mm において、 $r = 0$ mm から $r = 149$ mm まで 1 mm ごとに計 150 点で行うこととする。疑似測定データには境界要素法によって得られた順解析結果に標準偏差 1 mV の正規分布するランダムノイズを加えたものを用いる。

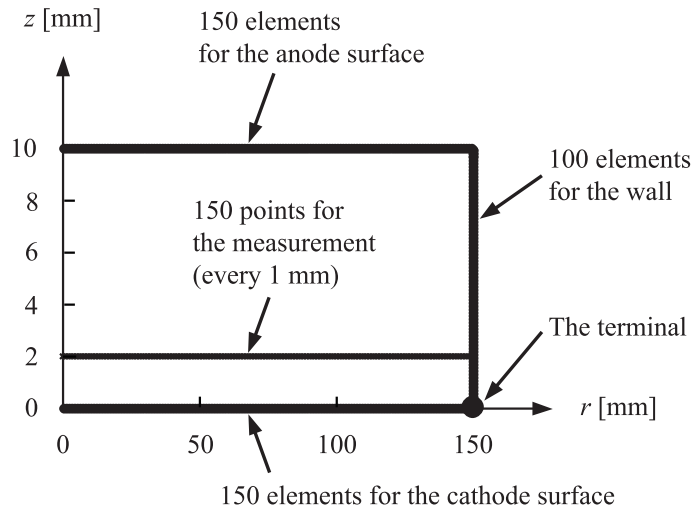
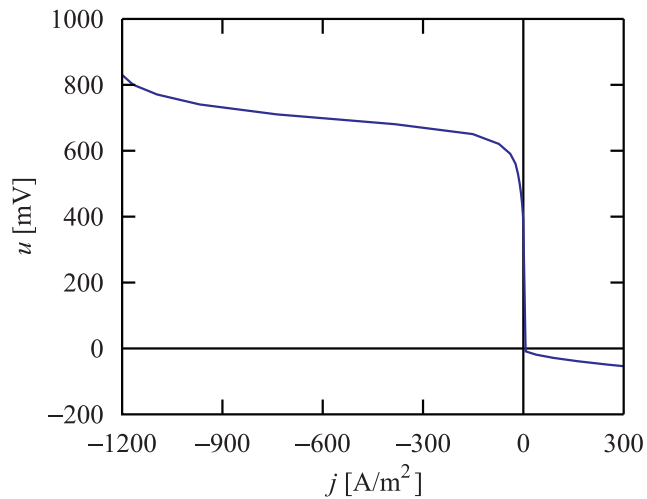


Fig. 2-5: The boundary elements of the electroplating cell for the numerical simulation


 Fig. 2-6: The polarization curve of Cu in CuSO_4

2.6.3 数値実験結果

a. 電気めっき開始直後の場合

図 2-7 に順解析によって得られた電気めっき開始直後の測定点における電位を示す。これに標準偏差 1 mV の正規分布するランダムノイズを加えたものを擬似測定データとする。この擬似測定データに本手法を適用し、推定されたカソード面における電流密度を図 2-8 に示す。

図 2-8 より、本手法の最終推定解である第 2 次推定解が正解の電流密度とよく一致していることが分かる。さらに、第 2 次推定である分極曲線の推定と境界要素法による再計算を得ることで、第 1 次推定解が有する振動成分が除去された。

第 1 次推定において、Tikhonov の適切化パラメータ α を徐々に増加させていくことで得られた式

(2.25) の値および L カurve を図 2-9 および図 2-10 に示す．図 2-9 および図 2-10 中の○は滑降シンプレックス法によって得られた Kullback-Leibler の情報量が最小となる点である．

図 2-9 は両対数グラフにするため，式 (2.25) の最小値が 1 になるようにすべての値にオフセットを加えた．Tikhonov の適切化パラメータ α の最適値が存在し，滑降シンプレックス法によってその

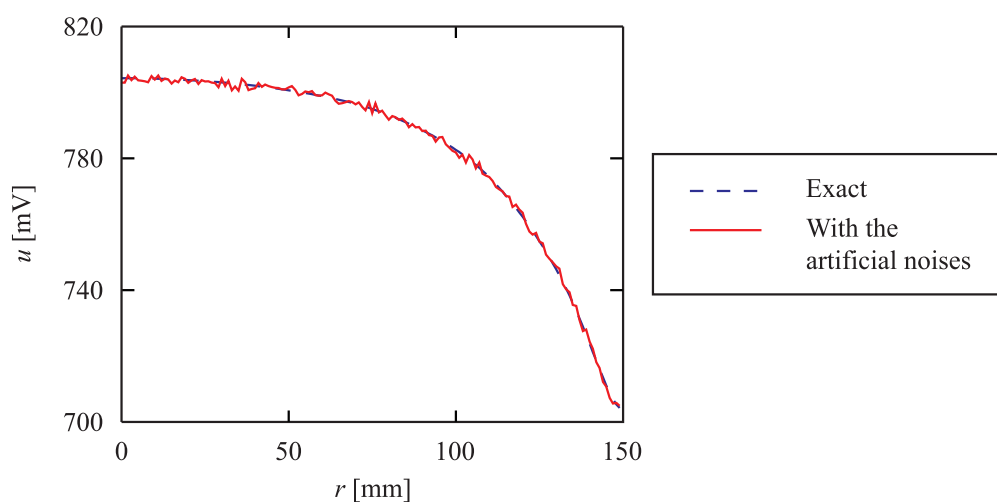


Fig. 2-7: The phantom data of the electric potentials in the cell
(0 second after the electroplating operation started)

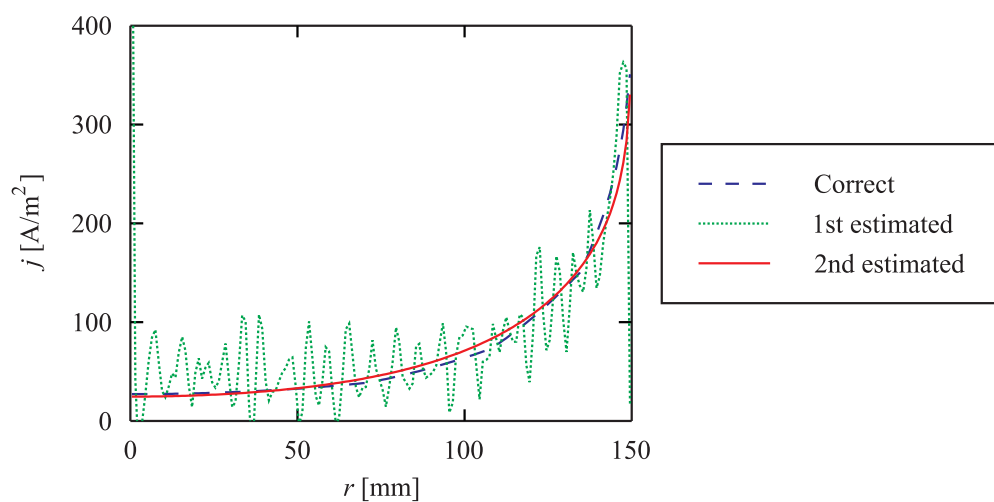


Fig. 2-8: The current density on the cathode estimated by the proposed method
(0 second after the electroplating operation started)

値が得られたことが分かる．また図 2-10 より，L カーブの角部が不明瞭であり，L カーブ法では α の決定が困難であることが分かる．

第 2 次推定において，多項式回帰によって推定された分極曲線を図 2-11 に示す．図 2-11 より，第 1 次推定解にはランダムノイズに起因する推定誤差が含まれているが，正解の分極曲線（図 2-6）と同様に，ほとんどのデータにおいて電流密度に対して電位が単調減少する傾向が見られる．

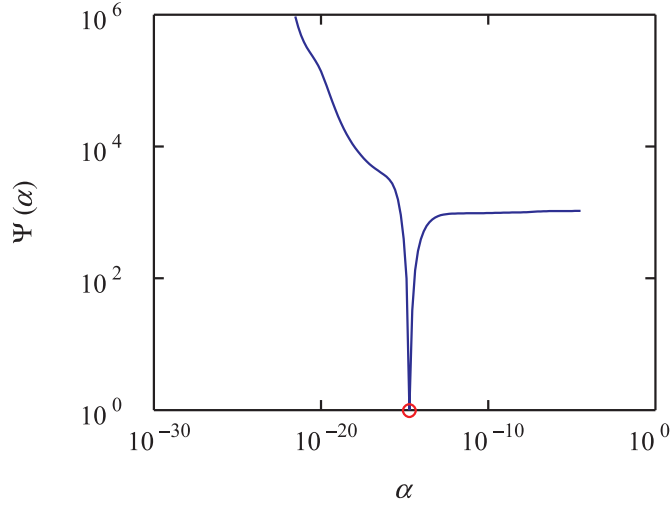


Fig. 2-9: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
(0 second after the electroplating operation started)

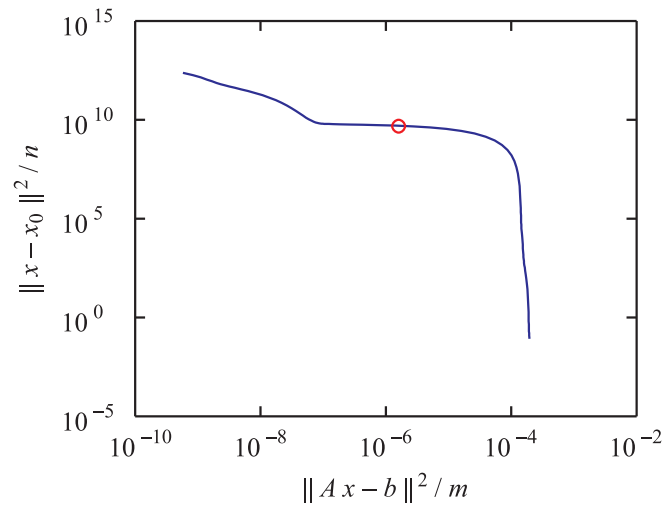


Fig. 2-10: L-curve (0 second after the electroplating operation started)

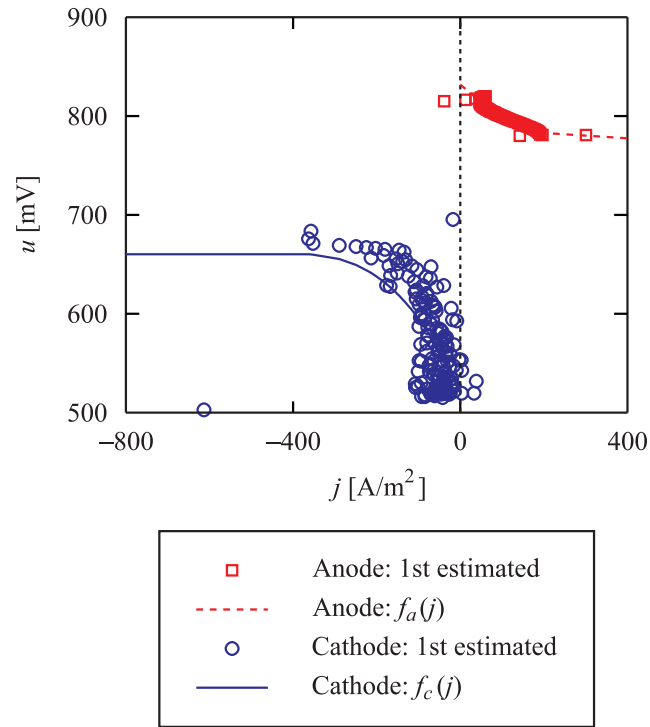


Fig. 2-11: The polarization curves estimated by the regression analysis
(0 second after the electroplating operation started)

$$\begin{cases} f_a(j) = 8.32 \times 10^2 - 0.395j + 7.37 \times 10^{-4}j^2 \\ f_c(j) = 5.20 \times 10^2 - 0.941j - 2.07 \times 10^{-3}j^2 - 1.47 \times 10^{-6}j^3 \end{cases}$$

b. 電気めっき開始 40 秒後の場合

電気めっき開始 40 秒後のめっき膜厚分布を図 2-12 に示す. このとき, 順解析によって得られた電気めっき開始直後の測定点における電位を図 2-13 に示す. これに標準偏差 1 mV の正規分布するランダムノイズを加えた擬似測定データに対して本手法を適用し, 推定されたカソード面における電流密度を図 2-14 に示す.

「a. 電気めっき開始直後の場合」と同様に, 本手法の最終推定解である第 2 次推定解が正解の電流密度とよく一致していることが分かる. さらに, 第 2 次推定である分極曲線の推定と境界要素法による再計算を行うことで, 第 1 次推定解が有する振動成分が除去された. 参考のため, 第 1 次推定において Tikhonov の適切化パラメータ α を徐々に増加させていくことで得られた式 (2.25) の値お

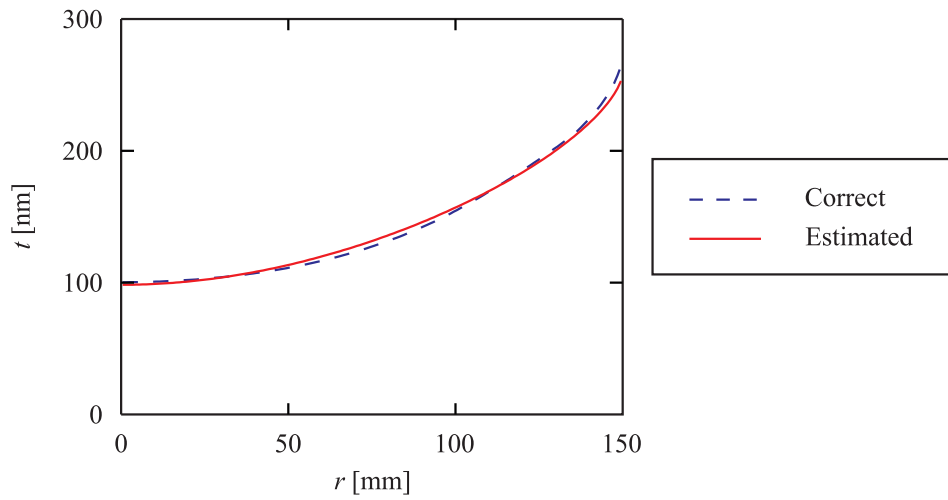


Fig. 2-12: The thickness of the plating film (40 second after the electroplating operation started)

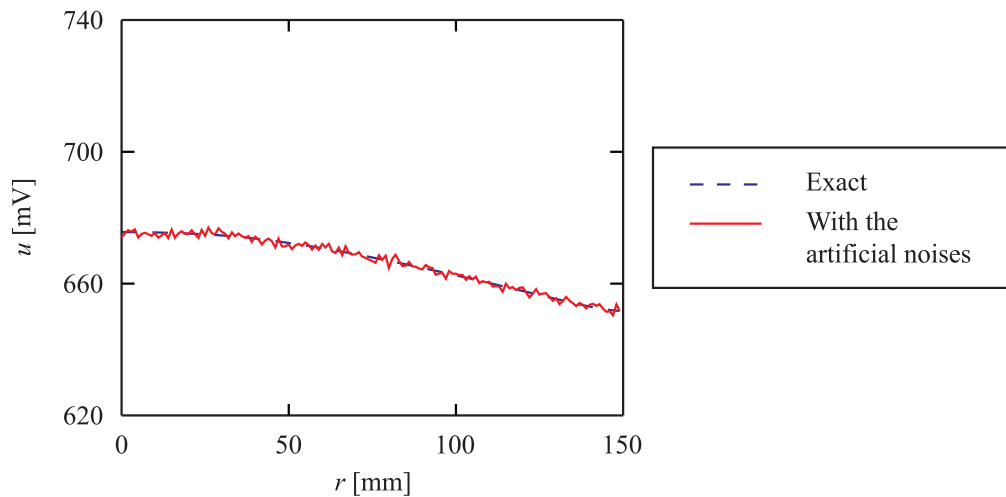


Fig. 2-13: The phantom data of the electric potentials in the cell
(40 second after the electroplating operation started)

よびLカーブを図2-15および図2-16に示す。また、第2次推定において多項式回帰によって推定された分極曲線を図2-17に示す。

図2-15より、Kullback-Leiblerの情報量を最小にする α の値が滑降シンプレックス法によって得られていることが分かる。また図2-16より、Kullback-Leiblerの情報量から得られた α の値は不明瞭であるがLカーブの角部と思われる α の値よりも大きいことが分かる。なお、このときのLカーブの角部に相当する α の値を用いた場合、擬似測定データのランダムノイズに起因する第1次推定解の振動成分が大きくなり、適切化が不十分な結果が得られた。

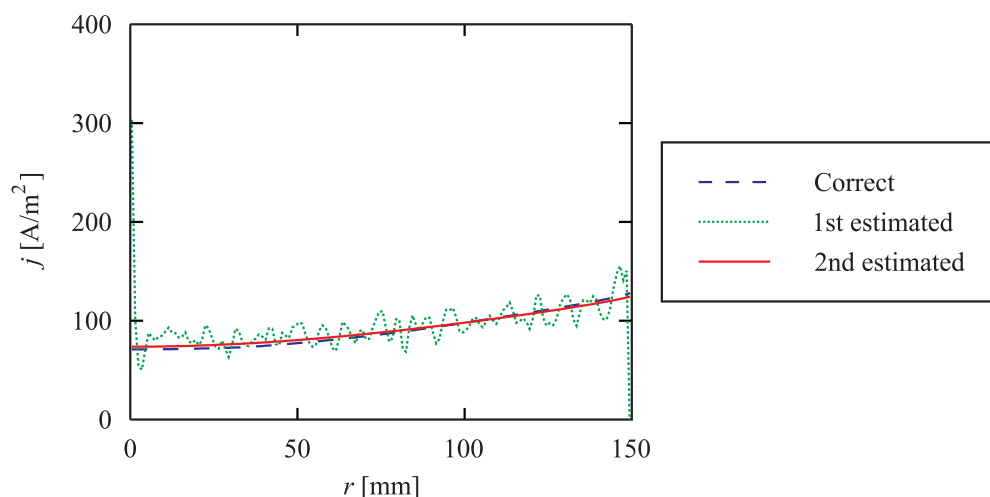


Fig. 2-14: The current density on the cathode estimated by the proposed method
(40 second after the electroplating operation started)

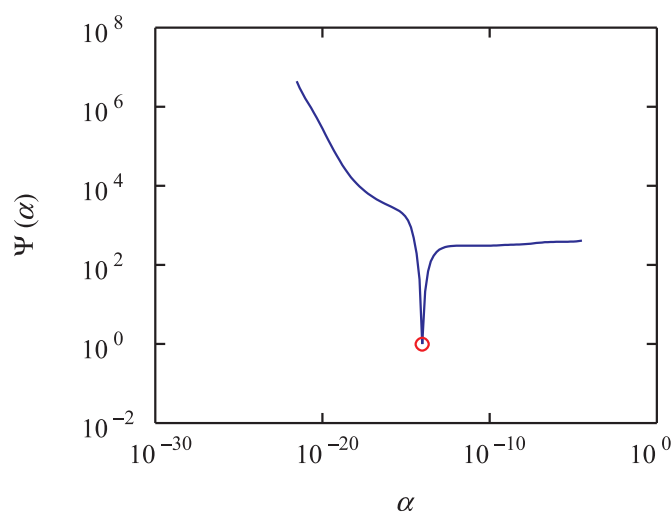


Fig. 2-15: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
(40 second after the electroplating operation started)

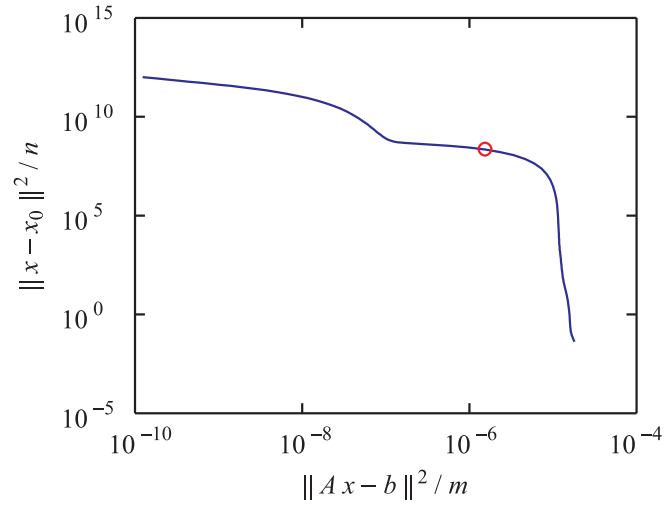


Fig. 2-16: L-curve (40 second after the electroplating operation started)

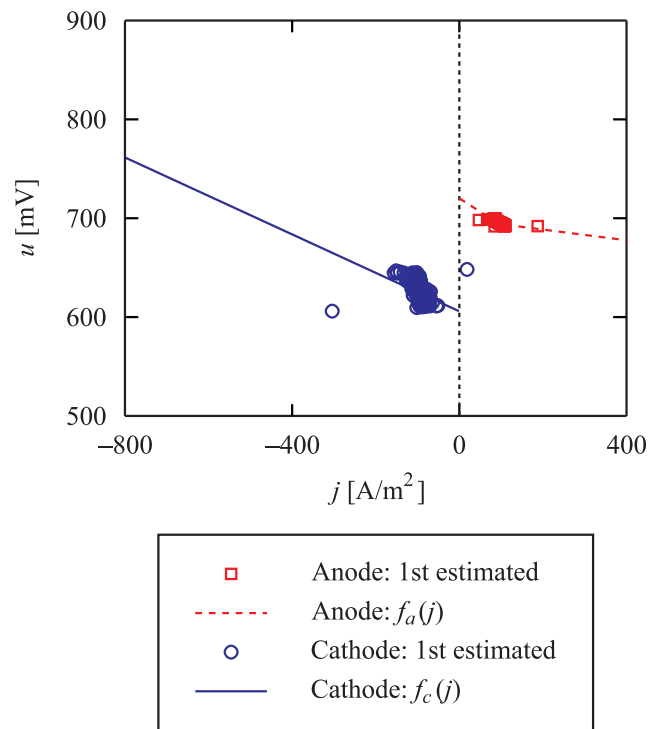


Fig. 2-17: The polarization curves estimated by the regression analysis (40 second after the electroplating operation started)

$$\begin{cases} f_a(j) = 7.24 \times 10^2 - 0.414j + 1.21 \times 10^{-3}j^2 \\ f_c(j) = 6.06 \times 10^2 - 0.194j \end{cases}$$

2.7 電気銅めっき装置による検証実験

2.7.1 実験装置と実験手順

本手法の検証実験に用いる銅めっき装置を図 2-18 に示す。めっき槽にはアクリル製の矩形容器を用い、LSI めっきに用いる電解液（主成分：硫酸銅，電気伝導度 $\kappa = 25.3 / \Omega\text{m}$ ）で満たす。アノードとカソードには銅板を用い、この上にめっきを施す。カソード側をビニルテープでマスキングし、様々な電流密度分布を形成させる。本実験では図 2-19 に示すように 2 種類のマスキングパターンを用意した。

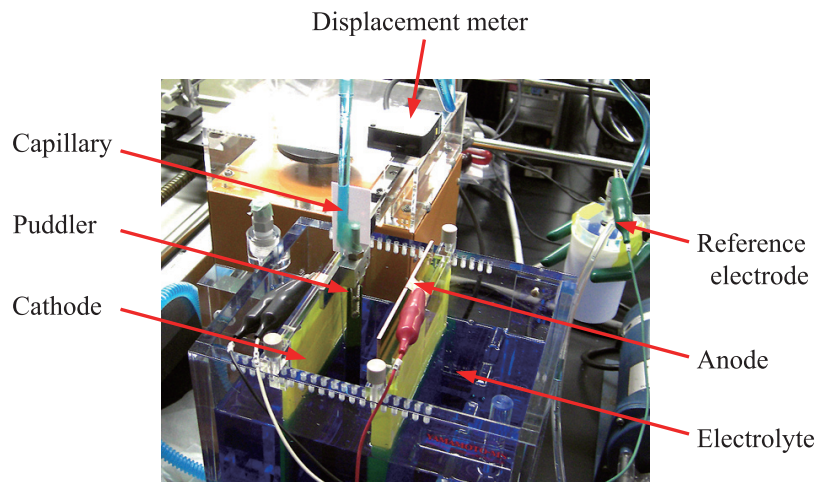


Fig. 2-18: The experimental setup

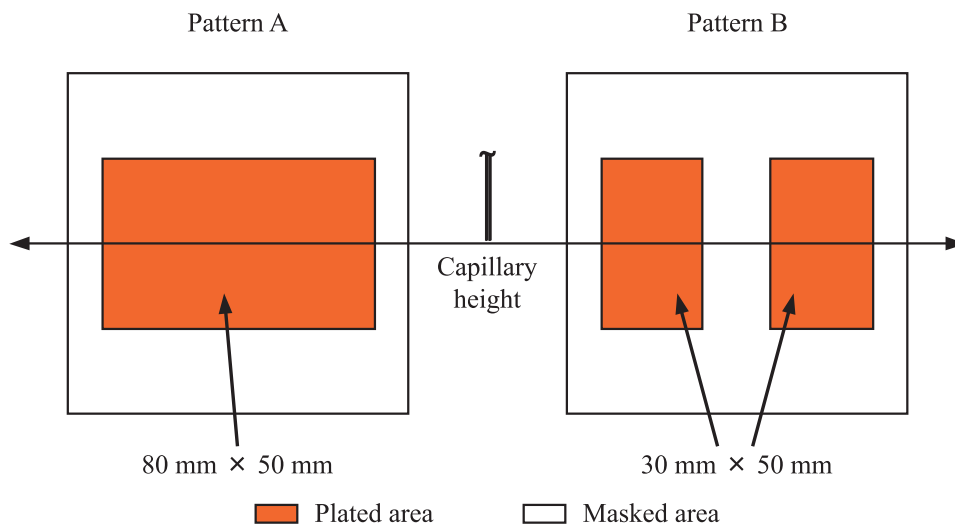


Fig. 2-19: The masking patterns of the cathode

図 2-18 に示すようにプラスチック製の攪拌パドルにガラス製の細管を取り付ける。攪拌パドルはめっき槽外に設置した揺動台によってアノード面あるいはカソード面に対して水平に駆動しながら、めっき槽内の電解液を攪拌する。これら攪拌パドルと細管をめっき槽に挿入し、細管で拾い上げた電解液を参照電極に通してめっき槽内の電位を測定する。参照電極は電圧計を介してカソードにつなぐ。参照電極には銀 - 塩化銀電極を用いた。このとき細管内を流れる電流はほぼ 0 であり、細管先端と参照電極近傍の電解液の電位差はほぼ 0 であると考えられる。

図 2-20 はめっき槽の断面図である。細管とカソード表面の距離を 5 mm とし、細管先端の高さはめっき面の中央とした (図 2-19)。細管および攪拌パドルの位置情報は揺動台に設置したレーザ変位計を用いて取得する。

2.7.2 解析モデル

めっき槽内の電場は深さ方向に対してほぼ一様であると近似し、2 次元境界要素法によってモデル化する。本検証実験の境界要素モデルを図 2-21 に示す。要素には直線一定要素を用い、その全要素数は 380 である。 Γ_n における電流密度 j_n を 0 A/m^2 とする。攪拌パドルの存在は無視する。

2.7.3 実験結果

a. マスキングパターン A の場合

印加電流 I を 0.8 A (平均電流密度 200 A/m^2) とし、めっき槽内の電位を測定した結果を図 2-22 に示す。電位の基準をカソード銅板とし、無攪拌の場合と攪拌速度 $0.5, 1.0, 1.5 \text{ Hz}$ の場合を測定した。無攪拌の電位測定は細管を攪拌パドルから外して行った。図 2-22 より、攪拌の有無によって電位が大きく異なるが、攪拌速度による電位の違いはほとんど見られないことが分かる。以下、本手法で用いる電位に測定範囲 $x = -45 \sim 45 \text{ mm}$ を 180 に分割したときの各区分における平均値を、標準偏差 σ には全区間の偏差二乗和から計算した標準偏差を用いた。図 2-23 は攪拌速度が 1.0 Hz のときの本手法によるカソード表面上の電流密度の推定結果である。第 1 次推定により電流密度の概形が得られた。マスキング部分と接する境界要素の推定値は大きく変化することが分かる。各 α 値に対する式 (2.25) の値および L カーブを図 2-25 および図 2-26 に描画した。図 2-25 は両対数グラフにするため、式 (2.25) の最小値が 1 になるようにすべての値にオフセットを加えた。 α の最適値が存在し、滑降シンプレックス法によってその値が得られたことが分かる (図 2-25 中の○)。

さらに、図 2-27 は本手法によって推定された分極曲線である。電流密度が逆流している点 (アノードでは負値、カソードでは正值) は無視し、多項式で近似した。得られた分極曲線を用いて再計算した結果を図 2-23 中に示す。マスキング部分と接する境界要素の推定値など、修正された電流密度分布が得られた。本手法によって測定誤差や数値モデルの誤差による感度を低減化しつつ、アノードおよびカソードの分極曲線を推定し、それに従う電流密度分布が得られた。

図 2-24 は本手法によるカソード表面上の電流密度の最終的な推定結果である。他の攪拌速度においても、同様にこれらの電流密度を推定することができた。図 2-24 中には比較のため、標本の分極曲線 (図 2-6) を用いた従来の数値解析による結果を示した。本手法によるこれら電流密度の推定結果は従来法で得られる傾向とよく合うことが分かる。

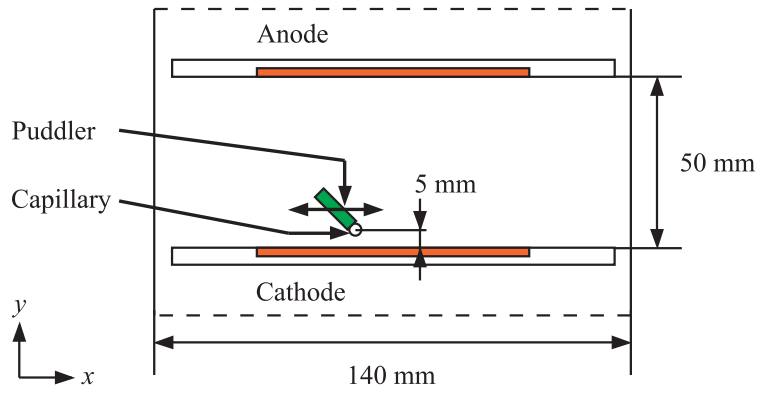


Fig. 2-20: The cross-section view of the plating cell

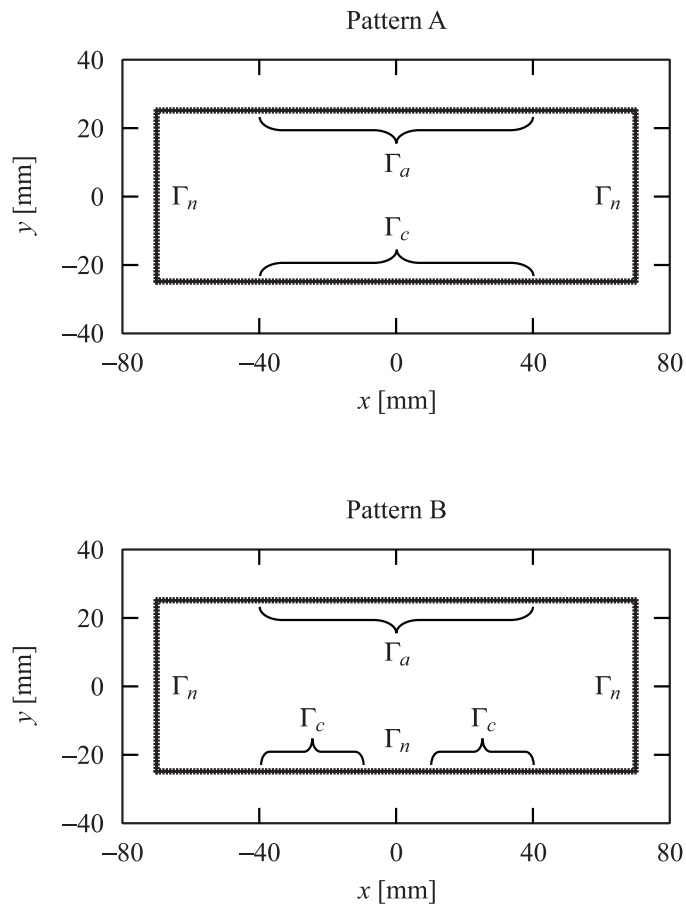


Fig. 2-21: The boundary element discretizations for the experimental setup

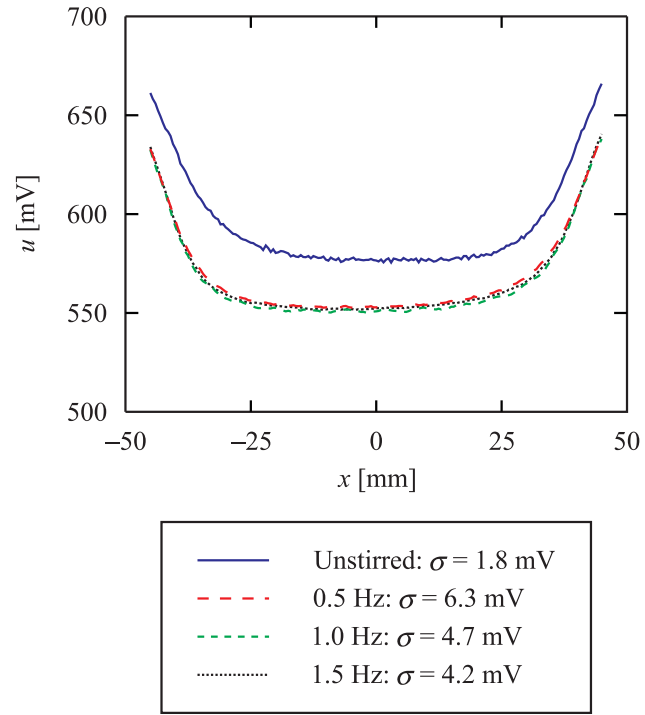


Fig. 2-22: The measured data of the electric potentials in the cell of the masking pattern A

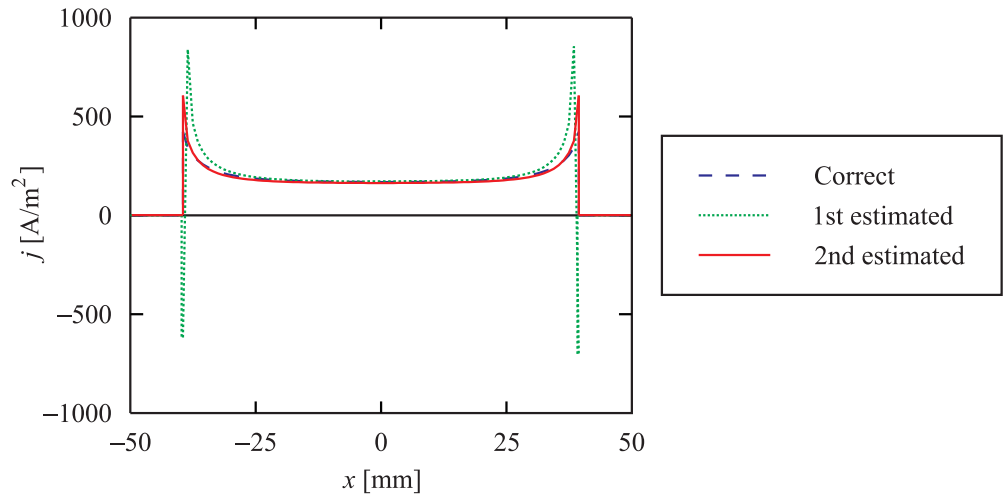


Fig. 2-23: The inverse analysis solutions for 1.0 Hz of the masking pattern A

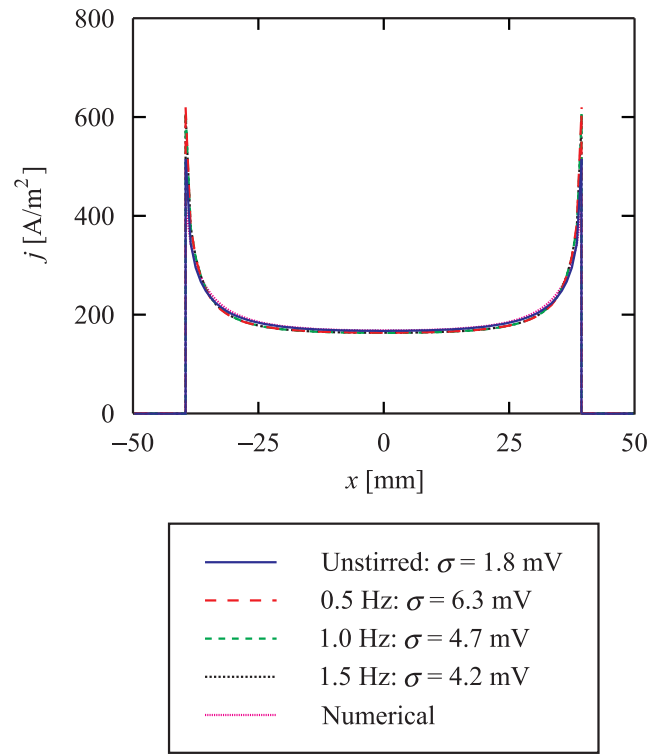


Fig. 2-24: The estimated current densities on 2nd phase of the masking pattern A

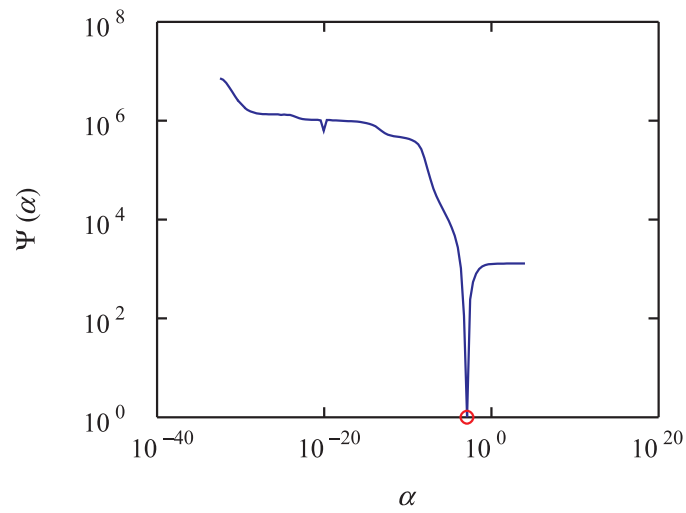


Fig. 2-25: Kullback-Leibler divergence for 1.0 Hz of the masking pattern A

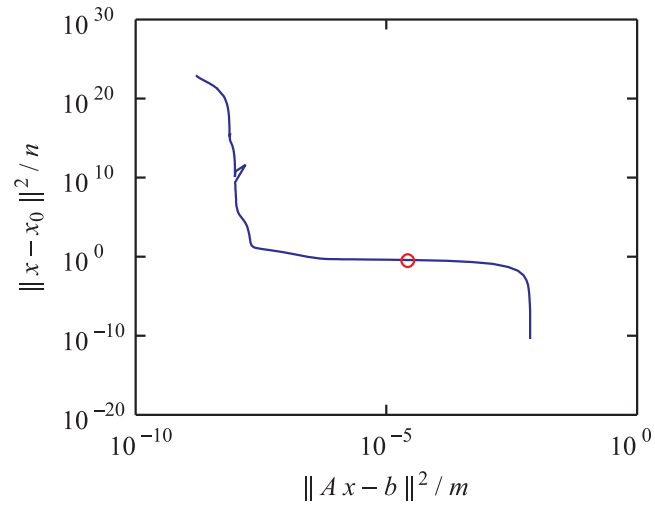


Fig. 2-26: L-curve for 1.0 Hz of the masking pattern A

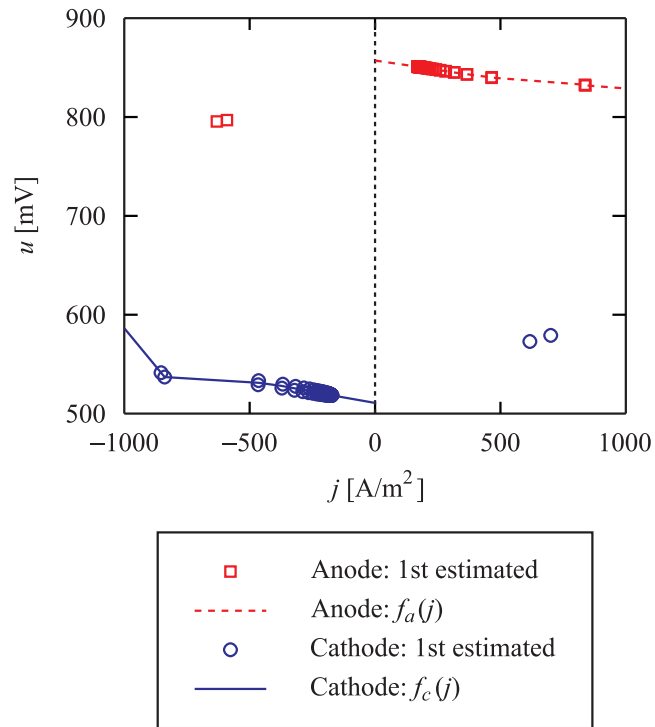


Fig. 2-27: The estimated polarization curves for 1.0 Hz of the masking pattern A

$$\begin{cases} f_a(j) = 8.50 \times 10^2 + 0.119j - 1.22 \times 10^{-3}j^2 + 4.79 \times 10^{-6}j^3 - 1.01 \times 10^{-8}j^4 \\ \quad + 1.10 \times 10^{-11}j^5 - 4.70 \times 10^{-15}j^6 \\ f_c(j) = 4.85 \times 10^2 - 0.437j - 2.28 \times 10^{-3}j^2 - 6.34 \times 10^{-6}j^3 - 8.29 \times 10^{-9}j^4 - 3.98 \times 10^{-12}j^5 \end{cases}$$

b. マスキングパターン B の場合

マスキングパターン A の場合と同様に印加電流 I を 0.6 A（平均電流密度 200 A/m²）とし、めっき槽内の電位を測定した結果を図 2-28 に示す。電位の基準をカソード銅板とし、無攪拌の場合と攪拌速度 0.5, 1.0, 1.5 Hz の場合を測定した。

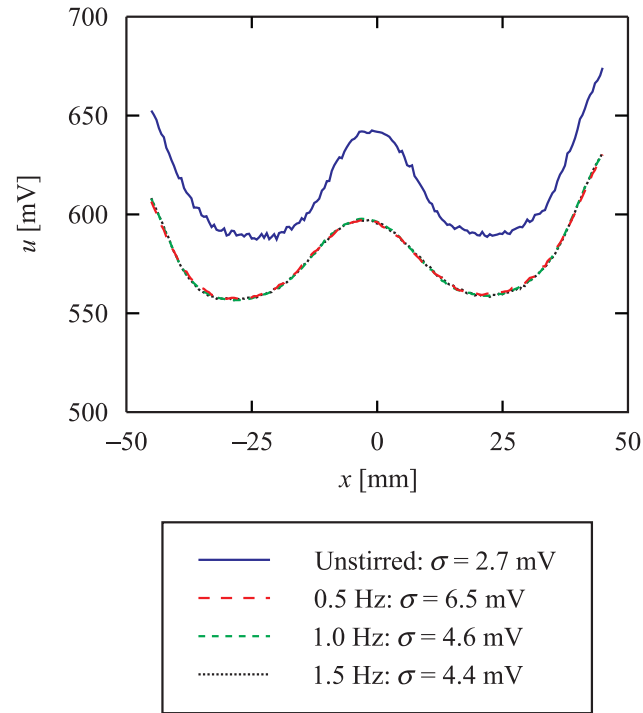


Fig. 2-28: The measured data of the electric potentials in the cell of the masking pattern B

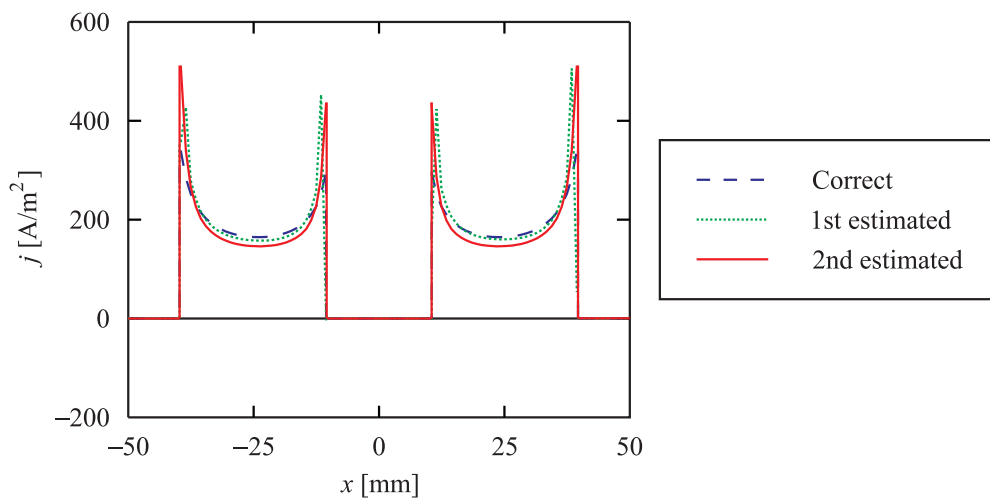


Fig. 2-29: The inverse analysis solutions for 1.0 Hz of the masking pattern B

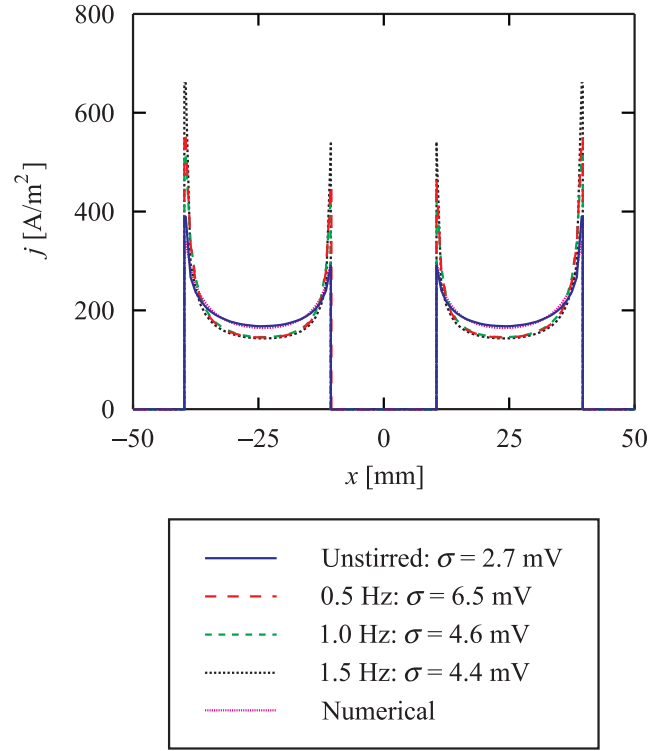


Fig. 2-30: The estimated current densities on 2nd phase of the masking pattern B

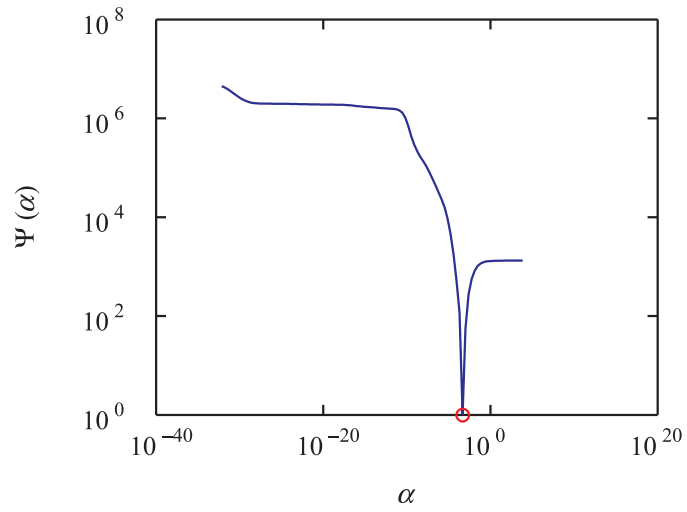


Fig. 2-31: Kullback-Leibler divergence for 1.0 Hz of the masking pattern B

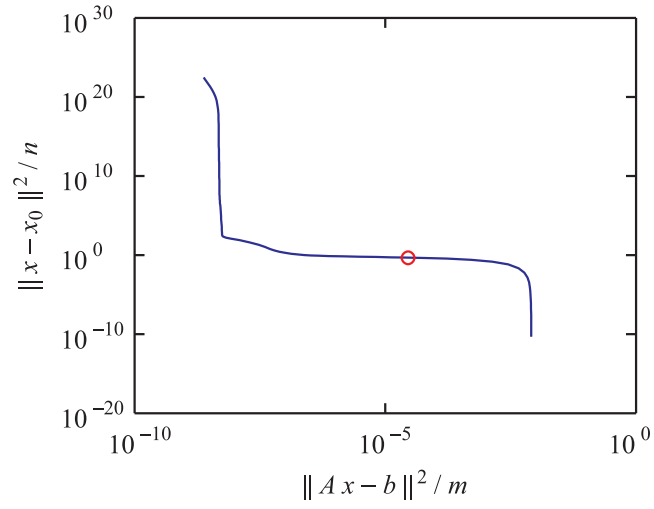


Fig. 2-32: L-curve for 1.0 Hz of the masking pattern B

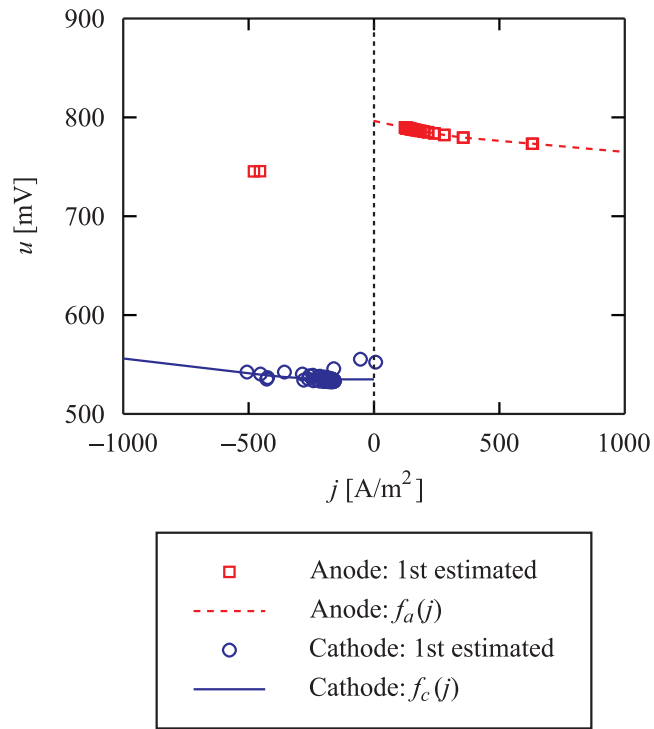


Fig. 2-33: The estimated polarization curves for 1.0 Hz of the masking pattern B

$$\begin{cases} f_a(j) = 8.12 \times 10^2 - 0.397j + 2.89 \times 10^{-3}j^2 - 1.22 \times 10^{-5}j^3 + 2.81 \times 10^{-8}j^4 \\ \quad - 3.24 \times 10^{-11}j^5 + 1.47 \times 10^{-14}j^6 \\ f_c(j) = 5.35 \times 10^2 + 8.64 \times 10^{-3}j + 4.10 \times 10^{-5}j^2 \end{cases}$$

図 2-33 は攪拌速度が 1.0 Hz のときの本手法によって推定された分極曲線である。特にカソードについては、マスキングのパターンとは無関係に、電流密度 - 電位のデータ点群がある曲線上に載ることが確認できる。したがって、マスキングパターン A と同様に、電流密度が逆流している点は無視し、多項式近似して推定電場の再計算を行った。図 2-30 は本手法によるカソード表面上の電流密度の最終的な推定結果である。

以上の結果より、本手法はマスキングパターンなどの境界条件が異なる場合でも同様の分極曲線を推定し、これらめっき表面上の電流密度分布を推定できることが示された。

2.8 結言

本研究では LSI 製造工程における電気めっきを対象に、めっきの質を決定するウェハ面上の電流密度を監視する手法として、めっき槽内の電位を逆解析することによって、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した。本手法ではめっき槽内の電位が Laplace 方程式を満たし、その境界条件がめっき表面上の電流密度によって決まることに注目した。これにより、複数の測定位置で測定した電解液の電位の情報を逆解析し、めっき表面上の電流密度を推定する。

めっき槽内の電位は細管を挿入して測定する。細管で拾い上げた電解液を参照電極に通し、参照電極とアノードあるいはカソードの電位差から細管先端位置の電位が得られる。さらに、電位測定用の細管を攪拌パドルに付けることで広範囲の電位を効率良く測定できる。

本研究で得られた結論を以下に示す。

- (1) LSI 製造工程における電気銅めっきを対象として、測定しためっき槽内の電位を逆解析することで、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した。本手法はめっきの条件に応じてリアルタイムで適用でき、得られた電流密度を用いて制御にフィードバックすることができる。
- (2) 電場解析に有限要素法および境界要素法を用いることでアノードおよびカソードに流入出する電流密度とめっき槽内で測定される電位の関係を直接表す観測方程式を導出した。
- (3) 本逆解析手法は Tikhonov の適切化法を用いた概値推定とそこから得られる分極曲線による推定電流密度の修正からなる。Tikhonov の適切化パラメータは Kullback-Leibler の情報量を最小にするものを用いた。また、分極曲線の推定には多項式近似による回帰分析を用いた。
- (4) 数値シミュレーションによる数値実験と電気銅めっき装置による検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。
 - (i) 本手法を検証するための数値シミュレーションによる数値実験では、銅-硫酸銅の分極曲線をアノードおよびカソードの分極曲線の正解のデータとして用いた。また、本数値実験では数理モデルの計算によって得られる順解析結果にランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。本手法によって推定された電流密度分布を正解の電流密度分布と比較することで本手法の有効性を示した。
 - (ii) 電気銅めっき装置による検証実験では、カソード側をビニルテープでマスキングし、様々な電流密度分布を形成させた。また、攪拌パドルの攪拌速度を変え、それぞれの条件下でめっき槽内の電位を測定した。測定した電解液の電位分布のデータを用い、本手法を適用することでカソード表面上の電流密度分布を推定した。

- (iii) 検証実験において、カソード表面上の電流密度分布の推定結果を従来の推定手法である標本の分極曲線を用いた数値解析結果と比較した。これにより、本手法による推定結果と従来の数値解析結果がよく合うことを確認し、本手法の有効性を示した。

以上の結果より、本手法は実際の LSI ウェハの電気めっきに対して十分に適用できると考えられる。

2.9 付録

2.9.1 制約付き Tikhonov の適切化法の解

a. 制約無し Tikhonov の適切化法（通常の Tikhonov の適切化法）の解

観測方程式が次式で与えられているとする。

$$\mathbf{b} = A \mathbf{x} \quad (2.40)$$

既知量 $\mathbf{b}$ の次元を m 、未知量 $\mathbf{x}$ の次元を n とする。このとき、 A は $m \times n$ 行列となる。

Tikhonov の適切化法は目的関数

$$\Pi(\mathbf{x}) = \|A \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_o\|^2 \quad (2.41)$$

を最小にする $\mathbf{x}$ を推定解とする。ここで、 α は Tikhonov の適切化パラメータ、 $\mathbf{x}_o$ は参照解である。観測行列 A を特異値分解する。

$$A = U S V^T \quad (2.42)$$

各変数を以下のように定義する。

$$\mathbf{c} = U^T \mathbf{b} \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{b} = U \mathbf{c} \quad (2.43)$$

$$\mathbf{y} = V^T \mathbf{x} \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{x} = V \mathbf{y} \quad (2.44)$$

$$\mathbf{y}_o = V^T \mathbf{x}_o \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{x}_o = V \mathbf{y}_o \quad (2.45)$$

目的関数は

$$\begin{aligned} \Pi &= (A \mathbf{x} - \mathbf{b})^T (A \mathbf{x} - \mathbf{b}) + \alpha (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \\ &= \mathbf{x}^T A^T A \mathbf{x} - 2 \mathbf{x}^T A^T \mathbf{b} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} + \alpha (\mathbf{x}^T \mathbf{x} - 2 \mathbf{x}^T \mathbf{x}_o + \mathbf{x}_o^T \mathbf{x}_o) \\ &= \mathbf{x}^T V S^T U^T U S V^T \mathbf{x} - 2 \mathbf{x}^T V S^T U^T \mathbf{b} + \mathbf{b}^T U U^T \mathbf{b} + \alpha (\mathbf{x}^T V V^T \mathbf{x} - 2 \mathbf{x}^T V V^T \mathbf{x}_o + \mathbf{x}_o^T V V^T \mathbf{x}_o) \\ &= \mathbf{y}^T S^T S \mathbf{y} - 2 \mathbf{y}^T S^T \mathbf{c} + \mathbf{c}^T \mathbf{c} + \alpha (\mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2 \mathbf{y}^T \mathbf{y}_o + \mathbf{y}_o^T \mathbf{y}_o) \\ &= (S \mathbf{y} - \mathbf{c})^T (S \mathbf{y} - \mathbf{c}) + \alpha (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o)^T (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o) \end{aligned} \quad (2.46)$$

したがって、 $\mathbf{y}$ の推定解は

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{y}^T} \right|_{\mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}} &= 0 \\ 2 S^T S \hat{\mathbf{y}} - 2 S^T \mathbf{c} + \alpha (2 \hat{\mathbf{y}} - 2 \mathbf{y}_o) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S^T S \hat{\mathbf{y}} - S^T \mathbf{c} + \alpha (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_o) &= 0 \\
 S^T S \hat{\mathbf{y}} + \alpha \hat{\mathbf{y}} &= S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o \\
 (S^T S + \alpha I_n) \hat{\mathbf{y}} &= S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o \\
 \hat{\mathbf{y}} &= (S^T S + \alpha I_n)^{-1} (S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o)
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

となる。また、推定既知量 $\hat{\mathbf{c}}$ は

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{b}} &= A \hat{\mathbf{x}} \\
 \hat{\mathbf{b}} &= U S V^T \hat{\mathbf{x}} \\
 U^T \hat{\mathbf{b}} &= S V^T \hat{\mathbf{x}} \\
 \hat{\mathbf{c}} &= S \hat{\mathbf{y}} \\
 &= S (S^T S + \alpha I_n)^{-1} (S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o) \\
 &= S (S^T S + \alpha I_n)^{-1} S^T \mathbf{c} + \alpha S (S^T S + \alpha I_n)^{-1} \mathbf{y}_o \\
 &= F \mathbf{c} + \mathbf{g}
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 F &= S (S^T S + \alpha I_n)^{-1} S^T \\
 \mathbf{g} &= \alpha S (S^T S + \alpha I_n)^{-1} \mathbf{y}_o
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

とおいた。

b. 制約付き Tikhonov の適切化法の解

観測方程式が

$$\mathbf{b} = A \mathbf{x} \tag{2.50}$$

制約条件が

$$\mathbf{d} = C \mathbf{x} \tag{2.51}$$

で与えられているとする。既知量 $\mathbf{b}$ の次元を m 、未知量 $\mathbf{x}$ の次元を n 、制約条件の数 ($\mathbf{d}$ の次元) を l とする。このとき、 A は $m \times n$ 行列、 C は $l \times n$ 行列となる。

Tikhonov の適切化法は目的関数

$$\Pi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \|A \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_o\|^2 - 2 (C \mathbf{x} - \mathbf{d})^T \boldsymbol{\lambda} \tag{2.52}$$

を最小にする $\mathbf{x}$ を推定解とする。ここで、 α は Tikhonov の適切化パラメータ、 $\mathbf{x}_o$ は参照解、 $\boldsymbol{\lambda}$ は Lagrange の未定乗数である。

観測行列 A を特異値分解する。

$$A = U S V^T \tag{2.53}$$

各変数を以下のように定義する.

$$\mathbf{c} = U^T \mathbf{b} \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{b} = U \mathbf{c} \quad (2.54)$$

$$\mathbf{y} = V^T \mathbf{x} \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{x} = V \mathbf{y} \quad (2.55)$$

$$\mathbf{y}_o = V^T \mathbf{x}_o \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{x}_o = V \mathbf{y}_o \quad (2.56)$$

$$D = CV \quad \leftrightarrow \quad C = DV^T \quad (2.57)$$

目的関数は

$$\begin{aligned} \Pi &= (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) + \alpha (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) - 2 (\mathbf{C}\mathbf{x} - \mathbf{d})^T \boldsymbol{\lambda} \\ &= (\mathbf{S}\mathbf{y} - \mathbf{c})^T (\mathbf{S}\mathbf{y} - \mathbf{c}) + \alpha (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o)^T (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o) - 2 (\mathbf{C}V V^T \mathbf{x} - \mathbf{d})^T \boldsymbol{\lambda} \\ &= (\mathbf{S}\mathbf{y} - \mathbf{c})^T (\mathbf{S}\mathbf{y} - \mathbf{c}) + \alpha (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o)^T (\mathbf{y} - \mathbf{y}_o) - 2 (\mathbf{D}\mathbf{y} - \mathbf{d})^T \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \quad (2.58)$$

したがって, $\mathbf{y}$ の推定解は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{y}^T} \Big|_{\mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}} &= 0 \\ 2 \mathbf{S}^T \mathbf{S} \hat{\mathbf{y}} - 2 \mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha (2 \hat{\mathbf{y}} - 2 \mathbf{y}_o) - 2 \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} &= 0 \\ \mathbf{S}^T \mathbf{S} \hat{\mathbf{y}} - \mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}_o) - \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} &= 0 \\ \mathbf{S}^T \mathbf{S} \hat{\mathbf{y}} + \alpha \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o + \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} \\ (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n) \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o + \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} \\ \hat{\mathbf{y}} &= (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} (\mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o + \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda}) \\ \hat{\mathbf{y}} &= (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} (\mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o) + (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} \\ \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{z} + (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \quad (2.59)$$

ここで

$$\mathbf{z} = (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} (\mathbf{S}^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o) \quad (2.60)$$

とおいた.

一方,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \Big|_{\mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}} &= 0 \\ -2 (\mathbf{D} \hat{\mathbf{y}} - \mathbf{d}) &= 0 \\ \mathbf{D} \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{d} \\ \mathbf{D} \{ \mathbf{z} + (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} \} &= \mathbf{d} \\ \mathbf{D} \mathbf{z} + \mathbf{D} (\mathbf{S}^T \mathbf{S} + \alpha \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{d} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D (S^T S + \alpha I_n)^{-1} D^T \lambda &= \mathbf{d} - D \mathbf{z} \\
 H \lambda &= \mathbf{d} - D \mathbf{z} \\
 \lambda &= H^{-1} (\mathbf{d} - D \mathbf{z})
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

ここで

$$H = D (S^T S + \alpha I_n)^{-1} D^T \tag{2.62}$$

とおいた。したがって

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{z} + (S^T S + \alpha I_n)^{-1} D^T H^{-1} (\mathbf{d} - D \mathbf{z}) \\
 &= \mathbf{z} + J (\mathbf{d} - D \mathbf{z}) \\
 &= \mathbf{z} + J \mathbf{d} - J D \mathbf{z} \\
 &= \mathbf{z} - J D \mathbf{z} + J \mathbf{d} \\
 &= (I_n - J D) \mathbf{z} + J \mathbf{d} \\
 &= (I_n - J D) (S^T S + \alpha I_n)^{-1} (S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o) + J \mathbf{d} \\
 &= K (S^T \mathbf{c} + \alpha \mathbf{y}_o) + J \mathbf{d} \\
 &= K S^T \mathbf{c} + \alpha K \mathbf{y}_o + J \mathbf{d}
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

となる。ここで

$$J = (S^T S + \alpha I_n)^{-1} D^T H^{-1} \tag{2.64}$$

$$K = (I_n - J D) (S^T S + \alpha I_n)^{-1} \tag{2.65}$$

とおいた。
さらに

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{c}} &= S \hat{\mathbf{y}} \\
 &= S (K S^T \mathbf{c} + \alpha K \mathbf{y}_o + J \mathbf{d}) \\
 &= S K S^T \mathbf{c} + \alpha S K \mathbf{y}_o + S J \mathbf{d} \\
 &= F \mathbf{c} + \mathbf{g}
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
 F &= S K S^T \\
 \mathbf{g} &= \alpha S K \mathbf{y}_o + S J \mathbf{d}
 \end{aligned} \tag{2.67}$$

とおいた。

2.9.2 Tikhonov の適切化法に対する Kullback-Leibler の情報量

まず, c_i を測定値, $\tilde{c}_i$ を真の値, ω_i を測定誤差とし, 測定誤差 ω_i が平均 0, 分散 σ^2 の Gauss 分布をなすと仮定する.

$$c_i = \tilde{c}_i + \omega_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} P(\omega_i) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\omega_i^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(c_i - \tilde{c}_i)^2}{2\sigma^2}\right\} \end{aligned} \quad (2.69)$$

また, $\hat{c}_i$ を $\tilde{c}_i$ の推定値, ϵ_i を推定値 $\hat{c}_i$ の測定値 c_i に対する誤差 (推定誤差) とし, 推定誤差 ϵ_i が平均 0, 分散 $\hat{\sigma}^2$ の Gauss 分布をなすと仮定する.

$$c_i = \hat{c}_i + \epsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}(\epsilon_i) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\hat{\sigma}^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}} \exp\left\{-\frac{(c_i - \hat{c}_i)^2}{2\hat{\sigma}^2}\right\} \end{aligned} \quad (2.71)$$

ここで, 測定誤差 ω_i の確率分布と推定誤差 ϵ_i の確率分布のずれを表す量として, 以下の Kullback-Leibler の情報量をとる.

$$\text{KLD}(P, \hat{P}) = \sum_{i=1}^m \int_{-\infty}^{\infty} P(c_i) \log \frac{P(c_i)}{\hat{P}(c_i)} dc_i \quad (2.72)$$

式 (2.72) に式 (2.69)(2.71) を代入すると

$$\begin{aligned} 2\text{KLD}(P, \hat{P}) &= \frac{1}{\hat{\sigma}^2} \sum_{i=1}^m (\hat{c}_i - \tilde{c}_i)^2 + m \left(\frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - 1 - \log \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} \right) \\ &= \frac{\|\hat{\mathbf{c}} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2}{\hat{\sigma}^2} + m \left(\frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - 1 - \log \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} \right) \end{aligned} \quad (2.73)$$

となる.

a. 制約無し Tikhonov の適切化法への応用

式 (2.73) の第 1 項は

$$\begin{aligned} \|\hat{\mathbf{c}} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2 &= \|F\mathbf{c} + \mathbf{g} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2 \\ &= \|F(\tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}) + \mathbf{g} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2 \\ &= \|F\tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2 \\ &= \|F\tilde{\mathbf{c}} - \tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g}\|^2 \\ &= \|(F - I_m)\tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g}\|^2 \\ &= \|\mathbf{u}\|^2 \\ &= \mathbf{u}^T \mathbf{u} \end{aligned} \quad (2.74)$$

ここで

$$\mathbf{u} = (F - I_m) \tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g} \quad (2.75)$$

とおいた.

測定値と推定値の残差 R は

$$\begin{aligned} R &= \|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}\|^2 \\ &= \|(F\mathbf{c} + \mathbf{g}) - \mathbf{c}\|^2 \\ &= \|F\mathbf{c} - \mathbf{c} + \mathbf{g}\|^2 \\ &= \|F(\tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}) - (\tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}) + \mathbf{g}\|^2 \\ &= \|F\tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} - \tilde{\mathbf{c}} - \boldsymbol{\omega} + \mathbf{g}\|^2 \\ &= \|(F - I_m) \tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g} - \boldsymbol{\omega}\|^2 \\ &= \|\mathbf{u} - \boldsymbol{\omega}\|^2 \\ &= (\mathbf{u} - \boldsymbol{\omega})^T (\mathbf{u} - \boldsymbol{\omega}) \\ &= \mathbf{u}^T \mathbf{u} - 2 \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{u} + \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\mathbf{u}^T \mathbf{u} = R + 2 \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{u} - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} \quad (2.77)$$

ここで

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{u} &= \boldsymbol{\omega}^T \{ (F - I_m) \tilde{\mathbf{c}} + F\boldsymbol{\omega} + \mathbf{g} \} \\ &= \boldsymbol{\omega}^T (F - I_m) \tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}^T F\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{g} \\ &= \boldsymbol{\omega}^T F\tilde{\mathbf{c}} - \boldsymbol{\omega}^T \tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}^T F\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{g} \end{aligned} \quad (2.78)$$

よって

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^T \mathbf{u} &= R + 2 (\boldsymbol{\omega}^T F\tilde{\mathbf{c}} - \boldsymbol{\omega}^T \tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}^T F\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{g}) - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} \\ &= R + 2 \boldsymbol{\omega}^T F\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} + 2 (\boldsymbol{\omega}^T F\tilde{\mathbf{c}} - \boldsymbol{\omega}^T \tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{g}) \end{aligned} \quad (2.79)$$

したがって, $\tilde{\mathbf{c}}$ と $\boldsymbol{\omega}$ が互いに独立で, $\boldsymbol{\omega}$ も各成分が独立であるとする, 式 (2.73) の第 1 項は平均の意味で次式となる.

$$\begin{aligned} \|\hat{\mathbf{c}} - \tilde{\mathbf{c}}\|^2 &= \mathbf{u}^T \mathbf{u} \\ &= R + 2 \boldsymbol{\omega}^T F\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} + 2 (\boldsymbol{\omega}^T F\tilde{\mathbf{c}} - \boldsymbol{\omega}^T \tilde{\mathbf{c}} + \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{g}) \\ &\sim R + 2 \operatorname{tr}(F) \sigma^2 - m\sigma^2 \end{aligned} \quad (2.80)$$

Kullback-Leibler の情報量は

$$2\text{KLD} \sim \frac{R + 2 \operatorname{tr}(F) \sigma^2 - m\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} + m \left(\frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - 1 - \log \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{R}{\hat{\sigma}^2} + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - m \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} + m \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - m - m \log \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} \\
&= \frac{R}{\hat{\sigma}^2} + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - m - m \log \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} \\
&= \frac{R}{\hat{\sigma}^2} + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} - m - m \log \sigma^2 + m \log \hat{\sigma}^2 \\
&= m \log \hat{\sigma}^2 + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{\hat{\sigma}^2} + \frac{R}{\hat{\sigma}^2} - m - m \log \sigma^2
\end{aligned} \tag{2.81}$$

となる．推定誤差の分散 $\hat{\sigma}^2$ として，その最尤推定値を用いると

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{R}{m} \tag{2.82}$$

であるから，

$$\begin{aligned}
2\text{KLD} &\sim m \log \frac{R}{m} + 2m \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} + m - m - m \log \sigma^2 \\
&= m \log R - m \log m + 2m \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} - m \log \sigma^2 \\
&= m \log R + 2m \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} - m \log m \sigma^2 \\
&= m \left\{ \log R + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} - \log m \sigma^2 \right\} \\
\text{KLD} &= \frac{m}{2} \left\{ \log R + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} - \log m \sigma^2 \right\}
\end{aligned} \tag{2.83}$$

となる．上式第 3 項は α に対して定数であるから，実用上は第 1 項と第 2 項で構成される目的関数

$$\Psi(\alpha) = \log R + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} \tag{2.84}$$

を最小にする α が Kullback-Leibler の情報量を最小にする推定モデルとなる．測定誤差の分散 σ^2 は実験（不偏分散量）によって求める．

なお，行列 F の対角和は

$$\operatorname{tr}(F) = \operatorname{tr}(S(S^T S + \alpha I_n)^{-1} S^T) = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \frac{\lambda_i^2}{\lambda_i^2 + \alpha} \tag{2.85}$$

となる．したがって， α の増加に伴い，式 (2.84) の残差二乗和である第 1 項は単調増加し，第 2 項は反比例的に減少する．これは， $\Psi(\alpha)$ に対して α の折衷値が存在することを意味する．

b. 制約付き Tikhonov の適切化法への応用

式 (2.66) は制約条件が無い場合の式 (2.48) と同じ形をしている．したがって，Kullback-Leibler の情報量も同じ形で表せる．すなわち

$$\text{KLD} = \frac{m}{2} \left\{ \log R + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} - \log m \sigma^2 \right\} \tag{2.86}$$

$$\Psi(\alpha) = \log R + 2 \operatorname{tr}(F) \frac{\sigma^2}{R} \quad (2.87)$$

$$\operatorname{tr}(F) = \operatorname{tr}(S K S^T) = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \lambda_i^2 K_{ii} \quad (2.88)$$

参考文献

- [1] Aoki, S., Amaya, K., Takazawa, H. and Miyasaka, M., Boundary Element Simulation of Electroplating on Silicon Wafer, *The Journal of the Surface Finishing Society of Japan*, Vol.51, No.4, (2000), pp.425–430.
- [2] Abe, K., Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Proceedings of the 13th Computational Mechanics Conference*, No.00-17, (2000), pp.315–316.
- [3] Abe, K., Amaya, K. and Aoki, S., Monitoring of Electroplating Thickness on Silicon Wafer using Inverse Analysis, *Proceedings of the 14th Computational Mechanics Conference*, No.01-10, (2001), pp.195–196.
- [4] Aoki, S., Amaya, K., Abe, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.68, No.666, (2002), pp.133–138.
- [5] Koderu, T., Okubo, T. and Kondo, K., Uniformity Formation of Pannel Plating by using Convexity-Modification of Cathode Holder, *Journal of Japan Institute of Electronics Packaging*, Vol.7, No.2, (2004), pp.141–146.
- [6] Okubo, T., Koderu, T. and Kondo, K., Uniformity of Patterned Copper Electrodeposit Thickness by using Auxiliary Electrode -Placement of Electrodes at the Edges of the Pattern, *Journal of Japan Institute of Electronics Packaging*, Vol.7, No.4, (2004), pp.322–327.
- [7] Satake, T. and Noji, N., Development of an Electron Beam Inspection System (EBeye), 1st Report, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.15–20.
- [8] Hodai, M., Nakada, T. and Kanda, H., Cu Interconnect Plating System, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.30–33.
- [9] Kuriyama, F., Minami, Y. and Kimura, M., Bump Plating System, *Ebara Engineering Review*, No.207, (2005), pp.34–38.
- [10] Terao, K., Karimata, T. and Sobukawa, H., Development of an Electron Beam Inspection System (EBeye), 2nd Report, *Ebara Engineering Review*, No.211, (2006), pp.21–27.
- [11] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Development of a Plating Simulation Method for 3-Dimensional Models, *Proceedings of the 2006 Annual Meeting of JSME/MMD*, Vol.06, No.4, (2006), pp.409–410.
- [12] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Optimization of the Shape of Plating Bath to Planarize Thickness of the Distribution in Semiconductor Plating, *Proceedings of the 2006 JSME Millennium* Vol.06, No.6, (2006), pp.105–106.

- [13] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Measurement Method of Plating Current for LSI Wafer by using Magnetic Sensors, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.73, No.730, (2007), pp.709–715.
- [14] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Non Destructive Measurement of LSI Electroplating Rate using Magnetic Sensor, *Proceedings of the 20th Computational Mechanics Conference*, No.07-20, (2007), pp.447–448.
- [15] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Nondestructive Measurement of LSI Electroplating Current Distribution using Magnetic Sensors, *Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics and The 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, No.08-08, (2008), No.a506.
- [16] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Experimental Verification of Nondestructive Measurement of Copper Electroplating Current Distribution using Magnetic Sensors, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.74, No.740, (2008), pp.491–498.
- [17] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Estimation Method of Copper Electroplating Current Density Distribution using Measurement Data of Electric Potentials in Plating Bath, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.74, No.745, (2008), pp.1204–1211.
- [18] Kishimoto, Y., Amaya, K. and Hayabusa, K., An Estimation Method of Copper Electroplating Current Densities by Inverse Analysis of Electric Potentials in Cells and Its Experimental Verification, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.75, No.757, (2009), pp.1239–1246.
- [19] Kishimoto, Y., Amaya, K., Hayabusa, K. and Onishi, Y., Estimation of Electroplating Current Densities on LSI Wafer using Measurement Information of Electric Potentials in Cells, *Proceedings of the 22nd Computational Mechanics Conference*, No.09-22, (2009), No.802.
- [20] Kishimoto, Y., Amaya, K. and Hayabusa, K., An Estimation Method of Electroplating Current Densities in LSI Fabrication Technology by Inverse Analysis of Electric Potentials in Cells, *Proceedings of the 8th IEEE Conference on Sensors*, No.09-08, (2009), pp.53–56.
- [21] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Development of a Real-Time Monitoring Method of Electroplating Current Densities in LSI Fabrication by Inverse Analysis of Electric Potentials, *Proceedings of Asian Pacific Conference for Materials and Mechanics 2009*, No.09-01, (2009), No.a236.
- [22] Kubo, S., *Inverse problem*, (1992), Baifukan.
- [23] The Japan Society of Mechanical Engineers ed., *Computer Analysis of Inverse Problems*, (1991), Corona Publishing.
- [24] Murakami, A., Tosaka, N., Hori, M. and Suzuki, M., *Inverse Analysis with FEM/BEM -Application of the Kalman Filter and the Equivalent Inclusion Method-*, (2002), Corona Publishing.
- [25] Osaka, T., Oyama, N. and Ohsaka, T., *Electrochemical Method -Manual of Fundamental Measurements*, (1989), Kodansha.

-
- [26] Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., *Boundary Element Analysis on Corrosion Problems*, (1998), Shokabo.
- [27] Osakai, T., Kano, K. and Kuwabata, S., *Basic Electrochemistry*, (2000), Kagaku-Dojin.
- [28] Haruyama, S., *Electrochemistry for Surface Engineers*, (2001), Maruzen.
- [29] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Basic Edition*, (2002), Maruzen.
- [30] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Practice Edition*, (2002), Maruzen.
- [31] Hansen, P.C., The Truncated SVD as a Method for Regularization, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.27, No.4, (1987), pp.534–553.
- [32] Hansen, P.C., Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve, *Society for Industrial and Applied Mathematics Review*, Vol.34, No.4, (1992), pp.561–580.
- [33] Belge, M., Kilmer, M. and Miller, E.L., Simultaneous Multiple Regularization Parameter Selection by Means of the L-Hypersurface with Applications to Linear Inverse Problems Posed in the Wavelet Transform Domain, *Bayesian Inference for Inverse Problems*, Vol.3459, (1998), pp.328–336.
- [34] Oraintara, S., Karl, W.C., Castanon, D.A. and Nguyen, T.Q., A Method for Choosing the Regularization Parameter in Generalized Tikhonov Regularized Linear Inverse Problems, *Proceedings of the 2000 IEEE International Conference on Image Processing*, Vol.1, (2000), pp.93–96.
- [35] Kullback, S. and Leibler, R.A., On Information and Sufficiency, *The Annals of Mathematical Statistics*, Vol.22, No.1, (1951), pp. 79–86.
- [36] Nelder, J.A. and Mead, R., A Simplex Method for Function Minimization, *Computer Journal*, Vol.7, No.4, (1965), pp. 308–313.
- [37] Arimoto, S., *Kalman Filter*, (1977), Sangyo Tosho.
- [38] Gill, P.E., Murray, W. and Wright, M.H., *Practical Optimization*, (1981), pp.155–203, Academic Press.
- [39] Burnham, K.P. and Anderson, D.R. *Model Selection and Multimodel Inference: A Practical Information-Theoretic Approach*, (2002), pp.49–97, Springer.
- [40] Miyasaka, M., Amaya, K. and Aoki, S., Development of Axi-symmetric BEM for Corrosion Problem Analysis and its Experimental Verification, *Ebara Engineering Review*, No.171, (1996), pp.3–8.

第3章 静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法

3.1 緒言

現在、構造物中の鉄筋などの腐食状態を調べる手段やき裂の有無を調べる非破壊検査を行う手段に静磁場解析が盛んに用いられている。また、生物学の分野では脳内の微小な電気信号により生じる磁場を解析し、その活動を研究することにも利用され、静磁場解析は工学に限らず非常に重要である [1]-[19]。

静電場における電流が誘起する静磁場を解析する場合、有限要素法や境界要素法など種々の数値解析法が利用できる。ベクトルポテンシャルを導入した境界要素法は、領域内部で要素分割を必要とせず、解析精度も高いため有用である。この方法では、まず有限要素法や境界要素法などによる静電場解析を行い、領域内の電流密度分布を求め、次に電流密度をソースとし、Biot-Savart の法則によって静磁場解析を行う。しかし、静磁場解析において、電流密度を領域内の多数の点で求め、さらに数値領域積分して計算を行うため、計算精度および計算量の点で様々な問題がある。開領域解析においては積分領域が膨大になるため、この問題は特に顕著になる [20]-[22]。

そこで、本研究では静電場が Laplace 方程式に支配される場合に対して、ソース電流の領域積分を必要としない高精度かつ効率的な静磁場の境界要素解析法を開発した [23]。まず、領域内の電流密度を電位に関する境界積分で表現できることを利用する [5], [20]。次に、静磁場の境界積分方程式の領域積分項を解析的に計算し、境界積分で表す。これらの操作により、磁束密度と境界の電位の関係を直接定式化することができ、数値計算における計算精度と計算量の問題を解決することができる [24]。

本論文ではまず、Laplace 電場に誘起される静磁場問題を示し、従来の静磁場解析法として、ベクトルポテンシャルを導入した境界要素法と Biot-Savart の法則について述べる [22]。次に本手法の詳細として、ソース電流の領域積分を電位に関する境界積分に変換する手順を述べ、それらを用いたベクトルポテンシャルと Biot-Savart の法則の定式化の手順について述べる。最後に従来法と本手法の比較のため、具体例として Laplace 方程式に支配される立方体の電場領域周辺のベクトルポテンシャルと磁束密度を従来法と本手法を用いて計算する。これによって、従来法と本手法による計算精度と計算量の比較を行い、本手法の有効性を確認する。

3.2 Laplace 電場に誘起される静磁場問題

静磁場および静電場の概略図を図 3-1 に示す。境界 Γ_M で囲まれた透磁率 μ である静磁場領域 Ω_M と、領域 Ω_M 内において境界 Γ_E で囲まれた電気伝導度 κ である静電場領域 Ω_E を考える。透磁率 μ は領域 Ω_M 内で、電気伝導度 κ は領域 Ω_E 内で場所によらず一定であるとする。磁束密度を求めるべき点 p の位置ベクトルを $\mathbf{p}$ 、ソース点 q の位置ベクトルを $\mathbf{q}$ とし、境界 Γ_M における外向き単位法線ベクトルを $\mathbf{n}_M$ 、境界 Γ_E における外向き単位法線ベクトルを $\mathbf{n}_E$ とする。また、全領域を Ω_∞ (境

界 Γ_∞) とする.

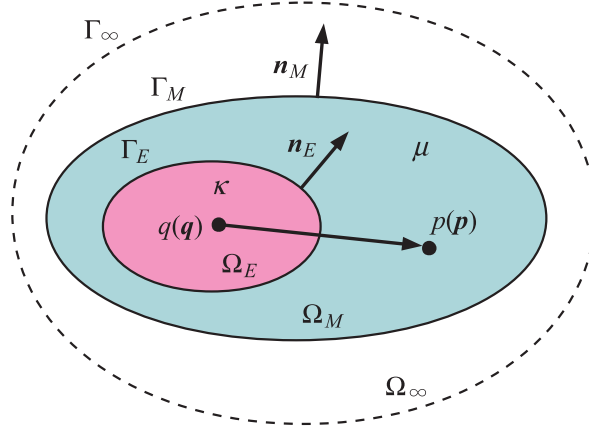


Fig. 3-1: The analytic area of the magnetostatic field induced by Laplace's electric field

3.2.1 静電場解析

静電場領域 Ω_E において, ソース点 q における電位 $u(q)$ と電流密度 $j(q)$ の間には, 次式が成り立つ.

$$j(q) = -\kappa \nabla_q u(q) \quad (3.1)$$

$$\nabla_q^2 u(q) = 0 \quad (3.2)$$

ここで, ∇_p は p 座標に関する微分であることを表すものとする.

式 (3.2) の両辺に Laplace 方程式の基本解

$$\phi^*(q, s) = \frac{1}{4\pi \|q - s\|} \quad (3.3)$$

$$\nabla_q^2 \phi^*(q, s) = \nabla_s^2 \phi^*(q, s) = -\delta(q - s) \quad (3.4)$$

を乗じ, 領域 Ω_E で領域積分すると

$$\int_{\Omega_E} \phi^*(q, s) \nabla_s^2 u(s) d\Omega(s) = 0 \quad (3.5)$$

となる. 上式 (3.5) の左辺を Green の定理を用いて変形することで

$$u(q) = \int_{\Gamma_E} \left(\phi^*(q, s) \frac{\partial u(s)}{\partial n_E} - u(s) \frac{\partial \phi^*(q, s)}{\partial n_E} \right) d\Gamma(s) \quad (3.6)$$

が得られる. ここで $\partial/\partial n_E$ は境界 Γ_E の外向き法線方向の微分を表す. したがって, 式 (3.1) および式 (3.6) より電流密度 $j(q)$ は

$$j(q) = \kappa \int_{\Gamma_E} \left(i^*(q, s) \frac{\partial u(s)}{\partial n_E} - j^*(q, s) u(s) \right) d\Gamma(s) \quad (3.7)$$

となる。ただし、ここで

$$\mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) = -\nabla_q \phi^*(\mathbf{q}, s) \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^*(\mathbf{q}, s) &= -\nabla_q \left(\frac{\partial \phi^*(\mathbf{q}, s)}{\partial n_E} \right) \\ &= -\nabla_q (\nabla_s \phi^*(\mathbf{q}, s) \cdot \mathbf{n}_E(s)) \\ &= \nabla_q (\nabla_q \phi^*(\mathbf{q}, s) \cdot \mathbf{n}_E(s)) \end{aligned} \quad (3.9)$$

とおいた。

3.3 従来の静磁場解析法

3.3.1 静磁場の支配方程式

静磁場領域 Ω_M において、点 $\mathbf{p}$ における磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{p})$ と電流密度 $\mathbf{j}(\mathbf{p})$ は次の Maxwell 方程式

$$\nabla_p \times \frac{\mathbf{B}(\mathbf{p})}{\mu} = \mathbf{j}(\mathbf{p}) \quad (3.10)$$

$$\nabla_p \cdot \mathbf{B}(\mathbf{p}) = 0 \quad (3.11)$$

を満たす。磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{p})$ に関して、式 (3.11) が成り立つことから、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ を導入して

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = \nabla_p \times \mathbf{A}(\mathbf{p}) \quad (3.12)$$

と表すことができる。したがって、透磁率 μ が領域 Ω_M 内で一定である場合、式 (3.10) および式 (3.12) より

$$\nabla_p \times (\nabla_p \times \mathbf{A}(\mathbf{p})) = \mu \mathbf{j}(\mathbf{p}) \quad (3.13)$$

となる。さらに、クーロンゲージ $\nabla_p \cdot \mathbf{A}(\mathbf{p}) = 0$ を仮定すると、式 (3.13) より静磁場の支配方程式として

$$\nabla_p^2 \mathbf{A}(\mathbf{p}) = -\mu \mathbf{j}(\mathbf{p}) \quad (3.14)$$

が得られる。

3.3.2 ベクトルポテンシャルの積分方程式

式 (3.14) から $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ を求めるために、静電場解析と同様に、Laplace 方程式の基本解 $\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ を導入する。

$$\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|} \quad (3.15)$$

$$\nabla_p^2 \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \nabla_q^2 \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \quad (3.16)$$

この基本解 $\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ を式 (3.14) の両辺に乗じて領域 Ω_M で領域積分すると、領域 Ω_E 外の電流密度が 0 であることから

$$\int_{\Omega_M} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \nabla_q^2 \mathbf{A}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = -\mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) \quad (3.17)$$

となる．上式 (3.17) の左辺を Green の定理を用いて変形すると，ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ の積分方程式として

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma_M} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{q})}{\partial n_M} - \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n_M} \right) d\Gamma(\mathbf{q}) + \mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) \quad (3.18)$$

が得られる．ここで $\partial/\partial n_M$ は境界 Γ_M の外向き法線方向の微分を表す．

式 (3.18) において，静磁場境界 Γ_M を無限遠（境界 Γ_∞ ）にとると，境界項である右辺第 1 項を無視できる．このとき，式 (3.12)，式 (3.15) および式 (3.18) より Biot-Savart の法則である次式が得られる．

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = \frac{\mu}{4\pi} \int_{\Omega_E} \frac{\mathbf{j}(\mathbf{q}) \times (\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} d\Omega(\mathbf{q}) \quad (3.19)$$

3.3.3 従来法の問題点

従来の静磁場解析法では境界要素法を用いる場合には式 (3.18) の右辺第 2 項，Biot-Savart の法則を用いる場合には式 (3.19) の右辺で表される領域積分を行わなければならない，非効率的である．また，領域 Ω_E 内のすべての電流密度を求めるために式 (3.7) で表される積分を行わなければならないため，電位に関する境界条件から直接磁束密度を計算することができない．そのため，数値積分を行う上で計算精度の低下および計算量の増加の要因となっている．

3.4 領域積分を必要としない静磁場解析法

本研究の手法では，式 (3.7) のように領域 Ω_E 内の電流密度を電位に関する境界積分で表現できることを利用し，領域積分に関する部分をあらかじめ解析的に計算することを利用する．これにより，ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ および磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{p})$ を境界積分のみで表すことができる．

3.4.1 本手法によるベクトルポテンシャルおよび磁束密度の導出

式 (3.7) を式 (3.18) にそのまま代入するだけでは領域積分が領域 Ω_E に依存してしまい，解析対象ごとに領域積分を行う必要がある．しかし， $\mathbf{j}(\mathbf{q}) = 0$ ($\mathbf{q} \notin \Omega_E$) であることから，式 (3.18) の右辺第 2 項において，次式のように領域積分を領域 Ω_E から全領域 Ω_∞ で行うように変形することができる．

$$\mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \mu \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) \quad (3.20)$$

上式 (3.20) に式 (3.7) を代入することで，ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ を求める際の領域積分を全領域 Ω_∞ の境界積分に変換することができる．すなわち

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) &= \mu \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \kappa \int_{\Gamma_E} \left(\mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) \frac{\partial u(s)}{\partial n_E} - \mathbf{j}^*(\mathbf{q}, s) u(s) \right) d\Gamma(s) d\Omega(\mathbf{q}) \\ &= \kappa \mu \int_{\Omega_\infty} \int_{\Gamma_E} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) \frac{\partial u(s)}{\partial n_E} - \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}^*(\mathbf{q}, s) u(s) \right) d\Gamma(s) d\Omega(\mathbf{q}) \end{aligned}$$

積分の順序を入れ換えると

$$\begin{aligned}
 \mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) j(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) &= \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \int_{\Omega_\infty} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) - u(s) \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) j^*(\mathbf{q}, s) \right) d\Omega(\mathbf{q}) d\Gamma(s) \\
 &= \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s)
 \end{aligned} \quad (3.21)$$

となる。ただし、ここで積分核 $\mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s), \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s)$ はそれぞれあらかじめ解析的に求めておくことができ、以下のようになる（「3.7.1 積分核 $\mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s), \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s)$ の計算」参照）。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) d\Omega(\mathbf{q}) \\
 &= - \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) (\nabla_{\mathbf{q}} \phi^*(\mathbf{q}, s)) d\Omega(\mathbf{q}) \\
 &= \frac{\mathbf{p} - \mathbf{s}}{8\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|}
 \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) j^*(\mathbf{q}, s) d\Omega(\mathbf{q}) \\
 &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left\{ \nabla_{\mathbf{q}} (\nabla_{\mathbf{q}} \phi^*(\mathbf{q}, s) \cdot \mathbf{n}_E(s)) \right\} d\Omega(\mathbf{q}) \\
 &= \frac{3(\mathbf{p} - \mathbf{s}) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|^3} (\mathbf{p} - \mathbf{s}) - \frac{\mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|}
 \end{aligned} \quad (3.23)$$

したがって、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ の積分方程式は式 (3.18) および式 (3.21) より

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma_M} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{q})}{\partial n_M} - \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n_M} \right) d\Gamma(\mathbf{q}) + \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \quad (3.24)$$

となり、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ に関する積分方程式のすべての項を境界積分のみで表すことができる。また、Biot-Savart の法則は式 (3.24) において右辺第1項を無視し、式 (3.12) に代入すると

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}(\mathbf{p}) &= \nabla_{\mathbf{p}} \times \left\{ \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \right\} \\
 &= \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s)
 \end{aligned} \quad (3.25)$$

となる。ここで

$$\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) = \mathbf{0} \quad (3.26)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) = \frac{\mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - \mathbf{s})}{4\pi \|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|^3} \quad (3.27)$$

であることから

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = -\frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - \mathbf{s})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|^3} u(s) d\Gamma(s) \quad (3.28)$$

となり、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ の積分方程式と同様に Biot-Savart の法則も境界積分で表すことができる。なお、式 (3.28) は Gauss の発散定理を用いることで、式 (3.19) から直接導出することもできる（「3.7.2 Gauss の発散定理を用いた Biot-Savart の法則の境界積分表示形の導出」参照）。

3.4.2 本手法の利点

本手法では式 (3.24) および式 (3.28) のように電場に関する領域積分を必要とせず、境界積分のみで磁場の計算ができる。さらに、電位に関する境界条件から直接磁場を計算できるため、計算量の点で改善されている。また、電場に関する領域積分を必要としないことから、電場を要素分割して計算する場合には領域を分割する必要が無く、境界を分割するだけでよい。これにより、従来法に比べて計算精度も高くなることが期待される。

3.5 従来法と本手法における計算精度と計算量の比較

本手法の有効性を確認するため、簡単な例として立方体の電場領域周辺の磁束密度分布を従来法と本手法を用いて計算する。得られた結果を Biot-Savart の法則による厳密解と比較し、従来法と本手法における計算精度と計算量の比較を行う。

3.5.1 解析対象

解析対象となるモデルを図 3-2 に示す。図 3-2 中の一辺の長さが $2L$ の立方体領域について、その領域内の電位 $u(x, y, z)$ を

$$u(x, y, z) = \frac{jL}{2\pi\kappa} \cos \frac{2\pi x}{L} \sinh \frac{2\pi y}{L} \quad (3.29)$$

とする。ここで、 j は原点 $(0, 0, 0)$ すなわち立方体中心における電流密度の大きさ、 κ は電気伝導度である。式 (3.29) の電位 $u(x, y, z)$ は Laplace 方程式を満たす。立方体周辺の透磁率を μ とし、場所によらず一定とする。

電流密度 $\mathbf{j}(x, y, z)$ は

$$\mathbf{j}(x, y, z) = -\kappa \left\{ \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \right\}^T = \left\{ j \sin \frac{2\pi x}{L} \sinh \frac{2\pi y}{L}, -j \cos \frac{2\pi x}{L} \cosh \frac{2\pi y}{L}, 0 \right\}^T \quad (3.30)$$

となるから、このときの点 $p(X, 0, 0)$ におけるベクトルポテンシャル $\mathbf{A} = \{A_x, A_y, A_z\}^T$ および磁束密度 $\mathbf{B} = \{B_x, B_y, B_z\}^T$ は、式 (3.18) および式 (3.19) より次のように求まる。

$$A_x = A_z = B_x = B_y = 0 \quad (3.31)$$

$$A_y = -\frac{\mu j}{\pi} \int_0^L \int_0^L \int_{-L}^L \frac{\cos \frac{2\pi x}{L} \cosh \frac{2\pi y}{L}}{\sqrt{(x-X)^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz \quad (3.32)$$

$$B_z = -\frac{\mu j}{\pi} \int_0^L \int_0^L \int_{-L}^L \frac{\left\{ (x-X) \cos \frac{2\pi x}{L} \cosh \frac{2\pi y}{L} + y \sin \frac{2\pi x}{L} \sinh \frac{2\pi y}{L} \right\}}{\{(x-X)^2 + y^2 + z^2\}^{\frac{3}{2}}} dx dy dz \quad (3.33)$$

3.5.2 数値計算

前節 3.5.1 の解析対象に具体的な数値を代入し、実際に計算した結果を比較することで、従来法と本手法の計算精度と計算量の違いについて比較する。

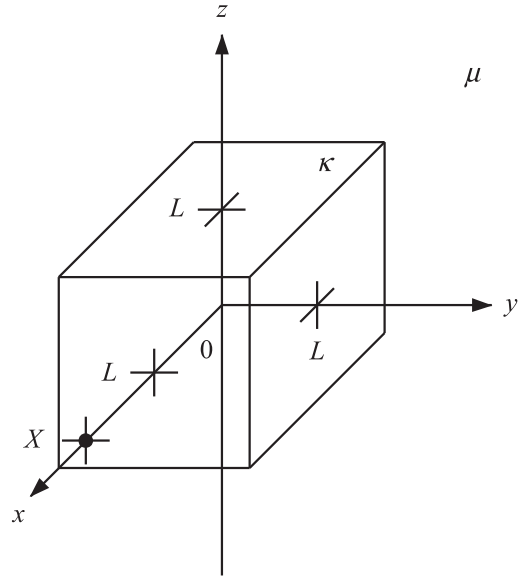


Fig. 3-2: The cubic model for comparison between the conventional method and the proposed method

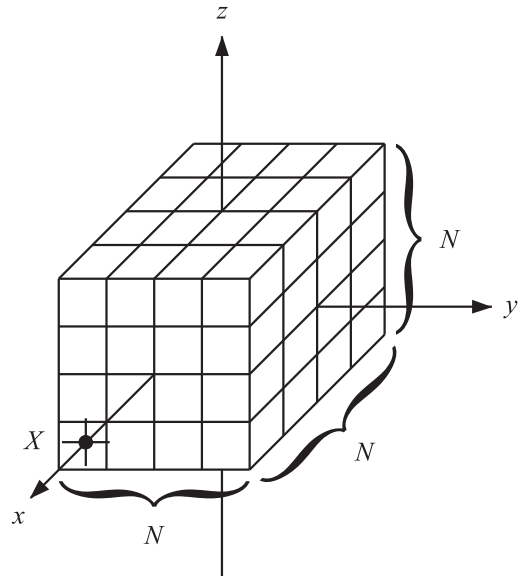


Fig. 3-3: The cubic model discretized as elements

a. 数値計算条件

図 3-3 のように立方体を一辺の分割数が N になるように立方体要素で分割し、従来法では計 N^3 個の立方体要素、本手法では計 $6N^2$ 個の正方形要素について各要素ごとに数値積分を行う。立方体の一辺の長さを $L = 1 \text{ m}$ 、立方体中心の電流密度を $j = 100 \text{ A/m}^2$ とし、立方体周辺の透磁率を $\mu = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ とする。また、要素分割する際の一辺の分割数 N は 5, 6, 10, 15, 20, 25, 30, 50 の 8 段階とする。このときの要素分割数は従来法では 125～125000、本手法では 150～15000 となる。

以上の条件において、点 $p(2, 0, 0)$ におけるベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ および磁束密度 $\mathbf{B}$ を従来法と本手法を用いて計算した。なお、数値積分には Gauss-Legendre の積分公式を用い、積分点は従来法では 2^3 個、本手法では 2^2 個とした。

b. 数値計算結果

要素分割する際の一边の分割数 $N = 6$ (要素分割数 216) の場合において、厳密解、従来法および本手法を用いて計算し、得られた点 $p(2, 0, 0)$ におけるベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ および磁束密度 $\mathbf{B}$ を表 3-1 に示す。括弧内の値は厳密解からの差である。

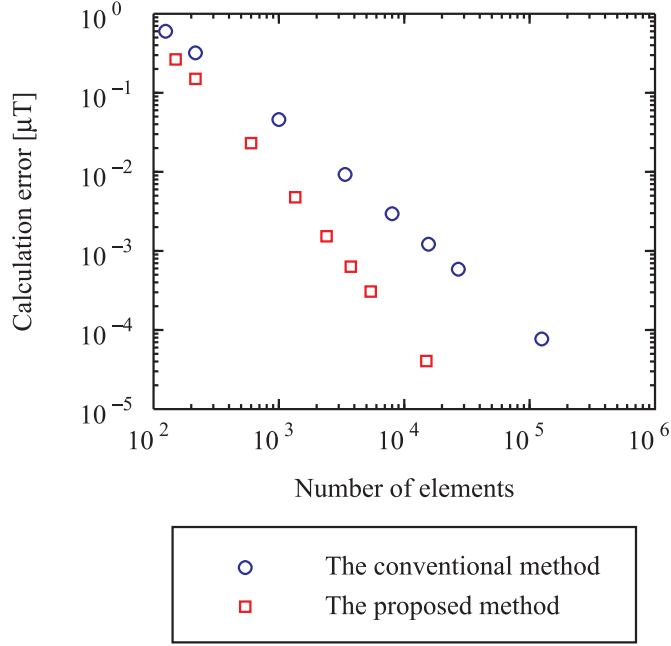
表 3-1 より、本数値計算例において最も意味のある磁束密度 $\mathbf{B}$ の z 方向成分 B_z について注目すると、厳密解からの差は本手法の方が従来法に比べて約 2 倍小さいことが分かる。一方のベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ の y 方向成分 A_y については、本手法では厳密解から大きく離れている。これは、あるスカラーポテンシャルの勾配により生じるオフセットが含まれているためである。したがって、本手法によって得られたベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ の回転について、ステップ幅 ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$) をすべて 1.0×10^{-5} m として中心差分を用いて計算すると、表 3-1 の最下段に示すように磁束密度 $\mathbf{B}$ と一致する。

また、磁束密度 $\mathbf{B}$ の z 方向成分 B_z について、分割数を変化させたときの厳密解とそれぞれの手法によって得られた値との差 (絶対値) の推移を図 3-4 に示す。図 3-4 より分割数を大きくするにつれて、従来法と本手法ともに厳密解に近づく傾向が見られる。しかし、本手法の方が従来法に比べて、少ない要素分割数で速く厳密解に近づくことが分かる。したがって、計算精度について、本手法の方が従来法よりも優れていることが示された。

一方、従来法では N^3 個の要素に、本手法では $6N^2$ 個の要素に分割して計算を行った。計算時間はこれら要素の数に比例し、従来法では N^3 、本手法では N^2 のオーダーとなる。したがって、計算量についても本手法の方が従来法よりも優れていることが分かる。

Table. 3-1: The calculated results at $N = 6$
(Number of elements = 216)

Vector potential	A_x [μTm]	A_y [μTm]	A_z [μTm]
Exact	0	-11.530430036	0
Conventional method	7.23×10^{-14} ($+7.23 \times 10^{-14}$)	-11.715146105 (-0.185)	0 (± 0)
Present method	-6.43×10^{-14} (-6.43×10^{-14})	37.450299140 (+49.0)	1.91×10^{-14} ($+1.91 \times 10^{-14}$)
Magnetic flux density	B_x [μT]	B_y [μT]	B_z [μT]
Exact	0	0	75.005399221
Conventional method	3.62×10^{-16} ($+3.62 \times 10^{-16}$)	-1.66×10^{-15} (-1.66×10^{-15})	74.685693632 (-0.320)
Present method	-3.38×10^{-15} (-3.38×10^{-15})	4.87×10^{-16} ($+4.87 \times 10^{-16}$)	74.855297648 (-0.150)
Present method (Difference of $\mathbf{A}$)	3.16×10^{-9} ($+3.16 \times 10^{-9}$)	1.17×10^{-9} ($+1.17 \times 10^{-9}$)	74.855297642 (-0.150)


 Fig. 3-4: The errors of the calculation results about B_z

3.6 結言

本研究では工学をはじめとして非常に重要な静磁場解析を対象に、静電場が Laplace 方程式に支配される場合に対して、ソース電流の領域積分を必要としない高精度かつ効率的な静磁場の境界要素解析法を開発した。本手法では電場の領域積分を境界積分に解析的に変換するため、従来よりも高精度かつ高速に磁束密度を求められる。

本研究で得られた結論を以下に示す。

- (1) ソース電流の領域積分を評価する境界積分である式 (3.34) を導出した。これにより、静磁場におけるベクトルポテンシャルの積分方程式および Biot-Savart の法則における領域積分をそれぞれ式 (3.37) および式 (3.38) のように境界積分項のみで構成することができた。これらの操作では領域内の電流密度を電位に関する境界積分で表現できることを利用し、静磁場の積分方程式の領域積分項を解析的に計算した。そのため、従来法におけるソース電流の領域積分に起因する数値計算による計算精度と計算量の問題を解決することができた。
- (2) 従来法と本手法の比較のため、Laplace 方程式に支配される立方体の電場領域周辺のベクトルポテンシャルと磁束密度を従来法と本手法を用いて計算した。従来法による計算結果と本手法による計算結果の比較により、計算精度と計算量の両面において、本手法が従来法よりも優れていることを示した。
- (3) 本研究で得られた静磁場の計算式は以下の通りである。

$$\mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \kappa \mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \quad (3.34)$$

$$f^*(\mathbf{p}, s) = \frac{\mathbf{p} - s}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \quad (3.35)$$

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) = \frac{3}{8\pi} \frac{(\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{\|\mathbf{p} - s\|^3} (\mathbf{p} - s) - \frac{\mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} A(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma_M} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial A(\mathbf{q})}{\partial n_M} - A(\mathbf{q}) \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n_M} \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \\ + \kappa \mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} f^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = -\frac{\kappa \mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - s)}{\|\mathbf{p} - s\|^3} u(s) d\Gamma(s) \quad (3.38)$$

ここで、それぞれの記号と物理量の対応は、 μ ：透磁率、 κ ：電気伝導度、 ϕ^* ：Laplace 方程式の基本解、 Ω_E ：電場領域、 Γ_E ：電場境界、 $\mathbf{n}_E$ ：電場境界の法線ベクトル、 $\mathbf{j}$ ：電流密度、 u ：電位、 Γ_M ：磁場境界、 $\mathbf{n}_M$ ：磁場境界の法線ベクトル、 A ：ベクトルポテンシャル、 $\mathbf{B}$ ：磁束密度である。

3.7 付録

3.7.1 積分核 $f^*(\mathbf{p}, s)$, $\mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s)$ の計算

積分核

$$\begin{aligned} f^*(\mathbf{p}, s) &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{i}^*(\mathbf{q}, s) d\Omega(\mathbf{q}) \\ &= - \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) (\nabla_{\mathbf{q}} \phi^*(\mathbf{q}, s)) d\Omega(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}^*(\mathbf{q}, s) d\Omega(\mathbf{q}) \\ &= \int_{\Omega_\infty} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left\{ \nabla_{\mathbf{q}} (\nabla_{\mathbf{q}} \phi^*(\mathbf{q}, s) \cdot \mathbf{n}_E(s)) \right\} d\Omega(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.40)$$

の計算には座標変換を用いて行う。図 3-5 のように、ベクトル $\mathbf{p} - s$ の中心を原点とし、その方向を z 軸とする円筒座標系 ($r\theta z$ 座標系) に座標変換する。ただし、以降、ベクトルの各成分は直交座標系 (xyz 座標系) で表す。このとき

$$\mathbf{n}_E(s) = \left\{ n_x, n_y, n_z \right\}^T \quad L = \|\mathbf{p} - s\| \quad (3.41)$$

$$R_p(r, z) = \sqrt{r^2 + \left(z - \frac{L}{2}\right)^2}, \quad R_s(r, z) = \sqrt{r^2 + \left(z + \frac{L}{2}\right)^2} \quad (3.42)$$

とすると

$$\mathbf{p} = \left\{ 0, 0, \frac{L}{2} \right\}^T, \quad \mathbf{s} = \left\{ 0, 0, -\frac{L}{2} \right\}^T \quad (3.43)$$

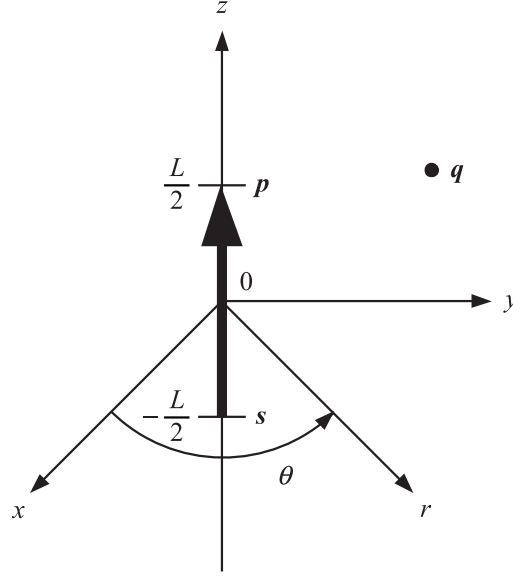


Fig. 3-5: The coordinate transformation for the calculations of the integral kernels

$$-\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) (\nabla_q \phi^*(\mathbf{q}, \mathbf{s})) = \frac{1}{16\pi^2 R_p R_s^3} \left\{ r \cos \theta, r \sin \theta, \frac{L+2z}{2} \right\}^T \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} & \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left\{ \nabla_q (\nabla_q \phi^*(\mathbf{q}, \mathbf{s}) \cdot \mathbf{n}_E(\mathbf{s})) \right\} \\ &= \frac{1}{64\pi^2 R_p R_s^5} \left\{ \begin{aligned} & \{ 2r^2 - (L+2z)^2 + 6r^2 \cos 2\theta \} n_x + \{ 6r^2 \sin 2\theta \} n_y + \{ 6(L+2z)r \cos \theta \} n_z \\ & \{ 6r^2 \sin 2\theta \} n_x + \{ 2r^2 - (L+2z)^2 - 6r^2 \cos 2\theta \} n_y + \{ 6(L+2z)r \sin \theta \} n_z \\ & \{ 6(L+2z)r \cos \theta \} n_x + \{ 6(L+2z)r \sin \theta \} n_y + \{ -4r^2 + 2(L+2z)^2 \} n_z \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (3.45)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{1}{16\pi^2 R_p R_s^3} \left\{ r \cos \theta, r \sin \theta, \frac{L+2z}{2} \right\}^T r d\theta dr dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{1}{16\pi R_p R_s^3} \{ 0, 0, L+2z \}^T r dr dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{8\pi} \left\{ 0, 0, \frac{1}{\left(z + \frac{L}{2}\right) \left(1 + \frac{R_p}{R_s}\right)} \right\}^T dz \\ &= \frac{1}{8\pi} \{ 0, 0, 1 \}^T \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s)$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{1}{64\pi^2 R_p R_s^5} \left\{ \begin{aligned} &\{ 2r^2 - (L+2z)^2 + 6r^2 \cos 2\theta \} n_x + \{ 6r^2 \sin 2\theta \} n_y \\ &+ \{ 6(L+2z)r \cos \theta \} n_z \\ &\{ 6r^2 \sin 2\theta \} n_x + \{ 2r^2 - (L+2z)^2 - 6r^2 \cos 2\theta \} n_y \\ &+ \{ 6(L+2z)r \sin \theta \} n_z \\ &\{ 6(L+2z)r \cos \theta \} n_x + \{ 6(L+2z)r \sin \theta \} n_y \\ &+ \{ -4r^2 + 2(L+2z)^2 \} n_z \end{aligned} \right\} r d\theta dr dz \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\frac{r^2}{2} - \left(z + \frac{L}{2}\right)^2}{128\pi^2 R_p R_s^5} \{ n_x, n_y, -2n_z \}^T r dr dz \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{32\pi \left\{ z^2 + \left(\frac{L}{2}\right)^2 + R_p R_s \right\}} \{ -n_x, -n_y, 2n_z \}^T dz \\
&= \frac{1}{8\pi L} \{ -n_x, -n_y, 2n_z \}^T \\
&= \frac{3}{8\pi L} \{ 0, 0, n_z \}^T - \frac{1}{8\pi L} \{ n_x, n_y, n_z \}^T \tag{3.47}
\end{aligned}$$

以上を元の座標に戻すことによって

$$\mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) = \frac{\mathbf{p} - s}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \tag{3.48}$$

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) = \frac{3(\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} (\mathbf{p} - s) - \frac{\mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \tag{3.49}$$

が得られる。また、これらの回転はベクトル解析によって次のようにして得られる。

$$\begin{aligned}
\nabla_p \times \mathbf{f}^*(\mathbf{p}, s) &= \nabla_p \times \frac{\mathbf{p} - s}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \\
&= \frac{1}{8\pi} \left(\nabla_p \frac{1}{\|\mathbf{p} - s\|} \times (\mathbf{p} - s) + \frac{1}{\|\mathbf{p} - s\|} \nabla_p \times (\mathbf{p} - s) \right) \\
&= \frac{1}{8\pi} \left(-\frac{\mathbf{p} - s}{\|\mathbf{p} - s\|^3} \times (\mathbf{p} - s) \right) \\
&= \mathbf{0} \tag{3.50}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \nabla_p \times \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \\
 &= \nabla_p \times \left\{ \frac{3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} (\mathbf{p} - s) - \frac{\mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \right\} \\
 &= \frac{1}{8\pi} \left\{ \nabla_p \times \frac{3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{\|\mathbf{p} - s\|^3} (\mathbf{p} - s) - \nabla_p \frac{1}{\|\mathbf{p} - s\|} \times \mathbf{n}_E(s) \right\} \\
 &= \frac{1}{8\pi} \left[\nabla_p \frac{1}{\|\mathbf{p} - s\|^3} \times 3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s) (\mathbf{p} - s) + \frac{1}{\|\mathbf{p} - s\|^3} \nabla_p \times \{ 3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s) (\mathbf{p} - s) \} + \frac{(\mathbf{p} - s) \times \mathbf{n}_E(s)}{\|\mathbf{p} - s\|^3} \right] \\
 &= \frac{1}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} [\nabla_p \{ 3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s) \} \times (\mathbf{p} - s) + 3 (\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s) \nabla_p \times (\mathbf{p} - s) + (\mathbf{p} - s) \times \mathbf{n}_E(s)] \\
 &= \frac{1}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} \{ 3 \mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - s) + (\mathbf{p} - s) \times \mathbf{n}_E(s) \} \\
 &= \frac{\mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - s)}{4\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} \tag{3.51}
 \end{aligned}$$

3.7.2 Gauss の発散定理を用いた Biot-Savart の法則の境界積分表示形の導出

Gauss の発散定理は

$$\int_{\Omega} \nabla_q \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \tag{3.52}$$

で表される。ここで、 $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ は領域 Ω 内でその第一階偏微分係数と共に連続な任意のベクトル関数である。ベクトル関数 $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ を別のベクトル関数 $\mathbf{F}(\mathbf{q})$ と定数ベクトル $\mathbf{C}$ の外積 ($\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \mathbf{F}(\mathbf{q}) \times \mathbf{C}$) に分解すると、式 (3.52) は

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \nabla_q \cdot (\mathbf{F}(\mathbf{q}) \times \mathbf{C}) d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{F}(\mathbf{q}) \times \mathbf{C}) d\Gamma(\mathbf{q}) \\
 & \int_{\Omega} \{ \mathbf{C} \cdot (\nabla_q \times \mathbf{F}(\mathbf{q})) - \mathbf{F}(\mathbf{q}) \cdot (\nabla_q \times \mathbf{C}) \} d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{C} \cdot (\mathbf{n}(\mathbf{q}) \times \mathbf{F}(\mathbf{q})) d\Gamma(\mathbf{q}) \\
 & \mathbf{C} \cdot \int_{\Omega} \nabla_q \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \mathbf{C} \cdot \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \\
 & \mathbf{C} \cdot \left(\int_{\Omega} \nabla_q \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) - \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \right) = 0 \\
 & \int_{\Omega} \nabla_q \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \times \mathbf{F}(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \tag{3.53}
 \end{aligned}$$

となる。さらに、ベクトル関数 $\mathbf{F}(\mathbf{q})$ を別のベクトル関数 $\mathbf{G}(\mathbf{q})$ とスカラー関数 $f(\mathbf{q})$ の積 ($\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \mathbf{G}(\mathbf{q}) f(\mathbf{q})$) に分解すると、式 (3.53) は

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \nabla_q \times (\mathbf{G}(\mathbf{q}) f(\mathbf{q})) d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \times (\mathbf{G}(\mathbf{q}) f(\mathbf{q})) d\Gamma(\mathbf{q}) \\
 & \int_{\Omega} (f(\mathbf{q}) \nabla_q \times \mathbf{G}(\mathbf{q}) + \nabla_q f(\mathbf{q}) \times \mathbf{G}(\mathbf{q})) d\Omega(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} \mathbf{n}(\mathbf{q}) \times \mathbf{G}(\mathbf{q}) f(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \tag{3.54}
 \end{aligned}$$

となる [25].

式 (3.54) において

$$\Omega \rightarrow \Omega_E, \quad \Gamma \rightarrow \Gamma_E \quad (3.55)$$

$$\mathbf{n}(\mathbf{q}) \rightarrow \mathbf{n}_E(\mathbf{q}) \quad (3.56)$$

$$f(\mathbf{q}) \rightarrow -\kappa u(\mathbf{q}) \quad (3.57)$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}) \rightarrow \frac{\mu}{4\pi} \frac{\mathbf{p} - \mathbf{q}}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} \quad (3.58)$$

のように置き換え, κ および μ が領域 Ω_E 内で一定であるとする, と,

$$\frac{\mu}{4\pi} \int_{\Omega_E} \frac{-\kappa \nabla_{\mathbf{q}} u(\mathbf{q}) \times (\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} d\Omega(\mathbf{q}) = -\frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E(\mathbf{q}) \times (\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} u(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (3.59)$$

となる. したがって, 式 (3.1) より

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = \frac{\mu}{4\pi} \int_{\Omega_E} \frac{\mathbf{j}(\mathbf{q}) \times (\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} d\Omega(\mathbf{q}) = -\frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E(\mathbf{q}) \times (\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|^3} u(\mathbf{q}) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (3.60)$$

が得られる.

参考文献

- [1] Miller, W.T. and Geselowitz, D.B., Use of Electric and Magnetic Data to Obtain a Multiple Dipole Inverse Cardiac Generator: A Spherical Model Study, *Annals of Biomedical Engineering*, Vol.2, No.4, (1974), pp.343–360.
- [2] Amaya, K., Uragou, M. and Aoki, S., New Eddy Current Thickness Sensor and its Boundary Element Analysis, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.64, No.588, (1995), pp.1841–1846.
- [3] Uragou, M., Amaya, K. and Aoki, S., Effective Boundary Element Method for an Axisymmetrical Electromagnetic Field of a Layered Tube, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.63, No.607, (1997), pp.589–594.
- [4] Kojima, F., Okamoto, J. and Ohno, Y., Computational Method for Crack Reconstruction of Steam Generator Materials using FEM-BEM Scheme in Inverse Applied Electromagnetics, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol.63, No.612, (1997), pp.2650–2656.
- [5] Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., *Boundary Element Analysis on Corrosion Problems*, (1998), Shokabo.
- [6] Miyashita, T., Kandori, A., Tsukada, K., Sato, M., Terada, Y., Horigome, H. and Mitsui, T., Construction of Tangential Vectors from Normal Cardiac Magnetic Field Components, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.520–523.
- [7] Tsukada, K., Kandori, A., Miyashita, T., Sasabuti, H., Suzuki, H., Kondo, S., Komiyama, Y. and Teshigawara, K., A Simplified Superconducting Quantum Interference Device System to Analyze Vector Components of a Cardiac Magnetic Field, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.524–527.
- [8] Clemens, M., Thoma, P., Weiland, T. and Van Rienen, U., Computational Electromagnetic-Field Calculation with the Finite-Integration Method, *Surveys on Mathematics for Industry*, Vol.8, No.3-4, (1999), pp.213–232.
- [9] Banks, H.T. and Kojima, F., Boundary Shape Identification in Two-Dimensional Electrostatic Problems using SQUIDS, *Journal of Inverse Ill-Posed Problems*, Vol. 8, No.5, (2000), pp.487–504.
- [10] Baillet, S., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., Electromagnetic Brain Mapping, *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol.18, No.6, (2001), pp.14–30.

-
- [11] Potthast, R. and Kuhn, L., On the Convergence of the Finite Integration Technique for the Anisotropic Boundary Value Problem of Magnetic Tomography, *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Vol.26, No.9, (2003), pp.739–757.
 - [12] Murakami, M., Matsuoka, Y. and Naitou, S., Magnetocardiography, *A Monthly Journal of Medical Imaging and Information*, Vol.35, No.13, (2003), pp.1112–1119.
 - [13] Kandori, A., Advanced Technology of Magnetocardiography, *A Monthly Publication of the Japan Society of Applied Physics*, Vol.74, No.5, (2005), pp.580–586.
 - [14] Ridha, M., Amaya, K. and Aoki, S., Boundary Element Simulation for Identification of Steel Corrosion in Concrete using Magnetic Field Measurement, *Corrosion*, Vol.61, No.8, (2005), pp.784–791.
 - [15] Nara, T. and Ando, S., Direct Localization of Multiple Magnetic Dipoles for Surface Crack Detection, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, Vol.15, No.4, (2007), pp.403–418.
 - [16] Hauer, K.H., Potthast, R. and Wannert, M., Algorithms for Magnetic Tomography -on the Role of a Priori Knowledge and Constraints, *Inverse Problems*, Vol.24, No.4, (2008), pp.045008.1–045008.18.
 - [17] Sauer, D.U., Sanders, T., Fricke, B., Baumhoefer, T., Wippermann, K., Kulikovsky, A.A., Schmitz, H. and Mergel, J., Measurement of the Current Distribution in a Direct Methanol Fuel Cell -Confirmation of Parallel Galvanic and Electrolytic Operation within One Cell, *Journal of Power Sources*, Vol.176, No.2, (2008), pp.477–483.
 - [18] Lustfeld, H., Reissel, M., Schmidt, U. and Steffen, B., Reconstruction of Electric Currents in a Fuel Cell by Magnetic Field Measurements, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, Vol.6, No.2, (2009), pp.021012.1–021012.8.
 - [19] Lustfeld, H., Reissel, M. and Steffen, B., Magnetotomography and Electric Currents in a Fuel Cell, *Fuel Cells*, Vol.9, No.4, (2009), pp.474–481.
 - [20] Tanaka, M., Matsumoto, T. and Nakamura, M., *Boundary Element Method*, (1991), Baifukan.
 - [21] Sakai, Y. and Yamasita, A., Magnetostatic Analysis by Coupling Finite-Element Method and Boundary Element Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.59, No.557, (1993), pp.211–218.
 - [22] Honma, T., Igarashi, H. and Kawaguchi, H., *Numerical Electromagnetic Dynamics*, (2002), Morikita Publishing.
 - [23] Kishimoto, Y., Tanaka, Y. and Amaya, K., Analysis Method for Magnetostatic Field without Region Integration in the Electrostatic Field Domain, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.73, No.729, (2007), pp.567–574.
 - [24] Tanaka, Y. and Amaya, K., Development of Method for the Magnetostatic Analysis without Region Integration, *Proceedings of the 17th Computational Mechanics Conference*, No.04-40, (2004), pp.447–448.
 - [25] Watanabe, T., *Basic and Applications of Vector Analysis*, (1993), pp.109–149, pp.184–209, Saiensu-sha.
-

第4章 磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法

4.1 緒言

「第2章 LSI製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」ではLSI製造工程における電気銅めっきを対象として、測定しためっき槽内の電位を逆解析することで、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した[1]-[5]。しかし、めっき槽内の電位測定に必要な参照電極は電解液に直接触れるために劣化しやすく、長時間の測定には向かない[6]-[10]。したがって、LSIの生産ラインにおいてめっき表面上の電流密度を常時モニタリングするためには、長時間の測定が可能な機器を用いた新たな手法が必要となる。

そこで、本研究ではめっき槽内の電流によって磁場が誘起することに注目し、電磁場逆解析を用いた種々の無侵襲測定法[11]-[32]を応用することで、逆解析的に磁束密度分布からめっき表面上の電流密度分布を推定する手法を開発した[33]-[36]。磁束密度はめっき槽の内外を問わず、既存の磁気センサによって測定できる。通常の電気めっきによって生じる磁場は $1\mu\text{T}$ 程度あるいはそれ以上であり、図4-1に示すように種々の磁気センサを用いて測定できる範囲にある。これらの磁気センサは長時間の運用が可能である[25], [37]-[40]。

また、磁束密度の測定をめっき槽外で行う場合、電位測定における細管などの測定機器を挿入する必要が無い。したがって、めっき槽の電場に全く影響を与えることなく、めっき槽内の電流密度分布を無侵襲で推定できる利点がある。本手法は燃料電池などの電解槽の空間が狭い電解セルに対しても適用でき、電位測定による電流密度推定法よりも応用範囲は広い[30]-[32]。表4-1は電流密度推定における電位測定と磁場測定の長所、短所および主な用途をまとめたものである。

本論文ではまず、磁気センサによって得られた磁束密度分布のデータから、めっき表面上の電流密度分布を推定する手法の詳細を述べる。逆解析に必要な数理モデルについては、本手法では任意形状の電気銅めっき装置を対象として、電場解析に有限要素法あるいは境界要素法[41]-[46]を、磁場解析に「第3章 静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法」で述べた手法[47], [48]を用いる。逆解析手法については基本的に「第2章 LSI製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」で述べたTikhonovの適切化法[49]-[56]と推定分極曲線を用いた再計算からなる2段階逆解析[1]-[5]を用いる。しかし、磁場測定では電位測定に比べ、地磁気や磁性体、他の電気機器などによって多くの外乱が含まれやすい。そのため、本手法では第2章で述べた逆解析手法に加え、観測方程式の差分を用いる方法と参照分散によるTikhonovの適切化パラメータ α の決定方法を導入する。

さらに、本研究では本手法の有効性を検討するため、数値シミュレーションによる数値実験と実際の電気銅めっき装置による検証実験を行った。めっき槽周辺の磁束密度を磁気センサを用いて実測し、本手法によってめっき表面上の電流密度分布を推定した。これらの推定結果を従来の推定手法である標本の分極曲線を用いた数値解析[58]-[63]に加え、めっき膜厚分布の実測値とも比較した結果を示し、本手法の有効性を示す。

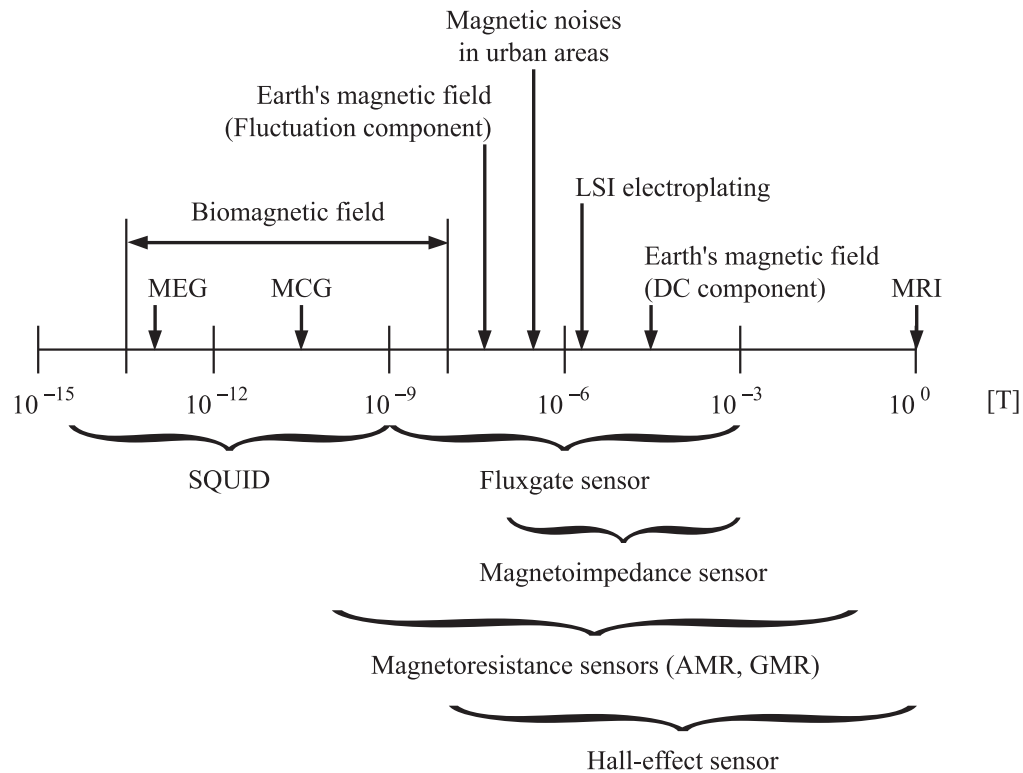


Fig. 4-1: The measurement ranges of magnetic sensors [25], [40]

Table. 4-1: The electric potential measurement vs. the magnetic field measurement

	電位測定	磁場測定
長所	大きな外乱が発生することがほとんど無い。数理モデルの計算が比較的簡単。	長時間の運用が可能。めっき槽内に細管などを挿入する必要が無く、無侵襲で測定できる。
短所	電位を測るための参照電極が劣化しやすく、長時間の運用に向かない。	地磁気や磁性体、他の電気機器などによる大きな外乱を考慮しなければならない。
主な用途	めっき条件の設計をはじめとした電流密度の推定精度が要求される場合など。	生産ラインでの常時モニタリング、電解槽が狭い燃料電池などへの応用。

4.2 めっき槽周辺における磁束密度の測定方法

図4-2に本手法における磁束密度の測定方法の概略図を示す。磁気センサを複数配置するか、走査することにより、その磁気センサの位置における磁束密度を測定することができる。外乱に対する処置を除けば、磁束密度の測定は比較的簡便である。

なお、外乱に対する処置として、地磁気などの定磁場に対しては、電流印加前にあらかじめオフセットを測定しておく方法や差分測定が挙げられる。また、高周波の磁場ノイズに対してはローパスフィルタを用いればよい。めっき装置の仕様などから、磁性体の挙動が明らかである場合は物理モデルの計算においてその影響を考慮しておく。生産現場においては、他にも様々な磁気ノイズが生じるため、磁気シールドなどの利用により予期しない外乱を極力取り除いておくことが望ましい。

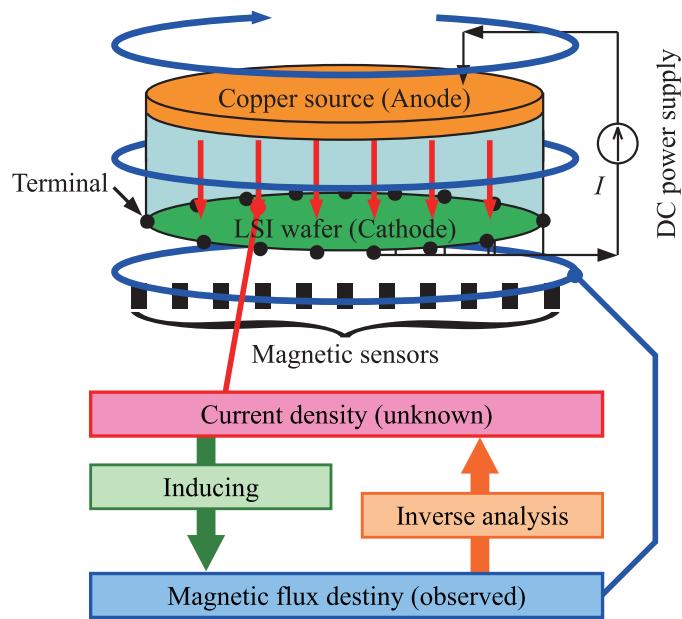


Fig. 4-2: The outline of the proposed method

4.3 解析対象

本研究において解析対象とする一般的なLSI用の電気銅めっき装置のモデルを図4-3に示す。アノードは厚い銅板であり、めっき槽内はめっき電解液（主成分：硫酸銅）で満たされている。LSIウェハは、実際の工程ではシリコンウェハ表面の二酸化ケイ素絶縁膜上に薄い窒化タンタルなどのバリア層および銅のシード層をスパッタリングなどで作成し、この上に電気めっきを施す（図4-4）。LSIウェハのシード層外周には吸電ターミナルが設置されており、シード層およびその上に施されるめっき膜がカソードとなる。

めっき槽内、アノード内、カソード内の電位分布をそれぞれ u_b, u_a, u_c 、銅および硫酸銅の電気伝導度を κ_c および κ_s とする。また、銅の磁化率は -0.086×10^{-6} 、硫酸銅の磁化率は 6.3×10^{-6} であることから、めっき槽内部および外部の透磁率 μ はほぼ一様として扱うことができる。

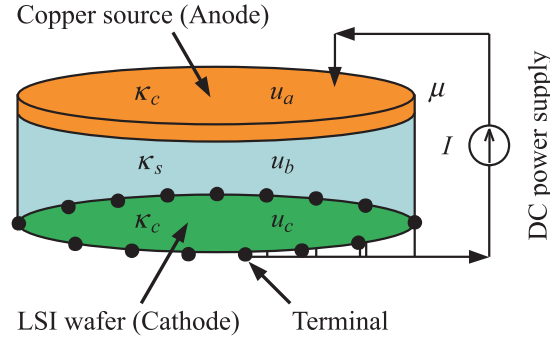


Fig. 4-3: The ordinary electroplating device for LSI fabrication

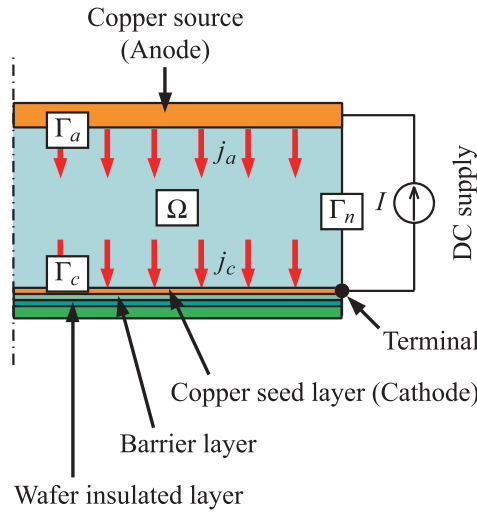


Fig. 4-4: The ordinary electroplating device for LSI fabrication (cross-section view)

4.4 観測方程式

本節では逆解析を行うための観測方程式の導出手順について述べる．アノードからめっき槽内に流入する電流密度 j_a がアノードの減少速度を，めっき槽内からカソードへ流出する電流密度 j_c がカソードにおけるめっき膜の成膜速度を決める． j_a, j_c はめっき槽内に流れ込む電流値を正とする．そこで，本手法ではまず，これら j_a, j_c を未知量，めっき槽外部で測定される磁束密度 $\mathbf{B}$ を既知量として，これらの関係を表す観測方程式を導出する．観測方程式は次の手順によって導出する．

まず電場解析として， j_a, j_c をめっき槽全体の電位分布 u_b, u_a, u_c の境界条件として取り扱い， u_b, u_a, u_c と j_a, j_c の関係式を有限要素法あるいは境界要素法によって求める．次に磁場解析として， $\mathbf{B}$ と u_b, u_a, u_c の関係式を「第3章 静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法」で述べた手法 [47], [48] によって求める．これらのステップによって得られた関係式を用い，観測方程式である $\mathbf{B}$ と j_a, j_c の関係式を得る．なお，これら電場解析および磁場解析はめっき槽をめっき槽内部，アノード部，カソード部の3つの領域に分割して行う．

4.4.1 電場解析

アノードおよびカソードはめっきを施すことによって厚さが変化し、その電気抵抗が変化する。しかし、(1) アノードおよびカソードの厚さの変化はめっき槽の大きさに対して極めて小さく、マクロ的には時間に対して不変とみることができ、(2) 電気抵抗の変化は未知量として与える j_a および j_c の変化で捉えることができるという2つの点から、本手法ではめっきによるアノードおよびカソードの形状の変化は無いと仮定して電場解析を行う。

a. めっき槽内部

めっき槽内の電位 u_b は金属（アノードおよびカソード）表面近傍を除き、次の Laplace 方程式を満足する。

$$\nabla^2 u_b = 0 \quad \left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad \text{in the plating cell} \quad (4.1)$$

めっき膜厚の変化など金属表面のごく近傍における複雑な挙動は陽に考慮せず、アノードおよびカソードに流入出する電流密度 j_a, j_c を境界条件として用いる。これにより、式 (4.1) の境界条件は次式で与えられる。

$$\kappa_s \frac{\partial u_b}{\partial n} = \begin{cases} 0 & \text{on the side wall} \\ j_a & \text{on the anode surface} \\ j_c & \text{on the cathode surface} \end{cases} \quad (4.2)$$

ここで、 $\partial/\partial n$ は外向き法線方向の微分である。また、電位基準点は任意に与えることができ、電位基準点における基準電位を u_{b0} とすると

$$u_b = u_{b0} \quad \text{on the reference point} \quad (4.3)$$

となる。

任意形状のめっき槽に対して、式 (4.1)、式 (4.2) および式 (4.3) は境界要素法あるいは有限要素法を用いて解くことができ、次の未知量 j_a, j_c に関する代数方程式に帰着する。

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{L}_b \mathbf{x} \quad (4.4)$$

$$\mathbf{x} = \{ \mathbf{j}_a^T \quad \mathbf{j}_c^T \}^T \quad (4.5)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{L}_b$ はめっき槽の形状に依存する既知行列であり、 $\mathbf{u}_b, \mathbf{j}_a, \mathbf{j}_c$ はそれぞれ各節点あるいは各要素における u_b, j_a および j_c の値を成分とするベクトルである。

b. アノード部

めっき槽内部と同様に、アノード部の電位 u_a は次の Laplace 方程式を満たす。

$$\nabla^2 u_a = 0 \quad \text{in the anode} \quad (4.6)$$

式 (4.18) の境界条件は次式で与えられる。

$$\kappa_c \frac{\partial u_a}{\partial n} = \begin{cases} -j_a & \text{on the boundary of the cell} \\ 0 & \text{on the other edge} \end{cases} \quad (4.7)$$

また、電位基準点における基準電位を u_{a0} とすると

$$u_a = u_{a0} \quad \text{on the electrode} \quad (4.8)$$

となる。

式 (4.18), 式 (4.7) および式 (4.8) においても、境界要素法あるいは有限要素法を用いて解くことができ、次の未知量 j_a に関する代数方程式に帰着する。

$$\mathbf{u}_a = L_a \mathbf{j}_a \quad (4.9)$$

ここで、 L_a はアノードの形状に依存する既知行列であり、 $\mathbf{u}_a$ は各節点あるいは各要素における u_a の値を成分とするベクトルである。なお、アノードがめっき槽に比べて薄い場合には、次に述べる「c. カソード部」と同様の計算を行っても良い。この計算方法でも式 (4.9) と同じ形の代数方程式に帰着する。

c. カソード部

カソードとなるシード層の厚さおよびその上に施されるめっき膜厚はめっき槽に比べて非常に薄いため、その電位は厚さ方向にはほぼ一様で 2 次的に分布すると近似できる。カソードの厚さを t_c とすると、カソード内の電位 u_c は次の 2 次元 Poisson 方程式を満たす。

$$\kappa_c t_c \nabla^2 u_c + j_c = 0 \quad \left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad \text{in the cathode} \quad (4.10)$$

下添字 2 は 2 次元の演算子であることを表す。式 (4.19) の境界条件は次式で与えられる。

$$\kappa_c \frac{\partial u_c}{\partial n} = 0 \quad \text{on the other edge} \quad (4.11)$$

また、電位基準点における基準電位を 0 とすると

$$u_c = 0 \quad \text{on the electrode} \quad (4.12)$$

式 (4.19), 式 (4.11) および式 (4.12) は有限要素法を用いて解くことができ、次の未知量 j_c に関する代数方程式に帰着する。

$$\mathbf{u}_c = L_c \mathbf{j}_c \quad (4.13)$$

ここで、 L_c はカソードの形状に依存する既知行列であり、 $\mathbf{u}_c$ は各節点あるいは各要素における u_c の値を成分とするベクトルである。

4.4.2 磁場解析

めっき電流は直流電流であり、めっき装置全体の電場の時間変化は小さいため、誘起される磁場は静磁場とみなせる。さらに、各領域（めっき槽内部、アノード部、カソード部）において、電気伝導度が一定であることから、次式を用いて、磁束密度 $\mathbf{B}$ を求めることができる [47], [48]。

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = -\frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E \times (\mathbf{p} - \mathbf{s})}{\|\mathbf{p} - \mathbf{s}\|^3} u(\mathbf{s}) d\Gamma(\mathbf{s}) \quad (4.14)$$

ここで、 $\mathbf{p}$ は磁束密度の測定位置、 $\mathbf{s}$ は計算点の位置ベクトルであり、 $u(\mathbf{s})$ は点 $\mathbf{s}$ における電位である。また、 κ は電気伝導度、 μ は透磁率、 Γ_E は静電場領域の境界、 $\mathbf{n}_E$ は境界 Γ_E における外向き単位法線ベクトルである。式 (4.14) の計算には「4.4.1 電場解析」で行った有限要素法および境界要素法による要素分割をそのまま用いることができる。カソード部などの電場解析に2次元電場モデルを用いた場合は電位が厚さ方向に一様であるとして、有限要素法解析に用いた要素を厚さ方向に引き伸ばして計算すればよい。

各領域で求めた磁束密度をすべて足し合わせることによって、めっき槽周辺の点 $\mathbf{p}$ における磁束密度 $\mathbf{B}$ は次式となる。

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = D \begin{Bmatrix} u_a \\ u_b \\ u_c \end{Bmatrix} \quad (4.15)$$

ここで、 D は測定位置 $\mathbf{p}$ およびめっき槽の形状で決まる既知行列である。式 (4.15) に「4.4.1 電場解析」で得られた式 (4.4)、式 (4.9) および式 (4.13) を代入すると、 $\mathbf{B}$ と $\mathbf{x} (= \{ \mathbf{j}_a^T \ \mathbf{j}_c^T \}^T)$ の関係式である次式が得られる。

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = D \begin{bmatrix} L_a & O_a \\ & L_b \\ O_c & L_c \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} j_a \\ j_c \end{Bmatrix} = A_p \mathbf{x} \quad (4.16)$$

ここで、 O_a, O_c は零行列であり、 A_p は $D, L_b, L_a, L_c, O_a, O_c$ をまとめた行列である。

4.4.3 観測方程式

磁束密度の測定を複数の場所で行うと A_p は測定場所に応じた様々な値を持つことになる。得られた磁束密度 $\mathbf{B}$ の測定データをベクトル $\mathbf{b}$ としてまとめると、観測方程式である次式が得られる。

$$\mathbf{b} = A \mathbf{x} \quad (4.17)$$

ここで、 A は $\mathbf{b}$ の各成分に対応する各 A_p によって構成される行列である。式 (4.17) を $\mathbf{x}$ について解くことによって、めっき槽外で測定した磁束密度のデータ $\mathbf{b}$ から $\mathbf{x}$ の値、すなわちアノードからめっき槽内に流出する電流密度 j_a およびめっき槽内からカソードに流入する電流密度 j_c を求めることができる。

式 (4.17) のみでの逆解析は可能であるが、推定解の精度を上げるため、総電流量の条件を制約条件として追加する。めっき槽に印加される総電流量を I とすると

$$\int_{\Gamma_a} j_a d\Gamma = I \quad (4.18)$$

$$\int_{\Gamma_c} j_c d\Gamma = -I \quad (4.19)$$

となる。境界要素法に用いた要素で式 (4.18) と式 (4.19) を離散化すると次式となる。

$$\mathbf{S}_a^T \mathbf{j}_a = I \quad (4.20)$$

$$\mathbf{S}_c^T \mathbf{j}_c = -I \quad (4.21)$$

ここで、 S_a, S_c は境界 Γ_a, Γ_c における要素形状に依存する既知ベクトルであり、一定要素を用いた場合は要素面積になる。式 (4.17) と同様にまとめると

$$\mathbf{d} = \mathbf{C} \mathbf{x} \quad (4.22)$$

となる。ここで

$$\mathbf{d} = \{ \quad I \quad -I \quad \}^T \quad (4.23)$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_a^T & \mathbf{O}_c \\ \mathbf{O}_a & \mathbf{S}_c^T \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

である。

4.5 逆解析手法

逆解析手法については、基本的に「第 2 章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」で述べた Tikhonov の適切化法 [49]-[56] と推定分極曲線を用いた再計算からなる 2 段階逆解析 [1]-[5] を用いる。しかし、磁場測定では電位測定に比べ、地磁気や磁性体、他の電気機器などによって多くの外乱が含まれやすい。そのため、本手法では第 2 章で述べた逆解析手法に加え、観測方程式の差分を用いる方法と参照分散による Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法を導入する。

4.5.1 観測方程式の差分を用いる方法

磁気センサで測定される磁束密度には地磁気などによる定磁場成分がオフセットとして含まれる。これらのオフセットは測定誤差と同様に逆解析において推定誤差を与える原因となる。そこで、観測方程式 (式 (4.17)) の差分

$$\Delta \mathbf{b} = (\Delta \mathbf{A}) \mathbf{x} \quad (4.25)$$

を改めて

$$\Delta \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}, \quad \Delta \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} \quad (4.26)$$

のように置き換え、逆解析に用いる観測方程式とする。これにより、測定データに含まれる定磁場成分の影響を除去した形で本逆解析手法を適用することができる。

4.5.2 参照分散による Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法

第 2 章では Tikhonov の適切化パラメータ α に測定誤差の分散 σ^2 に対する推定誤差 $\hat{\sigma}_2$ のずれを表す量である Kullback-Leibler の情報量を最小化する値を採用した。しかし、測定誤差の分散 σ^2 が十分大きくなると Tikhonov の適切化パラメータ α も大きくなり、推定解 $\hat{\mathbf{x}}$ が参照解 $\mathbf{x}_0$ とほぼ等しくなる。そのため、この Kullback-Leibler の情報量を基準とする方法には適用範囲がある^{*1}。

そこで、本研究では Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法に別の基準として、「2.5.1 第 1 次推定：Tikhonov の適切化法による未知量の概値推定」において参照解 $\mathbf{x}_0$ を計算する際に得られる参照分散 $\sigma_{\mathbf{x}}^2$ を利用する方法を提案する。

まず, Tikhonov の適切化法 (式 (2.41)) において, その適切化項 (式 (2.41) の第2項) を次式のよう
にアノードの電流密度 j_a に関する項とカソードの電流密度 j_c に関する項に分け, 適切化パラメー
タ α を2次元に拡張する.

$$\Pi_R(\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha_a \|j_a - j_{ao}\|^2 + \alpha_c \|j_c - j_{co}\|^2 \quad (4.27)$$

ここで, j_{ao} および j_{co} はアノードの電流密度 j_a およびカソードの電流密度 j_c の参照解である. 式
(4.27) を用いることにより, α_a は j_a について, α_c は j_c についてそれぞれ準独立的に適切化すること
ができる [54].

Bayes 推定では, (α_a, α_c) は推定解と参照解の差の分散 $\hat{\sigma}_x^2$ の逆数となる (「4.10.1 Bayes 推定と
Tikhonov の適切化法の関係」). そこで本手法では, 推定解と参照解の差の分散 $\hat{\sigma}_x^2$ が参照分散 σ_x^2
に等しいとする先験情報を与える. すなわち, 目的関数

$$\Psi_R(\alpha_a, \alpha_c) = \left(\frac{\|\hat{j}_a(\alpha_a, \alpha_c) - j_{ao}\|^2}{n_a} - \sigma_{ja}^2 \right) + \left(\frac{\|\hat{j}_c(\alpha_a, \alpha_c) - j_{co}\|^2}{n_c} - \sigma_{jc}^2 \right) \quad (4.28)$$

を最小にする (α_a, α_c) の値を選択する. ここで, $\hat{j}_a(\alpha_a, \alpha_c)$ および $\hat{j}_c(\alpha_a, \alpha_c)$ は式 (4.27) の (α_a, α_c) に
関する最小解, σ_{ja}^2 および σ_{jc}^2 はそれぞれ $j_a - j_{ao}$ および $j_c - j_{co}$ の参照分散である. n_a および n_c は
それぞれ j_a および j_c の次元である. 式 (4.28) を最小にする (α_a, α_c) の値を求めるには, 関数の微分
が不要な滑降シンプレックス法 [64] が有効である.

実際は真の値と参照解の差の分散 $\hat{\sigma}_x^2$ は参照分散 σ_x^2 とは異なるが, 第1次推定として未知量の
概値を推定する上では本方法は十分有効であると考えられる. 真の解の分散 $\hat{\sigma}_x^2$ が既知である場合
には, それを式 (4.28) 中の参照分散の代わりに用いることでより真の値に近い推定解が得られると
期待される.

なお, 制約条件である式 (4.22) を課す場合は式 (4.27) の最後に, 式 (4.22) の残差ベクトルと Lagrange
の未定乗数 λ との内積 $(C\mathbf{x} - \mathbf{d})^T \lambda$ を加えればよい.

4.6 本手法検証用の電気銅めっき装置

図 4-5 および図 4-6 に本手法の検証に用いる電気銅めっき装置の概略図を示す. めっき槽にはア
クリル製の矩形容器 (幅 100 mm, 奥行 60 mm, 高さ 130 mm) を用い, LSI めっきに用いる電解液
(主成分: 硫酸銅, 電気伝導度 $\kappa_s = 25.3 / \Omega\text{m}$) を高さ $h = 100$ mm まで満たす. アノードには銅棒
(直径 $\phi = 6$ mm, 長さ $H = 160$ mm) を用い, これをめっき槽内で動かすことによって様々な電位分
布を形成させる (図 4-6 左). カソードには薄い銅板 (幅 100 mm, 長さ 130 mm, 厚さ $t = 0.5$ mm)
を用い, この上にめっきを施す. なお, カソード銅板は裏側に電解液が回り込まないように, 裏側
全体から表側の周り 5 mm にかけてビニルテープでマスキングする (図 4-6 右).

x, y, z 軸, 原点 O を図 4-5 および図 4-6 のようにとる. 本めっき装置は z 軸方向 (深さ方向) に
対して, ほぼ一様の電場分布を形成することができるため, 数値シミュレーションおよび検証実験
では x 軸方向のカソード銅板上の電流密度分布を推定する.

*1 Tikhonov の適切化パラメータの決定方法について, 測定データの次元が小さい場合には Tikhonov の適切化法 (式 (2.41))
の第1項である残差二乗和が小さく, L カープ法でも適切化に十分な Tikhonov の適切化パラメータが得られる. しかし, 本
研究では測定データの次元を増やすことで L カープの角部が不鮮明となったため, 別の基準として Kullback-Leibler の情報
量を利用するに至った.

さらに数値シミュレーションにより, Kullback-Leibler の情報量には測定誤差と数理モデルの条件数に依存する適用範囲が
あることを確認した. 測定誤差が十分に小さい場合は数理モデルの数値的な不安定性が顕著になる. 一方, 測定誤差が十分
に大きい場合は対応する適切化パラメータも大きくなり, 推定解が参照解とほぼ等しくなる. これらのことから, 測定誤差
が小さい順に有効な基準を並べると, L カープ法 < Kullback-Leibler の情報量 < 参照分散であると考えられる.

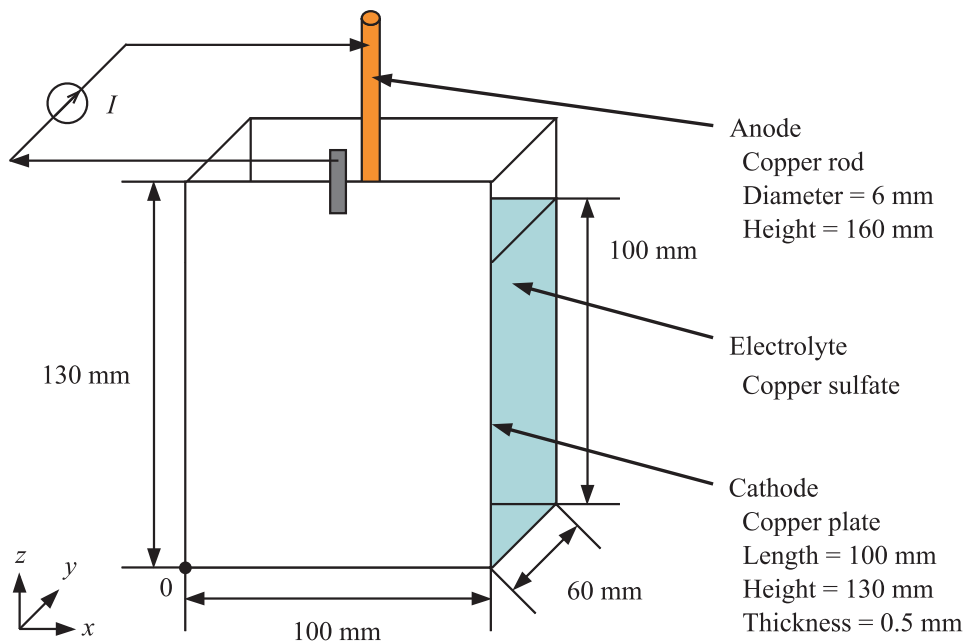


Fig. 4-5: The electroplating device for the verification of the proposed method

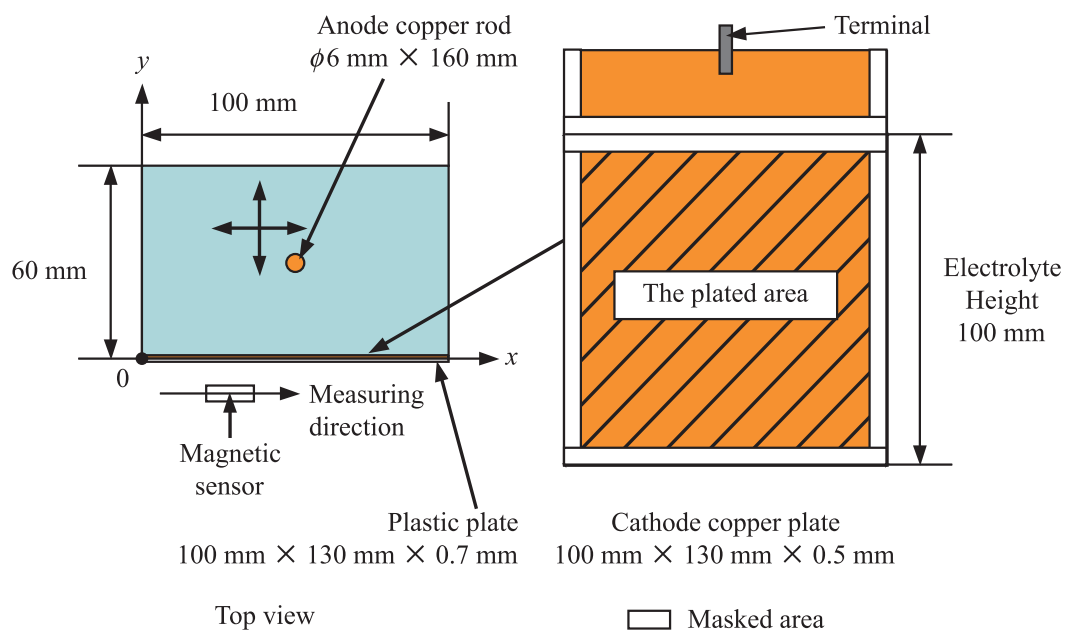


Fig. 4-6: The details of the anode and the cathode

4.7 数値シミュレーションによる数値実験

本手法の有効性を検討するため、「4.6 本手法検証用の電気銅めっき装置」の電気銅めっき装置を対象とし、カソード銅板に流入する電流密度分布 j_c を本手法によって推定する数値実験を行う。

4.7.1 数値実験条件

図 4-7 に逆解析に用いる本めっき装置の有限要素モデルを示す。めっき槽内の電場は z 軸方向に対してほぼ一様であると近似し、2次元有限要素法によって解析する。磁場解析では、この2次元電場を z 軸方向に引き伸ばして解析を行う。有限要素法では三角形一次要素を用い、各要素の辺上において電流密度を一定とする。槽内アノード側を 24 分割、槽内カソード側を 40 分割する。

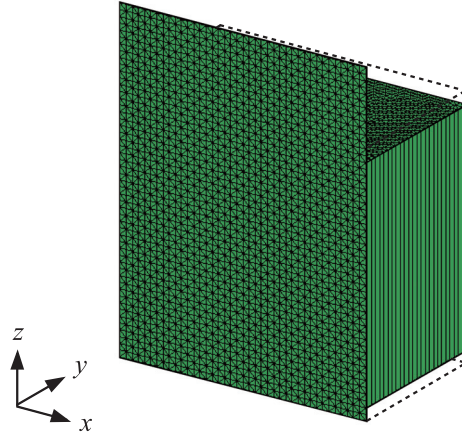


Fig. 4-7: The finite elements of the electroplating device for the inverse analysis

また、アノード内はアノード断面に対して電流密度が一様であると近似し、電解液に浸っている箇所の電流量は線形に減少するとする。すなわち、高さ z におけるアノード銅棒内の電流密度 $j(z)$ を

$$j(z) = \begin{cases} \frac{4I}{\pi\phi^2} \frac{z}{h_t - h_b} & h_b \leq z \leq h_t \\ \frac{4I}{\pi\phi^2} & h_t < z \leq H \end{cases} \quad (4.29)$$

とする。ここで、 h_t および h_b はカソード銅板におけるマスキング境界の上端および下端の高さ、 H はアノード銅棒の上端の高さ、 ϕ はアノード銅棒の直径である。式 (4.29) を用い、アノード銅棒内の電場から誘起される磁束密度は Biot-Savart の法則によって計算する。

めっき電解液の電気伝導度を $\kappa_s = 25.3 / \Omega\text{m}$ 、銅の電気伝導度を $\kappa_c = 6.0 \times 10^7 / \Omega\text{m}$ とし、解析領域の透磁率をすべて $\mu = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ で一様とする。アノードおよびカソードの分極曲線 $f_a(\bullet), f_c(\bullet)$ には図 4-8 に示す銅-硫酸銅の分極曲線を正解のデータとして用いる。

逆解析に用いる磁束密度について、その測定位置はカソード銅板に流入する電流密度に対して最も感度が良いカソード銅板の裏側 $y = -10 \text{ mm}$ 、 $z = 90 \text{ mm}$ において、 x 軸方向に対して、 $x = 0 \text{ mm}$ から $x = 100 \text{ mm}$ まで 1 mm ごとに計 101 点とする。磁束密度の方向はカソード銅板に流入する電

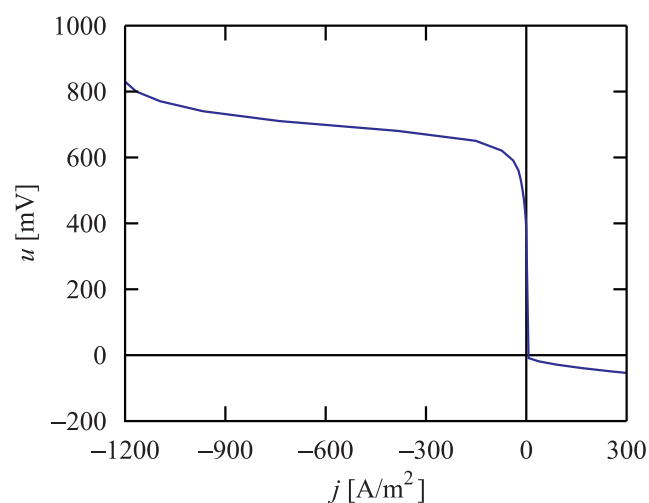


Fig. 4-8: The polarization curve of Cu in CuSO_4

流密度に対して最も感度が良い x 軸方向の磁束密度を用いる。疑似測定データには数理モデルの計算によって得られる順解析結果に標準偏差 1 nT および $0.1 \mu\text{T}$ の 2 種類の正規分布するランダムノイズを加えたものを用いる。与えるランダムノイズの大きさを変えることにより、Kullback-Leibler の情報量を基準とする Tikhonov の適切化パラメータ α の決定方法の適用範囲に関して考察する。

4.7.2 数値実験結果

アノード銅棒の位置を $(x, y) = (30, 10)$ mm、印加電流を $I = 1.0$ A としたときの数値実験の結果を以下に示す。図 4-9 は順解析によって得られた測定点における磁束密度の疑似測定データである。

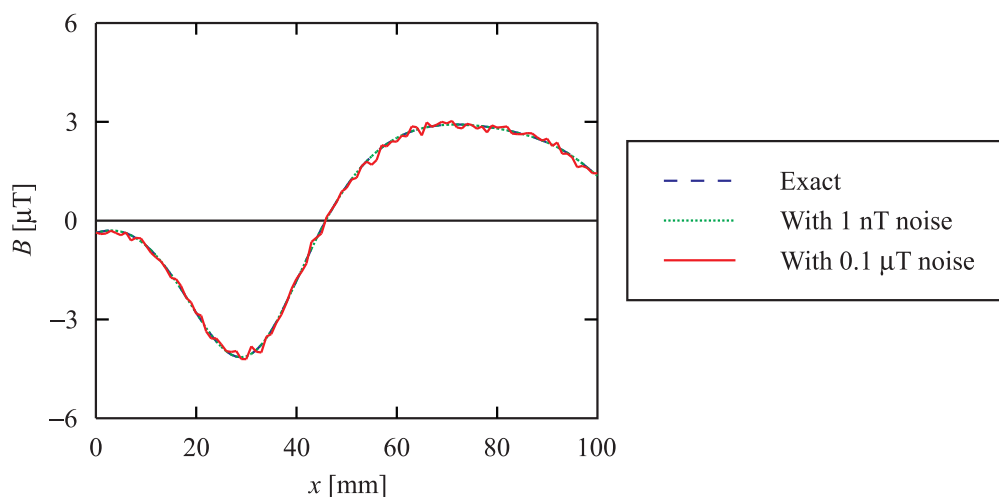


Fig. 4-9: The phantom data of the magnetic flux densities when the center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm

a. ランダムノイズの標準偏差が1 nT の場合

図4-9中の加えたランダムノイズの標準偏差が1 nT の場合の疑似測定データに対して、本逆解析手法を適用し、得られた結果を図4-10～図4-15に示す。

図4-10は第1次推定におけるTikhonovの適切化パラメータをKullback-Leiblerの情報量から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布の推定結果である。第1次推定解と第2次推定解ともに正解の分布とよく合うことが分かる。

第1次推定において、Tikhonovの適切化パラメータ α を徐々に増加させていくことで得られた式(2.25)の値およびLカーブを図4-11および図4-12に示す。図4-11および図4-12中の○は滑降シンプレックス法によって得られたKullback-Leiblerの情報量が最小となる点である。図4-11は両対数グラフにするため、式(2.25)の最小値が1になるようにすべての値にオフセットを加えた。

図4-11より、Tikhonovの適切化パラメータ α の最適値が存在し、滑降シンプレックス法によってその値が得られたことが分かる。また図4-12より、この数値シミュレーションの場合ではLカーブの角部がKullback-Leiblerの情報量からTikhonovの適切化パラメータ α を求めた場合とほぼ一致していることが分かる。これは疑似測定データとして加えたランダムノイズの標準偏差が1 nT と微小であったためと考えられる[55]。

第2次推定において、多項式回帰によって推定された分極曲線を図4-13に示す。図4-13を正解の分極曲線(図4-8)と比較するとカソード側の分極曲線の傾向は第一次推定解の電流密度の範囲内で正解の分極曲線とよく一致している。一方、アノード側の分極曲線ほぼ等電流密度の状態となっている。これはアノード側の電流密度に対して、測定される磁束密度がほとんど感度を持たないためである。

図4-16および図4-15は第1次推定におけるTikhonovの適切化パラメータを参照分散から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布および分極曲線の推定結果である。ここで、正解値の分散の平方根は $\sigma_{ja} = 58 \text{ A/m}^2$ および $\sigma_{jc} = 77 \text{ A/m}^2$ であり、これに対して、参照分散の平方根は $\sigma_{ja} = 121 \text{ A/m}^2$ および $\sigma_{jc} = 108 \text{ A/m}^2$ であった。参照分散と正解値の分散に大きな差がないため、参照分散を利用した場合でも、第2次推定解と正解の電流密度分布がよく合う。

b. ランダムノイズの標準偏差が0.1 μT の場合

図4-9中の加えたランダムノイズの標準偏差が0.1 μT の場合の疑似測定データに対して、本逆解析手法を適用し、得られた結果を図4-16～図4-21に示す。

図4-16は第1次推定におけるTikhonovの適切化パラメータをKullback-Leiblerの情報量から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布の推定結果である。また、第1次推定において、Tikhonovの適切化パラメータ α を徐々に増加させていくことで得られた式(2.25)の値およびLカーブを図4-17および図4-18に示す。図4-17より、ランダムノイズの標準偏差が0.1 μT と大きくなると、式(2.25)に極小値があらわれず、Tikhonovの適切化パラメータ α は大きな値をとることが分かる。これはKullback-Leiblerの情報量を基準とする方法の適用範囲外といえる。したがって、図4-16のように、電流密度の推定結果は参照解とした平均電流密度とほぼ等しくなる。

図4-20および図4-21は第1次推定におけるTikhonovの適切化パラメータを参照分散から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布および分極曲線の推定結果である。「a. ランダムノイズの標準偏差が1 nT の場合」と同様に、参照分散と正解値の分散に大きな差がないため、Kullback-Leiblerの情報量を基準とした方法の適用範囲外のノイズに対しても、参照分散を利用することによって正解に近い電流密度分布を推定することができた。

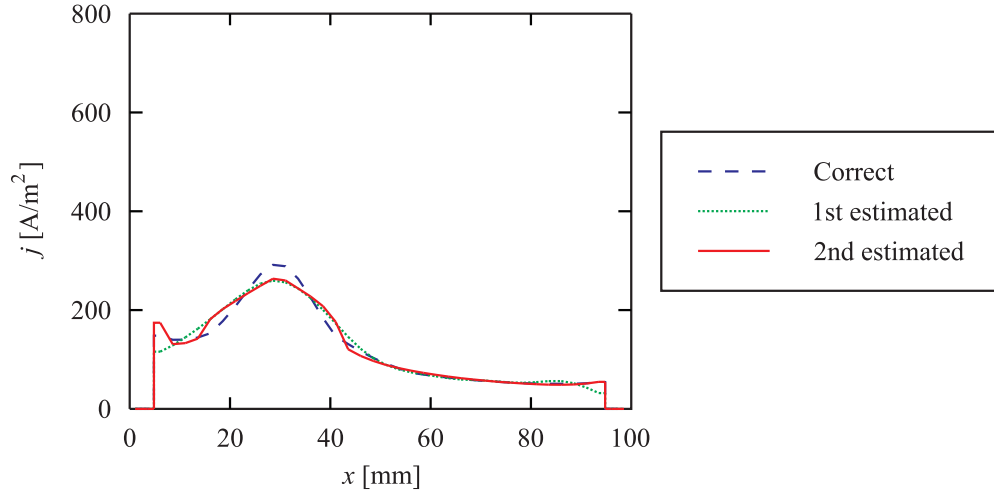


Fig. 4-10: The current density on the cathode estimated by the proposed method
—The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

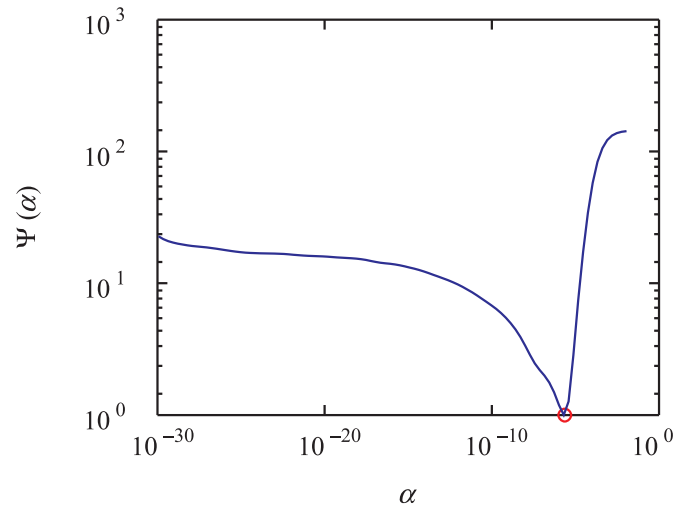


Fig. 4-11: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
—The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

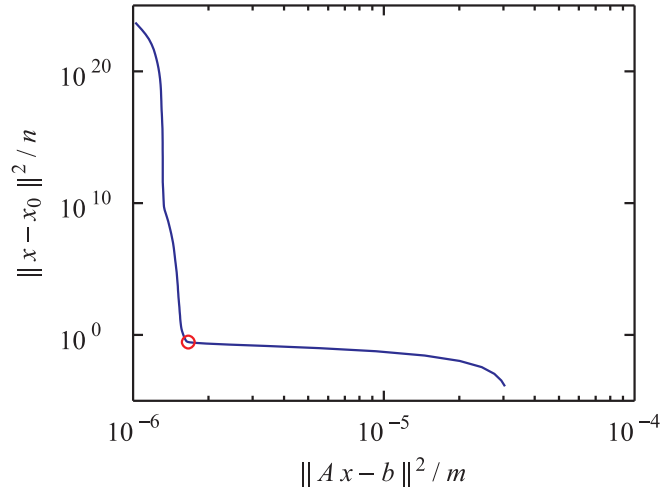


Fig. 4-12: L-curve—The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

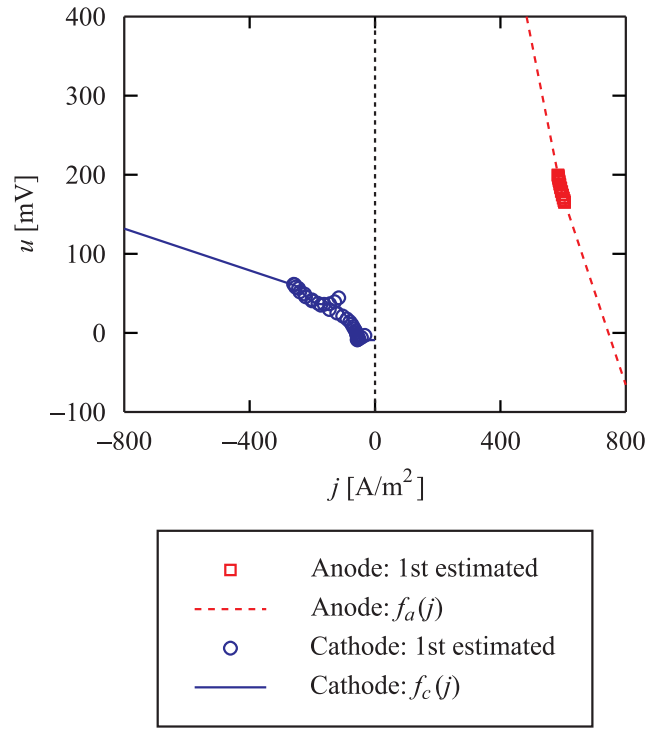


Fig. 4-13: The polarization curves estimated by the regression analysis
—The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} f_a(j) = 9.05 \times 10^3 - 28.2j + 2.24 \times 10^{-2}j^2 \\ f_c(j) = 44.3 + 3.57j + 7.71 \times 10^{-2}j^2 + 6.27 \times 10^{-4}j^3 + 2.23 \times 10^{-6}j^4 + 2.88 \times 10^{-9}j^5 \end{cases}$$

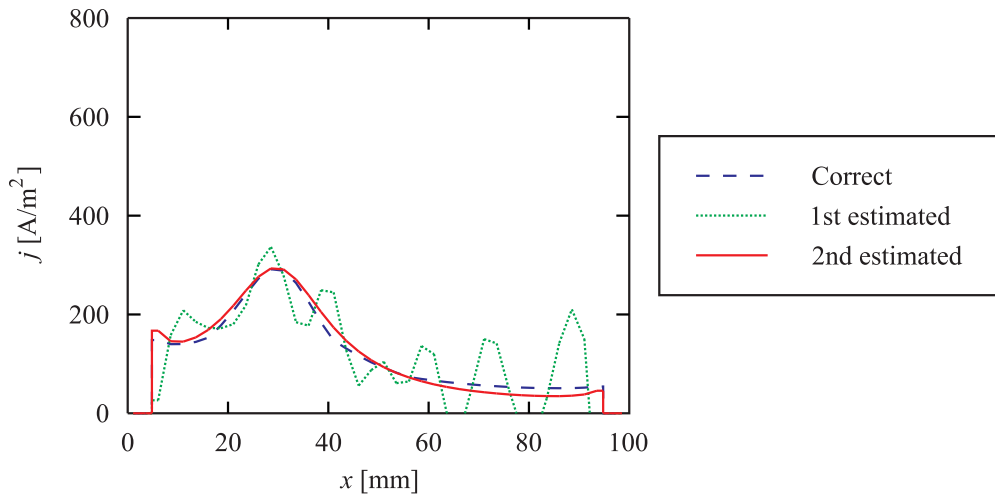


Fig. 4-14: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by the reference variance.

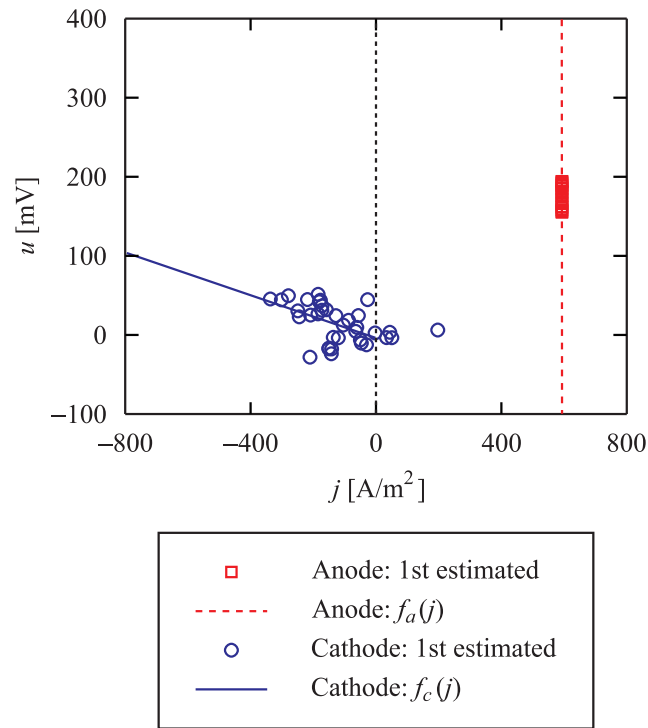


Fig. 4-15: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The standard deviation of the artificial noise is 1 nT and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ f_c(j) = -3.71 - 0.135j \end{cases}$$

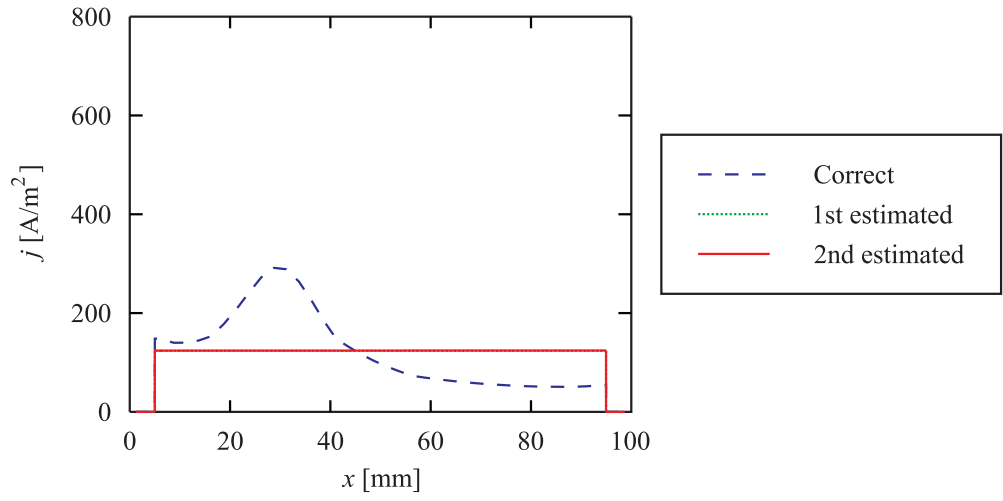


Fig. 4-16: The current density on the cathode estimated by the proposed method
—The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

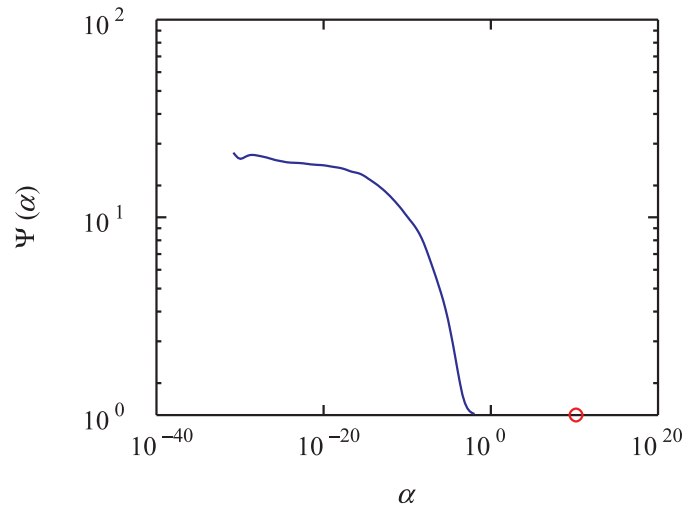


Fig. 4-17: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
—The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

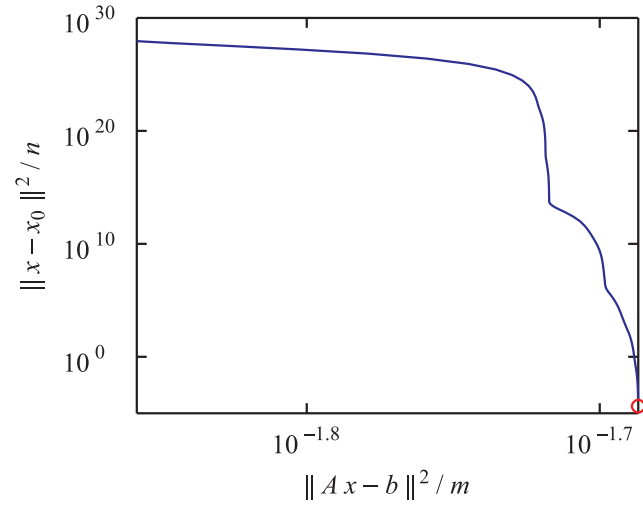


Fig. 4-18: L-curve—The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

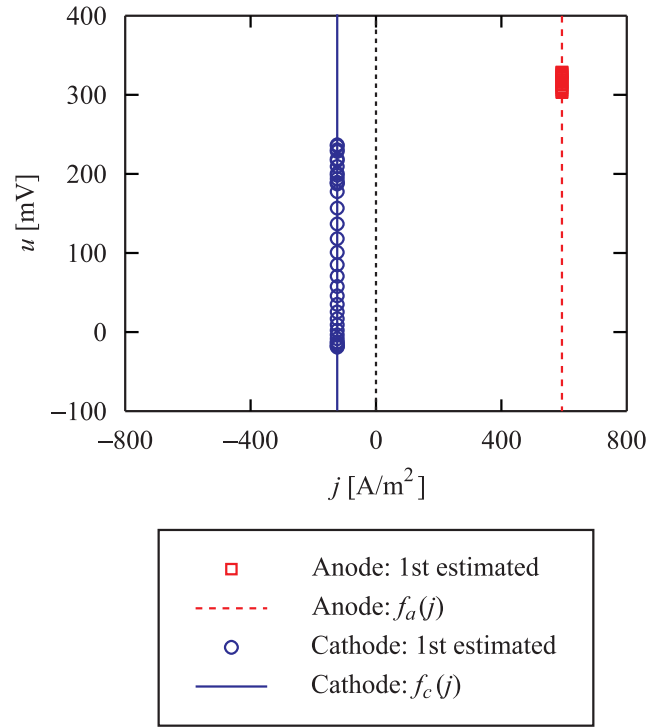


Fig. 4-19: The polarization curves estimated by the regression analysis
—The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ g_c(u) = f_c^{-1}(u) = -1.23 \times 10^2 \end{cases}$$

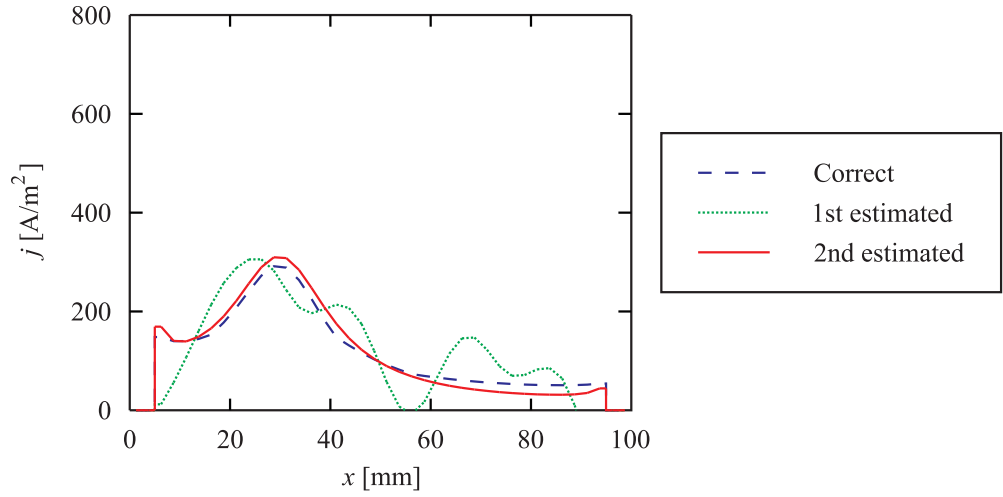


Fig. 4-20: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by the reference variance.

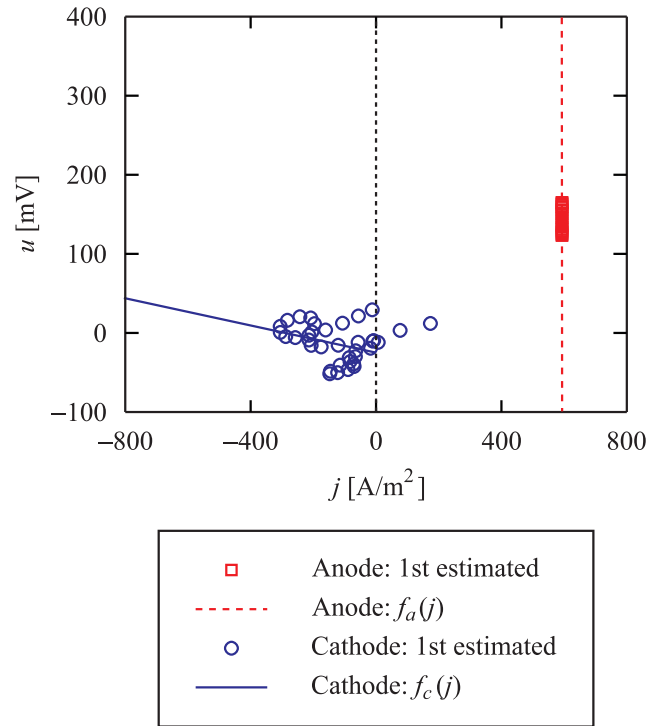


Fig. 4-21: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The standard deviation of the artificial noise is $0.1 \mu\text{T}$ and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ f_c(j) = -24.9 - 8.57 \times 10^{-2} j \end{cases}$$

4.8 電気銅めっき装置による検証実験

4.8.1 実験装置と実験手順

図 4-22 に磁気測定を行うための実験装置を示す。MTI 社製フラックスゲート式磁気センサ FM-1010A を用い、めっき装置外部に生じる磁束密度を測定する。磁束密度の測定では他の電気機器や地磁気などの影響によって様々な外乱が生じる。本測定ではこれらの影響を除去するために、めっき装置に電流を印加していない時の磁束密度をあらかじめ測定し、これをオフセットとする。磁束密度の測定中はこのオフセットの変動が十分小さいとし、電流を印加している時の磁束密度からこのオフセットを引いた値をめっき装置から生じる磁束密度として用いた。

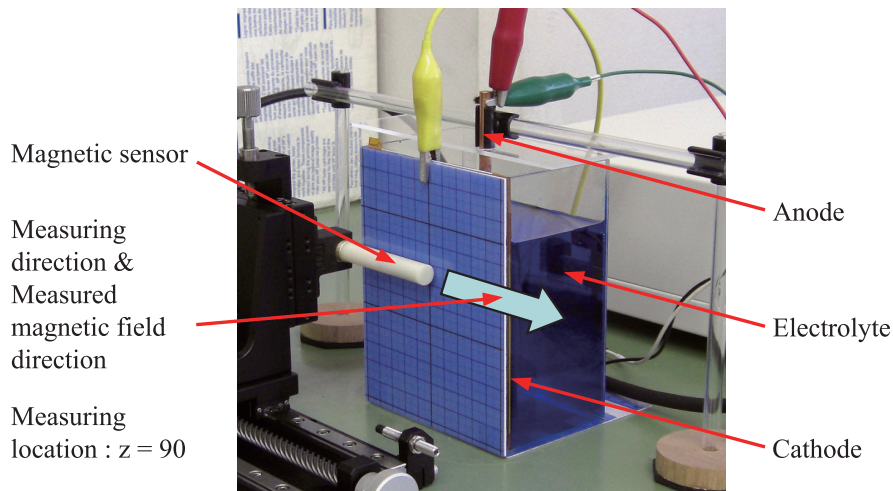


Fig. 4-22: The experimental setup

4.8.2 解析モデル

本手法を適用するにあたって必要な数値モデルは「4.7 数値シミュレーションによる数値実験」で用いた有限要素モデルを利用する（図 4-7）。逆解析に用いる磁束密度についても同様に、その測定位置はカソード銅板に流入する電流密度に対して最も感度が良いカソード銅板の裏側 $y = -10$ mm, $z = 90$ mm において、 x 軸方向に対して、 $x = 0$ mm から $x = 100$ mm まで 1 mm ごとに計 101 点とする。磁束密度の方向はカソード銅板に流入する電流密度に対して最も感度が良い x 軸方向の磁束密度を用いる。

4.8.3 実験結果

印加電流を $I = 1.0$ A に固定し、アノード銅棒の位置を $(x, y) = (10, 10), (30, 10), (50, 10), (50, 30)$ mm の 4 種類とした。これらの条件のときの測定点における磁束密度の x 方向成分の測定結果を図 4-23 に示す。ここで、図 4-23 の磁束密度の測定値は測定範囲 $x = 0 \sim 100$ mm を 100 に分割したときの各区間における平均値であり、その標準偏差 σ は全区間の偏差二乗和から計算した標準偏差で

ある．なお，本実験において，リード線内を流れる電流から生じる磁束密度はアノード側とカソード側のリード線を束ねることで相殺するようにした．電源装置は外乱とはならなかった．

これらの測定データを用い，本手法を適用することで，カソード銅板に流入する電流密度を推定した．

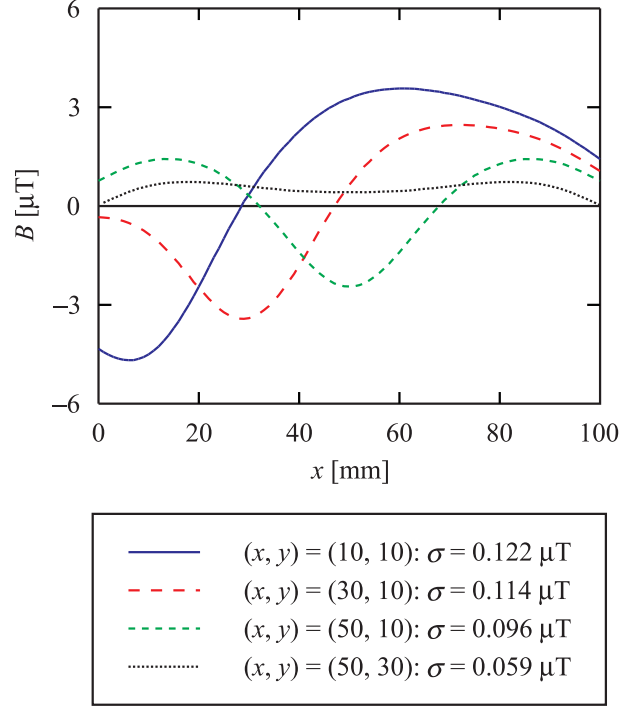


Fig. 4-23: The measured data of the magnetic flux densities when the center of the anode rod is located at the several positions

図 4-24～図 4-29 はアノード銅棒の位置が $(x, y) = (10, 10)$ mm のときの本手法による推定結果である．図 4-24 は第 1 次推定における Tikhonov の適切化パラメータを Kullback-Leibler の情報量から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布の推定結果である．図 4-24 中の一点鎖線は標本の分極曲線（図 4-8）を用いた従来の数値解析 [58]-[63] による結果である．また，破線はめっき膜厚分布の実測値から計算した電流密度分布であり，その計算式は

$$j_i = \frac{I t_i}{\sum_i t_i} \quad (4.30)$$

とした．ここで， t_i は i 番目のめっき膜厚であり， j_i がめっき膜厚 t_i に対応する電流密度である．

図 4-24 より，本手法による電流密度の推定結果は，第 1 次推定解と第 2 次推定解ともに従来法で得られる傾向とよく合うことが分かる．また，図 4-28 は第 1 次推定における Tikhonov の適切化パラメータを参照分散から求めた場合に得られたカソード銅板に流入する電流密度分布の推定結果である．ここで，数値解析結果の分散の平方根は $\sigma_{ja} = 99$ A/m² および $\sigma_{jc} = 136$ A/m²，めっき膜厚からの計算結果の分散の平方根は $\sigma_{jc} = 157$ A/m² である．これに対して，参照分散の平方根は $\sigma_{ja} = 214$ A/m² および $\sigma_{jc} = 181$ A/m² であった．カソード側に関して，参照分散と数値解析結果お

よびめっき膜厚からの計算結果の分散に大きな差がないため、参照分散を利用した場合でも、第2次推定解と数値解析およびめっき膜厚による電流密度分布がよく合う。

図4-30～図4-35はアノード銅棒の位置が $(x,y) = (30, 10)$ mm のときの本手法による推定結果である。これらの結果はアノード銅棒の位置を $(x,y) = (10, 10)$ mm としたときと同様の結果となり、本手法によってカソード銅板に流入する電流密度を推定することができた。

図4-36～図4-41はアノード銅棒の位置が $(x,y) = (50, 10)$ mm のときの本手法による推定結果である。図4-36より、この場合はKullback-Leiblerの情報量から求めたTikhonovの適切化パラメータが適切化に十分な値とならず、第1次推定解が大きな推定誤差を持つことが分かる。これは磁束密度の測定データに実際に含まれている測定誤差に比べ、測定データから計算して得られた標準偏差が小さかったためと考えられる。この場合、測定回数を増やし、より精度の良い測定をする必要がある。一方、図4-40より、Tikhonovの適切化パラメータを測定データの標準偏差に依存しない参照分散から求めた場合には数値解析結果およびめっき膜厚による計算結果とよく合う推定結果が得られることが分かる。

図4-42～図4-47はアノード銅棒の位置が $(x,y) = (50, 30)$ mm のときの本手法による推定結果である。図4-43より、この場合では極小値があらわれず、Tikhonovの適切化パラメータ α は大きな値をとることが分かる。これはKullback-Leiblerの情報量を基準とする方法の適用範囲外といえる。したがって、前節の「4.7 数値シミュレーションによる数値実験」の場合と同様に、図4-42のように電流密度の推定結果は参照解とした平均電流密度とほぼ等しくなる。これに対して、Tikhonovの適切化パラメータを参照分散から求めた場合、図4-46のように数値解析結果およびめっき膜厚による計算結果とよく合う推定結果が得られる。

以上の結果より、アノード銅棒の位置を変えた種々のめっき条件に対し、本手法によって、めっき槽周辺の磁束密度からカソード銅板に流入する電流密度分布を推定できることが示された。また、以上の磁束密度の測定結果および逆解析結果より、本手法の第1次推定におけるTikhonovの適切化法の決定方法についてまとめたものを表4-2に示す。Kullback-Leiblerの情報量から求めたTikhonovの適切化パラメータが適切化に十分な値をとらない場合は、より精度の良い測定をするか、参照分散を利用した適切化を行う必要がある。

Table. 4-2: The summary about the determination criteria of the regularization parameters

アノード銅棒 の位置 (x,y)	Kullback-Leibler の情報量 を基準とする方法	参照分散を利用する方法
(10, 10)	○	○ 参照分散が正解値の分散に近い ときは正解値に近い推定解が得 られる。ただし、Tikhonov の 適切化法において設定する参照 解と同様に、参照分散の値も先 験的に与える必要がある。
(30, 10)	○	
(50, 10)	× … 測定データの標準偏差が 小さいため、Tikhonov の適切 化パラメータも適切化に十分な 値よりも小さい。	
(50, 30)	× … 測定データの標準偏差が 大きいため、Kullback-Leibler の情報量の式 (式 (2.25)) に極 小値があらわれない。	

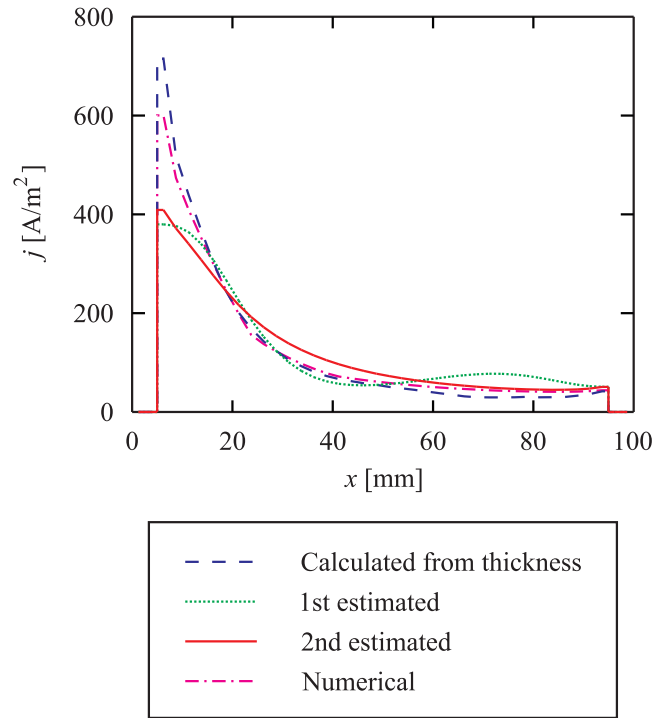


Fig. 4-24: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

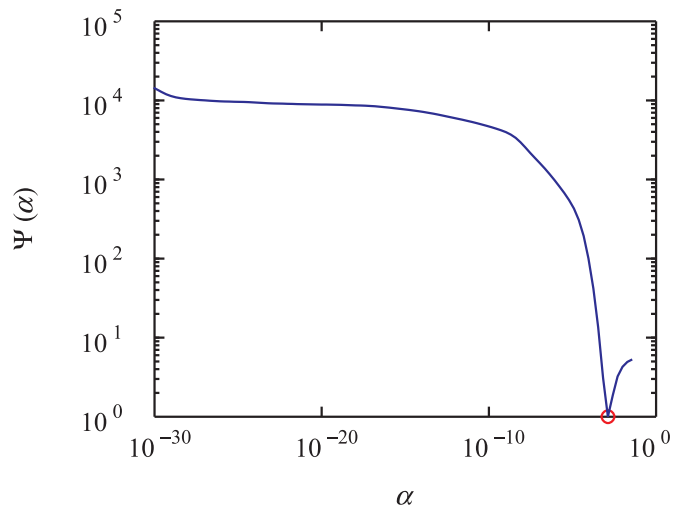


Fig. 4-25: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

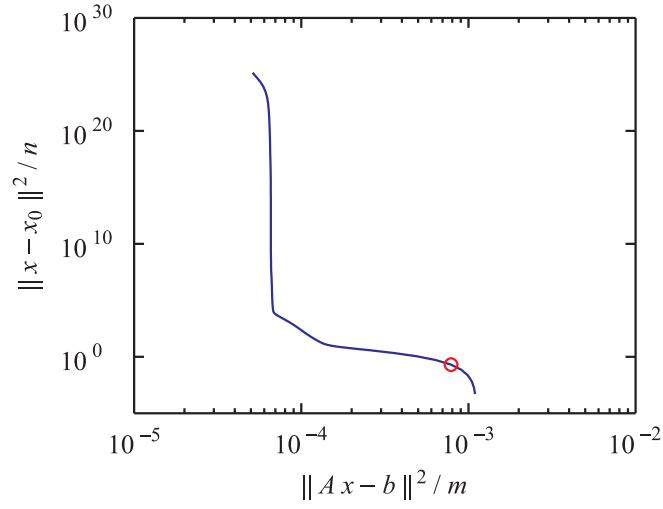


Fig. 4-26: L-curve—The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

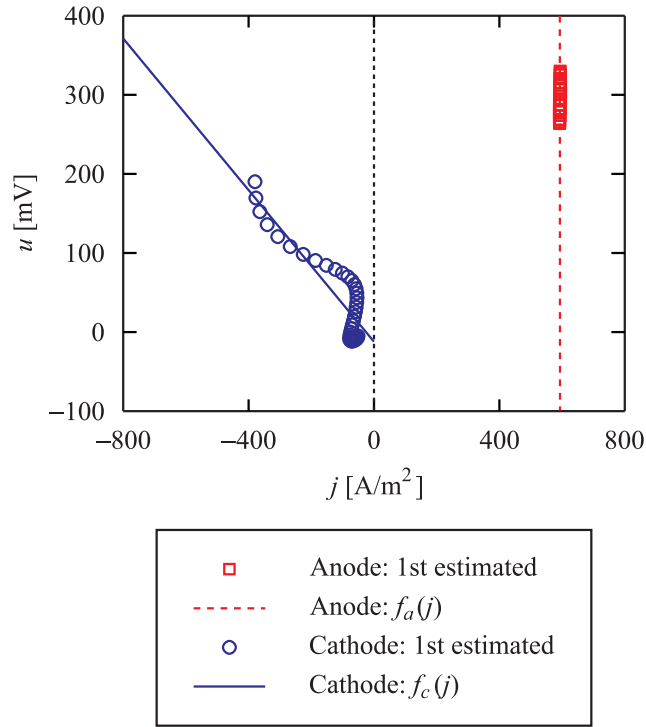


Fig. 4-27: The polarization curves estimated by the regression analysis —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ f_c(j) = -12.2 - 0.479j \end{cases}$$

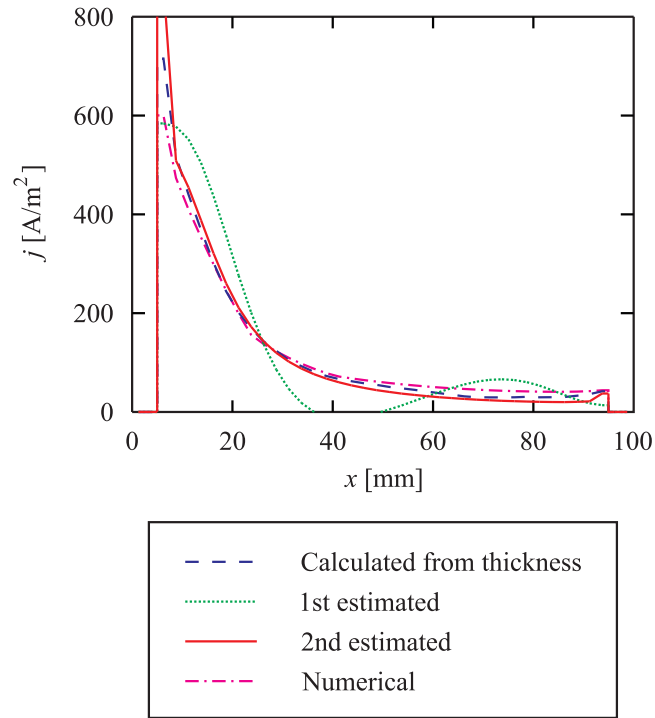


Fig. 4-28: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

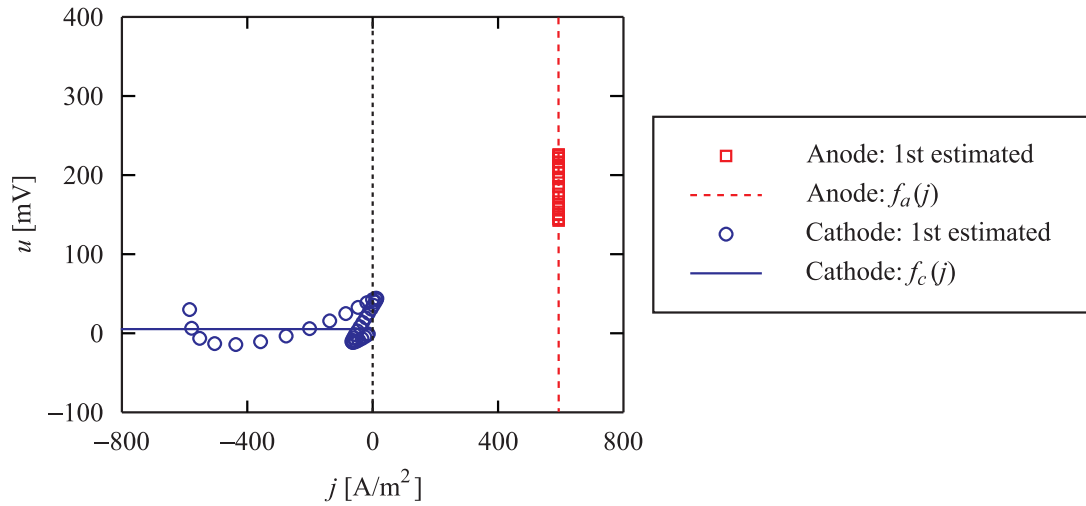


Fig. 4-29: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (10, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ f_c(j) = 5.27 \end{cases}$$

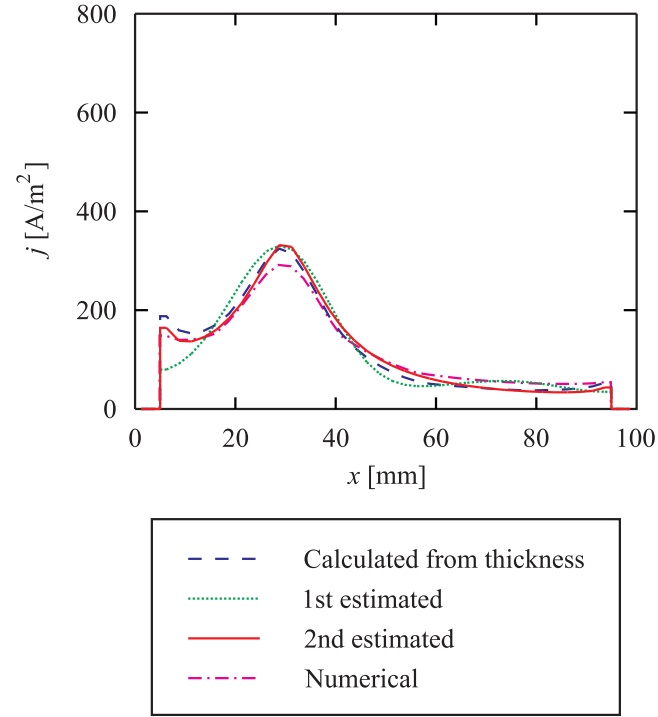


Fig. 4-30: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

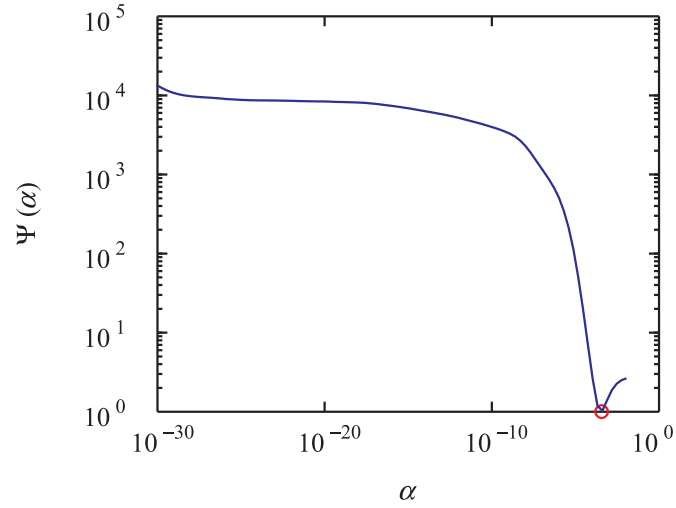


Fig. 4-31: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

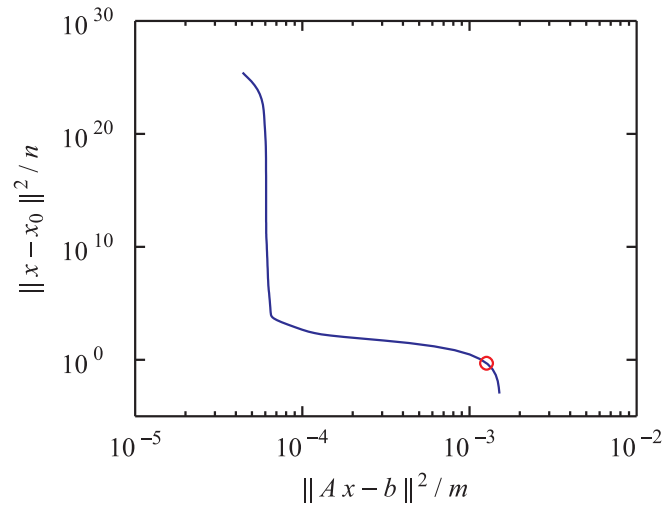


Fig. 4-32: L-curve—The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

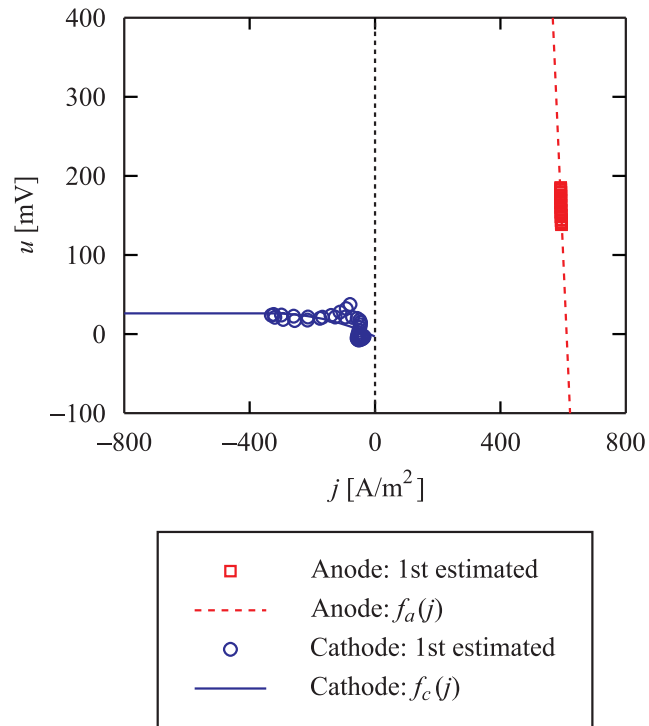


Fig. 4-33: The polarization curves estimated by the regression analysis —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} f_a(j) = 5.53 \times 10^3 - 9.04j \\ f_c(j) = -2.98 - 0.177j - 2.71 \times 10^{-4}j^2 \end{cases}$$

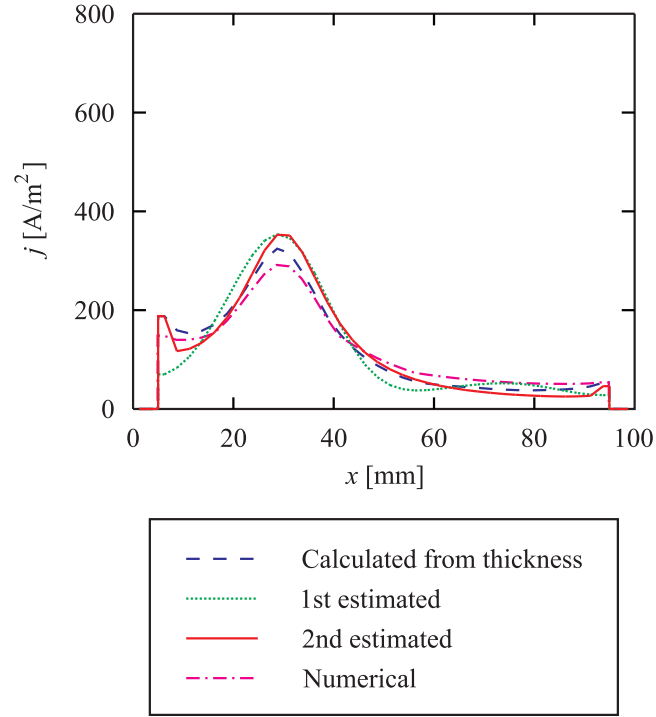


Fig. 4-34: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

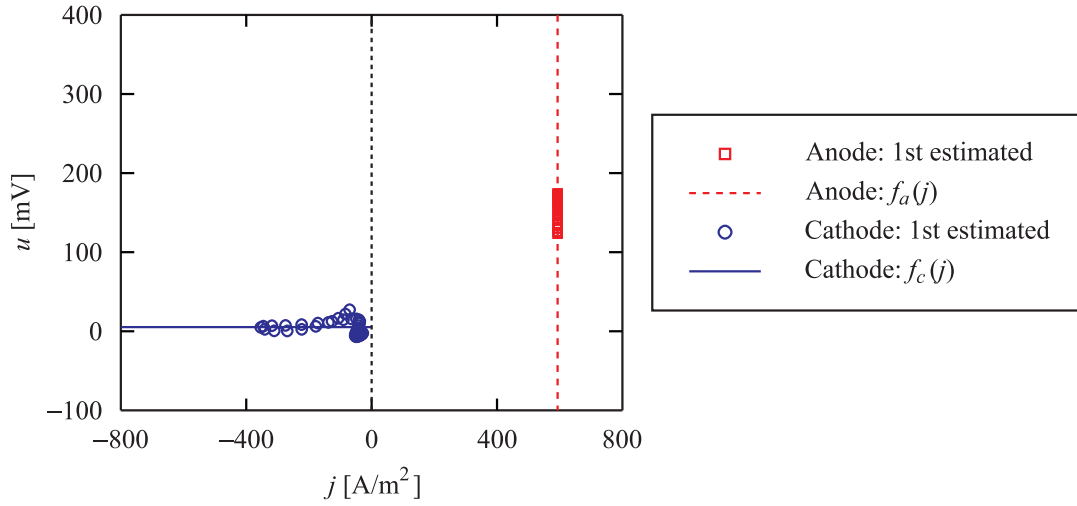


Fig. 4-35: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (30, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} f_a(j) = 2.02 \times 10^7 - 3.41 \times 10^4 j \\ f_c(j) = 5.20 \end{cases}$$

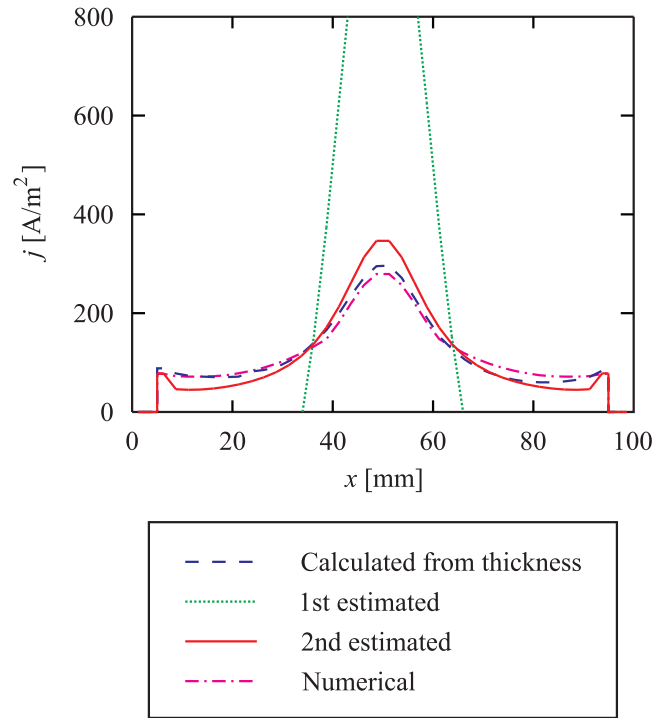


Fig. 4-36: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

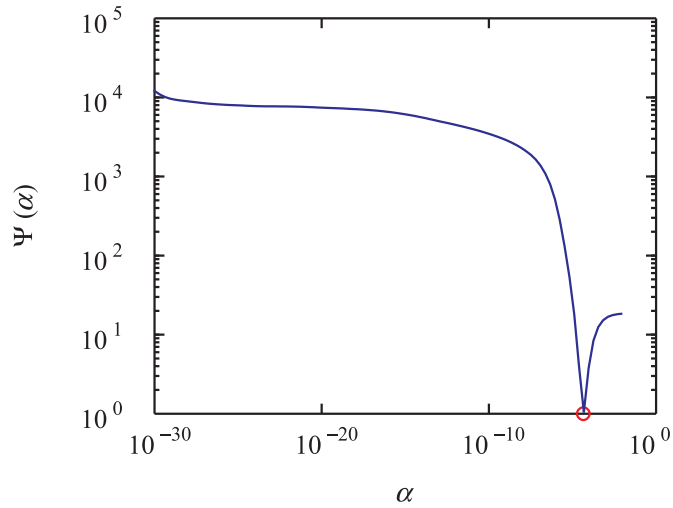


Fig. 4-37: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

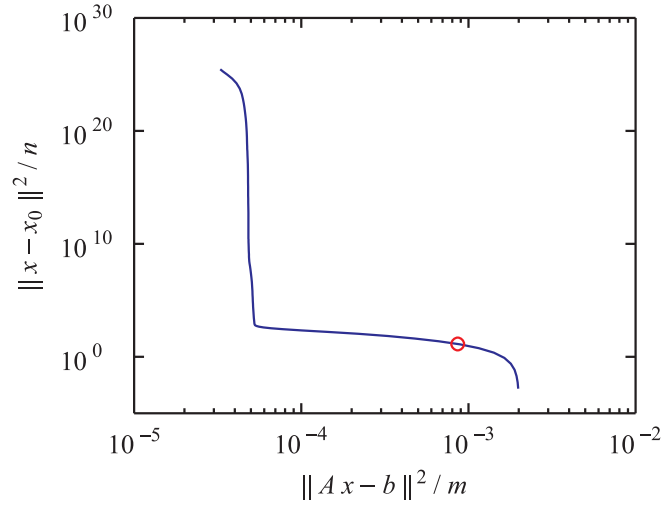


Fig. 4-38: L-curve—The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

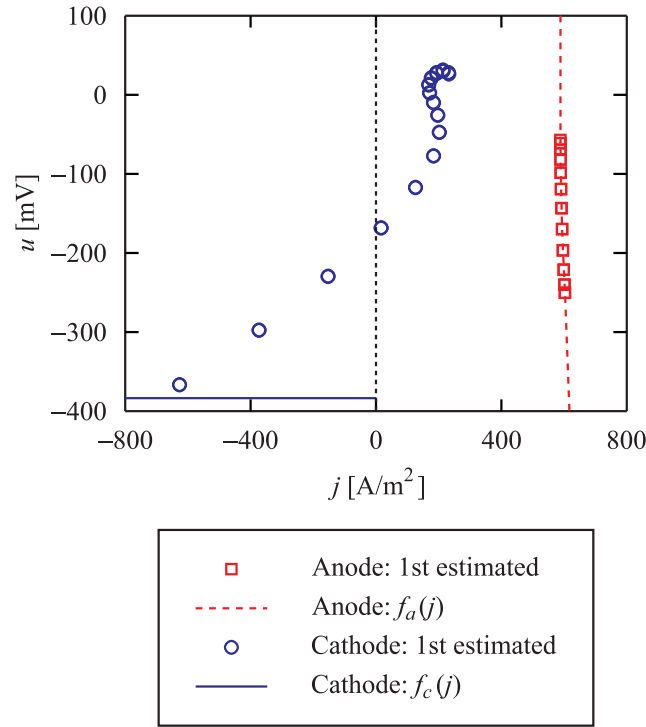


Fig. 4-39: The polarization curves estimated by the regression analysis —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} f_a(j) = 1.48 \times 10^7 - 7.41 \times 10^4 j + 1.24 \times 10^2 j^2 - 6.88 \times 10^{-2} j^3 \\ f_c(j) = -3.84 \times 10^2 \end{cases}$$

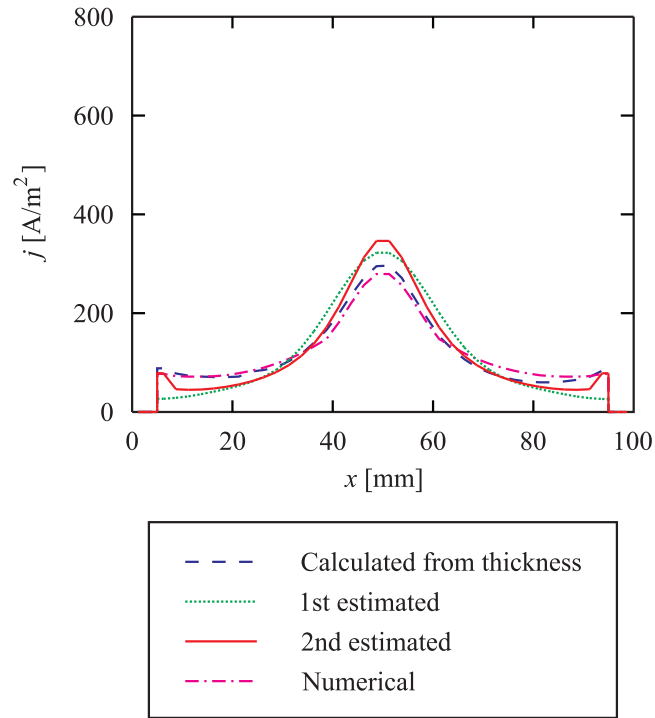


Fig. 4-40: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

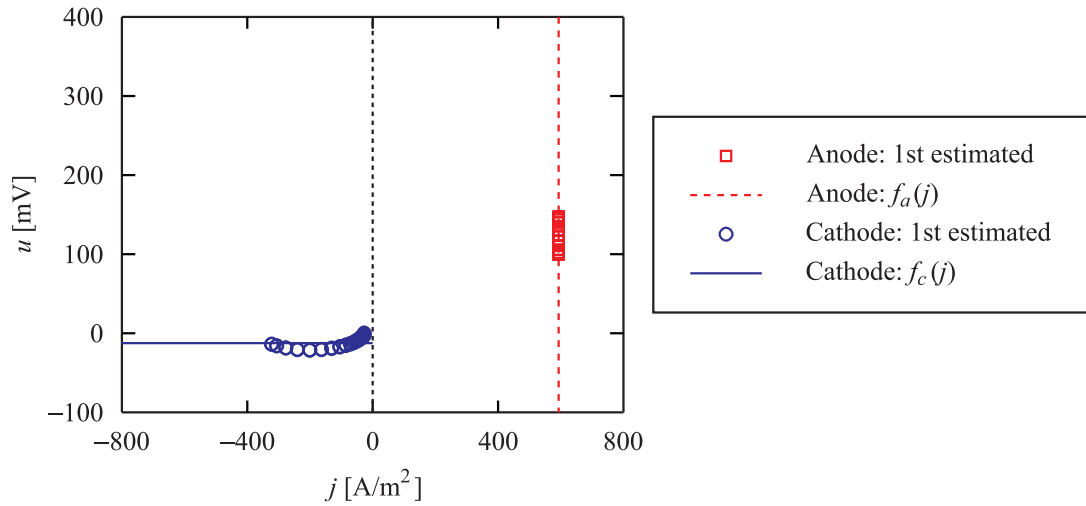


Fig. 4-41: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 10)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} f_a(j) = 1.88 \times 10^7 - 3.17 \times 10^4 j \\ f_c(j) = -12.5 \end{cases}$$

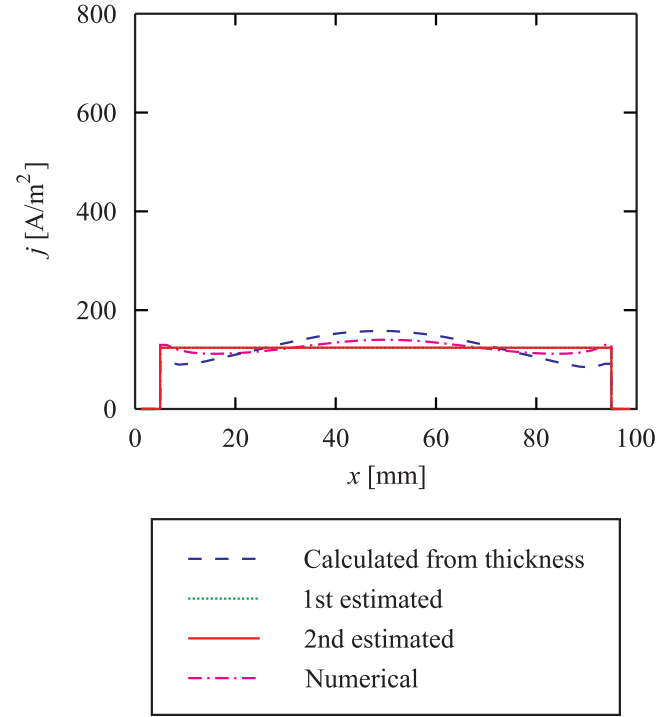


Fig. 4-42: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

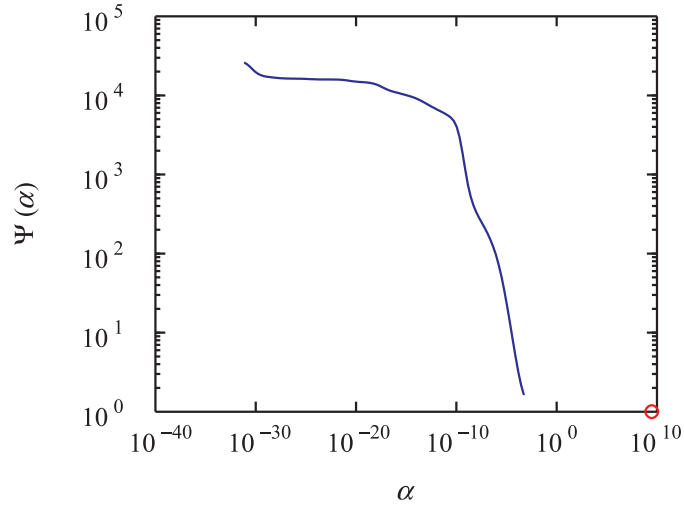


Fig. 4-43: Tikhonov regularization parameter vs. Kullback-Leibler divergence
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

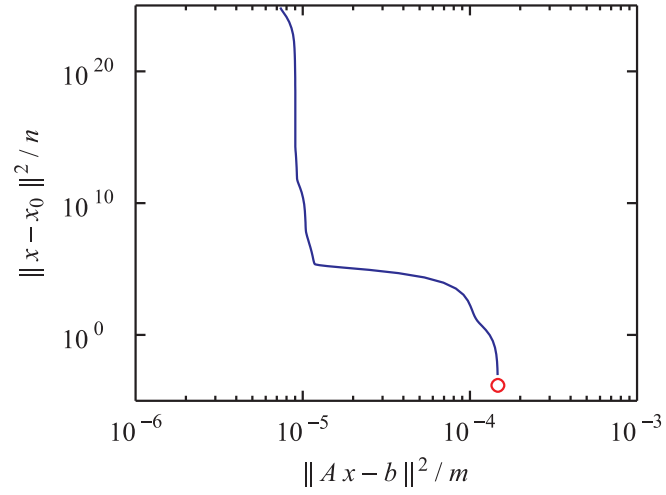


Fig. 4-44: L-curve—The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

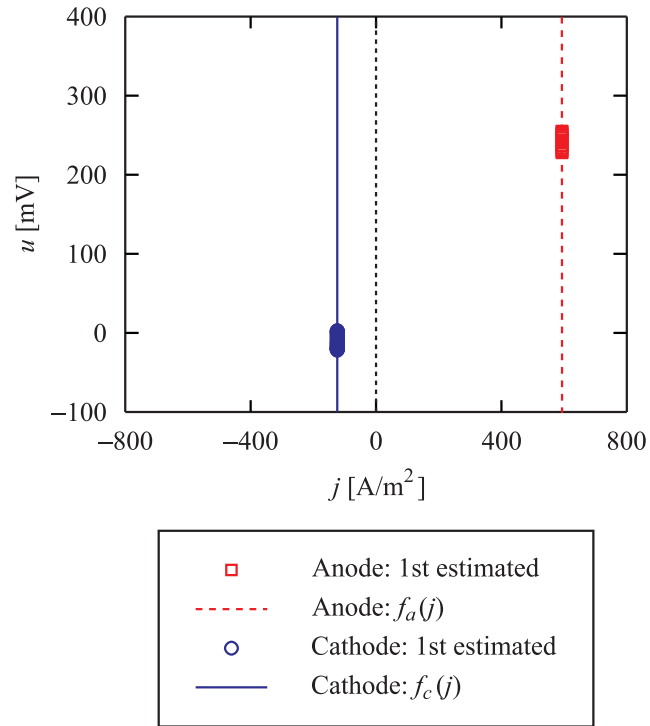


Fig. 4-45: The polarization curves estimated by the regression analysis —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by Kullback-Leibler divergence.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ g_c(u) = f_c^{-1}(u) = -1.23 \times 10^2 \end{cases}$$

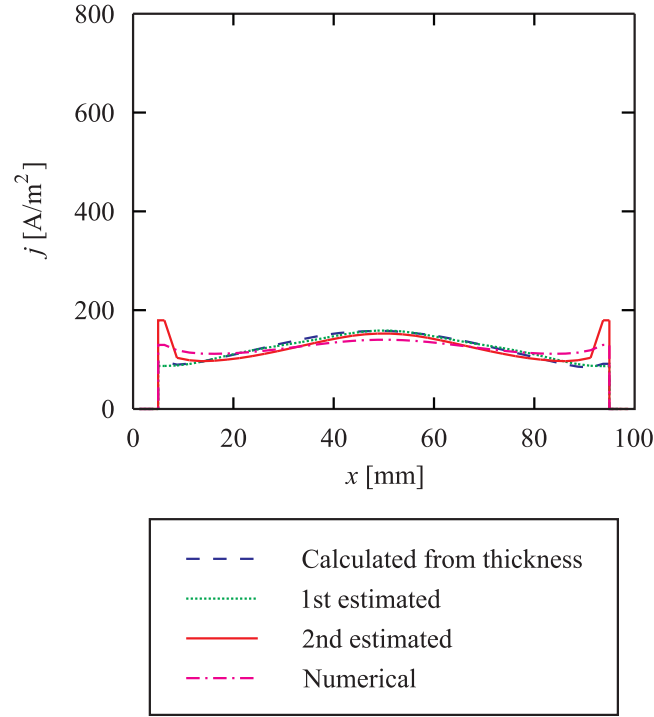


Fig. 4-46: The current density on the cathode estimated by the proposed method
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

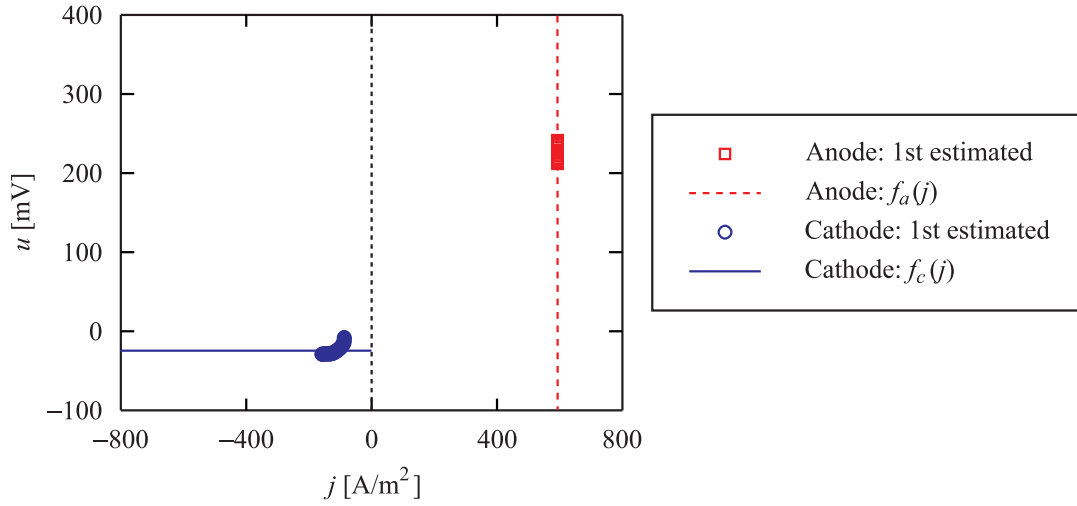


Fig. 4-47: The polarization curves estimated by the regression analysis
 —The center of the anode rod is located at $(x, y) = (50, 30)$ mm and the regularization parameter is determined by the reference variance.

$$\begin{cases} g_a(u) = f_a^{-1}(u) = 5.94 \times 10^2 \\ f_c(j) = -24.5 \end{cases}$$

4.9 結言

本研究ではめっき槽内の電流によって磁場が誘起することに注目し、この磁束密度を測定することで、逆解析的に磁束密度分布からめっき表面上の電流密度分布を推定する手法を開発した。「第2章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」で述べた参照電極を用いる電位測定と異なり、本手法で行う磁束密度の測定には長時間の運用が可能な磁気センサが利用できる利点がある。

また、磁束密度の測定をめっき槽外で行う場合、電位測定における細管などの測定機器を挿入する必要が無い。したがって、めっき槽の電場に全く影響を与えることなく、めっき槽内の電流密度分布を無侵襲で推定できる利点がある。本手法は燃料電池などの電解槽の空間が狭い電解セルに対しても適用でき、電位測定による電流密度推定法よりも応用範囲は広い。

本研究で得られた結論を以下に示す。

- (1) LSI の生産ラインにおいてめっき表面上の電流密度を常時モニタリングするための手法として、磁気センサを利用し、得られた磁束密度のデータから逆解析的にめっき表面上の電流密度分布を推定する手法を開発した。
- (2) 電場解析に有限要素法および境界要素法を用い、磁場解析に静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法を用いることでアノードおよびカソードに流入出する電流密度と磁気センサによって測定される磁束密度の関係を直接表す観測方程式を導出した。
- (3) 本逆解析手法は Tikhonov の適切化法を用いた概値推定とそこから得られる分極曲線による推定電流密度の修正からなる。本手法では測定データに含まれる定磁場成分の影響を除去した形で本逆解析手法を適用するため、数理モデルの差分を改めて逆解析に用いる観測方程式とする。
- (4) 本逆解析手法の第1次推定において、Tikhonov の適切化パラメータには基本的に Kullback-Leibler の情報量を最小にするものを用いるが、この方法には測定データに依存する適用範囲が存在する。そのため、適用範囲外では参照分散を利用する方法によって Tikhonov の適切化パラメータを決定する。
- (5) 数値シミュレーションによる数値実験と電気銅めっき装置による検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。
 - (i) 本数値実験では、数理モデルの計算によって得られる順解析結果に大きさの異なるランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。これにより、第1次推定における Tikhonov の適切化パラメータ決定方法は測定誤差の大きさに依存することを確認した。参照分散を利用する方法では参照分散が正解値の分散に近いほど、良好な推定結果が得られる。
 - (ii) 本検証実験では、アノードを銅棒、カソードを銅板とする検証用の電気銅めっき装置を製作した。アノード銅棒の位置を変えた種々のめっき条件に対して、めっき槽周辺の磁束密度を磁気センサを用いて測定した。測定した磁束密度のデータを用い、本手法を適用することでカソード銅板に流入する電流密度分布を推定した。
 - (iii) 検証実験において、カソードに流入する電流密度分布の推定結果を従来の推定手法である標本の分極曲線を用いた数値解析結果に加え、めっき膜厚分布の実測値とも比較した。

これにより、本手法による推定結果と従来の数値解析結果、およびめっき膜厚の測定結果がよく合うことを確認し、本手法の有効性を示した。

以上の結果より、「第2章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」と同様に、本手法も実際の LSI ウェハの電気めっきに対して十分に適用できると考えられる。

4.10 付録

4.10.1 Bayes 推定と Tikhonov の適切化法の関係

以下では、 $\mathbf{b}$ を磁束密度の測定データ、 $\mathbf{x}$ をアノードの電流密度 $\mathbf{j}_a$ とカソードの電流密度 $\mathbf{j}_c$ からなる未知量ベクトル ($\mathbf{x} = \{\mathbf{j}_a^T \ \mathbf{j}_c^T\}^T$) とした、本手法の場合について考える。

Bayes 推定は次の目的関数 $\Pi_B(\mathbf{x})$ を最小にする $\hat{\mathbf{x}}$ を $\mathbf{x}$ の推定解として採用する手法である [54]-[56], [65].

$$\Pi_B(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{W}_b^{-1} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o)^T \mathbf{W}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \quad (4.31)$$

ここで、 $\mathbf{W}_b$ は推定誤差の共分散行列、 $\mathbf{x}_o$ は参照解、 $\mathbf{W}_x$ は $\mathbf{x} - \mathbf{x}_o$ の共分散行列である。

測定量である $\mathbf{b}$ がすべて独立した磁束密度のデータであることから、推定誤差のベクトル $\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}$ には互いに相関が無く、その分散もすべて等しいと考えられる。したがって、推定誤差の分散を $\hat{\sigma}_b^2$ とすると

$$\mathbf{W}_b = \hat{\sigma}_b^2 \mathbf{E}_m \quad (4.32)$$

となる。ここで、 $\mathbf{E}_m$ は $m \times m$ の単位行列、 m は $\mathbf{b}$ の次元である。

また、推定解と参照解の差 $\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_o$ についても互い相関が無いとする。その分散についてはアノードの電流密度の参照解を $\mathbf{j}_{ao}$ 、カソードの電流密度の参照解を $\mathbf{j}_{co}$ とし、

$$\mathbf{W}_x = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{ja}^2 \mathbf{E}_a & \mathbf{O}_c \\ \mathbf{O}_a & \hat{\sigma}_{jc}^2 \mathbf{E}_c \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

のように分ける。ここで、 $\hat{\sigma}_{ja}^2$ はアノードの電流密度の推定解と参照解の差 $\hat{\mathbf{j}}_a - \mathbf{j}_{ao}$ の分散、 $\hat{\sigma}_{jc}^2$ はカソードの電流密度の推定解と参照解の差 $\hat{\mathbf{j}}_c - \mathbf{j}_{co}$ の分散である。また、 $\mathbf{E}_a$ および $\mathbf{E}_c$ は $\mathbf{j}_a$ および $\mathbf{j}_c$ にかかる単位行列である。

したがって、式 (4.31) は式 (4.32) および式 (4.33) を用いると

$$\frac{1}{\hat{\sigma}_b^2} \Pi_B(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha_a \|\mathbf{j}_a - \mathbf{j}_{ao}\|^2 + \alpha_c \|\mathbf{j}_c - \mathbf{j}_{co}\|^2 \quad (4.34)$$

$$\alpha_a = \frac{\hat{\sigma}_b^2}{\hat{\sigma}_{ja}^2}, \quad \alpha_c = \frac{\hat{\sigma}_b^2}{\hat{\sigma}_{jc}^2} \quad (4.35)$$

となる。式 (4.34) は Tikhonov の適切化法 (式 (2.41)) において、適切化パラメータ α を 2 次元に拡張したものともみなせる [54].

式 (4.34) は未知量 $\mathbf{x}$ の参照分散が 2 変数の以外の場合にも簡単に拡張できる。この場合の Tikhonov の適切化法は次式となる。

$$\frac{1}{\hat{\sigma}_b^2} \Pi_B(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \sum_i \alpha_i \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{io}\|^2 \quad (4.36)$$

$$\mathbf{x} = \{ \mathbf{x}_1^T \quad \mathbf{x}_2^T \quad \cdots \}^T \quad (4.37)$$

$$\alpha_i = \frac{\hat{\sigma}_b^2}{\hat{\sigma}_i^2} \quad (4.38)$$

参考文献

- [1] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Estimation Method of Copper Electroplating Current Density Distribution using Measurement Data of Electric Potentials in Plating Bath, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.74, No.745, (2008), pp.1204–1211.
- [2] Kishimoto, Y., Amaya, K. and Hayabusa, K., An Estimation Method of Copper Electroplating Current Densities by Inverse Analysis of Electric Potentials in Cells and Its Experimental Verification, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.75, No.757, (2009), pp.1239–1246.
- [3] Kishimoto, Y., Amaya, K., Hayabusa, K. and Onishi, Y., Estimation of Electroplating Current Densities on LSI Wafer using Measurement Information of Electric Potentials in Cells, *Proceedings of the 22nd Computational Mechanics Conference*, No.09-22, (2009), No.802.
- [4] Kishimoto, Y., Amaya, K. and Hayabusa, K., An Estimation Method of Electroplating Current Densities in LSI Fabrication Technology by Inverse Analysis of Electric Potentials in Cells, *Proceedings of the 8th IEEE Conference on Sensors*, No.09-08, (2009), pp.53–56.
- [5] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Development of a Real-Time Monitoring Method of Electroplating Current Densities in LSI Fabrication by Inverse Analysis of Electric Potentials, *Proceedings of Asian Pacific Conference for Materials and Mechanics 2009*, No.09-01, (2009), No.a236.
- [6] Osaka, T., Oyama, N. and Ohsaka, T., *Electrochemical Method -Manual of Fundamental Measurements*, (1989), Kodansha.
- [7] Osakai, T., Kano, K. and Kuwabata, S., *Basic Electrochemistry*, (2000), Kagaku-Dojin.
- [8] Haruyama, S., *Electrochemistry for Surface Engineers*, (2001), Maruzen.
- [9] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Basic Edition*, (2002), Maruzen.
- [10] The Electrochemical Society of Japan ed., *Manual of Electrochemical Measurements, Practice Edition*, (2002), Maruzen.
- [11] Miller, W.T. and Geselowitz, D.B., Use of Electric and Magnetic Data to Obtain a Multiple Dipole Inverse Cardiac Generator: A Spherical Model Study, *Annals of Biomedical Engineering*, Vol.2, No.4, (1974), pp.343–360.
- [12] Sakai, Y. and Yamasita, A., Magnetostatic Analysis by Coupling Finite-Element Method and Boundary Element Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.59, No.557, (1993), pp.211–218.

- [13] Amaya, K., Uragou, M. and Aoki, S., New Eddy Current Thickness Sensor and its Boundary Element Analysis, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.64, No.588, (1995), pp.1841-1846.
- [14] Uragou, M., Amaya, K. and Aoki, S., Effective Boundary Element Method for an Axisymmetrical Electromagnetic Field of a Layered Tube, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.63, No.607, (1997), pp.589-594.
- [15] Kojima, F., Okamoto, J. and Ohno, Y., Computational Method for Crack Reconstruction of Steam Generator Materials using FEM-BEM Scheme in Inverse Applied Electromagnetics, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol.63, No.612, (1997), pp.2650-2656.
- [16] Phillips, J.W., Leahy, R.M. and Mosher, J.C., MEG-Based Imaging of Focal Neuronal Current Sources, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, Vol.16, No.3, (1997), pp.338-348.
- [17] Miyashita, T., Kandori, A., Tsukada, K., Sato, M., Terada, Y., Horigome, H. and Mitsui, T., Construction of Tangential Vectors from Normal Cardiac Magnetic Field Components, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.520-523.
- [18] Tsukada, K., Kandori, A., Miyashita, T., Sasabuti, H., Suzuki, H., Kondo, S., Komiyama, Y. and Teshigawara, K., A Simplified Superconducting Quantum Interference Device System to Analyze Vector Components of a Cardiac Magnetic Field, *Proceedings of the 20th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, Vol.20, No.1, (1998), pp.524-527.
- [19] Clemens, M., Thoma, P., Weiland, T. and Van Rienen, U., Computational Electromagnetic-Field Calculation with the Finite-Integration Method, *Surveys on Mathematics for Industry*, Vol.8, No.3-4, (1999), pp.213-232.
- [20] Banks, H.T. and Kojima, F., Boundary Shape Identification in Two-Dimensional Electrostatic Problems using SQUIDS, *Journal of Inverse Ill-Posed Problems*, Vol. 8, No.5, (2000), pp.487-504.
- [21] Baillet, S., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., Electromagnetic Brain Mapping, *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol.18, No.6, (2001), pp.14-30.
- [22] Mamelak, A.N., Lopez, N., Akhtari, M. and Sutherling, W.W., Magnetoencephalography-Directed Surgery in Patients with Neocortical Epilepsy, *Journal of Neurosurgery*, Vol.97, No.4, (2002), pp.865-873.
- [23] Potthast, R. and Kuhn, L., On the Convergence of the Finite Integration Technique for the Anisotropic Boundary Value Problem of Magnetic Tomography, *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Vol.26, No.9, (2003), pp.739-757.
- [24] Murakami, M., Matsuoka, Y. and Naitou, S., Magnetocardiography, *A Monthly Journal of Medical Imaging and Information*, Vol.35, No.13, (2003), pp.1112-1119.
- [25] T. Takeda, *Brain Engineering*, (2003), Corona Publishing.

-
- [26] Kandori, A., Advanced Technology of Magnetocardiography, *A Monthly Publication of the Japan Society of Applied Physics*, Vol.74, No.5, (2005), pp.580–586.
- [27] Ridha, M., Amaya, K. and Aoki, S., Boundary Element Simulation for Identification of Steel Corrosion in Concrete using Magnetic Field Measurement, *Corrosion*, Vol.61, No.8, (2005), pp.784–791.
- [28] Nara, T. and Ando, S., Direct Localization of Multiple Magnetic Dipoles for Surface Crack Detection, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, Vol.15, No.4, (2007), pp.403–418.
- [29] Hauer, K.H., Potthast, R. and Wannert, M., Algorithms for Magnetic Tomography -on the Role of a Priori Knowledge and Constraints, *Inverse Problems*, Vol.24, No.4, (2008), pp.045008.1–045008.18.
- [30] Sauer, D.U., Sanders, T., Fricke, B., Baumhoefer, T., Wippermann, K., Kulikovskiy, A.A., Schmitz, H. and Mergel, J., Measurement of the Current Distribution in a Direct Methanol Fuel Cell -Confirmation of Parallel Galvanic and Electrolytic Operation within One Cell, *Journal of Power Sources*, Vol.176, No.2, (2008), pp.477–483.
- [31] Lustfeld, H., Reissel, M., Schmidt, U. and Steffen, B., Reconstruction of Electric Currents in a Fuel Cell by Magnetic Field Measurements, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, Vol.6, No.2, (2009), pp.021012.1–021012.8.
- [32] Lustfeld, H., Reissel, M. and Steffen, B., Magnetotomography and Electric Currents in a Fuel Cell, *Fuel Cells*, Vol.9, No.4, (2009), pp.474–481.
- [33] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Measurement Method of Plating Current for LSI Wafer by using Magnetic Sensors, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.73, No.730, (2007), pp.709–715.
- [34] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Non Destructive Measurement of LSI Electroplating Rate using Magnetic Sensor, *Proceedings of the 20th Computational Mechanics Conference*, No.07-20, (2007), pp.447–448.
- [35] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Nondestructive Measurement of LSI Electroplating Current Distribution using Magnetic Sensors, *Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics and The 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, No.08-08, (2008), No.a506.
- [36] Kishimoto, Y. and Amaya, K., Experimental Verification of Nondestructive Measurement of Copper Electroplating Current Distribution using Magnetic Sensors, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol.74, No.740, (2008), pp.491–498.
- [37] Mohri, K., Panina, L.V., Uchiyama, T., Bushida, K. and Noda, M., Sensitive and Quick Response Micro Magnetic Sensor Utilizing Magneto-Impedance in Co-rich Amorphous Wires, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.31, No.2, (1995), pp.1266–1275.
- [38] Munaka, T., Yoshimi, K., Nakanishi, H., Yamada, Y., Iijima, K. and Kano, I., Experimental Production of the Thin-Film Flux-Gate Magnetic Sensor, *Shimadzu Review*, Vol.53, No.1, (1996), pp.75–81.
-

- [39] Fujiyama, Y., Yoshimi K., Munaka, T. and Nakanishi, H., Development of the Thin-Film Flux-Gate Magnetic Sensor, *Proceedings of Conference on Information, Intelligence and Precision Equipment 2000*, No.00-10, (2000), pp.114–117.
- [40] Ripka, P., *Magnetic Sensors and Magnetometers*, (2001), Artech House.
- [41] Washizu, K., Miyamoto, H., Yamada, Y., Yamamoto, Y. and Kawai, T., *Handbook of Finite Element Method (1), Basic Edition*, (1981), Baifukan.
- [42] Washizu, K., Miyamoto, H., Yamada, Y., Yamamoto, Y. and Kawai, T., *Handbook of Finite Element Method (2), Application Edition*, (1983), Baifukan.
- [43] Yagawa, G. and Yoshimura, S., *Finite Element Method*, (1991), Baifukan.
- [44] Tanaka, M., Matsumoto, T. and Nakamura, M., *Boundary Element Method*, (1991), Baifukan.
- [45] Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., *Boundary Element Analysis on Corrosion Problems*, (1998), Shokabo.
- [46] Honma, T., Igarashi, H. and Kawaguchi, H., *Numerical Electromagnetic Dynamics*, (2002), Morikita Publishing.
- [47] Tanaka, Y. and Amaya, K., Development of Method for the Magnetostatic Analysis without Region Integration, *Proceedings of the 17th Computational Mechanics Conference*, No.04-40, (2004), pp.447–448.
- [48] Kishimoto, Y., Tanaka, Y. and Amaya, K., Analysis Method for Magnetostatic Field without Region Integration in the Electrostatic Field Domain, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.73, No.729, (2007), pp.567–574.
- [49] Tanabe, K., Statistical Regularization of a Noisy Ill-Conditioned System of Linear Equations by Akaike's Information Criterion, *The Institute of Statistical Mathematics Research Memorandum*, No.60, (1974), pp.1–20.
- [50] Hansen, P.C., The Truncated SVD as a Method for Regularization, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.27, No.4, (1987), pp.534–553.
- [51] The Japan Society of Mechanical Engineers ed., *Computer Analysis of Inverse Problems*, (1991), Corona Publishing.
- [52] Kubo, S., *Inverse problem*, (1992), Baifukan.
- [53] Hansen, P.C., Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve, *Society for Industrial and Applied Mathematics Review*, Vol.34, No.4, (1992), pp.561–580.
- [54] Belge, M., Kilmer, M. and Miller, E.L., Simultaneous Multiple Regularization Parameter Selection by Means of the L-Hypersurface with Applications to Linear Inverse Problems Posed in the Wavelet Transform Domain, *Bayesian Inference for Inverse Problems*, Vol.3459, (1998), pp.328–336.

-
- [55] Oraintara, S., Karl, W.C., Castanon, D.A. and Nguyen, T.Q., A Method for Choosing the Regularization Parameter in Generalized Tikhonov Regularized Linear Inverse Problems, *Proceedings of the 2000 IEEE International Conference on Image Processing*, Vol.1, (2000), pp.93–96.
- [56] Murakami, A., Tosaka, N., Hori, M. and Suzuki, M., *Inverse Analysis with FEM/BEM -Application of the Kalman Filter and the Equivalent Inclusion Method-*, (2002), Corona Publishing.
- [57] Kullback, S. and Leibler, R.A., On Information and Sufficiency, *The Annals of Mathematical Statistics*, Vol.22, No.1, (1951), pp. 79–86.
- [58] Aoki, S., Amaya, K., Takazawa, H. and Miyasaka, M., Boundary Element Simulation of Electroplating on Silicon Wafer, *The Journal of the Surface Finishing Society of Japan*, Vol.51, No.4, (2000), pp.425–430.
- [59] Abe, K., Aoki, S., Amaya, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Proceedings of the 13th Computational Mechanics Conference*, No.00-17, (2000), pp.315–316.
- [60] Abe, K., Amaya, K. and Aoki, S., Monitoring of Electroplating Thickness on Silicon Wafer using Inverse Analysis, *Proceedings of the 14th Computational Mechanics Conference*, No.01-10, (2001), pp.195–196.
- [61] Aoki, S., Amaya, K., Abe, K. and Miyasaka, M., Optimization of Electroplating on Silicon Wafer, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.68, No.666, (2002), pp.133–138.
- [62] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Development of a Plating Simulation Method for 3-Dimensional Models, *Proceedings of the 2006 Annual Meeting of JSME/MMD*, Vol.06, No.4, (2006), pp.409–410.
- [63] Hayabusa, K., Takemura, T. and Amaya, K., Optimization of the Shape of Plating Bath to Planarize Thickness of the Distribution in Semiconductor Plating, *Proceedings of the 2006 JSME Millennium* Vol.06, No.6, (2006), pp.105–106.
- [64] Nelder, J.A. and Mead, R., A Simplex Method for Function Minimization, *Computer Journal*, Vol.7, No.4, (1965), pp. 308–313.
- [65] Arimoto, S., *Kalman Filter*, (1977), Sangyo Tosho.

第5章 脳磁図における多段階逆解析を用いた脳内神経細胞活動の推定

5.1 緒言

近年、脳内の活動状態を調べるための新たな無侵襲診断技術として脳磁図 (Magnetoencephalography, MEG) が注目を浴びている [1]-[61]. 脳内の神経活動により生じる電流は非常に弱い磁場を誘起する. MEG はこの磁場を脳外に設置した多数の磁気センサによって測定したものである (図 5-1 および図 5-2). MEG の医療応用では、測定した脳外磁場から脳内の活動状態を推定し、病変部位の特定するために用いられる. 例えば、てんかんの治療において異常放電が始まる脳の部位を立体的に特定するために、MEG の応用が期待されている [10]-[15].

MEG で得られた磁場から脳内の電流分布を推定する問題は逆問題となる. この逆問題を解くために、(a) 脳内の電流分布と MEG で得られる磁場の関係式すなわち数理モデルの導出、および (b) その関係式を解くための数理的手法が必要であり、現在までに多くの研究がなされている [16]-[61].

(a) については現在、電流双極子モデルと磁気双極子モデルの 2 つが提案されている. 電流双極子モデルは脳内の電流発生源を電流双極子と仮定したモデルである. 電流双極子モデルを用いる逆解析では Maxwell 方程式から得られる関係式を用いる手法がよく用いられる. 球対称な電気伝導度を持つ伝導体に対しては、Sarvas(1987) によって、理論式が導出されている. 現在の MEG の逆解析に関する研究では、観測方程式の導出が簡単であることから、この Sarvas の式がよく用いられている [41]-[52]. また、磁気双極子モデルは脳内の電流分布が磁場源の最小要素である微小円環電流の集合であるとするモデルである. 磁気双極子モデルを用いる逆解析では電流双極子モデルを用いる場合と異なり、電場の式を解く必要が無く、また MEG で推定できない電流 (磁場を作らない電流) 成分の基底を除外する必要も無い [53], [54].

一方、(b) については双極子の位置とモーメントを未知として、これらの値を推定する滑降シンプレックス法が用いられている. 滑降シンプレックス法は特に、てんかんなどの病変部位の特定に対して良好な結果が示されている. しかし、推定される解が初期値に大きく依存するという原理的な問題を抱えている. そのため、これらの初期値は利用者の経験によって設定されているのが現状である [4], [6], [23], [24], [62].

そこで、本研究では MEG による双極子の推定問題における逆解析手法に焦点を当て、打切り特異値分解法による双極子分布の概値推定と滑降シンプレックス法による推定解の修正からなる多段階逆解析手法を開発した [63], [64]. 本手法では、まず双極子の位置候補点を作成した後、候補点における MEG の測定データから打切り特異値分解法を用いて推定する. 次にクラスタ分析を用い、打切り特異値分解法によって鈍って推定される電流双極子の分布を少数の双極子で代表させる. このクラスタ分析によって得られた代表電流双極子を初期値として用い、滑降シンプレックス法を適用することで双極子の位置とモーメントの最終的な推定解を得る. 以上の行程により、滑降シンプレックス法における初期値決定に関する問題を解決する. なお、本手法は逆解析に用いる数理モデルによらず適用できる.



Fig. 5-1: Magnetoencephalography brain imaging system (CTF Systems, Inc.)

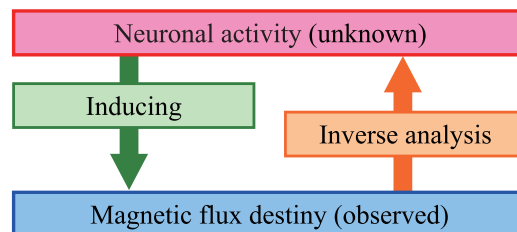
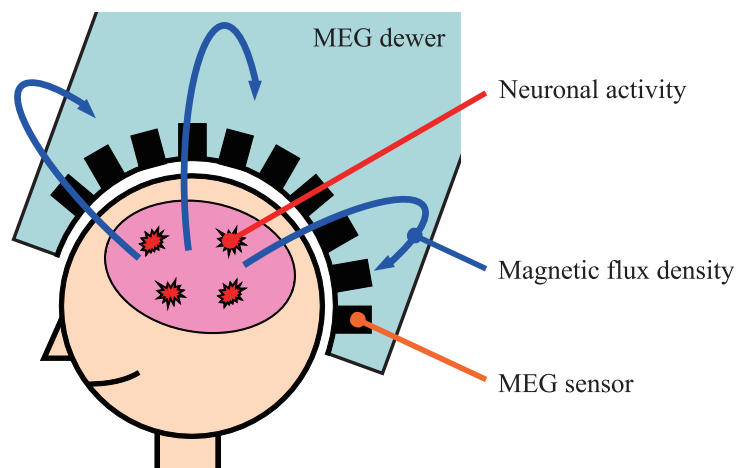


Fig. 5-2: The configuration of MEG sensors and the inverse problem in MEG

本論文ではまず、MEG によって脳内の活動状態を調べるためによく用いられる、電流双極子モデルと磁気双極子モデルについて概説する。次に、逆解析手法として、打ち切り特異値分解法による双極子分布の推定方法とクラスタ分析による双極子分布を少数の双極子で代表させる方法について述べる。その後、数値シミュレーションによる数値実験を行った結果を示し、本手法の有効性を示す。

本研究ではさらに、本逆解析手法の有効性の検証と MEG センサの校正のため、磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムを開発した。本論文ではこの MEG 用ファントムを用いた測定実験を行った結果を示す。さらに、測定結果に対して本逆解析手法を適用することで、その有効性を示す。

5.2 MEG における数理モデル

5.2.1 電流双極子モデルと Sarvas の式

脳内の電流分布と MEG で得られる磁場の関係式の導出には、脳内の電流発生源を電流双極子と仮定し、Maxwell 方程式から得られる次式を用いる手法がよく用いられる [41]-[52]。

$$\mathbf{J}(\mathbf{p}) = -\kappa(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} u(\mathbf{p}) + \sum_j^n \mathbf{Q}_j(\mathbf{q}_j) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_j) \quad (5.1)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{B}(\mathbf{p}) = \mu(\mathbf{p}) \mathbf{J}(\mathbf{p}) \quad (5.2)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{p}) = 0 \quad (5.3)$$

太字は 3 次元ベクトル、 $\nabla_{\mathbf{p}}$ は $\mathbf{p}$ 座標に関する微分であることを表す。ここで、 $\mathbf{J}, \mathbf{Q}_j, \mathbf{q}_j, \delta(\mathbf{p}), \kappa, u, \mathbf{B}, \mu$ はそれぞれ全電流、 j ($j = 1, 2, \dots, n$) 番目の電流双極子モーメントとその位置ベクトル、Dirac のデルタ関数、電気伝導度、電位、磁束密度、透磁率である。

脳内外の透磁率 μ はほぼ一様であると仮定できる。このとき、式 (5.2) より

$$\mu \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{p}) = \nabla_{\mathbf{p}} \cdot (\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{B}(\mathbf{p})) = 0 \quad (5.4)$$

式 (5.1) に代入すると

$$\nabla_{\mathbf{p}} \cdot (\kappa(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} u(\mathbf{p})) = \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \left\{ \sum_j^n \mathbf{Q}_j(\mathbf{q}_j) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_j) \right\} \quad (5.5)$$

となるため、電位 u は電流双極子モーメント $\mathbf{Q}_j$ に従属する。したがって、電流双極子モデルを用いた場合の逆問題は体外の磁場から脳内の電流双極子の位置とモーメントを推定する問題となる。

電場領域が球対称な電気伝導度を持つ伝導体である場合に対しては、Sarvas によって式 (5.6) で表される理論式が導出されている [43]。

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = \frac{\mu}{4\pi} \sum_j^n \left(\frac{\mathbf{Q}_j \times \mathbf{q}_j}{F_j} - \mathbf{Q}_j \times \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{p} \frac{\nabla_{\mathbf{p}} F_j}{F_j^2} \right) \quad (5.6)$$

$$F_j = s_j (s_j p + p^2 - \mathbf{q}_j \cdot \mathbf{p}) \quad (5.7)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} F_j = \left\{ \frac{s_j^2}{p} + \frac{s_j \cdot \mathbf{p}}{s_j} + 2(s_j + p) \right\} \mathbf{p} - \left(s_j + 2p + \frac{s_j \cdot \mathbf{p}}{s_j} \right) \mathbf{q}_j \quad (5.8)$$

$$s_j = \mathbf{p} - \mathbf{q}_j, \quad s_j = \|\mathbf{s}_j\|, \quad p = \|\mathbf{p}\| \quad (5.9)$$

ここで、位置ベクトルの原点は伝導球体の中心である。なお、Sarvas の式の導出過程において、磁束密度の測定位置より外側の領域 $[p, \infty]$ では全電流 $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ であることを前提としている。

現在の MEG の逆解析に関する研究では、観測方程式の導出が簡単であることから、この Sarvas の式 (式 (5.6)) がよく用いられている。しかし、式 (5.6) では電流双極子モーメント $\mathbf{Q}_j$ の半径方向成分はベクトルの外積計算によって、球体外部の磁束密度に影響を与えない。したがって、式 (5.6) を脳の電磁場モデルとして用いる場合、電流双極子モーメントの半径方向成分を推定することは原理的に不可能である。このため、電流双極子モーメント $\mathbf{Q}_j$ の半径方向成分は EEG によって推定することが多い。一方の EEG は電流双極子モーメント $\mathbf{Q}_j$ の接線方向成分の感度が悪いとされ、MEG とは相補的な関係にあるといえる [1]-[3], [6], [8]。

5.2.2 磁気双極子モデル

磁気双極子モデルは脳内の電流分布が磁場源の最小要素である微小円環電流の集合であるとするモデルである。磁気双極子モデルを用いる逆解析には電流双極子モデルを用いる場合と異なり、電場の式を解く必要が無く、また MEG で推定できない電流（磁場を作らない電流）成分の基底を除外する必要も無いという利点がある [53], [54]。

透磁率 μ が一様とき、 n 個の磁気双極子が位置 $\mathbf{p}$ に作る磁束密度 $\mathbf{B}$ は次式で表せる。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{p}) &= -\nabla_p \left\{ \sum_j^n \frac{\mu}{4\pi} \frac{\mathbf{M}_j \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{q}_j)}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}_j\|^3} \right\} \\ &= \frac{\mu}{4\pi} \sum_j^n \left\{ \frac{3 \mathbf{M}_j \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{q}_j) (\mathbf{p} - \mathbf{q}_j)}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}_j\|^5} - \frac{\mathbf{M}_j}{\|\mathbf{p} - \mathbf{q}_j\|^3} \right\} \end{aligned} \quad (5.10)$$

ここで、太字は 3 次元ベクトル、 ∇_p は $\mathbf{p}$ 座標に関する微分であることを表す。また、 $\mathbf{M}_j$ および $\mathbf{q}_j$ はそれぞれ j ($j = 1, 2, \dots, n$) 番目の磁気双極子モーメントおよびその位置ベクトルである。

5.3 逆解析手法

5.3.1 本逆解析手法の流れ

本研究において開発した MEG による双極子の推定手法の流れを図 5-3 に示す。第 1 段階では、MEG で得られる磁場データ、各 MEG センサ位置、双極子の位置候補点を入力として、打ち切り特異値分解法^{*1}によって位置候補点における双極子モーメントを推定する。第 2 段階では、第 1 段階で得られた双極子モーメントの分布とその分布を代表させる双極子の個数を入力として、クラスタ分析により代表双極子の位置とモーメントを得る。第 3 段階では、得られた代表双極子を初期値とし、滑降シンプレックス法によって双極子の位置とモーメントを修正する。本節ではそれぞれの段階の手法について詳述する。

^{*1}第 2 章および第 4 章で用いた Tikhonov の適切化法でも双極子のモーメント分布を推定することは可能である。参照解に依存するが、例えば参照解を 0 とした場合は打ち切り特異値分解法よりも全体的に鈍って推定される。そのため、特徴点として代表双極子を抽出することを考慮すると、打ち切り特異値分解法の方が効果的であるといえる。

また、近年盛んに研究されている MEG 逆解析手法としてアダプティブビームフォーミング法がある [9], [17], [30], [34]-[36], [38]。これは Backus-Gilbert の方法と同種の手法であり、本研究で用いた打ち切り特異値分解法よりも鮮明な双極子分布が得られることが報告されているが、計算量が比較的多い。この手法も測定誤差に起因する推定誤差の拡大を防ぐための適切化パラメータが必要である。これらの方法の検討については、今後の課題としたい。

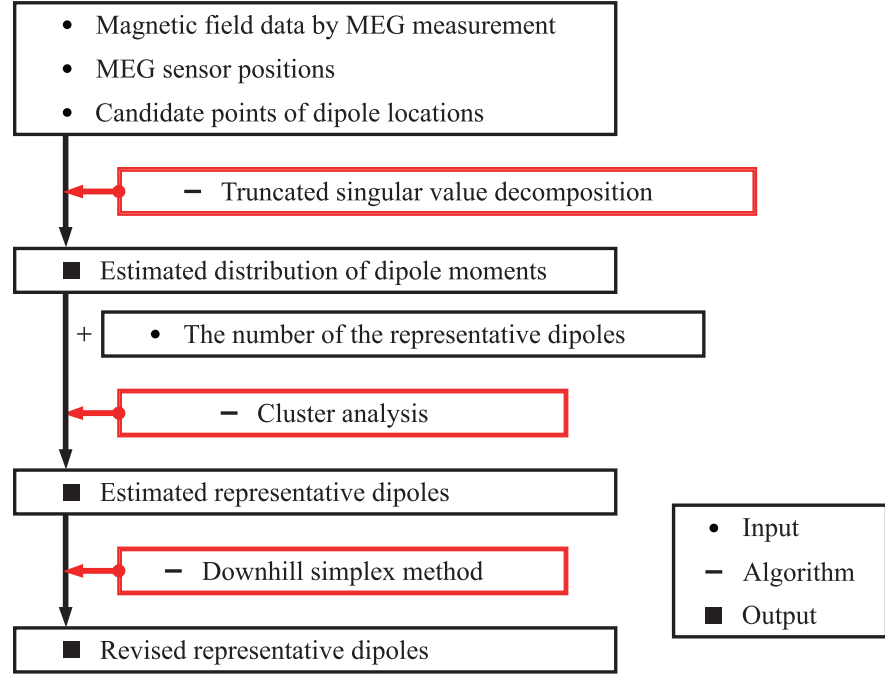


Fig. 5-3: The flowchart of the estimation procedure

5.3.2 観測方程式

式 (5.6) あるいは式 (5.10) より, 磁束密度 $\mathbf{B}$ と電流双極子モーメント $\mathbf{Q}_j$ あるいは磁気双極子モーメント $\mathbf{M}_j$ の関係は線形であることが分かる. したがって, 各 MEG センサで測定される磁束密度 $\mathbf{B}$ の値を並べたベクトルを $\mathbf{b}$, $\mathbf{Q}_j$ あるいは $\mathbf{M}_j$ の各成分を並べたベクトルを $\mathbf{x}$ とすると, 観測方程式として

$$\mathbf{b} = A(\mathbf{q}) \mathbf{x} \quad (5.11)$$

が得られる. ここで, $\mathbf{q}$ は $\mathbf{q}_j$ の各成分を並べたベクトルである. また, 係数行列 A は MEG センサの位置 $\mathbf{p}_i$ ($i = 1, 2, \dots, m$; m は磁束密度のデータ数) と双極子の位置 $\mathbf{q}_j$ で決まる.

式 (5.11) において, $\mathbf{x}$ と $\mathbf{q}$ が推定すべき未知量, $\mathbf{b}$ が測定により得られる既知量である. $\mathbf{b}$ は未知量 $\mathbf{x}$ に対して線形であるが, 未知量 $\mathbf{q}$ に対して非線形となっている.

5.3.3 第 1 次推定: 打ち切り特異値分解による双極子モーメントの概値推定

本逆解析手法ではまず, 図 5-4 に示すように双極子の位置候補点を多数作成し, 双極子の位置 $\mathbf{q}$ を既知量とする. その後, 選択した位置候補点 $\mathbf{q}_j$ と MEG センサの測定位置 $\mathbf{p}_i$ を用いて, 係数行列 A の各値を得る. このとき, 推定する双極子数 n は候補点数に等しい. これにより, 式 (5.11) は未知量 $\mathbf{x}$ と既知量 $\mathbf{b}$ に関する線形方程式

$$\mathbf{b} = A \mathbf{x} \quad (5.12)$$

となる. 式 (5.12) を用い, 双極子の各位置候補点における双極子モーメントの各成分の値を以下の打ち切り特異値分解を適用して推定する.

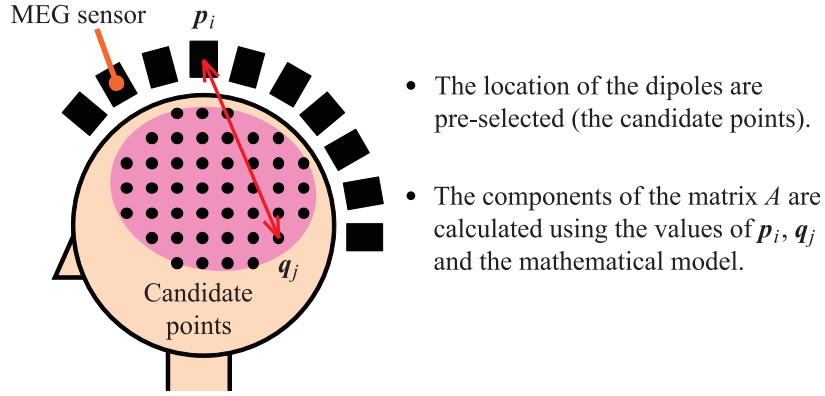


Fig. 5-4: The candidate points and the way of obtaining the matrix A

a. 特異値分解法による解の推定

式 (5.12) 中の行列 A は式 (5.13) のように特異値分解することができる.

$$A = U S V^T \quad (5.13)$$

ここで, 上添え字 T は行列の転置を表し,

$$S = \begin{cases} \begin{bmatrix} \Lambda & O_{m \times (3n-m)} \end{bmatrix} & (m < 3n) \\ \begin{bmatrix} \Lambda \end{bmatrix} & (m = 3n) \\ \begin{bmatrix} \Lambda & O_{3n \times (m-3n)} \end{bmatrix}^T & (m > 3n) \end{cases} \quad (5.14)$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_l \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} l &= \min(m, 3n) \\ \lambda_1 &\geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_l \geq 0 \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$U^{-1} = U^T, \quad V^{-1} = V^T \quad (5.16)$$

であり, $O_{i \times j}$ は i 行 j 列の零行列である.

このとき, 式 (5.12) は

$$\begin{aligned} \mathbf{b} &= U S V^T \mathbf{x} \\ U^T \mathbf{b} &= S V^T \mathbf{x} \\ \mathbf{c} &= S \mathbf{y} \end{aligned} \quad (5.17)$$

となる. ここで, $\mathbf{c} = U^T \mathbf{b}$, $\mathbf{y} = V^T \mathbf{x}$ とおいた. さらに, 式 (5.17) を成分ごとに書くと,

$$c_i = \lambda_i y_i \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (5.18)$$

となる. したがって,

$$y_i = c_i / \lambda_i \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (5.19)$$

となり、関係式 $\mathbf{x} = \mathbf{V}\mathbf{y}$ を用いて、 $\mathbf{x}$ を求めることができる。

$m < 3n$ のとき、 y_i ($i = l+1, \dots, 3n$) は不定になる。このとき、 $y_i = 0$ ($i = l+1, \dots, 3n$) とおくことによって、式 (5.12) の不適切性を回避する。これによって得られる $\mathbf{x}$ の推定値 $\hat{\mathbf{x}}$ は式 (5.12) の最小ノルム解と等しい。一方、 $m > 3n$ のとき、 c_i ($i = l+1, \dots, m$) は $\mathbf{x}$ に反映されない。このとき得られる $\hat{\mathbf{x}}$ は式 (5.12) の最小二乗解と等しい [65], [66]。

b. c-AIC による特異値の打ち切り

式 (5.18) において、特異値 λ_i が小さい場合、測定値 c_i およびその真の値も小さくなる。一方、逆解析に用いる数値モデルと実際の磁場との違い、位置決めにおける誤差や外乱など、測定値 c_i には様々な要因による誤差が含まれる。このとき式 (5.19) より、これらの誤差は小さい特異値 λ_i によって y_i に対して大きく拡大される。そこで、 y_i の推定において、有効な特異値がある番号 k までで打ち切り、それ以降の y_i ($i = k+1, \dots, l$) を 0 とし、誤差の拡大を防ぐ方法がある [65]-[68]。

ここで、 k をどのように決めるかの指標が必要となる。本研究ではその指標として、測定数 m が推定すべき解の数 k に対して小さい場合（一般的には $m/k < 40$ ）において有効な c-AIC を適用する [69]-[71]。ここで、c-AIC は次式となる。

$$\text{c-AIC}(k) = m \log \sum_{i=k+1}^m c_i^2 + \frac{2km}{m-k-1} \quad (5.20)$$

式 (5.20) の第 1 項は測定値と推定値の残差二乗和、第 2 項はパラメータが増えることによるペナルティ項となっている。有効な特異値を式 (5.20) を最小にする番号 k までで打ち切り、それ以降の y_i ($i = k+1, \dots, l$) を 0 とした解を $\mathbf{x}$ の推定解として採用する。この推定解は Kullback-Leibler の情報量の意味で最も良好な推定解となる。

5.3.4 双極子の位置候補点の絞り込み

次の「5.3.5 第 2 次推定：クラスタ分析による代表双極子の抽出」で行うクラスタ分析では双極子の位置候補点の組み合わせの数だけ計算を行う。これに対し、本研究ではクラスタ分析における計算量を軽減するため、モーメントが微小と推定された双極子の位置候補点を切捨てる絞り込みをクラスタ分析を適用する前に行う。

具体的には、まず打ち切り特異値分解法によって推定された双極子モーメントの分布において、微小な双極子モーメントを有する候補点を切捨てる。その後、残った位置候補点で再度打ち切り特異値分解法を適用し、双極子モーメントの分布を推定する。候補点の切捨てと打ち切り特異値分解法を繰り返し行い、切捨てる候補点が無くなった時点でこの繰り返し行程を終了する。最後に残った位置候補点と双極子モーメントの推定値に対して、次のクラスタ分析を適用する。

5.3.5 第 2 次推定：クラスタ分析による代表双極子の抽出

a. Ward 法

クラスタ分析には、その手法の違いから主に階層的クラスタリングと非階層的クラスタリングの 2 種類の方法がある [72]-[75]。非階層的クラスタリングを行うためには初期分割を設定する必要があり、最終的なクラスタリングの結果は初期分割に依存する。したがって、本研究では初期分割を

設定する必要が無い階層的クラスタリングを用いる。

階層的クラスタリングとは、ある段階での 2 個のクラスタの組み合わせすべてに対してクラスタ間距離と呼ばれる評価値を計算し、その段階で評価値が最も小さいクラスタの組み合わせを 1 個のクラスタに統合する方法である。この 1 回の評価によって、クラスタが 1 つ減ることになる。

クラスタ間距離には様々な評価式が提案されている。その中でも最も分割感度が高いとされているのが式 (5.21) で定義される Ward の式である [72]。クラスタ C_A とクラスタ C_B のクラスタ間距離 $\text{Ward}(C_A, C_B)$ は

$$\text{Ward}(C_A, C_B) = E(C_A \cup C_B) - E(C_A) - E(C_B) \quad (5.21)$$

ここで、 $E(D)$ はクラスタ D に含まれるデータの分散とデータ数の積であり、クラスタ D 内のデータ値が d_j であれば、次式で定義される。

$$E(D) = \sum_{j \in D} d_j^2 - \left(\sum_{j \in D} d_j \right)^2 \quad (5.22)$$

式 (5.21) はクラスタの統合によって生じるクラスタ内のデータの分散の増加量を表している。これを用いた階層的クラスタリングは Ward 法と呼ばれる。

初期段階はクラスタリングを施されるデータがそれぞれが 1 個のクラスタをなす。すなわち、初期クラスタ数はそのデータ数と等しい。ここから N 個のクラスタを作るためには、階層的クラスタリングを (データ数 $-N$) 回行えば良い。

b. 打ち切り特異値分解と Ward 法による代表双極子の抽出

ある階層で得られた推定双極子を $\hat{\mathbf{x}}_j = \{ \hat{x}_{xj}, \hat{x}_{yj}, \hat{x}_{zj} \}^T$ ($j = 1, 2, \dots, \hat{n}$)、各推定双極子の位置ベクトルを $\hat{\mathbf{q}}_j = \{ \hat{q}_{xj}, \hat{q}_{yj}, \hat{q}_{zj} \}^T$ ($j = 1, 2, \dots, \hat{n}$) とする。ここで、 $\hat{n}$ は現時点の階層における双極子の個数である。1 個の推定双極子が持つデータ $\mathbf{d}_j$ を

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_j &= \left\{ \frac{\hat{\mathbf{x}}_j^T}{\hat{x}_{ave}}, \frac{\hat{\mathbf{q}}_j^T}{\hat{q}_{ave}} \right\}^T \\ &= \left\{ \frac{\hat{x}_{xj}}{\hat{x}_{ave}}, \frac{\hat{x}_{yj}}{\hat{x}_{ave}}, \frac{\hat{x}_{zj}}{\hat{x}_{ave}}, \frac{\hat{q}_{xj}}{\hat{q}_{ave}}, \frac{\hat{q}_{yj}}{\hat{q}_{ave}}, \frac{\hat{q}_{zj}}{\hat{q}_{ave}} \right\}^T \end{aligned} \quad (5.23)$$

とする。ここで、

$$\hat{x}_{ave} = \frac{1}{\hat{n}} \sum_{j=1}^{\hat{n}} \hat{\mathbf{x}}_j^T \hat{\mathbf{x}}_j \quad (5.24)$$

$$\hat{q}_{ave} = \frac{1}{\hat{n}} \sum_{j=1}^{\hat{n}} \hat{\mathbf{q}}_j^T \hat{\mathbf{q}}_j \quad (5.25)$$

であり、 $\mathbf{d}_j$ は双極子モーメントおよび双極子の位置の平均でそれぞれ正規化する。

ある推定双極子のクラスタ C_A とクラスタ C_B のクラスタ間距離 $\text{Ward}(C_A, C_B)$ を式 (5.21) で定義する。このとき、式 (5.21) 中の $E(D)$ は式 (5.26) より次式となる。

$$E(D) = \sum_{j \in D} \mathbf{d}_j^T \mathbf{d}_j - \left(\sum_{j \in D} \mathbf{d}_j \right)^T \left(\sum_{j \in D} \mathbf{d}_j \right) \quad (5.26)$$

式 (5.26) が最小となる組み合わせのクラスタ $\hat{C}_A$ とクラスタ $\hat{C}_B$ を統合し、新たに 1 個の双極子としてまとめる。統合後のクラスタ $\hat{D}$ による双極子モーメントの各成分 $\hat{x}_{\hat{D}}$ はクラスタ D 内の双極子の総和

$$\hat{x}_{\hat{D}} = \sum_{j \in \hat{D}} \hat{x}_j \quad (5.27)$$

とし、その双極子位置 $\hat{q}_{\hat{D}}$ はクラスタ $\hat{D}$ 内の双極子の大きさを重みとした重心

$$\hat{q}_{\hat{D}} = \frac{\sum_{j \in \hat{D}} \hat{q}_j \sqrt{\hat{x}_j^T \hat{x}_j}}{\sum_{j \in \hat{D}} \sqrt{\hat{x}_j^T \hat{x}_j}} \quad (5.28)$$

とする。

打ち切り特異値分解法によって推定された個々の双極子を初期クラスタし、階層的クラスタリングを $n - N$ 回行うことで、打ち切り特異値分解法によって推定された n 個の双極子は最終的に N 個のクラスタに統合される。統合後、それぞれのクラスタを 1 個の双極子と考え、 n 個の双極子を N 個の双極子で代表する。

5.3.6 第 3 次推定：滑降シンプレックス法による双極子の位置とモーメントの修正

「5.3.5 クラスタ分析による代表双極子の抽出」によって得られた N 個の代表双極子の位置 $\hat{q}_j^{cls}$ ($j = 1, 2, \dots, N$) とモーメント $\hat{x}_j^{cls}$ ($j = 1, 2, \dots, N$) を初期値として、式 (5.11) の残差二乗和

$$r = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \quad (5.29)$$

を最小にする双極子の位置 $\hat{q}_j^{opt}$ およびモーメント $\hat{x}_j^{opt}$ を滑降シンプレックス法 [62] によって求める。こうして得られた $\hat{q}_j^{opt}$ および $\hat{x}_j^{opt}$ を本手法における最終推定解とする。

5.4 数値シミュレーションによる数値実験

本手法の有効性を検討するため、電流双極子モデルを用いた数値シミュレーションによる数値実験を行った結果を示す。図 5-5 に本数値実験に用いる MEG センサ（磁束密度測定用コイル）の配置を示す。測定における外乱の影響を低減するため、MEG センサは 2 対のコイルから成っており、コイル内を通過する磁束密度が検出される。コイル 1 とコイル 2 で測定される磁束密度の差分が測定データとなる。本数値実験では正解の電流双極子として、以下の 2 通りの分布を与えた。

(1) 電流双極子 2 個

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1 &= (0.0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_1 &= (0.0, -30.0, 30.0) \text{ nAm} \\ \mathbf{q}_2 &= (0.0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_2 &= (0.0, 30.0, 30.0) \text{ nAm} \end{aligned} \quad (5.30)$$

(2) (1) の 2 つの電流双極子それぞれを中心として、次式のモーメント分布をなすように電流双極子を一辺 $r = 5 \text{ mm}$ の立方体領域に 125 個ずつ等間隔に配置

$$Q(x, y, z) = a \left\{ (x - x_o)^2 + (y - y_o)^2 + (z - z_o)^2 - 3r^2 \right\} \quad (5.31)$$

ここで、 (x_o, y_o, z_o) は配置した立方体領域の中心点である．比例定数 a の値は分布のモーメントの総和が (1) と等しくなるように設定した．

逆解析において，電流双極子の位置候補点を原点から 12.9 mm ごとに直径約 160 mm の球を成すように等間隔に配置し，その数を 1020 個とした．ここで，本数値実験において電流双極子の候補点位置に，正解の電流双極子と同じ位置になるものが無いことに注意されたい．特異値分解法の繰り返し行程において切捨てる候補点は，その点における双極子モーメントが全候補点での双極子モーメントにおける最大値の 10 % 以下となるものとした．また，クラスタ分析における代表双極子数は (1) と (2) のどちらの場合においても 2 個とした．

上記の正解の電流双極子の位置とモーメントを与え，式 (5.6) によって各 MEG センサの磁束密度を計算する．この計算結果に平均 0 fT，分散 5 fT の Gause 分布をなす微小なランダムノイズを与えたものを擬似測定データとし，本手法を適用して得られた結果を以下に示す．

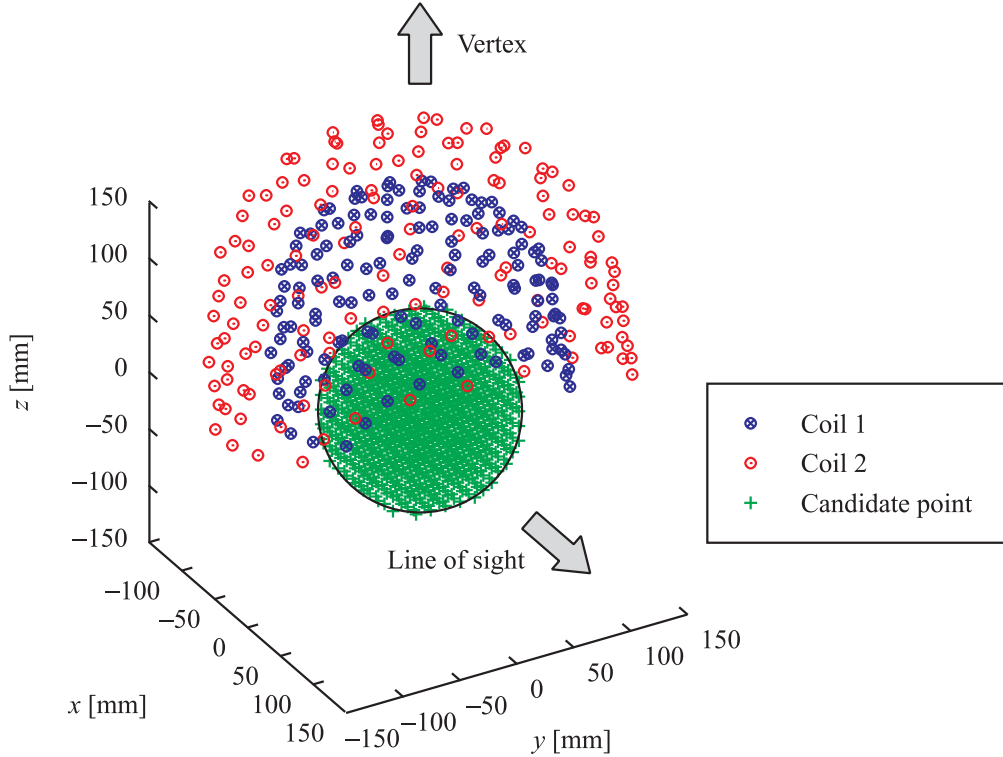


Fig. 5-5: The configuration of the sensor coils and the candidate points of the current dipoles

5.4.1 電流双極子 2 個の場合

図 5-6 は位置 $q_1 = (0, 50, 50)$ mm，モーメント $Q_1 = (100, 0, 0)$ nAm および位置 $q_2 = (0, -50, 50)$ mm，モーメント $Q_2 = (100, 0, 0)$ nAm の電流双極子 2 個が発生したときの磁束密度の擬似測定データの分布である．

図 5-6 のデータを用いて，打ち切り特異値分解法を 1 回だけ適用した結果を図 5-7 に示す．このとき，推定された電流双極子モーメントは広く分布し，正解の双極子位置近傍で大きくなる．推定さ

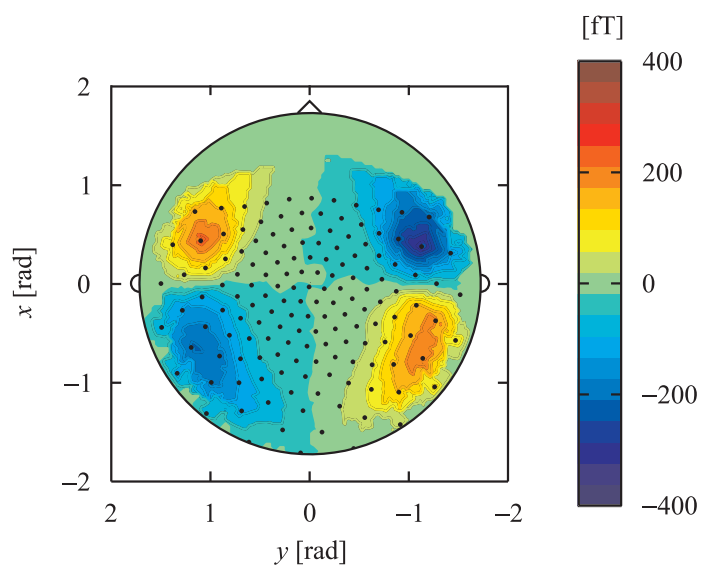


Fig. 5-6: The phantom data of the magnetic flux density by 2 current dipoles

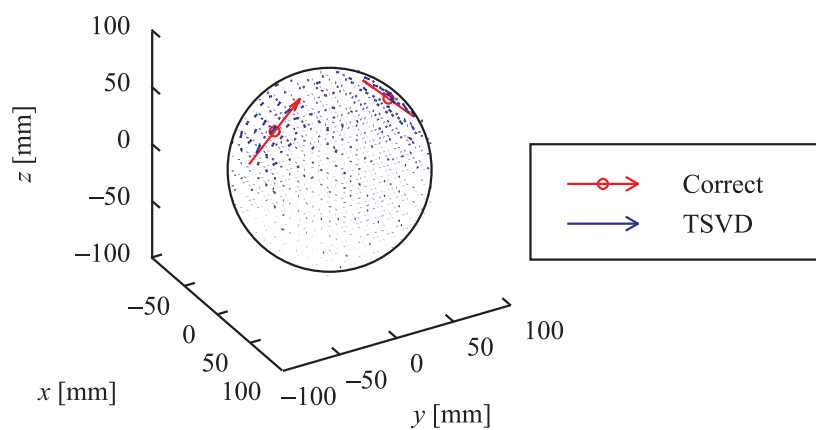


Fig. 5-7: The estimated dipoles from Figure 5-6 by one-time TSVD

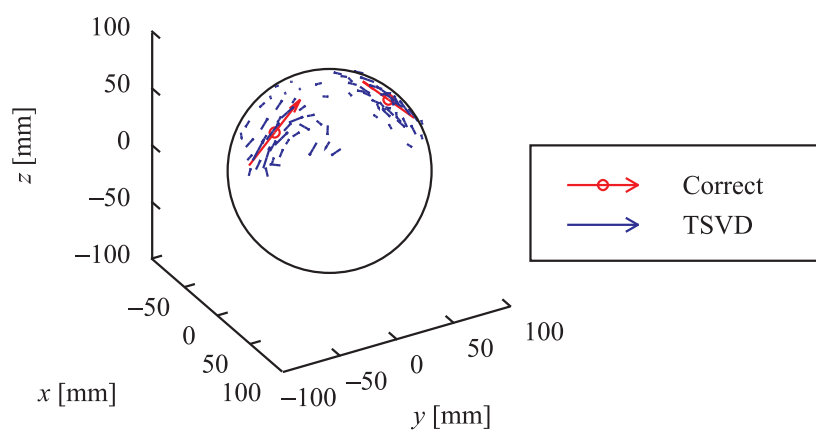


Fig. 5-8: The estimated dipoles from Figure 5-7 by the iterative TSVD

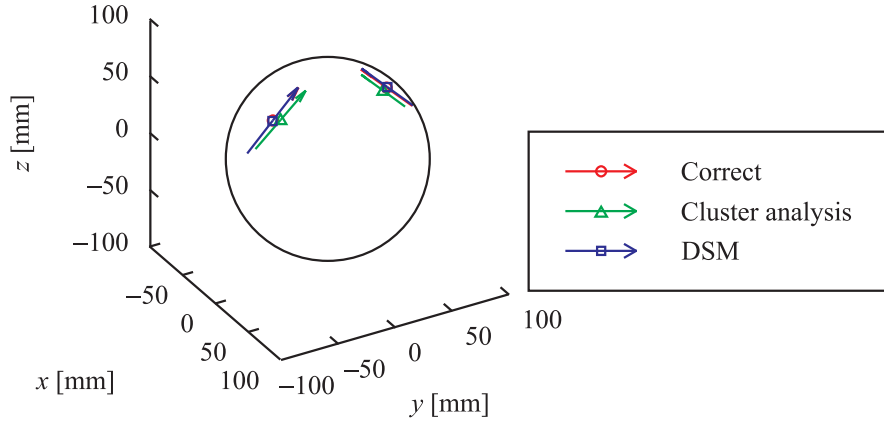


Fig. 5-9: The estimated dipoles from Figure 5-8 by the cluster analysis and the downhill simplex method

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_1 = (0.0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_1 = (0.0, -30.0, 30.0) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{cls} = (-1.7, 48.0, 47.1) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_1^{cls} = (0.7, -34.3, 35.0) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (-0.1, 50.7, 50.3) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_1^{opt} = (-0.1, -29.3, 29.5) \text{ nAm}
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_2 = (0.0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_2 = (0.0, 30.0, 30.0) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{cls} = (1.8, -44.2, 49.8) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_2^{cls} = (0.5, 38.7, 34.4) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (0.0, -50.4, 49.6) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_2^{opt} = (-0.4, 29.4, 29.8) \text{ nAm}
 \end{cases}$$

れた電流双極子モーメントの最大値の 10 % 以下になる位置候補点を切捨てた後、再び打ち切り特異値分解法を適用する繰り返し計算を行った結果を図 5-8 に示す。これにより、正解の双極子位置近傍の推定点 78 個が残った。

図 5-8 の双極子推定分布にクラスタ分析を適用した後、分析結果を初期値として滑降シンプレックス法を適用した結果を図 5-9 に示す。クラスタ分析によって 78 個の位置候補点が 2 個の電流双極子で代表された。また、その代表双極子の位置およびモーメントは正解の電流双極子に近い。代表双極子を初期値とした滑降シンプレックス法によって、正解値とほぼ一致する電流双極子を推定することができた。

5.4.2 多数の電流双極子が分布する場合

図 5-10 は位置 $\mathbf{q}_1 = (0, 50, 50) \text{ mm}$ および $\mathbf{q}_2 = (0, -50, 50) \text{ mm}$ を中心として、式 (5.31) のモーメント分布をなす 125 個の電流双極子が 2 つの立方体領域にそれぞれ発生したときの磁束密度の擬似測定データの分布である。

図 5-10 のデータを用いて、打ち切り特異値分解法を 1 回だけ適用した結果を図 5-11 に示す。また、推定された電流双極子の最大値の 10 % 以下になる位置候補点を切捨てた後、再び打ち切り特異値分解法を適用する繰り返し計算を行った結果を図 5-12 に示す。これにより、正解の双極子分布の中心 2 点近傍に 84 個の位置候補点が残った。

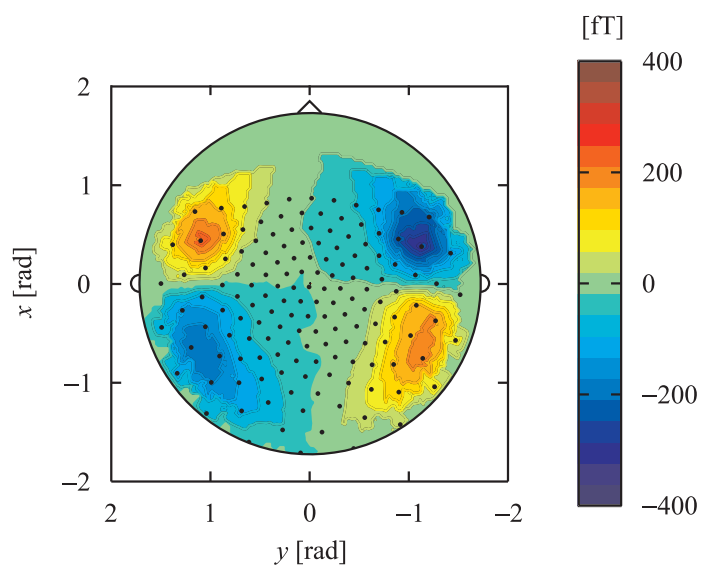


Fig. 5-10: The phantom data of the magnetic flux density by distributed current dipole

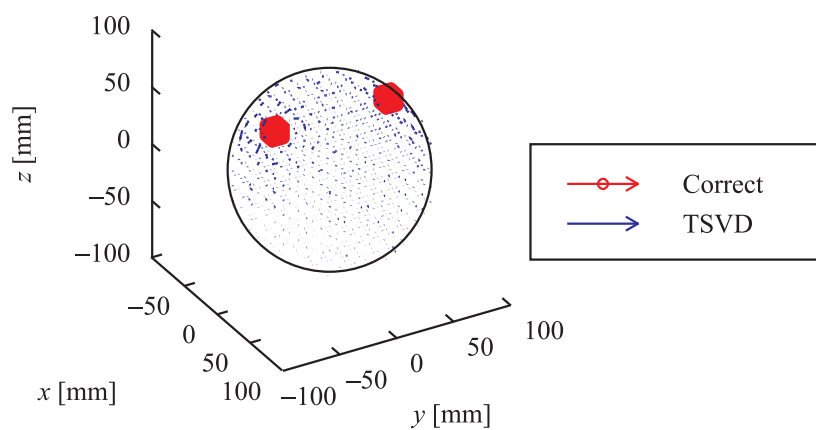


Fig. 5-11: The estimated dipoles from Figure 5-10 by one-time TSVD

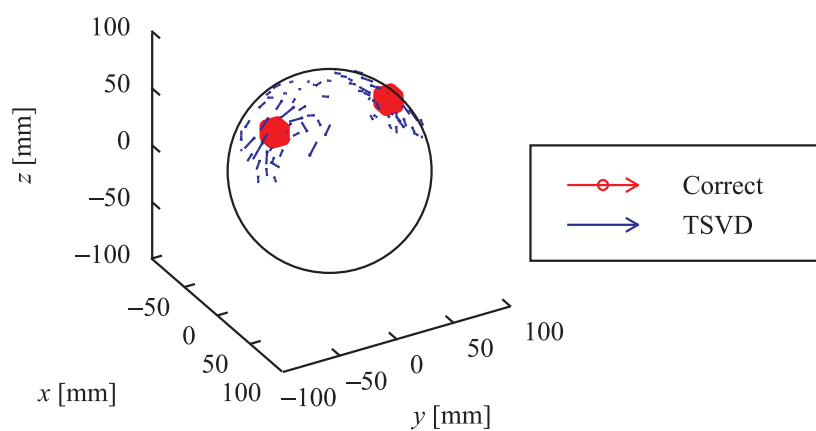


Fig. 5-12: The estimated dipoles from Figure 5-11 by the iterative TSVD

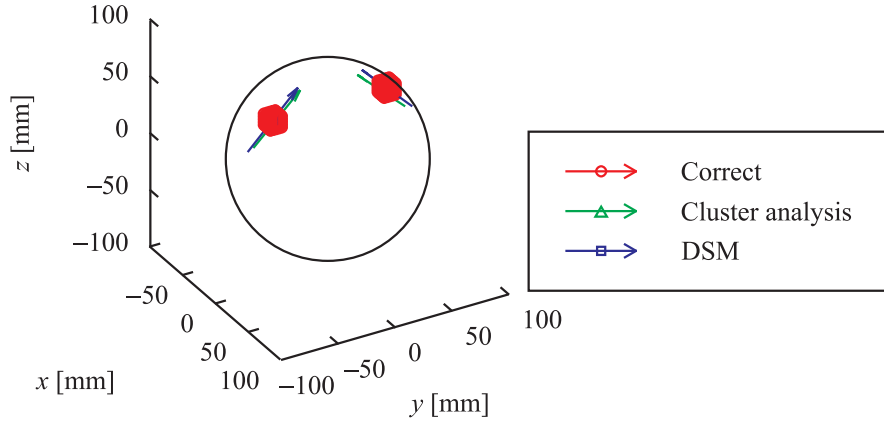


Fig. 5-13: The estimated dipoles from Figure 5-12 by the cluster analysis and the downhill simplex method

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_1^{center} = (0.0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_1^{center} = (0.0, -30.0, 30.0) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{cls} = (-0.9, 45.8, 48.2) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_1^{cls} = (0.4, -37.0, 35.1) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (0.2, 50.3, 49.6) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_1^{opt} = (0.7, -29.8, 30.2) \text{ nAm}
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_2^{center} = (0.0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{Q}_2^{center} = (0.0, 30.0, 30.0) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{cls} = (-1.4, -45.7, 49.3) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_2^{cls} = (-0.6, 36.4, 33.7) \text{ nAm} \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (0.3, -50.2, 50.7) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{Q}}_2^{opt} = (-0.1, 29.4, 29.1) \text{ nAm}
 \end{cases}$$

図 5-12 の双極子推定分布にクラスタ分析を適用した後、分析結果を初期値として滑降シンプレックス法を適用した結果を図 5-13 に示す。滑降シンプレックス法による推定電流双極子の修正結果は正解の双極子分布の中心とほぼ一致する値が得られた。

5.5 磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムによる検証実験

5.5.1 磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントム

本研究で開発した磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムを図 5-14 に示す。本 MEG 用ファントムは磁気双極子となる 4 つの小さなコイルとこれらコイルに様々な波形を有する電流を入力する電流発生装置からなる。図 5-15 はコイルの配置図である。これは MEG 用ファントムとしての基礎的な機能を持たせた第 1 世代ファントムであり、今後コイルの小型化およびその個数を増やすことで、再現できる磁場の自由度を上げることを検討している。

本ファントムは電流双極子モデルベース [55]-[61] のファントムと異なり、電解液を用いないため、電気化学的な反応を考慮する必要が無い。したがって、磁気双極子モデルベースのファントムはより精度良く設計・製作でき、長期運用が可能である利点がある。

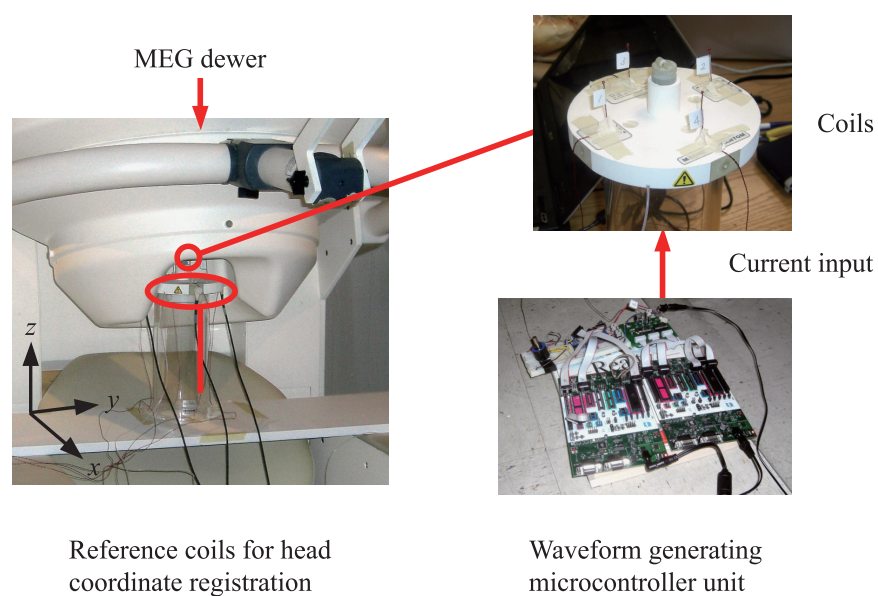


Fig. 5-14: The 1st generation brain phantom for MEG measurement

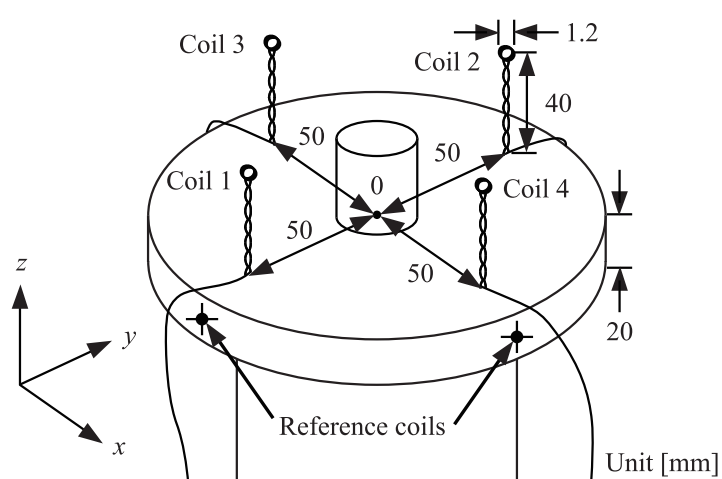


Fig. 5-15: The locations of the phantom's coils

5.5.2 測定手順

測定実験では図 5-14 に示すように、開発したファントムを MEG 測定装置に設置する。ファントムには頭部座標系を決定するための参照コイルを前と左右の計 3 つ取り付ける。

電流発生装置から任意の波形を有する電流をそれぞれのコイルに入力し、それらによって生じる磁束密度を MEG センサで測定する。今回用いた MEG 測定装置が有する MEG センサ数は 151 個であり、それぞれのセンサで磁束密度の時系列データを取得する。各 MEG センサの配置は「5.4 数値シミュレーションによる数値実験」と同じであり、図 5-5 に示したとおりである。なお、測定は外部ノイズの影響を小さくするため、磁気シールドルーム内にて行う。

5.5.3 磁気双極子コイルの推定手順

本手法を適用するにあたって必要な磁気双極子コイルの位置候補点は「5.4 数値シミュレーションによる数値実験」で用いた配置と同じとした（図 5-5）。その双極子位置の候補点は原点から 12.9 mm ごとに直径約 160 mm の球を成すように等間隔に配置され、その数は 1020 個である。

5.5.4 測定結果と本手法による推定結果

a. 左右の磁気双極子コイル (coil 1, 2) に電流を入力した場合

左右の磁気双極子コイル (coil 1, 2) に正弦波形 (周波数 12.5 Hz, 10 mA) の電流を入力したときに得られた脳磁図の時系列データを図 5-16 に、図 5-16 中の 1.1 秒のときの脳磁図（頭部表面近傍の磁束密度分布）を図 5-17 に示す。また、図 5-17 のデータを用い、本手法によって推定された磁気双極子モーメントの推移を図 5-18、図 5-19 および図 5-20 に示す。

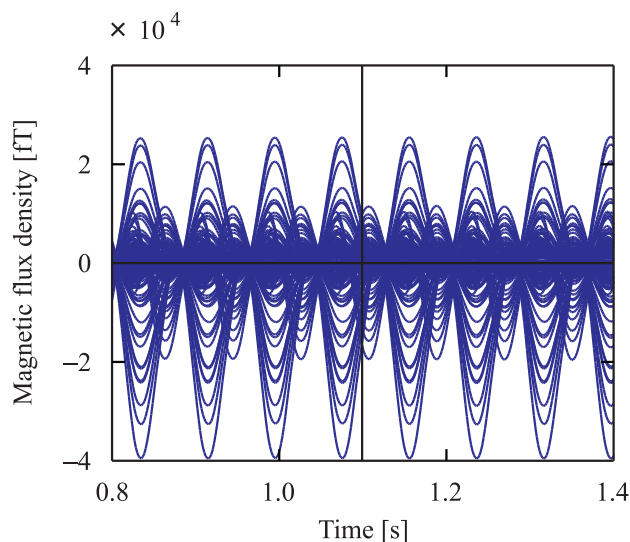


Fig. 5-16: The time-line data of MEG when the coils 1 and 2 are activated

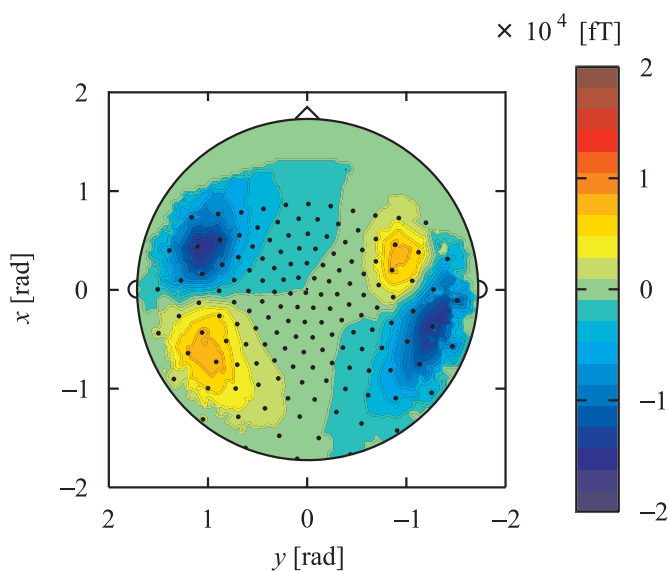


Fig. 5-17: The spatial distribution map of MEG at 1.1 s in Figure 5-16

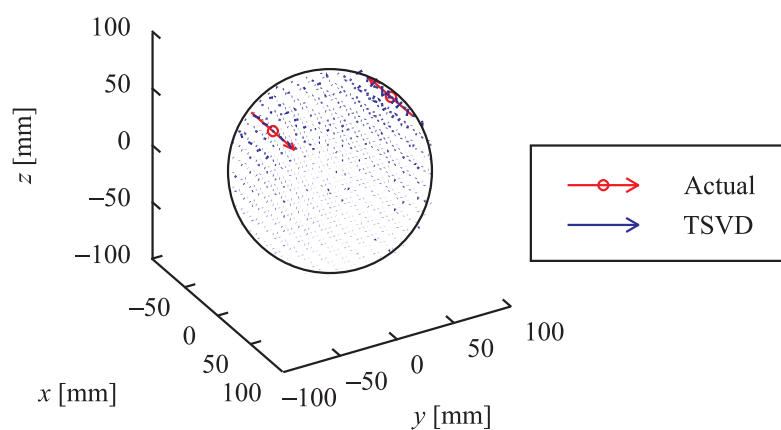


Fig. 5-18: The estimated dipoles from Figure 5-17 by one-time TSVD

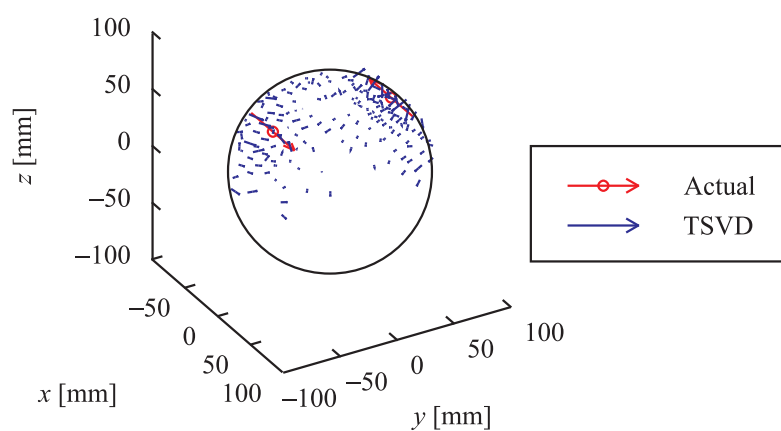


Fig. 5-19: The estimated dipoles from Figure 5-18 by the iterative TSVD

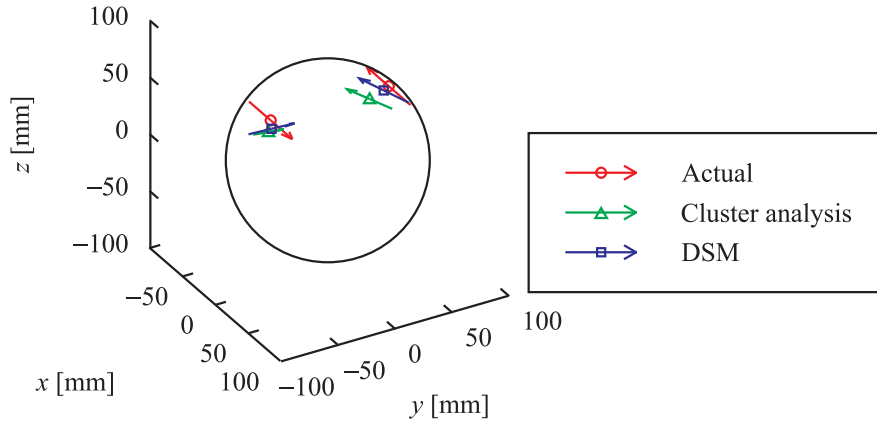


Fig. 5-20: The estimated dipoles from Figure 5-19 by the cluster analysis and the downhill simplex method

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{q}_1 = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_1 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_1^{cls} = (-3.5, -51.8, 40.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{cls} = (29.1, 13.5, 16.2) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (-3.8, -49.0, 41.7) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{opt} = (29.3, 14.4, 17.9) \text{ nAm}^2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{q}_2 = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_2 = (-33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_2^{cls} = (0.1, 35.0, 45.6) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{cls} = (-61.6, -9.6, -8.4) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (-0.4, 47.7, 49.3) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{opt} = (-46.9, -6.4, -5.3) \text{ nAm}^2 \end{array} \right.$$

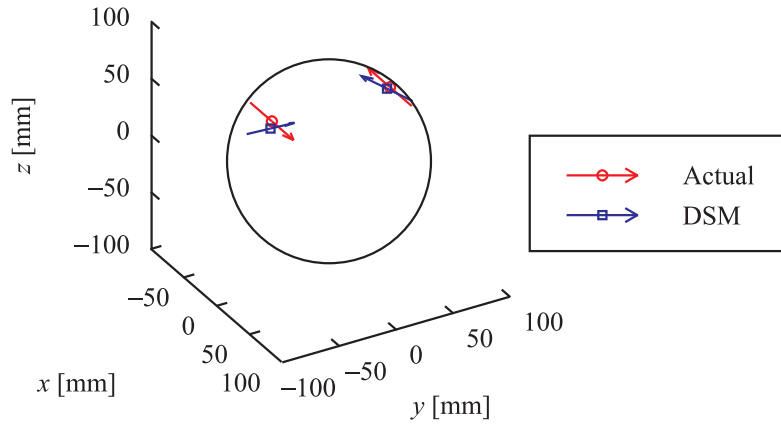


Fig. 5-21: The estimated dipoles from Figure 5-17 by the conventional downhill simplex method

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{q}_1 = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_1 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_1^{initial} = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{initial} = (1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (-3.8, -49.0, 41.7) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{opt} = (29.3, 14.4, 17.9) \text{ nAm}^2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{q}_2 = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_2 = (-33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_2^{initial} = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{initial} = (-1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\ \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (-0.4, 47.7, 49.3) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{opt} = (-46.9, -6.4, -5.3) \text{ nAm}^2 \end{array} \right.$$

図 5-19 より, 本手法によって磁気双極子コイル (coil 1, 2) がある位置を中心とした磁気双極子モーメントの分布が得られたことが分かる. さらに図 5-20 より, 代表双極子数を 2 個としてクラスタ分析と滑降シンプレックス法を適用することで, 実際の磁気双極子コイルとよく一致する推定結果が得られた.

比較のため, 従来法として滑降シンプレックス法のみを用いて磁気双極子コイルを推定した結果を図 5-21 に示す. 初期点は図 5-21 の下に示すように $\hat{\mathbf{q}}_1^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_1^{initial}, \hat{\mathbf{q}}_2^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_2^{initial}$ とした. 本測定実験では本手法と従来法のどちらでも同じ推定結果が得られたが, 従来法では初期点を適切に設定しなければならない問題点がある.

b. 前後左右の磁気双極子コイル (coil 1-4) に電流を入力した場合

前後左右の磁気双極子コイル (coil 1-4) に正弦波形 (周波数 12.5 Hz, 10 mA) の電流を入力したときに得られた脳磁図の時系列データを図 5-22 に, 図 5-22 中の 1.1 秒のときの脳磁図を図 5-23 に示す. また, 図 5-23 のデータを用い, 本手法によって推定された磁気双極子モーメントの推移を図 5-24, 図 5-25 および図 5-26 に示す.

図 5-25 に示すように, 本手法によって磁気双極子コイル (coil 1-4) がある位置を中心とした磁気双極子モーメントの分布が得られた. さらに図 5-26 より, 代表双極子数を 4 個としてクラスタ分析と滑降シンプレックス法を適用することで, 実際の磁気双極子コイルとよく一致する推定結果が得られた.

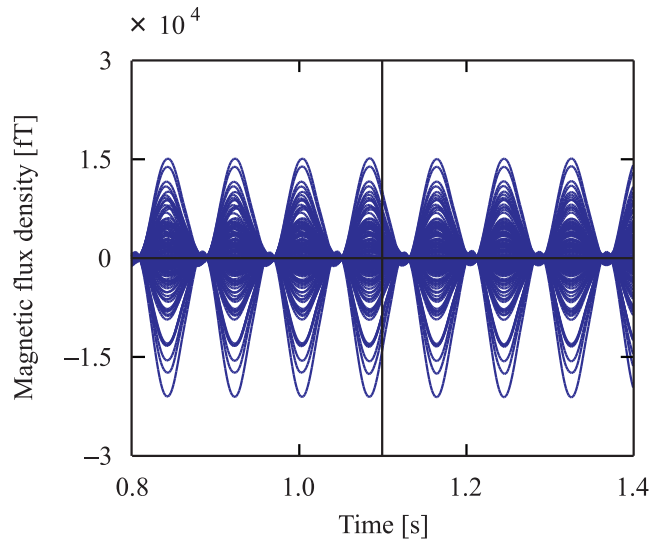


Fig. 5-22: The time-line data of MEG when the coils 1-4 are activated

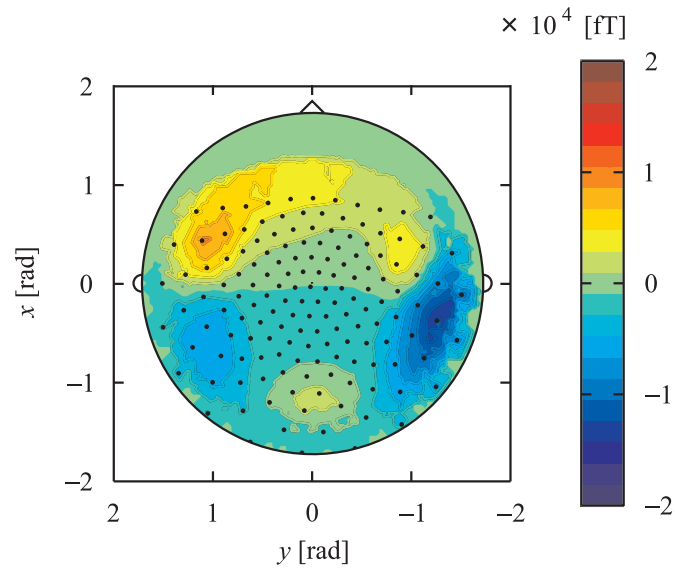


Fig. 5-23: The spatial distribution map of MEG at 1.1 s in Figure 5-22

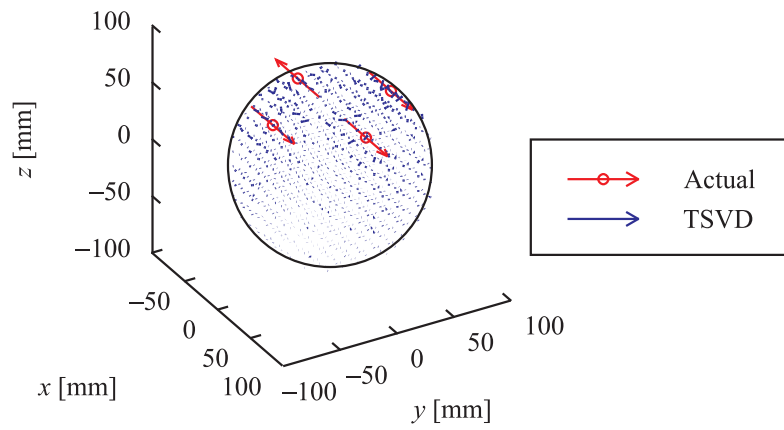


Fig. 5-24: The estimated dipoles from Figure 5-23 by one-time TSVD

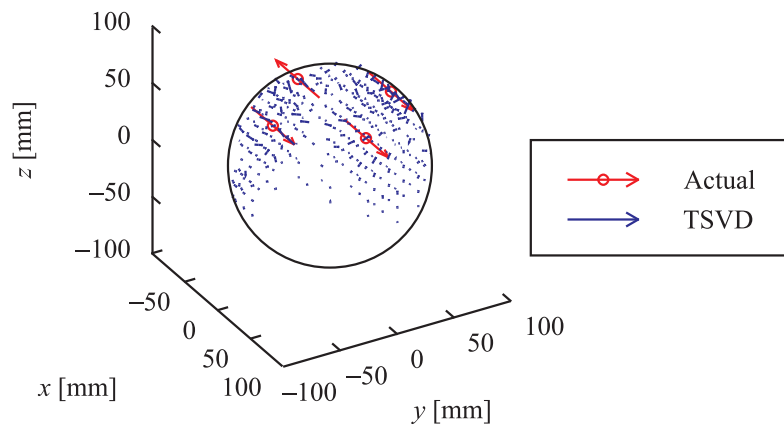


Fig. 5-25: The estimated dipoles from Figure 5-24 by the iterative TSVD

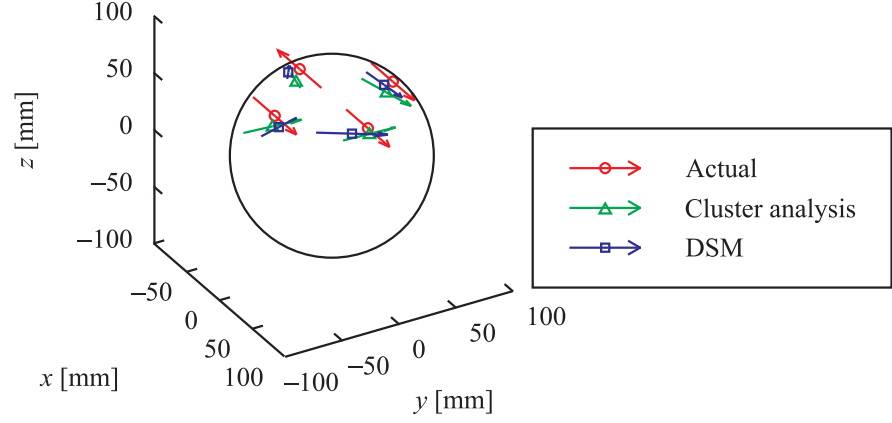


Fig. 5-26: The estimated dipoles from Figure 5-25 by the cluster analysis and the downhill simplex method

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_1 = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_1 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{cls} = (-8.4, -49.1, 37.6) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{cls} = (19.0, 14.9, 11.1) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (1.4, -49.1, 41.9) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{opt} = (24.6, 4.3, 20.7) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_2 = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_2 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{cls} = (0.5, 45.8, 44.6) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{cls} = (27.4, 6.3, -0.3) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (-2.7, 45.8, 49.5) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{opt} = (29.7, 1.8, 1.0) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_3 = (-50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_3 = (-33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_3^{cls} = (-59.2, 1.1, 37.1) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_3^{cls} = (-7.4, 0.4, 2.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_3^{opt} = (-45.5, -13.8, 56.4) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_3^{opt} = (-13.6, 9.0, -2.4) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_4 = (50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_4 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_4^{cls} = (43.7, 6.0, 41.1) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_4^{cls} = (26.1, 8.3, 16.5) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_4^{opt} = (44.2, -9.5, 46.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_4^{opt} = (26.2, 22.5, 5.6) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

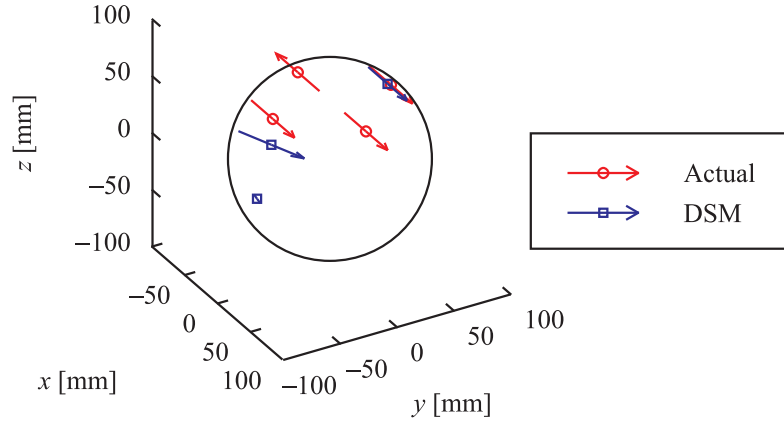


Fig. 5-27: The estimated dipoles from Figure 5-23 by the conventional downhill simplex method

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_1 = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_1 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{initial} = (0, 0, -50.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{initial} = (1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_1^{opt} = (-0.1, -51.2, 28.4) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_1^{opt} = (31.5, 11.6, 0.0) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_2 = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_2 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{initial} = (0, 0, 50.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{initial} = (1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_2^{opt} = (0.8, 46.7, 52.2) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_2^{opt} = (30.4, 0.0, -0.1) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_3 = (-50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_3 = (-33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_3^{initial} = (-50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_3^{initial} = (-1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_3^{opt} = (55.0, -95.1, 23.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_3^{opt} = (5.0, -0.1, -1.3) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

$$\begin{cases}
 \mathbf{q}_4 = (50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \mathbf{M}_4 = (33.9, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_4^{initial} = (50, 0, 0.0, 50.0) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_4^{initial} = (1.0, 0.0, 0.0) \text{ nAm}^2 \\
 \hat{\mathbf{q}}_4^{opt} = (-791.5, -1788.0, -3515.8) \text{ mm}, & \hat{\mathbf{M}}_4^{opt} = (33.7, -4.0, -0.8) \text{ nAm}^2
 \end{cases}$$

比較のため、従来法として滑降シンプレックス法のみを用いて磁気双極子コイルを推定した結果を図 5-27 に示す。初期点は図 5-27 の下に示すように $\hat{\mathbf{q}}_1^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_1^{initial}, \hat{\mathbf{q}}_2^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_2^{initial}, \hat{\mathbf{q}}_3^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_3^{initial}, \hat{\mathbf{q}}_4^{initial}, \hat{\mathbf{M}}_4^{initial}$ とした。このとき従来法では局所解を求めており、特に前後の磁気双極子コイル (Coil 3,4) が正確に推定できていない。

5.6 結言

本研究では、電磁場逆解析による電気めっきモニタリングに関する研究（「第2章 LSI製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」および「第4章 磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法」）から得られた知見および成果を脳磁図逆問題に応用し、従来法では成し得なかった経験に依存しない多段階逆解析手法を開発した。

本研究ではさらに、本逆解析手法の有効性の検証と MEG センサの校正のため、磁気双極子モデルベースの MEG 用ファントムを開発した。これは MEG 用ファントムとしての基礎的な機能を持たせた第1世代ファントムであり、今後コイルの小型化およびその個数を増やすことで、再現できる磁場の自由度を上げることを検討している。

本研究で得られた結論を以下に示す。

- (1) 本研究では MEG による双極子の推定問題における逆解析手法に焦点を当て、打ち切り特異値分解法による双極子分布の概値推定と滑降シンプレックス法による推定解の修正からなる多段階逆解析手法を開発した。
- (2) 本手法では、まず第1段階として双極子の位置候補点を作成した後、候補点における MEG の測定データから打ち切り特異値分解法を用いて推定する。次に第2段階となるクラスタ分析を用い、打ち切り特異値分解法によって鈍って推定される電流双極子の分布を少数の双極子で代表させる。このクラスタ分析によって得られた代表電流双極子を初期値として用い、第3段階として滑降シンプレックス法を適用することで双極子の位置とモーメントの最終的な推定解を得る。以上の行程により、従来は MEG の利用者の経験に依存していた滑降シンプレックス法における初期値決定に関する問題を解決する。本手法は逆解析に用いる電流双極子モデルや磁気双極子モデルといった数理モデルによらず適用できる。
- (3) 数値シミュレーションによる数値実験と MEG 用ファントムによる検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。
 - (i) 数値シミュレーションによる数値実験では、電流双極子モデルを用いて、MEG センサで測定される磁場を計算し、ランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。得られた擬似測定データに本手法を適用することで、磁場源となっている正解の電流双極子を推定することができた。
 - (ii) 本手法の検証実験では、開発した MEG 用ファントムを用いて測定実験を行い、磁気双極子コイルによる脳磁図を得た。得られた脳磁図に本手法を適用することで、第1段階では正解の磁気双極子コイル位置を中心とした磁気双極子モーメントの分布が得られることを示した。さらに、クラスタ分析および滑降シンプレックス法を適用することで、特に磁気双極子数が多い場合でも、局所解を得ることなく実際の磁気双極子コイルを推定できることを確認した。

以上の結果より、本手法は実際の脳内の神経活動から得られる MEG データに対しても十分に適用できると考えられる。

参考文献

- [1] Cohen, D., Cuffin, B.N., Yunokuchi, K., Maniewski, R., Purcell, C., Cosgrove, G.R., Ives, J., Kennedy, J.G. and Schomer, D.L., MEG versus EEG Localization Test using Implanted Sources in the Human Brain, *Annals of Neurology*, Vol.28, No.6, (1990), pp.811–817.
- [2] Barth, D.S., Empirical Comparison of the MEG and EEG: Animal Models of the Direct Codical Response and Epileptiform Activity in Neocortex, *Brain Topography*, Vol.4, No.2, (1991), pp.85–93.
- [3] Cheyne, D., Roberts, L.E., Gaetz, W., Bosnyak, D., Nahmias, C., Christoforou, N., and Weinberg, H., Somatotopic Organization of Human Somatosensory Cortex: A Comparison of EEG, MEG and fMRI Methods, *Proceedings of the 3rd Pan-Pacific Conference on Brain Topography*, Vol.1147, (1997), pp.76–81.
- [4] Baillet, S., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., Electromagnetic Brain Mapping, *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol.18, No.6, (2001), pp.14–30.
- [5] Hillebrand, A. and Barnes, G.R., A Quantitative Assessment of the Sensitivity of Whole-Head MEG to Activity in the Adult Human Cortex, *NeuroImage*, Vol.16, No.3, (2002), pp.638–650.
- [6] Takeda, T., *Brain Engineering*, (2003), Corona Publishing.
- [7] Simine, E., Gaetz, W., Cheyne, D., Tsotsos, J. and Martinez-Trujillo, J.C., MEG Study of Temporal Parameters and Localization of Brain Responses During the Detection of Transient Changes in the Direction of Moving Stimuli, *Journal of Vision*, Vol.4, No.8, (2004), pp.564.
- [8] Darvas, F., Pantazis, D., Kucukaltun-Yildirim, E. and Leahy, R.M., Mapping Human Brain Function with MEG and EEG: Methods and Validation, *NeuroImage*, Vol.23, No.1, (2004), pp.289–299.
- [9] Cornwell, B.R., Carver, F.W., Coppola, R., Johnson, L., Alvarez, R. and Grillon, C., Evoked Amygdala Responses to Negative Faces Revealed by Adaptive MEG Beamformers, *Brain Research*, Vol.1244, (2008), pp.103–112.
- [10] Mamelak, A.N., Lopez, N., Akhtari, M. and Sutherling, W.W., Magnetoencephalography-Directed Surgery in Patients with Neocortical Epilepsy, *Journal of Neurosurgery*, Vol.97, No.4, (2002), pp.865–873.
- [11] Fischer, M.J.M., Scheler, G. and Stefan, H., Utilization of Magnetoencephalography Results to Obtain Favourable Outcomes in Epilepsy Surgery, *Brain*, Vol.128, No.1, (2005), pp.153–157.
- [12] Papanicolaou, A.C., Patariaia, E., Marshall, R.B., Castillo, E.M., Wheless, J.W., Swank, P., Breier, J.I., Sarakari, S. and Simos, P.G., Toward the Substitution of Invasive Electroencephalography in Epilepsy Surgery, *Journal of Clinical Neurophysiology*, Vol.22, No.4, (2005), pp.231–237.

- [13] Knake, S., Halgren, E., Shiraishi, H., Hara, K., Hamer, H.M., Grant, P.E., Carr, V.A., Foxe, D., Camposano, S., Busa, E., Witzel, T., Hamalainen, M.S., Ahlfors, S.P., Bromfield, E.B., Black, P.M., Bourgeois, B.F., Cole, A.J., Cosgrove, G.R., Dworetzky, B.A., Madsen, J.R., Larsson, P.G., Schomer, D.L., Thiele, E.A., Dale, A.M., Rosen, B.R. and Stufflebeam, S.M., The Value of Multichannel MEG and EEG in the Presurgical Evaluation of 70 Epilepsy Patients, *Epilepsy Research*, Vol.69, No.1, (2006), pp.80–86.
- [14] Schwartz, E.S., Dlugos, D.J., Storm, P.B., Della, J., Magee, R., Flynn, T.P., Zarnow, D.M., Zimmermann, R.A. and Roberts, T.P.L., Magnetoencephalography for Pediatric Epilepsy: How We Do It, *American Journal of Neuroradiology*, Vol.29, No.5, (2008), pp.832–837.
- [15] Agirre-Arrizubieta, Z., Huiskamp, G.J.M., Ferrier, C.H., Van Huffelen, A.C. and Leijten, F.S.S., Interictal Magnetoencephalography and the Irritative Zone in the Electrocorticogram, *Brain*, Vol.132, No.11, (2009), pp.3060–3071.
- [16] Barth, D.S., Sutherling, W., Broffman, J. and Beatty, J., Magnetic Localization of a Dipolar Current Source Implanted in a Sphere and a Human Cranium, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.63, No.3, (1986), pp.260–273.
- [17] Van Veen, B.D. and Buckley, K.M., Beamforming: A Versatile Approach to Spatial Filtering, *IEEE ASSP Magazine*, Vol.5, No.2, (1988), pp.4–24.
- [18] Liu, T.C. and Van Veen, B.D., Multiple Window Based Minimum Variance Spectrum Estimation for Multidimensional Random Fields, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol.40, No.3, (1992), pp.578–589.
- [19] Hamalainen, M.S. and Ilmoniemi, R.J., Interpreting Magnetic Fields of the Brain: Minimum Norm Estimates, *Medical and Biological Engineering and Computing*, Vol.32, No.1, (1994), pp.35–42.
- [20] Cheyne, D., Roberts, L.E., Gaetz, W., Bosnyak, D., Weinberg, H., Johnson, B., Nahmias, C. and Deecke, L., EEG and MEG Source Analysis of Somatosensory Evoked Responses to Mechanical Stimulation of the Fingers, *Proceedings of the 10th International Conference Biomagnetism*, Vol.2, (1996), pp.1130–1133.
- [21] Van Veen, B.D., Van Drongelen, W., Yuchtman, M. and Suzuki, A., Localization of Brain Electrical Activity via Linearly Constrained Minimum Variance Spatial Filtering, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.44, No.9, (1997), pp.867–880.
- [22] Phillips, J.W., Leahy, R.M. and Mosher, J.C., MEG-Based Imaging of Focal Neuronal Current Sources, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, Vol.16, No.3, (1997), pp.338–348.
- [23] Huang, M., Aine, C.J., Supek, S., Best, E., Ranken, D. and Flynn, E.R., Multi-Start Downhill Simplex Method for Spatio-Temporal Source Localization in Magnetoencephalography, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.108, No.1, (1998), pp.32–44.
- [24] Uutela, K., Hamalainen, M., and Salmelin, R., Global Optimization in the Localization of Neuro-magnetic Sources, *IEEE Transaction on Biomedical Engineering*, Vol.45, No.6, (1998), pp.716–723.

-
- [25] Slotnick, S.D., Klein, S.A., Carney, T., Sutter, E. and Dastmalchi, S., Using Multi-Stimulus VEP Source Localization to Obtain a Retinotopic Map of Human Primary Visual Cortex, *Clinical Neurophysiology*, Vol.110, No.10, (1999), pp.1793–1800.
- [26] Crouzeix, A., Yvert, B., Bertrand, O. and Pernier, J., An Evaluation of Dipole Reconstruction Accuracy with Spherical and Realistic Head Models in MEG, *Clinical Neurophysiology*, Vol.110, No.12, (1999), pp.2176–2188.
- [27] Mosher, J.C., Leahy, R.M., Shattuck, D.W. and Baillet, S., MEG Source Imaging Using Multipolar Expansions, *Proceedings of the 16th Conference on Information Processing in Medical Imaging*, Vol.1613, (1999), pp.15–18.
- [28] Mosher, J.C., Baillet, S., Jerbi, K. and Leahy, R.M., MEG Multipolar Modeling of Distributed Sources using RAP-MUSIC, *Conference Record of the 34th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, Vol.1, (2000), pp.318–322.
- [29] Liu, A.K., Dale, A.M. and Belliveau, J.W., Monte Carlo Simulation Studies of EEG and MEG Localization Accuracy, *Human Brain Mapping*, Vol.16, No.1, (2002), pp.47–62.
- [30] Hillebrand, A. and Barnes, G.R., The Use of Anatomical Constraints with MEG Beamformers, *NeuroImage*, Vol.20, No.4, (2003), pp.2302–2313.
- [31] Jerbi, K., Baillet, S., Mosher, J.C., Nolte, G., Garnero, L. and Leahy, R.M., Localization of Realistic Cortical Activity in MEG using Current Multipoles, *NeuroImage*, Vol.22, No.2, (2004), pp.779–793.
- [32] Chau, W., McIntosh, A.R., Robinson, S.E., Schulz, M. and Pantev, C., Improving Permutation Test Power for Group Analysis of Spatially Filtered MEG Data, *NeuroImage*, Vol.23, No.3, (2004), pp.983–996.
- [33] Jun, S.C. and Pearlmuter, B.A., Fast Robust Subject-Independent Magnetoencephalographic Source Localization using an Artificial Neural Network, *Human Brain Mapping*, Vol.24, No.1, (2005), pp.21–34.
- [34] Cheyne, D., Bakhtazad, L. and Gaetz, W., Spatiotemporal Mapping of Cortical Activity Accompanying Voluntary Movements using an Event-Related Beamforming Approach, *Human Brain Mapping*, Vol.27, No.3, (2006), pp.213–229.
- [35] Dalal, S.S., Sekihara, K. and Nagarajan, S.S., Modified Beamformers for Coherent Source Region Suppression, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.53, No.7, (2006), pp.1357–1363.
- [36] Chen, Y.S., Cheng, C.Y., Hsieh, J.C. and Chen, L.F., Maximum Contrast Beamformer for Electromagnetic Mapping of Brain Activity, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.53, No. 9, (2006), pp.1765–1774.
- [37] Bayless, S.J., Gaetz, W.C., Cheyne, D. and Taylor, M.J., Spatiotemporal Analysis of Feedback Processing During a Card Sorting Task using Spatially Filtered MEG, *Neuroscience Letters*, Vol.410, No.1, (2006), pp.31–36.
-

- [38] Cheyne, D., Bostan, A.C., Gaetz, W. and Pang, E.W., Event-Related Beamforming: A Robust Method for Presurgical Functional Mapping using MEG, *Clinical Neurophysiology*, Vol.118, No.8, (2007), pp.1691–1704.
- [39] Nara, T., Oohama, J., Hashimoto, M., Takeda, T. and Ando, S., Direct Reconstruction Algorithm of Current Dipoles for Vector Magnetoencephalography and Electroencephalography, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.52, No.13, (2007), pp.3859–3879.
- [40] Lioumis, P., Taulu, S., Kicic, D., Nurminen, J., Kahkonen, S., Nenonen, J. and Montonen, J., Standardization of MEG Sensors by the Signal Space Separation Method, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, No.1300, (2007), pp.237–240.
- [41] Geselowitz, D.B., On Bioelectric Potentials in an Inhomogeneous Volume Conductor, *Biophysical Journal*, Vol.7, No.1, (1967), pp.1–11.
- [42] Grynszpan, F. and Geselowitz, D.B., Model Studies of the Magnetocardiogram, *Biophysical Journal*, Vol.13, No.9, (1973), pp.911–925.
- [43] Sarvas, J., Basic Mathematical and Electromagnetic Concepts of the Biomagnetic Inverse Problem, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.11–22.
- [44] Okada, Y., Lauritzen, M. and Nicholson, C., MEG Source Models and Physiology, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.43–51.
- [45] Stok, C.J., Meijs, J.W.H. and Peters, M.J., Inverse Solutions Based on MEG and EEG Applied to Volume Conductor Analysis, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.32, No.1, (1987), pp.99–104.
- [46] De Munck, J.C., Van Dijk, B.W. and Spekreijse, H., Mathematical Dipoles are Adequate to Describe Realistic Generators of Human Brain Activity, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.35, No.11, (1988), pp.960–966.
- [47] Hamalainen, M.S. and Sarvas, J., Realistic Conductivity Geometry Model of the Human Head for Interpretation of Neuromagnetic Data, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.36, No.2, (1989), pp.165–171.
- [48] Mosher, J.C., Leahy, R.M. and Lewis, P.S., EEG and MEG: Forward Solutions for Inverse Methods, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.46, No.3, (1999), pp.245–259.
- [49] Huang, M.X., Mosher, J.C. and Leahy, R.M., A Sensor-Weighted Overlapping-Sphere Head Model and Exhaustive Head Model Comparison for MEG, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.44, No.2, (1999), pp.423–440.
- [50] He, S. and Norgren, M., Magnetostatic Image Current and Its Application to an Analytic Identification of a Current Dipole Inside a Conducting Sphere, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol.47, No.2, (2000), pp.183–191.
- [51] Teale, P., Benkers, T., Rojas, D. and Reite, M., Determination of the Sphere Origin for MEG Source Modelling in Temporal Regions, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.47, No.7, (2002), pp.1161–1166.

-
- [52] Kwon, H., Lee, Y.H., Kim, J.M., Park, Y.K. and Kuriki, S., Localization Accuracy of Single Current Dipoles from Tangential Components of Auditory Evoked Fields, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.47, No.23, (2002), pp.4145–4154.
- [53] Nara, T., Suzuki, S. and Ando, S., A Closed-Form Formula for Magnetic Dipole Localization by Measurement of Its Magnetic Field and Spatial Gradients, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.42, No.10, (2006), pp.3291–3293.
- [54] Uehara, G., Higuchi, M., Adachi, Y., Kawai, J., Tanaka, H., Haruta, Y., Miyamoto, M., Shimozu, T. and Kawabata, M., An Error in Magnetic Field of Isosceles-Triangle Coil as a Representation of Equivalent Current Dipole, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.607–610.
- [55] Leahy, R.M., Mosher, J.C., Spencer, M.E., Huang, M.X. and Lewine, J.D., A Study of Dipole Localization Accuracy for MEG and EEG using a Human Skull Phantom, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, Vol.107, No.2, (1998), pp.159–173.
- [56] Baillet, S., Riera, J.J., Marin, G., Mangin, J.F., Aubert, J. and Garnero, L., Evaluation of Inverse Methods and Head Models for EEG Source Localization using a Human Skull Phantom, *Physics in Medicine and Biology*, Vol.46, No.1, (2001), pp.77–96.
- [57] Liehr, M., Hauelsen, J., Goernig, M., Seidel, P., Nenonen, J. and Katila, T., Vortex Shaped Current Sources in a Physical Torso Phantom, *Annals of Biomedical Engineering*, Vol.33, No.2, (2005), pp.240–247.
- [58] Flemming, L., Wang, Y., Caprihan, A., Eiselt, M., Hauelsen, J. and Okada, Y., Evaluation of the Distortion of EEG Signals Caused by a Hole in the Skull Mimicking the Fontanel in the Skull of Human Neonates, *Clinical Neurophysiology*, Vol.116, No.5, (2005), pp.1141–1152.
- [59] Aubert-Broche, B., Evans, A.C. and Collins, L., A New Improved Version of the Realistic Digital Brain Phantom, *NeuroImage*, Vol.32, No.1, (2006), pp.138–145.
- [60] McVeigh, P., Bostan, A. and Cheyne, D., Study of Conducting Volume Boundary Influence on Source Localization using a Realistic MEG Phantom, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.153–156.
- [61] Uehara, G., Miyamoto, M., Adachi, Y., Haruta, Y., Kawai, J., Shimozu, T. and Kawabata, M., An Effect of Electrical Double Layer on MEG Phantom with Saline Water, *Proceedings of the 15th International Conference on Biomagnetism*, Vol.1300, (2007), pp.611–614.
- [62] Nelder, J.A. and Mead, R., A Simplex Method for Function Minimization, *Computer Journal*, Vol.7, No.4, (1965), pp.308–313.
- [63] Kishimoto, Y., Cheung, T., Liu, J., Amaya, K. and Parameswaran, A.M., Brain Current Dipole Localization Studies for Magnetoencephalography using Multiple Phase Inverse Analysis, *Proceedings of the 15th Annual Meeting of the Organization for Human Brain Mapping*, Vol.47, No.1, (2009), No.210.
-

- [64] Kishimoto, Y., Liu, J., Cheung, T., Parameswaran, A.M. and Amaya, K., Magnetic Dipole Localization Studies for Magnetoencephalography using Multiple Phase Inverse Analysis and the Experimental Verification, *Proceedings of the 32nd Conference of the Canadian Medical and Biological Engineering Society*, No.09-32, (2009).
- [65] The Japan Society of Mechanical Engineers ed., *Computer Analysis of Inverse Problems*, (1991), Corona Publishing.
- [66] Kubo, S., *Inverse problem*, (1992), Baifukan.
- [67] Tanabe, K., Statistical Regularization of a Noisy Ill-Conditioned System of Linear Equations by Akaike's Information Criterion, *The Institute of Statistical Mathematics Research Memorandum*, No.60, (1974), pp.1–20.
- [68] Hansen, P.C., The Truncated SVD as a Method for Regularization, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.27, No.4, (1987), pp.534–553.
- [69] Akaike, H., A New Look at the Statistical Model Identification, *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol.19, No.6, (1974), pp.716–723.
- [70] Sugiura, N., Further Analysts of the Data by Akaike's Information Criterion and the Finite Corrections, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Vol.7, No.1, (1978), pp.13–26.
- [71] Burnham, K.P. and Anderson, D.R. *Model Selection and Multimodel Inference: A Practical Information-Theoretic Approach*, (2002), Springer.
- [72] Ward, J.H., Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function, *Journal of the American Statistical Association*, Vol.58, No.301, (1963), pp.236–244.
- [73] Ball, G.H., and Hall, D.J., A Clustering Technique for Summarizing Multivariate Data, *Behavioral Science*, Vol.12, No.2, (1967), pp.153–155.
- [74] MacQueen, J., Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations, *Proceedings of 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Berkeley, University of California Press, (1967), pp.281–297.
- [75] Tamura, H., *Introduction to Computer Image Processing*, (1985), Soken Publishing.

第6章 結論

本研究では、LSI 製造工程における電気めっきを対象に、めっきの質を決定するウェハ面上の電流密度をリアルタイムで監視するための手法の開発を目的として、LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法および磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法を開発した。さらに、本研究から得られた知見および成果を脳磁図による脳機能診断に応用し、従来法では成し得なかった経験に依存しない多段階逆解析手法を開発した。

本研究で開発した逆解析手法はいずれも第1次推定で概算の値を推定し、以降の段階では得られた概算値からモニタリングに際してより有益な情報を抽出する手法となっている。その点でこれらの手法は共通している。第1次推定ではTikhonovの適切化法と打ち切り特異値分解法のどちらを使っても差し支えないと考えられる。本研究では、それぞれの問題に対して有益な推定解（第2章および第4章ではめっき表面全体の電流密度分布、第5章では双極子モーメント分布の特徴）を得るため、それぞれに対して効果的な手法を選択した。第2次推定以降は、LSIめっきでは分極曲線が1つの曲線をなすこと、MEG逆解析では少数の代表双極子で表すという先験情報を使って、より有益な情報を抽出する。

本手法はLSI製造工程における電気めっきに限らず、一般的な電気めっきをはじめとして、腐食防食、電着塗装、燃料電池などの電気化学的物理現象、および脳磁図のように電磁場逆解析を用いた種々の無侵襲測定法など電磁気学的物理現象を伴う工学分野に対して、広く応用できると考えられる。また、本研究で開発した逆解析手法は逆解析に用いる数理モデルによらず適用できるため、一般的な逆問題に対しても有効な解析手法であると考えられる。

以下に、本研究で得られた結論を総括する。

第2章では、LSI製造工程における電気めっきを対象に、めっきの質を決定するウェハ面上の電流密度を監視する手法として、めっき槽内の電位を逆解析することによって、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した。本手法ではめっき槽内の電位がLaplace方程式を満たし、その境界条件がめっき表面上の電流密度によって決まることに注目した。これにより、複数の測定位置で測定した電解液の電位の情報を逆解析し、めっき表面上の電流密度を推定する。

めっき槽内の電位は細管を挿入して測定する。細管で拾い上げた電解液を参照電極に通し、参照電極とアノードあるいはカソードの電位差から細管先端位置の電位が得られる。さらに、電位測定用の細管を攪拌パドルに付けることで広範囲の電位を効率良く測定できる。

本章の結論を以下に示す。

- (1) LSI製造工程における電気銅めっきを対象として、測定しためっき槽内の電位を逆解析することで、めっき表面上の電流密度を推定する手法を開発した。本手法はめっきの条件に応じてリアルタイムで適用でき、得られた電流密度を用いて制御にフィードバックすることができる。
- (2) 電場解析に有限要素法および境界要素法を用いることでアノードおよびカソードに流入出する電流密度とめっき槽内で測定される電位の関係を直接表す観測方程式を導出した。

-
- (3) 本逆解析手法は Tikhonov の適切化法を用いた概値推定とそこから得られる分極曲線による推定電流密度の修正からなる。Tikhonov の適切化パラメータは Kullback-Leibler の情報量を最小にするものを用いた。また、分極曲線の推定には多項式近似による回帰分析を用いた。
- (4) 数値シミュレーションによる数値実験と電気銅めっき装置による検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。
- (i) 本手法を検証するための数値シミュレーションによる数値実験では、銅-硫酸銅の分極曲線をアノードおよびカソードの分極曲線の正解のデータとして用いた。また、本数値実験では数理モデルの計算によって得られる順解析結果にランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。本手法によって推定された電流密度分布を正解の電流密度分布と比較することで本手法の有効性を示した。
 - (ii) 電気銅めっき装置による検証実験では、カソード側をビニルテープでマスキングし、様々な電流密度分布を形成させた。また、攪拌パドルの攪拌速度を変え、それぞれの条件下でめっき槽内の電位を測定した。測定した電解液の電位分布のデータを用い、本手法を適用することでカソード表面上の電流密度分布を推定した。
 - (iii) 検証実験において、カソード表面上の電流密度分布の推定結果を従来の推定手法である標本の分極曲線を用いた数値解析結果と比較した。これにより、本手法による推定結果と従来の数値解析結果がよく合うことを確認し、本手法の有効性を示した。

以上の結果より、本手法は実際の LSI ウェハの電気めっきに対して十分に適用できると考えられる。

第 3 章では、工学をはじめとして非常に重要な静磁場解析を対象に、静電場が Laplace 方程式に支配される場合に対して、ソース電流の領域積分を必要としない高精度かつ効率的な静磁場の境界要素解析法を開発した。本手法では電場の領域積分を境界積分に解析的に変換するため、従来よりも高精度かつ高速に磁束密度を求められる。

本章の得られた結論を以下に示す。

- (1) ソース電流の領域積分を評価する境界積分である式 (6.1) を導出した。これにより、静磁場におけるベクトルポテンシャルの積分方程式および Biot-Savart の法則における領域積分をそれぞれ式 (6.4) および式 (6.5) のように境界積分項のみで構成することができた。これらの操作では領域内の電流密度を電位に関する境界積分で表現できることを利用し、静磁場の積分方程式の領域積分項を解析的に計算した。そのため、従来法におけるソース電流の領域積分に起因する数値計算による計算精度と計算量の問題を解決することができた。
- (2) 従来法と本手法の比較のため、Laplace 方程式に支配される立方体の電場領域周辺のベクトルポテンシャルと磁束密度を従来法と本手法を用いて計算した。従来法による計算結果と本手法による計算結果の比較により、計算精度と計算量の両面において、本手法が従来法よりも優れていることを示した。
- (3) 本研究で得られた静磁場の計算式は以下の通りである。

$$\mu \int_{\Omega_E} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mathbf{j}(\mathbf{q}) d\Omega(\mathbf{q}) = \kappa \mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} f^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \quad (6.1)$$

$$f^*(\mathbf{p}, s) = \frac{\mathbf{p} - s}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \quad (6.2)$$

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) = \frac{3(\mathbf{p} - s) \cdot \mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|^3} (\mathbf{p} - s) - \frac{\mathbf{n}_E(s)}{8\pi \|\mathbf{p} - s\|} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} A(\mathbf{p}) = & \int_{\Gamma_M} \left(\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial A(\mathbf{q})}{\partial n_M} - A(\mathbf{q}) \frac{\partial \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n_M} \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \\ & + \kappa\mu \int_{\Gamma_E} \left(\frac{\partial u(s)}{\partial n_E} f^*(\mathbf{p}, s) - u(s) \mathbf{g}^*(\mathbf{p}, s) \right) d\Gamma(s) \end{aligned} \quad (6.4)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{p}) = -\frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{\Gamma_E} \frac{\mathbf{n}_E(s) \times (\mathbf{p} - s)}{\|\mathbf{p} - s\|^3} u(s) d\Gamma(s) \quad (6.5)$$

ここで、それぞれの記号と物理量の対応は、 μ ：透磁率、 κ ：電気伝導度、 ϕ^* ：Laplace 方程式の基本解、 Ω_E ：電場領域、 Γ_E ：電場境界、 $\mathbf{n}_E$ ：電場境界の法線ベクトル、 $\mathbf{j}$ ：電流密度、 u ：電位、 Γ_M ：磁場境界、 $\mathbf{n}_M$ ：磁場境界の法線ベクトル、 $\mathbf{A}$ ：ベクトルポテンシャル、 $\mathbf{B}$ ：磁束密度である。

第 4 章では、めっき槽内の電流によって磁場が誘起することに注目し、この磁束密度を測定することで、逆解析的に磁束密度分布からめっき表面上の電流密度分布を推定する手法を開発した。「第 2 章 LSI 製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」で述べた参照電極を用いる電位測定と異なり、本手法で行う磁束密度の測定には長時間の運用が可能な磁気センサが利用できる利点がある。

また、磁束密度の測定をめっき槽外で行う場合、電位測定における細管などの測定機器を挿入する必要が無い。したがって、めっき槽の電場に全く影響を与えることなく、めっき槽内の電流密度分布を無侵襲で推定できる利点がある。本手法は燃料電池などの電解槽の空間が狭い電解セルに対しても適用でき、電位測定による電流密度推定法よりも応用範囲は広い。

本章の得られた結論を以下に示す。

- (1) LSI の生産ラインにおいてめっき表面上の電流密度を常時モニタリングするための手法として、磁気センサを利用し、得られた磁束密度のデータから逆解析的にめっき表面上の電流密度分布を推定する手法を開発した。
- (2) 電場解析に有限要素法および境界要素法を用い、磁場解析に静電場領域の領域積分を必要としない静磁場解析法を用いることでアノードおよびカソードに流入出する電流密度と磁気センサによって測定される磁束密度の関係を直接表す観測方程式を導出した。
- (3) 本逆解析手法は Tikhonov の適切化法を用いた概値推定とそこから得られる分極曲線による推定電流密度の修正からなる。本手法では測定データに含まれる定磁場成分の影響を除去した形で本逆解析手法を適用するため、数値モデルの差分を改めて逆解析に用いる観測方程式とする。
- (4) 本逆解析手法の第 1 次推定において、Tikhonov の適切化パラメータには基本的に Kullback-Leibler の情報量を最小にするものを用いるが、この方法には測定データに依存する適用範囲が存在する。そのため、適用範囲外では参照分散を利用する方法によって Tikhonov の適切化パラメータを決定する。

(5) 数値シミュレーションによる数値実験と電気銅めっき装置による検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。

- (i) 本数値実験では、数値モデルの計算によって得られる順解析結果に大きさの異なるランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。これにより、第1次推定におけるTikhonovの適切化パラメータ決定方法は測定誤差の大きさに依存することを確認した。参照分散を利用する方法では参照分散が正解値の分散に近いほど、良好な推定結果が得られる。
- (ii) 本検証実験では、アノードを銅棒、カソードを銅板とする検証用の電気銅めっき装置を製作した。アノード銅棒の位置を変えた種々のめっき条件に対して、めっき槽周辺の磁束密度を磁気センサを用いて測定した。測定した磁束密度のデータを用い、本手法を適用することでカソード銅板に流入する電流密度分布を推定した。
- (iii) 検証実験において、カソードに流入する電流密度分布の推定結果を従来の推定手法である標本の分極曲線を用いた数値解析結果に加え、めっき膜厚分布の実測値とも比較した。これにより、本手法による推定結果と従来の数値解析結果、およびめっき膜厚の測定結果がよく合うことを確認し、本手法の有効性を示した。

以上の結果より、「第2章 LSI製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」と同様に、本手法も実際のLSIウェハの電気めっきに対して十分に適用できると考えられる。

第5章では、電磁場逆解析による電気めっきモニタリングに関する研究（「第2章 LSI製造における槽内電位逆解析を用いためっき電流密度分布推定法」および「第4章 磁気センサを用いためっき電流密度分布の無侵襲測定法」）から得られた知見および成果を脳磁図による脳機能診断に応用し、従来法では成し得なかった経験に依存しない多段階逆解析手法を開発した。

本研究ではさらに、本逆解析手法の有効性の検証とMEGセンサの校正のため、磁気双極子モデルベースのMEG用ファントムを開発した。これはMEG用ファントムとしての基礎的な機能を持たせた第1世代ファントムであり、今後コイルの小型化およびその個数を増やすことで、再現できる磁場の自由度を上げることを検討している。

本章の結論を以下に示す。

- (1) 本研究ではMEGによる双極子の推定問題における逆解析手法に焦点を当て、打ち切り特異値分解法による双極子分布の概値推定と滑降シンプレックス法による推定解の修正からなる多段階逆解析手法を開発した。
- (2) 本手法では、まず第1段階として双極子の位置候補点を作成した後、候補点におけるMEGの測定データから打ち切り特異値分解法を用いて推定する。次に第2段階となるクラスタ分析を用い、打ち切り特異値分解法によって鈍って推定される電流双極子の分布を少数の双極子で代表させる。このクラスタ分析によって得られた代表電流双極子を初期値として用い、第3段階として滑降シンプレックス法を適用することで双極子の位置とモーメントの最終的な推定解を得る。以上の行程により、従来はMEGの利用者の経験に依存していた滑降シンプレックス法における初期値決定に関する問題を解決する。本手法は逆解析に用いる電流双極子モデルや磁気双極子モデルといった数値モデルによらず適用できる。

(3) 数値シミュレーションによる数値実験と MEG 用ファントムによる検証実験の両面から本手法の有効性を検討した。

- (i) 数値シミュレーションによる数値実験では、電流双極子モデルを用いて、MEG センサで測定される磁場を計算し、ランダムノイズを加えたものを擬似測定データとした。得られた擬似測定データに本手法を適用することで、磁場源となっている正解の電流双極子を推定することができた。
- (ii) 本手法の検証実験では、開発した MEG 用ファントムを用いて測定実験を行い、磁気双極子コイルによる脳磁図を得た。得られた脳磁図に本手法を適用することで、第1段階では正解の磁気双極子コイル位置を中心とした磁気双極子モーメントの分布が得られることを示した。さらに、クラスタ分析および滑降シンプレックス法を適用することで、特に磁気双極子数が多い場合でも、局所解を得ることなく実際の磁気双極子コイルを推定できることを確認した。

以上の結果より、本手法は実際の脳内の神経活動から得られる MEG データに対しても十分に適用できると考えられる。

なお、今後の研究課題としては以下のことが考えられる。

- (1) 第2章および第4章において、数値シミュレーションによる数値実験および電気銅めっき装置による検証実験では、電場の数値モデルの計算に2次元境界要素法あるいは2次元有限要素法を用いる簡略化を行った。この電場の数値モデルの計算を3次元に拡張した場合の電流密度の推定手法の取り扱いについて検討する。
- (2) (1)に関して、数値モデルの計算の3次元化により、観測量である電位および磁場の測定領域を大幅に拡大する必要がある。測定領域を拡大することは膨大な情報量をもたらすことから、その中で真に有益な情報を抽出するための方法について検討する。また、電位測定ならびに磁場測定の効率化のため、ハードウェアの観点からも検討する。
- (3) 本研究で開発した電気めっきのモニタリング技術を応用し、実時間のめっき状態の変化に即したフィードバック制御による電気めっきの最適化手法について検討する。
- (4) 本研究で開発した脳磁図逆解析手法は代表双極子の個数を入力として与える必要がある。したがって、代表双極子の個数を第1段階によって推定される双極子分布などから客観的な基準に則って判定する手法について検討する。
- (5) MEG 用ファントムの開発に関して、現在、コイルの小型化およびその個数を増やすことで、再現できる磁場の自由度を上げることを検討している。これに加えて、本 MEG 用ファントムは磁気双極子モデルベースであることから、より実際の脳内の電気現象に近い数値モデルである電流双極子モデルと等価となる磁気双極子コイルの配置について検討する。

謝辞

本研究は、著者が東京工業大学大学院情報理工学研究科に在学中に行ったものである。本研究を遂行するにあたり、終始貴重な御助言と御指導を賜りました、東京工業大学天谷賢治教授に深く感謝致します。また、多大な御助言と御指導、御援助を賜りました、東京工業大学木村康治教授、八木透准教授ならびに研究室の皆様にご心から感謝致します。

荏原総合研究所の早房敬祐氏にはLSI めっきの数値解析技術に関して大変貴重な御助言を頂きました。また、同研究所の下山正氏ならびに西條康彦氏には電気化学的計測技術について、多大な御助言と御援助、御協力を賜りました。ここに記して、深甚なる謝意を表します。

カナダ留学にあたり、多大な御指導と御支援を賜りました、Simon Fraser 大学 Ash M. Parameswaran 教授に深く感謝致します。また、脳磁図に関する研究を遂行するにあたり、多大な御助言と御援助、御協力を賜りました、Down Syndrome Research Foundation の Teresa Cheung 氏に深く感謝致します。共同研究として MEG 用ファントムの設計と製作に携わっていただいた修士の Jeff Liu 氏をはじめ、公私にわたり格別な御厚情を頂いた Ash 研究室の皆様にご心から感謝致します。

最後に、公私ともに御厚志を賜りました皆様に対し、改めて深く感謝の意を表します。

平成 22 年 2 月
岸本喜直