槽内電位の効率的逆解析による LSI めっき電流密度分布の推定*

岸本 喜直^{*1}, 安部 勇仁^{*2}, 小林 志好^{*1}, 大塚 年久^{*1}, 天谷 賢治^{*3}Estimation of Current Density Distribution in LSI Electroplating
by an Efficient Inverse Analysis of Electric PotentialYoshinao KISHIMOTO^{*1}, Yuji ABE, Yuki Yoshi KOBAYASHI,
Toshihisa OHTSUKA and Kenji AMAYA^{*1} Department of Mechanical Engineering, Tokyo City University
1-28-1, Tamazutsumi, Setagaya-ku, Tokyo, 158-8557, Japan

Our research focuses on the techniques for monitoring the current density distribution of the real-time electroplating and a novel technique to estimate electroplating current densities on plated surfaces from the data of the electric potentials in the plating cells has been developed for LSI fabrication technology. However we have applied with only two dimensional analysis in our previous researches and it limits the application range of the proposed technique. In this research, we applied the monitoring technique with three dimensional analysis. Although the inverse analysis using the three dimensional analysis tends to be large scale, it is important for the practical usage to monitor current density on target region accurately and efficiently. Therefore we have developed an efficient inverse analysis technique for monitoring of the electroplating current density on the target region. For the selection of the measurement data and the reduction of the calculation amount for the inverse analysis, the proposed technique discards low sensitive components in the observation equation. The criteria of the discarding process are based on error ratios derived by singular values of the observation equation. In order to demonstrate the effectivity of the proposed technique, numerical simulations are performed for a sample polarization curve of copper in copper sulfate. The results show that this technique estimates the current density on target region accurately and its estimation is more efficient than that by the previous technique.

Key Words : Inverse Problem, Large-Scale Problem, Diagnostic Technique, Large-Scale Integration, Electroplating, Electrochemistry, Analytical Model, Boundary Element Method, Model Selection, Tikhonov Regularization, Information Criterion

1. 緒 言

LSI ウェハの微細配線を形成するため、電気銅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盤などの複雑かつ微細な配線から基盤間をつなぐバンブ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)~(6)}。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が不可欠である。従来は電流密度の制御に重点が置かれ、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^{(7)~(10)}。

* 原稿受付 2011 年 3 月 4 日

^{*1} 正員, 東京都市大学工学部機械工学科 (〒158-8557 東京都世田谷区玉堤 1-28-1)^{*2} 学生員, 東京都市大学大学院工学研究科機械工学専攻 (〒158-8557 東京都世田谷区玉堤 1-28-1)^{*3} 正員, 東京工業大学大学院情報理工学研究科情報環境学専攻
(〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

E-mail: ykishimo@tcu.ac.jp

これに対し、著者らのこれまでの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^{(11)~(15)}。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。一方で、測定した電位からめっき表面の電流密度を推定する問題は領域内の物理量から境界上の物理量を推定する逆問題となる。本手法では境界要素法によって得られた電場の数値モデルに Tikhonov の適切化法を適用することでこの逆問題における不適切性を解消した^{(16)~(18)}。ここで、Tikhonov の適切化パラメータには測定誤差の分散に対するモデル誤差の分散のずれを表す量である Kullback-Leiler の情報量^{(19) (20)}を最小化する値を選択した。さらに、本手法の有効性を検討するため、電気銅めっき装置による検証実験を行った。検証実験では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した^{(12) (14)}。

しかしながら、これまでの研究では三次元境界要素法よりも高精度かつ短時間で計算できることから、二次元境界要素法による解析のみを行った^{(11)~(15)}。二次元境界要素法は軸対称な領域あるいは軸方向に一樣な領域に対してのみ適用できる。そのため、本手法の適用範囲は限定されている。

そこで、本研究では三次元境界要素法を用い、槽内電位逆解析による電流密度の推定手法を任意の三次元領域に対しても適用できるように拡張を試みた。三次元境界要素法を用いた逆解析はその計算量と必要な測定データ数の両面において大規模になる傾向がある⁽²¹⁾。一方で、実用においては推定対象とするめっき表面の一部領域の電流密度を精度良く高速で推定できることが重要である。そのため、本研究では推定対象とする一部領域の電流密度のみを推定する効率的な逆解析手法を提案、導入した。本逆解析手法は逆解析に用いる観測方程式における低感度成分を除去することで、逆解析に必要な測定データ数と計算量を大幅に減少させる。除去する成分の個数を決定するための基準には観測方程式の特異値から得られる測定量と未知量の誤差率の比を用いた。

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、逆解析に用いる電場の数値モデルと観測方程式の導出手順について述べる。その後、本研究で提案する効率的な逆解析手法について詳述する。本研究ではさらに、本提案手法の有効性を検証するため、数値シミュレーションを用いた数値実験を行った。本数値実験では従来の逆解析手法^{(11)~(15)}による全電流密度の同時推定とも比較し、得られためっき表面上の電流密度の推定結果を示す。

2. LSI 電気銅めっきの概要

図 1 および図 2 に一般的な LSI 用の電気銅めっき装置のモデルおよびその断面図を示す。図 1 および図 2 中の Ω , Γ_a , Γ_c , Γ_n は次々章にて用いる記号である。アノードは厚い銅板であり、めっき槽内は硫酸銅を主成分とするめっき電解液で満たされている。これに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ことでカソードに銅めっきが施される。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)。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^{(7)~(10)}。

Fig. 1 The model of the LSI electroplating device

Fig. 2 The cross-sectional view of the device

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⁽²²⁾．図 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撹拌パドルに付けることで効率良く測定ができる．

Fig. 3 The measurement method of electric potentials in a plating cell

4. 逆解析に用いる電場の数値モデルと観測方程式

4.1 電場の数値モデル

本節では逆解析に用いる電場の数値モデルについて述べる．図 1 および図 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 は境界 $\Gamma (\equiv \Gamma_a + \Gamma_c + \Gamma_n)$ で囲まれているとする．ここで， Γ_n はめっき槽の側壁を， Γ_a および Γ_c はそれぞれアノードおよびカソードの表面境界を表す．領域 Ω における電位分布を u とし，境界 Γ_a ， Γ_c ， Γ_n 上の u の値をそれぞれ 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， Γ_a ， Γ_c および Γ_n における法線方向の電流密度をそれぞれ j_a ， j_c および $j_n (= 0)$ とする．このとき， j_a および j_c については境界 Γ を通して領域 Ω に流れ込む電流値を正とすると， 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．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．

$$\nabla^2 u = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

式 (1) の境界条件は次式で与えられる．

$$\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \begin{cases} j_a & \text{on } \Gamma_a \\ j_c & \text{on } \Gamma_c \\ j_n = 0 & \text{on } \Gamma_n \end{cases} \quad (2)$$

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 (1) の両辺に Laplace 方程式の基本解

$$v(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi |\mathbf{p} - \mathbf{q}|} \quad (3)$$

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

$$u_i(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma} \left(v(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial u(\mathbf{q})}{\partial n} - \frac{\partial v(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n} u(\mathbf{q}) \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (4)$$

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．

$$c(\mathbf{p})u(\mathbf{p}) = \int_{\Gamma} \left(v(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \frac{\partial u(\mathbf{q})}{\partial n} - \frac{\partial v(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial n} u(\mathbf{q}) \right) d\Gamma(\mathbf{q}) \quad (5)$$

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 (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．

4.2 観測方程式

設定した数理モデルを既知量 u_i と未知量 j_a, j_c を関係づける観測方程式としてまとめる．式 (5) を離散化すると次の代数方程式が得られる．

$$H_a u_a + H_c u_c + H_n u_n = G_a j_a + G_c j_c + G_n j_n \quad (6)$$

また，同様に式 (4) を離散化すると次式が得られる．

$$u_i = G_{ia} j_a + G_{ic} j_c + G_{in} j_n - H_{ia} u_a - H_{ic} u_c - H_{in} u_n \quad (7)$$

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． $u_a, u_c, u_n, j_a, j_c, j_n$ 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， u_i は電位の測定値を成分とするベクトルである．

式 (6) は u_a, u_c および u_n に関して不定であるから，この式を解くために境界 Γ_n 上の任意の位置に仮の電位基準点を定義する．この仮の電位基準点の電位を $u_d (= 0)$ とし，代わりに電位基準点の電流密度 j_d の値を変数として与える．このとき，式 (6) および式 (7) 中の一部の項は以下のように分解できる．

$$H_n u_n = H'_n u'_n + u_d h_d \quad (8)$$

$$G_n j_n = G'_n j'_n + j_d g_d \quad (9)$$

$$H_{in} u_n = H'_{in} u'_n + u_d h_{id} \quad (10)$$

$$G_{in} j_n = G'_{in} j'_n + j_d g_{id} \quad (11)$$

したがって，式 (6) は u_a, u_c, u'_n および j_d に関して次のように解くことができる．

$$\begin{Bmatrix} u_a \\ u_c \\ u'_n \\ j_d \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{ia} & H_{ic} & H'_{ic} & -g_{id} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} G_a & G_c \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} j_a \\ j_c \end{Bmatrix} \quad (12)$$

ここで，計算の過程において $j_n = 0$ および $u_d = 0$ であることを考慮した．

以上より，式 (7) および式 (12) をまとめると既知量と未知量とを関係づける観測方程式として

$$b = A x \quad (13)$$

が得られる．ここで

$$b = u_i \quad (14)$$

$$A = \begin{bmatrix} G_{ia} & G_{ic} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} H_{ia} & H_{ic} & H'_{ic} & -g_{id} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_a & H_c & H'_n & -g_d \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} G_a & G_c \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$x = \begin{Bmatrix} j_a \\ j_c \end{Bmatrix} \quad (16)$$

と置いた．

実際の測定では，式 (13) を導く際に設定した境界 Γ_n 上の仮の電位基準点を用いるよりも槽内電位の測定点の一つを電位基準点とするほうが便利である．電位基準点を境界 Γ_n 上の仮の電位基準点から槽内電位の測定点の一つに移すにはベクトル b および行列 A について，各行の成分から電位基準点とする測定点に対応する行の成分を引けばよい．このとき，電位基準点とする測定点に対応する行の成分は自らの成分を引くことになり，その値は 0 となるから，この行を除去する．このようにして電位基準点を槽内電位の測定点の一つに移動した場合，観測方程式は式 (13) とまったく同じ形式で書ける．そのため，以下では電位基準点の位置に関係なく，式 (13) を本手法で用いる観測方程式とする．

5. 逆 解 析 手 法

5.1 Tikhonov の適切化法

観測方程式である式 (13) を用いて、実際に測定される槽内電位 u_i から未知量 j_a, j_c を推定する。測定誤差の感度を低減するため、式 (13) に以下の評価関数 $\Pi(x)$ で表される Tikhonov の適切化法を適用することで観測方程式を解く。

$$\Pi(x) = \|b - Ax\|^2 + \alpha \|x - x_o\|^2 \quad (17)$$

ここで、 α は Tikhonov の適切化パラメータ、 x_o は x の参照値を成分とするベクトルである。本研究では、 x_o の値に総電流をアノードあるいはカソードの表面積で除した値である電流密度の平均値を用いた。

評価関数 $\Pi(x)$ を最小にする $x = \hat{x}$ が Tikhonov の適切化法による x の推定解である。推定解 $\hat{x}$ は行列 A を

$$A = USV^T \quad (U^{-1} = U^T, V^{-1} = V^T) \quad (18)$$

のように特異値分解することで以下のように求められる。

$$\hat{x} = Lb + Kx_o \quad (19)$$

ここで

$$L = V(S^T S + \alpha E)^{-1} S^T U^T \quad (20)$$

$$K = \alpha V(S^T S + \alpha E)^{-1} V^T \quad (21)$$

であり、 E は単位行列である。また、以上において上添字 T は行列の転置を表す。

Tikhonov の適切化パラメータ α の値を定めるには種々の基準がある^{(16)~(18)}。本研究では α の値を次のようにして決める。式 (19) より、 α にある値を代入するとそれに対応する $\hat{x}(\alpha)$ の値が求まる。さらに式 (13) より、推定解 $\hat{x}(\alpha)$ からモデル誤差の分散 $\hat{\sigma}^2(\alpha)$ が以下のように得られる。

$$\hat{\sigma}^2(\alpha) = \frac{\|b - A\hat{x}(\alpha)\|^2}{\dim(b)} \quad (22)$$

これを用い、次式で表される Kullback-Leiblar の情報量 $KLD(\alpha)$ を最小にする α の値を採用する。

$$KLD(\alpha) = \log \hat{\sigma}^2(\alpha) + \frac{2\sigma^2}{\dim(b)\hat{\sigma}^2(\alpha)} \sum_{i=1}^s \frac{\lambda_i^2}{\lambda_i^2 + \alpha} \quad (23)$$

ここで、 σ^2 、 λ_i および s はそれぞれ測定誤差の分散、行列 A の i 番目の特異値およびその特異値の個数である。Kullback-Leiblar の情報量 $KLD(\alpha)$ は測定誤差の分散 σ^2 に対するモデル誤差の分散 $\hat{\sigma}^2$ のずれを表す量であり⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾、式 (23) を最小にする α の値は黄金分割法によって求めることができる。

5.2 本研究で提案する効率的な逆解析手法

三次元領域での解析を行う場合など、推定する領域あるいはその解像度が大きくなると式 (13) における未知量ベクトル x の次元は大きくなる。未知量ベクトル x の次元が大きくなるとその問題は大規模逆問題となり、その逆問題を解くために膨大な計算量が必要となる。さらに、より精度の良い推定解を得るためには式 (13) より、未知量ベクトル x の次元以上の数の測定データ b もまた必要となる。これは実際の測定において時間と労力を要することを意味する。

本研究では逆解析の計算量と必要な測定データ数を減少させるため、大規模逆問題となる LSI めっきにおける電流密度分布の三次元推定に対して効率的な逆解析手法を提案する。実際の電流密度のモニタリングではめっき表面の全電流密度を同時に推定する必要は無く、大きな電流密度が集中するカソードの端など、推定対象とする一部領域の電流密度のみを推定するだけで十分な場合が多い。そのため、本手法では推定対象とする領域の電流密度を効率的に推定するため、未知量ベクトル x における任意の成分 x_l のみを推定する。推定対象とする領域に対応する未知量ベクトル x の成分が複数になる場合には、領域内の各成分に対して本手法を順次適用する。本手法では以下に述べる手順に従い、推定対象とする成分 x_l の値を推定するにあたって感度が低い未知量ベクトル x と測定量ベクトル b を除去する。

5.2.1 観測方程式における低感度成分の除去

低感度成分を除去する前の行列 A のサイズを $M \times N$ 、行列 A の i 行 j 列の成分を a_{ij} とする． a_{ij} の大きさは測定量ベクトル b の各成分のオーダーおよび b_i と x_j の間の感度によって決まる．そこで、まず測定量のオーダーの影響を除外するため、以下のように式 (13) の各行を正規化する．

$$\begin{Bmatrix} \tilde{b}_1 \\ \vdots \\ \tilde{b}_k \\ \vdots \\ \tilde{b}_M \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{11} & \cdots & \tilde{a}_{1l} & \cdots & \tilde{a}_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{a}_{k1} & \cdots & \tilde{a}_{kl} & \cdots & \tilde{a}_{kN} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{a}_{M1} & \cdots & \tilde{a}_{Ml} & \cdots & \tilde{a}_{MN} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_l \\ \vdots \\ x_N \end{Bmatrix} \quad (24)$$

ここで、

$$\tilde{b}_i = b_i \left(\sqrt{\sum_{j=1}^N a_{ij}^2} \right)^{-1}, \quad \tilde{a}_{ij} = a_{ij} \left(\sqrt{\sum_{j=1}^N a_{ij}^2} \right)^{-1} \quad (25)$$

であり、 k 行 l 列の成分 $\tilde{a}_{kl}$ を正規化された行列 $\tilde{A}$ の l 列目の中で絶対値が最大の成分とする．このとき、ベクトル b の k 番目の成分 b_k が推定対象とする成分 x_l に対して最大の感度を持つ．一方で、行列 $\tilde{A}$ の中で絶対値が小さい成分はベクトル x に対して感度が低いため、これらの低感度成分の除去をそれぞれ以下のように列方向と行方向に分けて行う．

a. 列方向の除去（未知量の個数の削減）

まず、低感度成分を除去する際に目標とする未知量の個数 n を定め、式 (24) 中の $|\tilde{a}_{kl}|$ が含まれている k 行目において $|\tilde{a}_{kj}|$ ($j = 1 \cdots N$) を降順に並び替えた後、 $n-1$ 番目以降の列を除去する列とする．ここで、除去する列を $n-1$ 番目以降とするのは以下の手順によって列が 2 個増加するためである．この手順によって除去されなかった列の集合を D 、除去された列の集合を $\bar{D}$ とする．

次に、除去された列における行列 A の成分 a_{ij} ($i \in \bar{D}$) を以下のようにまとめる．

$$\begin{Bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_k \\ \vdots \\ b_M \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1n'} & \cdots & a_{1l} & \cdots & a_{1n''} & \sum_{j \in \bar{D}_a} a_{1j} & \sum_{j \in \bar{D}_c} a_{1j} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{kn'} & \cdots & a_{kl} & \cdots & a_{kn''} & \sum_{j \in \bar{D}_a} a_{kj} & \sum_{j \in \bar{D}_c} a_{kj} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{Mn'} & \cdots & a_{Ml} & \cdots & a_{Mn''} & \sum_{j \in \bar{D}_a} a_{Mj} & \sum_{j \in \bar{D}_c} a_{Mj} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_{n'} \\ \vdots \\ x_l \\ \vdots \\ x_{n''} \\ x_a \\ x_c \end{Bmatrix} \quad (26)$$

ここで、 $n', \dots, l, \dots, n''$ は上記の除去過程によって除去されなかった列である． $\bar{D}_a$ および $\bar{D}_c$ は除去された成分の中でアノード要素およびカソード要素に対応する行列 A の列の集合である． x_a および x_c は除去された列に対応する境界要素における未知の電流密度であり、これらの値は未知量として逆解析によって推定する．なお、正規化された行列 $\tilde{A}$ は低感度成分を有する行あるいは列を抽出するときのみ用い、成分の除去などは正規化する前の行列 A に対して行うことに注意されたい．式 (26) を用いて逆解析を行うことは、推定対象とする電流密度 x_l の推定に対して感度が小さい電流密度は一様分布をなすと近似することと同義である．

b. 行方向の除去（測定量の個数の削減）

行方向についても同様に、低感度成分を除去する際に目標とする測定量の個数 m を定め、式 (24) 中の $|\tilde{a}_{kl}|$ が含まれている l 列目において $|\tilde{a}_{il}|$ ($i = 1 \cdots M$) を降順に並び替えた後、 $m+1$ 番目以降の行を除去する行とする．以上の手順によって得られた観測方程式を成分ごとに表すと以下ようになる．

$$\begin{Bmatrix} b_{m'} \\ \vdots \\ b_k \\ \vdots \\ b_{m''} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{m'n'} \cdots a_{m'l} \cdots a_{m'n''} & \sum_{j \in D_a} a_{m'j} & \sum_{j \in D_c} a_{m'j} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{kn'} \cdots a_{kl} \cdots a_{kn''} & \sum_{j \in D_a} a_{kj} & \sum_{j \in D_c} a_{kj} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m''n'} \cdots a_{m''l} \cdots a_{m''n''} & \sum_{j \in D_a} a_{m''j} & \sum_{j \in D_c} a_{m''j} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_{n'} \\ \vdots \\ x_l \\ \vdots \\ x_{n''} \\ x_a \\ x_c \end{Bmatrix} \quad (27)$$

ここで、 $m', \dots, k, \dots, m''$ は上記の除去過程によって除去されなかった行である。なお、列方向の除去と行方向の除去ともに未知量の個数 n が測定量の個数 m を超えないように $m \geq n$ の範囲内で行うものとする。

以降では、式 (27) 中の低感度成分を除去し、サイズが $m \times n$ となった行列 A を $A(m, n)$ とおく。また、このときの測定量ベクトル b および未知量ベクトル x をそれぞれ $b(m)$ および $x(n)$ とおく。

5.2.2 測定量の個数 m および未知量の個数 n の決定方法

除去する成分の個数を決定するための基準すなわち低感度成分を除去する際に目標とする測定量の個数 m および未知量の個数 n を決定するための基準について、本研究では以下のように行列 $A(m, n)$ の特異値 $\lambda_i(m, n)$ ($i = 1, 2, \dots, s(m, n)$) から得られる測定量ベクトル $b(m)$ と未知量ベクトル $x(n)$ の誤差率の比を用いた。

a. 測定量ベクトル $b(m)$ と未知量ベクトル $x(n)$ の誤差率の比 η

測定量ベクトル $b(m)$ が測定誤差 $\Delta b(m)$ だけ変化したとき、未知量ベクトル $x(n)$ が推定誤差 $\Delta x(n)$ だけ変化したとするとこれらの誤差率の比 $\eta(m, n)$ は

$$\eta(m, n) = \left(\frac{\|\Delta x(n)\| / \|x(n)\|}{\|\Delta b(m)\| / \|b(m)\|} \right)^2 = \frac{\|\Delta x(n)\|^2}{\|\Delta b(m)\|^2} \cdot \frac{\|b(m)\|^2}{\|x(n)\|^2} \quad (28)$$

となる。ここで、 $\Delta b(m)$ の分散共分散行列が

$$\Delta b(m) \Delta b(m)^T = \tau^2 E \quad (29)$$

で与えられるとすると、式 (13) および式 (18) から得られる $\Delta b(m)$ と $\Delta x(n)$ との関係式

$$\Delta b(m) = A(m, n) \Delta x(n) = U(m, n) S(m, n) V^T(m, n) \Delta x(n) \quad (30)$$

を用いて、次式が得られる。

$$\tau^2 (S^T(m, n) S(m, n))^{-1} = (V^T(m, n) \Delta x(n)) (V^T(m, n) \Delta x(n))^T \quad (31)$$

したがって

$$\begin{aligned} \frac{\|\Delta x(n)\|^2}{\|\Delta b(m)\|^2} &= \frac{\Delta x(n)^T \Delta x(n)}{\Delta b(m)^T \Delta b(m)} = \frac{(V^T \Delta x(n))^T (V^T \Delta x(n))}{\Delta b(m)^T \Delta b(m)} = \frac{\text{tr}[(V^T(m, n) \Delta x(n)) (V^T(m, n) \Delta x(n))^T]}{\text{tr}[\Delta b(m) \Delta b(m)^T]} \\ &= \frac{\text{tr}[\tau^2 (S^T(m, n) S(m, n))^{-1}]}{\text{tr}[\tau^2 E]} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^s \frac{1}{\lambda_i^2(m, n)} \end{aligned} \quad (32)$$

となる。一方、

$$\frac{\min_i(\lambda_i^2(m, n))}{\max_i(\lambda_i^2(m, n))} \leq \frac{\|b(m)\|^2}{\|x(n)\|^2} = \frac{\|A(m, n) x(n)\|^2}{\|x(n)\|^2} \leq \frac{\max_i(\lambda_i^2(m, n))}{\min_i(\lambda_i^2(m, n))} \quad (33)$$

であるから、式 (28)、式 (32) および式 (33) より次式が得られる。

$$\eta_{\min}(m, n) \leq \eta(m, n) \leq \eta_{\max}(m, n), \quad \begin{cases} \eta_{\min}(m, n) = \frac{1}{m} \cdot \frac{\min_i(\lambda_i^2(m, n))}{\max_i(\lambda_i^2(m, n))} \sum_{i=1}^s \frac{1}{\lambda_i^2(m, n)} \\ \eta_{\max}(m, n) = \frac{1}{m} \cdot \frac{\max_i(\lambda_i^2(m, n))}{\min_i(\lambda_i^2(m, n))} \sum_{i=1}^s \frac{1}{\lambda_i^2(m, n)} \end{cases} \quad (34)$$

b. 誤差率の比 η を用いた測定量の個数 m および未知量の個数 n の決定方法

誤差率の比 $\eta(m, n)$ は $b(m)$ の変動に対し, 行列 $A(m, n)$ を介して $x(n)$ に与える変動量を表す指標となっている. このことから, $\eta(m, n)$ の下限値 $\eta_{\min}(m, n)$ と上限値 $\eta_{\max}(m, n)$ の差が小さいほど, $x(n)$ すなわち行列 $A(m, n)$ は $b(m)$ の変動に対して感度が低くなるといえる. 後述の「6.2.2 (数値シミュレーション実験による検証) 本提案手法による電流密度の効率的推定」において得られた $m \geq n$ の範囲内での $\eta_{\min}(m, n)$ および $\eta_{\max}(m, n)$ の値の一例を図 4 および図 5 に示す.

Fig. 4 The minimum error ratio $\eta_{\min}(m, n)$ in 6.2.2—The target element: (73, 0, 0) mm

Fig. 5 The maximum error ratio $\eta_{\max}(m, n)$ in 6.2.2—The target element: (73, 0, 0) mm

図 4 より, $\eta_{\min}(m, n)$ は n には大きく依存せず, m の減少に伴って指数関数的に増加することが分かる. 同様に, 図 5 より $\eta_{\max}(m, n)$ は m には大きく依存せず, n の減少に伴って指数関数的に減少することが分かる. したがって, m あるいは n の減少に伴い, $b(m)$ の変動に対する行列 $A(m, n)$ の感度は低くなる. そこで, 本研究では行列 $A(m, n)$ が $b(m)$ の変動に対して十分な感度を有するように, これら $\eta_{\min}(m, n)$ および $\eta_{\max}(m, n)$ の曲率半径を最小にする組合せ $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ を採用した.

(m, n) は離散値であるため, 曲率半径を差分で求める必要があることから, 数値誤差の影響によって曲率半径を最小にする組合せ $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ が正しく求まらない場合がある. そのため, 本研究では $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ を以下の手順によって求めた.

- (1) まず, 行列 $A(m, n)$ のサイズを最小にする組合せが $(3, 3)$, 最大にする組合せが $(\min(M, N), \min(M, N))$ であることに注意し, 以下のように $m, n, \eta_{\min}(m, n)$ および $\eta_{\max}(m, n)$ を正規化する.

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{m} = \frac{m-3}{\min(M, N)-3}, \quad \tilde{n} = \frac{n-3}{\min(M, N)-3} \\ \tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}, \tilde{n}) = \frac{\eta_{\min}(m, n) - \eta_{\min}(3, 3)}{\eta_{\min}(\min(M, N), \min(M, N)) - \eta_{\min}(3, 3)} \\ \tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}, \tilde{n}) = \frac{\eta_{\max}(m, n) - \eta_{\max}(3, 3)}{\eta_{\max}(\min(M, N), \min(M, N)) - \eta_{\max}(3, 3)} \end{array} \right. \quad (35)$$

- (2) 次に, 行列 $A(m, n)$ が正方行列となる $m = n$ 上すなわち $\tilde{m} = \tilde{n}$ 上において, $\tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}, \tilde{m})$ の曲率半径が最小となる組合せ $(\tilde{m}_{\min}, \tilde{m}_{\min})$ および $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}, \tilde{m})$ の曲率半径が最小となる組合せ $(\tilde{m}_{\max}, \tilde{m}_{\max})$ を求める. $\tilde{m}_{\min}$ および $\tilde{m}_{\max}$ を求めるにはまず, $\tilde{m}$ を横軸に, $\tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}, \tilde{m})$ および $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}, \tilde{m})$ を縦軸にとり, それぞれ以下の式で表される累乗近似式の係数 $\theta_{\min}$ および $\theta_{\max}$ の値を最小二乗法によって求める.

$$\tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}, \tilde{m}) = 1 - \tilde{m}^{\theta_{\min}}, \quad \tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}, \tilde{m}) = \tilde{m}^{\theta_{\max}} \quad (36)$$

式 (36) の曲率半径を最小にする $\tilde{m}_{\min}$ および $\tilde{m}_{\max}$ はそれぞれ

$$\tilde{m}_{\min} = \left\{ \frac{\theta_{\min} - 2}{\theta_{\min}^2 (\theta_{\min} - 1)} \right\}^{\frac{1}{2(\theta_{\min} - 1)}}, \quad \tilde{m}_{\max} = \left\{ \frac{\theta_{\max} - 2}{\theta_{\max}^2 (\theta_{\max} - 1)} \right\}^{\frac{1}{2(\theta_{\max} - 1)}} \quad (37)$$

で与えられる．ここで， $\tilde{m}_{\min} \leq \tilde{m}_{\max}$ であれば

$$\tilde{m}_{\text{eff}} = \tilde{n}_{\text{eff}} = \tilde{m}_{\max} \quad (38)$$

とし，計算を終了する． $\tilde{m}_{\min} > \tilde{m}_{\max}$ であれば

$$\tilde{m}_{\text{eff}} = \tilde{m}_{\min} \quad (39)$$

とし， $\tilde{n}_{\text{eff}}$ を次の手順によって求める．

- (3) $\tilde{n}$ を横軸に， $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n})$ を縦軸にとり，以下の式で表される累乗近似式の係数 ψ の値を最小二乗法によって求める．

$$\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n}) = \tilde{n}^{\psi} \quad (40)$$

式 (40) の曲率半径を最小にする $\tilde{n}$ を $\tilde{n}_{\text{eff}}$ とする．すなわち

$$\tilde{n}_{\text{eff}} = \left\{ \frac{\psi - 2}{\psi^2 (\psi - 1)} \right\}^{\frac{1}{2(\psi - 1)}} \quad (41)$$

とする．

- (4) 以上の手順によって得られた $(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n}_{\text{eff}})$ を式 (35) によって正規化前の値に戻した後，四捨五入して整数にした値を $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ とする．

以上，5.2.1 および 5.2.2 によって得られた観測方程式

$$\mathbf{b}(m_{\text{eff}}) = \mathbf{A}(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}}) \mathbf{x}(n_{\text{eff}}) \quad (42)$$

を式 (13) の代わりに用い，5.1 を適用することで効率的に $\hat{\mathbf{x}}(n_{\text{eff}})$ が得られる．

6. 数値シミュレーション実験による検証

6.1 数値実験条件

本手法の有効性を検証するため，数値シミュレーションを用いた数値実験を行った．本実験では図 6 に示す三次元境界要素法モデルを用いた．めっき槽を直径 300 mm，高さ 10 mm の円筒型とし，図 6 に示すモデルの上面をアノード表面との境界，下面をカソード表面との境界とする．このモデルでは攪拌パドルと細管の存在は無視する．図 6 において，文献 (7), (9) を参考にして境界要素には三角形一定要素を用い，その総数を 6300 とした．要素数の内訳はアノード表面およびカソード表面の要素数がそれぞれ 1350，めっき槽の側壁の要素数が 3600 である．よって，本モデルを用いた逆解析では未知量の個数は 2700 となり，この逆問題の規模は大きい．

Fig. 6 The BEM model for 3D domain analysis

Fig. 7 The polarization curve of copper in copper sulfate

電流密度の平均値を 100 A/m^2 、めっき電解液の電気伝導度を $25.3 / \Omega\text{m}$ とし、アノード表面およびカソード表面の電流密度の正解値を従来の数値シミュレーション解析によって計算する^{(7)~(10)}。本数値解析に用いた銅 硫酸銅の分極曲線の標本を図 7 に示す。式 (6) を解く上で設定した仮の電位基準点の位置はめっき槽の側壁に対応する一要素の中心座標 $(X, Y, Z) = (-3.5, 149.9, 5.2) \text{ mm}$ とした。

図 8 に、本数値実験において設定した槽内電位の測定点の配置を示す。測定点は高さ $Z = 1 \text{ mm}$ および $Z = 9 \text{ mm}$ の位置に配置した。本数値実験で模擬測定データとするめっき槽内の各測定点における電位は式 (13) に電流密度の正解値を代入することで得られる。

Fig. 8 The locations of the measurement points

Fig. 9 The calculated electric potentials at the measurement points for the entire estimation

Fig. 10 Comparison of the calculation accuracy by the axially symmetric BEM

6.2 数値実験結果

6.2.1 従来の逆解析手法による全電流密度の同時推定

従来の逆解析手法^{(11)~(15)}による全電流密度の同時推定では、槽内電位の測定点を図 8 に示したように X 軸および Y 軸などの径方向の直線に沿って 2.5 mm ごとに配置し、その総数を 2834 個（高さ $Z = 1$ mm および $Z = 9$ mm の位置にそれぞれ 1917 個ずつ）とした。設定した測定点のうち、電位基準点とする測定点の座標は $(X, Y, Z) = (0, 0, 1)$ mm とした。したがって、行列 A のサイズは 2833×2700 となった。

式 (13) に正解の電流密度を代入して得られた X 軸に沿った測定点における槽内電位の計算値を図 9 に示す。他の径方向の直線に沿った測定点における槽内電位の値は図 9 と同様の傾向を示した。図 9 より、槽内電位の計算精度が低いことが分かるが、逆解析では式 (23) により、モデルの計算精度はモデル誤差として扱われる。

なお、槽内電位の計算精度については軸対称境界要素法⁽¹¹⁾⁽¹⁵⁾を用いて検討した。図 7 に示した分極曲線を用いて、軸対称境界要素法によって得られた、要素分割幅を変えたときのカソード表面の電位と高さ $Z = 1$ mm における槽内電位を図 10 に示す。図 10 より、カソード表面の電位は図 6 のモデルと同じ X 軸方向の分割幅 $\Delta X = 10$ mm のときであっても、精度良く計算できていることが分かる。一方、槽内電位については、分割幅 $\Delta X = 10$ mm のときの計算精度が低く、分割幅 ΔX を 3 mm 以下にすることで高周波成分を取り除けることが分かる。しかしながら、この結果を図 6 のモデルにあてはめ、 XY 平面の分割幅を 3 mm とすると総要素数は 42000 となり、一般的なコンピュータで処理できる要素数（2 GB のメモリで扱える最大要素数は約 11000）を超える。したがって、実用上の観点から、本論文では図 6 のモデルをさらに細かく要素分割したモデルは扱わないこととした。

疑似測定データには図 9 に示した槽内電位の計算値に加え、実際の電位測定⁽¹²⁾⁽¹⁴⁾を想定して、元の槽内電位の計算値から FFT によって高周波成分を取り除いたものの二種類を用いた。高周波成分を取り除いた槽内電位を図 9 に元の槽内電位の計算値と合わせて示す。また、図 9 に示す槽内電位の疑似測定データから従来の逆解析手法によって推定したカソード表面上の電流密度とその正解値を図 11 および図 12 に示す。ここで、図 11 および図 12 はそれぞれ図 8 中の破線 A 上および点線 B 上の電流密度である。逆解析を行うにあたって、式 (23) 中の測定誤差の分散を $\sigma^2 = 25 \text{ mV}^2$ （すなわち $\sigma = 5 \text{ mV}$ ）に設定した。

図 11 より、破線 A 上において、槽内電位の計算値をそのまま用いた場合の推定値 $\times$ は正解値 とよく合うことが分かる。また、高周波成分を取り除いた槽内電位を用いても、その推定値 は正解値 の分布の特徴をよく捉えていることが分かる。一方で、図 12 より、点線 B 上では $X = \pm 150$ mm 近傍で精度良く推定がなされていない。これは図 8 より点線 B 上では $X = \pm 150$ mm 近傍に測定点が少ないことが原因である。すべての電流密度を精度良く推定するためには疎密なく測定点を用意する必要があり、槽内電位の二次元分布測定が要求される。

Fig. 11 The current densities on the cathode surface by the entire estimation (on the dash line A)

Fig. 12 The current densities on the cathode surface by the entire estimation (on the dot line B)

6.2.2 本提案手法による電流密度の効率的推定

本提案手法による電流密度の推定を行うにあたって、実際の測定効率を考慮し、取得する槽内電位は一次元分布とした。そのため、測定点は図 8 に示したように X 軸に沿って 0.5 mm ごとに配置し、その総数を 1198 個（高さ $Z = 1$ mm および $Z = 9$ mm の位置にそれぞれ 599 個ずつ）とした。設定した槽内電位の測定点のうち、電位基準点とする測定点の座標は前項 6.2.1 と同様に $(X, Y, Z) = (0, 0, 1)$ mm とした。

式 (13) に正解の電流密度を代入して得られた測定点における槽内電位の計算値を図 13 に示す。前項 6.2.1 と同様に擬似測定データには図 13 に示した槽内電位の計算値に加え、元の槽内電位の計算値から FFT によって高周波成分を取り除いたものの二種類を用いた。高周波成分を取り除いた槽内電位の擬似データを同図 13 に元の槽内電位の計算値と合わせて示す。また、図 13 に示す槽内電位の擬似測定データから本提案手法によって推定したカソード表面上の電流密度とその正解値を図 14 に示す。ここで、図 14 は X 軸上の電流密度であり、推定対象の要素

Fig. 13 The calculated electric potentials at the measurement points for the efficient estimation

Fig. 14 The current densities on the cathode surface from Fig. 13 by the proposed method

Fig. 15 The BEM elements and the measurement points utilized or discarded by the proposed method —The target element: (73, 0, 0) mm

Fig. 16 The numbers of BEM elements and measurement points utilized by the proposed method

を X 軸に沿って順次変更することで推定値 $\times$ および $\circ$ を得た．逆解析を行う際，式 (23) 中の測定誤差の分散を前項 6.2.1 の場合と同様に $\sigma^2 = 25 \text{ mV}^2$ に設定した．図 14 より，槽内電位の計算値をそのまま用いた場合の推定値 $\times$ は，従来法による推定結果（図 11）と同程度以上の精度で正解値 $\circ$ とよく合うことが分かる．また，高周波成分を取り除いた槽内電位を用いても，その推定値 $\times$ は正解値 $\circ$ の分布の特徴をよく捉えていることが分かる．

ここで，図 15 に一例として，中心座標 $(X, Y, Z) = (73, 0, 0) \text{ mm}$ の要素を推定対象としたときの本手法によって選択されていた測定点位置ならびに同時に推定する要素を示す．また，図 16 に本手法によって得られた m_{eff} および n_{eff} の値を X 軸上の要素に対して示す．なお， m_{eff} および n_{eff} の値を取得する際には付録に示す計算上の工夫をした． m_{eff} および n_{eff} の値が $X = 0 \text{ mm}$ で非対称となっているのは，式 (6) を解く上で設定した仮の電位基準点の X 座標を $X = -3.5 \text{ mm}$ としたことによる．

図 15 より，候補として与えた測定点 1197 個のうち，推定対象とした要素に近い測定点 80 個程度が選択されたことが分かる．また，図 16 より， X 軸上のすべての要素において，本手法によって選択されていた測定点位置ならびに同時に推定する要素はいずれも 100 個以下であったことが分かる．このことから，本手法によって測定点を

Fig. 17 The 2nd simulation example of the electric potentials at the measurement points in Fig. 8

Fig. 18 The 3rd simulation example of the electric potentials at the measurement points in Fig. 8

Fig. 19 The current densities on the cathode surface from Fig. 17 by the proposed method

Fig. 20 The current densities on the cathode surface from Fig. 18 by the proposed method

絞り込むことで槽内電位の測定を効率化できると考えられる．さらに，逆解析にはサイズが $m_{\text{eff}} \times n_{\text{eff}}$ である行列 $A(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ を用いることで，前項 6.2.1 の場合と比べると計算量が大幅に減少した．

計算例として，アノード，カソードともに電流密度分布を一様分布とした場合（図 17，図 19）と図 14 の正解値の電流密度分布に対して，アノード表面およびカソード表面において X 軸方向に 200 A/m^3 および -200 A/m^3 の傾きが生じた場合（図 18，図 20）についても検討した．その他の条件については図 13 のデータに本手法を適用したときと同様である．図 17 および図 18 より，電流密度の変化に応じて，槽内電位も変化することが分かる．また，図 19 および図 20 より，槽内電位が変化した場合であっても，本手法によって変化後の槽内電位に対応する電流密度が推定できていることが分かる．

以上より，本手法による電流密度の推定値が従来法と同程度以上の精度でその正解値とよく合うことが確認された．本手法によって選択される測定点ならびに推定対象の要素と同時に推定する要素の組合せは行列 A の構成で決まる．すなわち，測定データである槽内電位には依存せず，図 8 のように測定点の候補が決まった段階で電流密度の推定対象とする要素に必要な測定点の位置と数が決まる．したがって，本手法では電流密度の推定を行う度に従来法のようにめっき面全体に渡る電位測定を行う必要は無く，推定に必要な測定点での電位を取得するだけでよい．また，槽内電位の測定を効率化できる．また，計算面においても上述の数値実験で示されたように行列 A のサイズを縮小できるため，大規模になる傾向がある電流密度分布の三次元推定を高速で行うことができる．

7. 結 論

本研究では三次元境界要素法を用い，槽内電位逆解析による電流密度の推定手法を任意の三次元領域に対しても適用できるように拡張を試みた．三次元境界要素法による逆解析はその計算量と必要な測定データ数の両面において大規模になる傾向があることから，本論文では推定対象とする一部領域の電流密度のみを推定する効率的な逆解析手法を提案，導入した．提案する逆解析手法の有効性を検証するため，銅 硫酸銅の分極曲線の標本を用いた数値実験を行い，従来の逆解析手法と比較して良好な結果を得た．以下に本論文の結論を示す．

- (1) 本研究で提案，導入した逆解析手法は逆解析に用いる観測方程式における低感度成分を除去することで，逆解析に必要な測定データ数と計算量を大幅に減少させる．除去する成分の個数を決定するための基準には観測方程式の特異値から得られる測定量と未知量の誤差率の比を用いた．
- (2) 銅 硫酸銅の分極曲線の標本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，本手法による数値実験を行った．本数値実験より，本手法による電流密度の推定値がその正解値とよく合うことを確認した．また，従来の逆解析法と比較して，同程度以上の精度で電流密度の正解値を推定することができた．
- (3) 本手法によって選択される測定点ならびに推定対象の要素と同時に推定する要素の組合せは観測方程式中の行列 A の構成で決まる．すなわち，測定データである槽内電位には依存せず，測定点の候補が決まった段階で電流密度の推定対象とする要素に必要な測定点の位置と数が決まる．したがって，本手法では電流密度の推定を行う度に従来法のようにめっき面全体に渡る電位測定を行う必要は無く，推定に必要な測定点での電位を取得するだけでよい．また，槽内電位の測定を効率化できる．また，計算面においても本数値実験で示されたように行列 A のサイズを縮小できるため，大規模になる傾向がある電流密度分布の三次元推定を高速で行うことができる．本逆解析手法は電位逆解析に限らず，他の大規模逆問題に対しても応用できると考えられる．

付録．数値シミュレーション実験における $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ の取得過程

「6.2.2 (数値シミュレーション実験による検証) 本提案手法による電流密度の効率的推定」において， $(m_{\text{eff}}, n_{\text{eff}})$ の値を 5.2.2.b にて述べた手順に基づき，以下のようにして得た．まず， m_{min} および m_{max} の値を求める際， $\tilde{\eta}_{\text{min}}(\tilde{m}, \tilde{m})$ および $\tilde{\eta}_{\text{max}}(\tilde{m}, \tilde{m})$ を求める上で必要な特異値分解の回数を低減させるため，すべての m を用いる代わりに以下のように等比分割した p 個のサンプル点を用いた．

$$m_i = 3 \left(\frac{\min(M, N)}{3} \right)^{\frac{i-1}{p-1}} \quad (43)$$

ここで，本数値シミュレーション実験では $p = 30$ とした．図 21 に中心座標 $(X, Y, Z) = (73, 0, 0) \text{ mm}$ の要素を推定対象としたときの $\tilde{\eta}_{\text{min}}(\tilde{m}, \tilde{m})$ および $\tilde{\eta}_{\text{max}}(\tilde{m}, \tilde{m})$ を示す．図 21 中の破線および点線より，すべてのサンプル点

Fig. 21 The minimum error ratio $\tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}, \tilde{m})$ and the maximum error ratio $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}, \tilde{m})$ in 6-2-2—The target element: (73, 0, 0) mm

Fig. 22 The maximum error ratio $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n})$ in 6-2-2—The target element: (73, 0, 0) mm

を用いた場合、最小二乗法により得られた累乗近似曲線（式 (36)）はサンプル点の分布とは離れた形状となった。そこで、本研究では p 個のサンプル点のうち、 m_i の値の大きい順に r 個のサンプル点のみを用いて最小二乗法によって累乗近似曲線（式 (36)）を求め、次式で表される赤池情報量規準⁽²⁰⁾ $\text{AIC}_{\min}(r)$ を最小にする $r = r_{\min}$ 個および $\text{AIC}_{\max}(r)$ を最小にする $r = r_{\max}$ 個のサンプル点による累乗近似曲線（図 21 中の一点鎖線および二点鎖線）を用いた。

$$\text{AIC}_{\min}(r) = p \log \sum_{i=1}^p (\tilde{\eta}_{\min}(\tilde{m}_i, \tilde{m}_i) - 1 + \tilde{m}_i^{\theta_{\min}(r)})^2 + 2r \quad (44)$$

$$\text{AIC}_{\max}(r) = p \log \sum_{i=1}^p (\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_i, \tilde{m}_i) - \tilde{m}_i^{\theta_{\max}(r)})^2 + 2r \quad (45)$$

図 21 中の一点鎖線および二点鎖線から、5-2-2-b にて述べた手順により、 $m_{\min} = 85$ 、 $m_{\max} = 6$ すなわち $m_{\text{eff}} = 85$ が得られた。

次に、 n_{eff} の値を求める際にも同様に、すべての $n (\leq m_{\text{eff}})$ を用いる代わりに以下のように等比分割した q 個のサンプル点を用いた。

$$n_i = 3 \left(\frac{m_{\text{eff}}}{3} \right)^{\frac{i-1}{q-1}} \quad (46)$$

ここで、本数値シミュレーション実験では $q = 30$ とした。図 22 に中心座標 $(X, Y, Z) = (73, 0, 0)$ mm の要素を推定対象としたときの $\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n})$ を示す。上述の m_{eff} を求めたときと同様に、赤池情報量規準 $\text{AIC}'(r)$

$$\text{AIC}'_{\max}(r) = q \log \sum_{i=1}^q (\tilde{\eta}_{\max}(\tilde{m}_{\text{eff}}, \tilde{n}_i) - \tilde{n}_i^{\psi(r)})^2 + 2r \quad (47)$$

を最小にする $r = r'_{\max}$ 個の累乗近似曲線（図 22 中の二点鎖線）から $n_{\text{eff}} = 22$ が得られた。

文 献

- (1) 小寺民恵, 大久保利一, 近藤和夫, “突起電極を利用したパネルめっき膜厚の均一化 - 基板保持治具の改善”, エレクトロニクス実装学会誌, Vol. 7, No. 2 (2004), pp. 141-146.
- (2) 大久保利一, 小寺民恵, 近藤和夫, “突起電極を利用したパターンめっき膜厚の均一化 - パターン周辺設置電極”, エレクトロニクス実装学会誌, Vol. 7, No. 4 (2004), pp. 322-327.

- (3) 佐竹徹, 野路伸治, “電子線を用いたウェーハ欠陥検査装置 (EBeye) の開発 (第 1 報) - 開発の背景と装置の原理 (コンセプト) -”, エバラ時報, Vol. 207 (2005), pp. 15-20.
- (4) 蓬臺昌夫, 中田勉, 神田裕之, “Cu 配線めっき装置”, エバラ時報, Vol. 207 (2005), pp. 30-33.
- (5) 栗山文夫, 南吉夫, 木村誠章, “パンプめっき装置”, エバラ時報, Vol. 207 (2005), pp. 34-38.
- (6) 寺尾健二, 狩俣努, 曾布川拓司, “電子線を用いたウェーハ欠陥検査装置 (EBeye) の開発 (第 2 報)”, エバラ時報, Vol. 211 (2006), pp. 21-27.
- (7) 青木繁, 天谷賢治, 高沢宏彰, 宮坂松甫, “電気めっきの境界要素シミュレーション (LSI 銅配線への応用)”, 表面技術, Vol. 51, No. 4 (2000), pp. 425-430.
- (8) 青木繁, 天谷賢治, 阿部馨督, 宮坂松甫, “シリコンウェハへの電気めっきの最適化”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 68, No. 666 (2002), pp. 133-138.
- (9) 早房敬祐, 竹村隆, 天谷賢治, “3 次元モデルに対する半導体めっき膜厚シミュレーション技術の開発”, 日本機械学会 M&M2006 材料力学カンファレンス講演論文集, Vol. 06, No. 4 (2006-08), pp. 409-410.
- (10) 早房敬祐, 竹村隆, 天谷賢治, “半導体めっきにおける膜厚分布平坦化のためのめっき槽形状の最適化”, 日本機械学会 2006 年度年次大会講演論文集, Vol. 06, No. 6 (2006-09), pp. 105-106.
- (11) 岸本喜直, 天谷賢治, “電気銅めっきにおける槽内電位の測定情報を利用した電流密度分布推定法”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 74, No. 745 (2008), pp. 1204-1211.
- (12) 岸本喜直, 天谷賢治, 早房敬祐, “槽内電位逆解析による電気銅めっき電流密度推定法とその検証実験”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 75, No. 757 (2009), pp. 1239-1246.
- (13) 岸本喜直, 天谷賢治, 早房敬祐, 大西有希, “槽内電位の測定情報を利用した LSI ウェハ上のめっき電流密度の推定”, 日本機械学会 第 22 回計算力学講演会講演論文集 (CD-ROM), No. 09-22 (2009-10), 講演 No. 802.
- (14) 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 (2009-10), pp. 53-56.
- (15) 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), Paper No. a236.
- (16) 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.
- (17) 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.
- (18) Orantara, 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.
- (19) Kullback, S. and Leibler, R.A., “On Information and Sufficiency”, *The Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 22, No.1 (1951), pp. 79-86.
- (20) Burnham, K.P. and Anderson, D.R., *Model Selection and Multimodel Inference: A Practical Information-Theoretic Approach* (2000), pp. 49-97, Springer.
- (21) Biegler, L., Biros, G., Ghattas, O., Heinkenschloss, M., Keyes, D., Mallick, B., Marzouk, Y., Tenorio, L., Waanders, B.B. and Willcox, K., *Large-Scale Inverse Problems and Quantification of Uncertainty* (2011), pp. 1-7, Wiley Series in Computational Statistics.
- (22) 青木繁, 天谷賢治, 宮坂松甫, 境界要素法による腐食防食問題の解析 (1998), pp.1-55, pp.156-197, 裳華房.