



Title	最大エントロピー法による計測データの高分解能スペクトル解析
Author(s)	松本, 久功
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(情報科学)
Dissertation Number	甲第16674号
Issue Date	2025-09-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16674
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/98284
Type	doctoral thesis
File Information	Hisanori_Matsumoto.pdf, 全文



博士論文

最大エントロピー法による 計測データの高分解能スペクトル解析

北海道大学大学院情報科学研究科

松本久功

2025 年 9 月

目次

第1章 序論	5
1.1 研究背景と動機	5
1.2 産業界における計測データ解析の課題	5
1.3 MEM の活用	6
1.4 研究目的	7
1.5 本論文の構成	7
第2章 計測データ解析の特徴と具体例	8
2.1 計測データの一般的性質	8
2.2 計測データの具体例：FBAR の成膜プロセス管理	9
2.2.1 FBAR の概要	9
2.2.2 FBAR の成膜プロセス	10
2.2.3 FBAR の膜質と電気特性の関係	11
2.2.4 FBAR 製造プロセスにおける計測データ活用	17
2.3 スペクトル推定法の分類	18
2.3.1 古典的手法	18
2.3.2 確率過程論に基づく手法	19
2.3.3 機械学習・深層学習による手法	20
2.4 特徴量抽出とパターン認識	22
2.5 MEM の産業応用	23
2.6 本研究の位置づけ	24
第3章 最大エントロピー法による計測データ解析	25

3.1	MEM 理論	25
3.2	周波数分解能・推定誤差に関する考察	26
3.3	MEM による計測データ解析フレームワーク	27
第 4 章	産業事例 I：回転機械の軸受診断	29
4.1	産業 IoT 時代における軸受診断の要求と課題	29
4.2	振動診断手法	30
4.2.1	IIoT 向け振動診断方式	30
4.2.2	軸受の固有振動	31
4.3	模擬データでの評価	33
4.3.1	模擬データの生成	33
4.3.2	包絡線信号の抽出	34
4.3.3	包絡線スペクトルの推定	35
4.4	実測データでの評価	41
4.4.1	サンプルデータ	41
4.4.2	包絡線信号の抽出	42
4.4.3	包絡線スペクトルの推定	42
4.5	まとめ	46
第 5 章	産業事例 II：走査型プローブ顕微鏡像の解析	47
5.1	周波数領域解析	47
5.1.1	パワースペクトルと自己相関関数	47
5.1.2	MEM によるパワースペクトル推定	50
5.1.3	2 次元 FFT の欠点	56
5.2	実空間領域解析	57

5.2.1	2次元三角関数多項式	57
5.2.2	最小二乗法	57
5.3	決定論的変動の抽出	59
5.3.1	自己相関関数の計算	59
5.3.2	処理の手順	60
5.4	モデルデータへの適用	61
5.4.1	対象データ	61
5.4.2	処理結果	61
5.5	走査型トンネル顕微鏡像への適用	64
5.5.1	対象データ	64
5.5.2	処理結果	65
5.6	非接触原子間力顕微鏡像への適用	68
5.6.1	対象データ	68
5.6.2	処理結果	69
5.7	まとめ	71
第6章	結論および今後の課題	73
6.1	研究成果のまとめ	73
6.2	残された課題	74
6.3	今後の研究展開と応用可能性	74
謝辞		76
参考文献		77

第 1 章 序論

本章では，本研究が取り組む計測データ解析の産業的重要性と，最大エントロピー法（Maximum Entropy Method: MEM）を採用する狙いを説明する．続く各章で議論する理論・応用・評価の起点として，研究目的と論文全体の構成を位置付ける．

1.1 研究背景と動機

産業分野における製造プロセスの最適化や設備保全の高度化，また学術分野における新材料探索や基礎物理の解明など，多岐にわたる場面で意思決定の根拠を提供するために計測データ解析が行われている．さらに近年のスマートファクトリー化やデジタルツインの潮流により，工程モニタリングや品質管理にリアルタイム解析が組み込まれることが常態化しつつある．このような背景の下で，計測データの高精度解析は技術革新を推進する重要な鍵となり，産業・学術の双方でその需要が年々高まっている．

一方，現場で取得される計測データは有限長であるうえに，計測環境の変動やセンサ固有の誤差などに起因する雑音が混入することが避けられない．また，センサの多様化によって振動・画像・電気信号など複数の物理量が同時収集されるマルチモーダル化が進み，データ構造はより複雑になっている．これらの要因は解析精度を低下させるだけでなく，従来手法のパラメータチューニングを煩雑化させるため，短時間でロバストに特徴量を抽出できる手法が望まれている．

1.2 産業界における計測データ解析の課題

産業現場では Internet of Things（IoT）化とセンサネットワークの高密度化に伴い，データ取得量が指数的に増加している．一方で，その膨大なデータをリアルタイムで解析し，即座にフィードバック制御や異常検知へ反映させるためには計算資源と処理アルゴリズムの両面で高い性能が求められる．結果として「データ量の爆発」と「解析コスト・応答遅延」のトレードオフが顕在化し，解析パイプラインの軽量化と高精度化を同時に達成することが産業界全体で共通の課題となっている．

さらに，現場環境は温度・湿度・振動などの外乱が常に変動しており，センサドリフトや計測欠損が発生しやすい．環境ノイズが重畳された有限長データから安定した指標

を抽出するためには、前処理段階での欠損補間やドリフト補正、ノイズ抑制が不可欠となる。しかし、多様な装置・プロセスごとにノイズ特性が異なるため、汎用的な補正手法の開発は容易ではない。

計測データからどの物理量を「特徴量」として抽出するかについてもそれぞれの領域や現場課題によって異なるため、手法の再利用性が低く、異分野連携によるベストプラクティス共有が進みにくい状況にある。加えて、最先端の解析アルゴリズムは統計数理や信号処理の高度な知識を前提とする場合が多く、現場エンジニアがブラックボックスに感じることで導入障壁となる。アルゴリズムのチューニングや結果解釈を専門家に依存する構造は、運用コストと属人化リスクを増大させる。

1.3 MEM の活用

MEM は、確率統計のエントロピー最大化原理を用いて自己相関関数の既知の値に恣意的な情報は一切付け加えることなく無限長に拡張し、データが持つ特徴だけに基づくパワースペクトル密度を算出する手法である [1][2][3]。推定パラメータ数がデータ系列の長さと同程度に抑えられるため、サンプル数がごく少ない場合でも鋭いスペクトルピークを理論的に再現できる点が最大の特色である。すなわち MEM は「データ長が短いほど分解能が低下する」という従来の常識を突破し、最短データ長でも高分解能を保証する推定法である。

これに対し、高速フーリエ変換（Fast Fourier Transform: FFT）を基盤とする古典的手法は窓長に反比例して周波数分解能が決まるため、十分な解像度を得るには長時間データを蓄積するか、多重窓・ゼロパディングなどの外挿を施す必要がある。また、FFT は雑音成分がバックグラウンドに広く拡散するためピーク識別が困難になりやすい。一方、MEM スペクトルは予測誤差フィルターの逆数で定義される式の極値としてピークを直接推定するため、狭帯域のスペクトル成分を雑音に埋もれず抽出できる点で根本的にアプローチが異なる。

産業現場では装置停止を最小限に抑える観点から「短時間サンプリングで高精度に状態判定したい」という要請が強い。また、自律化・無人化の流れにより解析アルゴリズム自体のチューニング工数を削減し、オンラインで自動運用できることが望まれる。MEM は短データ長でも高分解能を維持できる点と、演算コストがデータ長に対して線形スケールでありリアルタイム実装に適する点で、これらの産業的要件に合致する。本研究では MEM を中核に据えた汎用スペクトル解析フレームワークを構築し、製造業に

における検査工程の精度向上や生産設備・ユーティリティ設備の運用保守の効率化の観点でその有効性を検討する。

1.4 研究目的

本研究の目的は、有限長・雑音混入データに対しても高分解能解析を実現する MEM を理論と実用の両面で体系化し、産業横断的に再利用できる解析フレームワークを提案することである。

理論検討として、MEM スペクトル推定に内在する誤差要因（ピークシフト、半値幅拡大、スプリアス発生など）を定義式に基づいて議論し、サンプル数、SNR、AR 次数とスペクトル推定誤差との関係について洞察を与える。

実用検討として、回転機械の軸受予兆診断を目的とした振動解析と、走査型プローブ顕微鏡（Scanning Probe Microscopy: SPM）像の構造解析を目的とした 2 次元スペクトル解析を題材に実証検討を行う。

1.5 本論文の構成

本論文は全六章で構成される。第 2 章では、計測データの共通特性とスペクトル推定法の体系を整理する。第 3 章は、第 2 章で抽出した要求を踏まえ、MEM の誤差理論と実装最適化について議論し、解析フレームワークを提案する。このフレームワークを実装対象へ適用し、その有効性を検証した結果を第 4 章および第 5 章に示す。第 4 章では、モーター軸受の予兆診断への応用を検討し、工場のユーティリティ設備の予防保全への適用について考察する。第 5 章は、MEM を 2 次元データへと拡張し、SPM 像の薄膜表面のナノスケール構造の分析への応用を検討し、デバイス製造プロセスにおける検査工程への適用について考察する。これらの議論を通じて得られた知見と残課題を総括し、将来展望を含めた結論を第 6 章で示す。

第2章 計測データ解析の特徴と具体例

本章は、計測データの一般的性質と薄膜バルク弾性波共振器（Film Bulk Acoustic Wave Resonator: FBAR）の成膜プロセスを例とする具体的課題を整理し、既存スペクトル推定法・関連研究を整理する。これにより、本研究が解決すべき課題と技術的要件を明示し、第3章以降の理論構築へつなげる。

2.1 計測データの一般的性質

製造業における計測データは、製品品質の即時判定、工程パラメータの最適化、設備の状態監視・予知保全、さらにデジタルツインによるシミュレーション精度向上など、多岐にわたる目的で活用されている。特に近年はIoT化が進み、設備稼働中のインライン計測が主流となった結果、サブ秒オーダーの振動信号や高解像度画像がリアルタイムに収集されるようになった。これによりライン停止なしに歩留まり向上や異常兆候の早期検知が可能となり、トレーサビリティ確保や規制対応の観点から、計測データを長期蓄積して根本原因解析（Root Cause Analysis: RCA）に活用する事例も増加している。

解析手法としては、従来の統計的工程管理（Statistical Process Control: SPC）や主成分分析（Principal Component Analysis: PCA）、部分最小二乗回帰（Partial Least Squares: PLS）に加え、高速フーリエ変換（Fast Fourier Transform: FFT）を基盤とするスペクトル解析、ウェーブレット変換、ARモデル、MEMなどの高分解能推定手法が広く用いられている。近年は機械学習・深層学習の導入が進み、教師あり学習による品質分類、自己符号化器を用いた異常検知、再帰型ニューラルネットワーク（Recurrent Neural Network: RNN）による時系列予測などが実装されている。加えて、ストリーミング処理基盤（Spark Streaming, Kafka Streams 等）やエッジ推論デバイスの普及により、計測データをクラウドへ送らず現場で即時解析するアーキテクチャも現実化しつつある。

しかし、計測データ活用にはいくつかの課題が残る。第一に、センサ種別・計測条件ごとにデータ形式やスケールが異なるため、前処理やメタデータ管理の標準化が不十分である。第二に、環境ノイズやセンサドリフトが混入した有限長データを解析する場合、パラメータチューニングが煩雑化し、結果の再現性が確保しにくい。第三に、高度な解析アルゴリズムを運用するための専門人材が不足しており、ブラックボックス化への懸念から現場導入が進まないケースも多い。さらに、リアルタイム処理を要求する一方で計算資源や通信帯域が限られるため、解析精度と処理負荷の両立が技術的ボトルネ

ックとなっている．本研究では，短時間データでも高分解能を維持し，自動運用が可能な MEM ベースの解析フレームワークを提案することで，これらの課題を包括的に解決することをめざす．

2.2 計測データ的具体例：FBAR の成膜プロセス管理

産業分野における計測データ活用の一例として，携帯電話用高周波（Radio Frequency :RF）フィルタとして広く用いられている FBAR の成膜プロセスを取り上げる．圧電薄膜として窒化アルミニウム（AlN），電極膜としてモリブデン（Mo）を採用し，FBAR の電気性能にとって重要な高配向 AlN 膜を得るためのプロセス開発の実例を示す [4]．

2.2.1 FBAR の概要

無線端末はスマートフォン，ウェアラブル機器，IoT デバイスへと多様化し，それに伴い RF フロントエンドを構成する各コンポーネントの小型化が急務となった．従来主流であった表面弾性波（Surface Acoustic Wave: SAW）フィルタは，基板面上で波が伝搬する構造上，共振周波数を高めるほど電極ピッチの微細化と伝搬経路の長尺化がトレードオフとなり，チップサイズの縮小に限界が生じる．また，5G/Wi-Fi 6E など 3 GHz 以上の高周波帯では SAW 基板材料の位相速度が不足し，挿入損失や温度依存性が増大する問題が顕在化した．

一方，RF 回路のモノリシック実装が進む現在，パッシブ素子も CMOS や BiCMOS 等のシリコンプロセス互換であることが望ましい．SAW フィルタはリチウムタンタレートやクォーツなどシリコンとは異種の単結晶基板を必要とし，後段 IC との 3D 実装やウェハレベルパッケージングに制約が残る．

こうした背景の下で登場したのが FBAR フィルタである [5] [6] [7]．FBAR は Si 基板上に積層した金属／圧電薄膜の上下電極間でバルク音響波を垂直に励起するため，共振周波数は薄膜厚のみで決定され，SAW のような伝搬距離によるチップ面積依存性がない．さらに，圧電層に窒化アルミニウム（AlN）やスカンジウム添加 AlN（ScAlN）を採用すれば，3–6 GHz 帯でも高い品質係数（Q 値）と有効電気機械結合係数（ k_e^2 ）が得られ，低損失で広帯域なフィルタ設計が可能となる [8] [9] [10] [11]．MEMS 技術とシリコンスルーホール（Through-Silicon Via: TSV）を組み合わせれば，RF トランシーバ IC と一体化したモノリシック RF モジュールを実現できる点も次世代端末の高密度実装要求に合致する．

このように、端末の多機能化がもたらす小型、高周波、Si プロセス互換という三つの要請を同時に満たす解決策として FBAR フィルタが採用され、今日の 5G スマートフォンや Wi-Fi 6E 対応デバイスを支える中核部品へと成長している。

また、ここで開発した高 c 軸配向 AlN 成膜技術を応用することで、様々な振動モードによる高周波振動子を実現することができる [12].

2.2.2 FBAR の成膜プロセス

FBAR の圧電層として AlN 膜を使用するには、AlN が基板表面に対して垂直方向 (c 軸) に配向して成長させる必要がある。X 線回折 (X-Ray Diffraction: XRD) ロッキングカーブにおいて半値幅 (Full Width at Half Maximum: FWHM) が 4 度以下であることが、単結晶 AlN と同等の高い k_e^2 を得るために必要とされている。単結晶または高 c 軸配向の多結晶 AlN 膜を得るため、これまでさまざまな成膜技術が試行されてきた [13] [14] [15] [16] [17]. その中で反応性スパッタリングは、比較的低い成膜温度と IC 技術との互換性から FBAR の製造に適している。

しかし、FBAR では AlN 膜が多結晶金属膜の粗い表面上にスパッタされるため、結晶性が劣化しやすいという問題がある。高 c 軸配向の AlN 膜を金属膜上に成膜する最適な方法を見つけるために多くの努力がなされてきた。例えば、Dubois と Muralt は、白金、アルミニウム、チタンなどの金属膜上に異なるスパッタ条件で成膜した AlN 膜の圧電特性を調査した [16]. また、Lee らは、Mo 膜上に反応性 RF マグネトロンスパッタリングで成膜した AlN 膜の FWHM と Mo 膜の特性との相関を示した [17].

これらの過去の研究では、AlN の成膜条件、金属の成膜条件、金属材料の影響に焦点が当てられてきたが、FBAR 用途における AlN/金属二層膜の下地材料の影響については明らかにされてなかった。下地材料は上層の金属膜の結晶性に大きな影響を与える [18]. そしてこれらの金属膜の結晶性は AlN 膜の c 軸配向と密接に関連している。したがって、適切な下地材料を選ぶことで、高 c 軸配向の AlN 膜を得ることが可能であると考えられる。

本節では FBAR において高 c 軸配向の AlN 膜を得るために、下地材料が金属膜および AlN 膜の結晶性に与える影響を調査した。金属材料には、硬度が高く FBAR の金属膜として使用されている耐熱性金属である Mo を採用した。

下地材料としてシリコン (Si) , 二酸化ケイ素 (SiO_2) , および AlN を使用した。ここで Si は直径 76 mm の(111)シリコンウェハを 1%フッ化水素水溶液で 5 分間エッチングし、表面の自然酸化膜を除去したものである。SiO₂および AlN 下地は、それぞれ熱酸

化膜およびスパッタ AlN 膜をコーティングしたシリコンウェハである．これらの下地の構造および成膜方法を表 2.1 に示す．

表 2.1 下地層に用いた材料（出典：[4]を基に和訳）

下地層	Si	SiO ₂	AlN
基板	Si(111)	SiO ₂ /Si(111)	AlN/Si(111)
成膜方法	—	熱酸化	スパッタ法
結晶構造	単結晶	非晶質	多結晶

AlN/Mo 二層膜はすべて同一のスパッタ条件下でそれぞれの下地の上に成膜した．Mo 膜は純度 99.98%の直径 101.6 mm の Mo ターゲットを用い，アルゴン（Ar）雰囲気中で直流マグネトロンスパッタリングにより成膜した．AlN 膜は純度 99.999%の直径 101.6 mm の Al ターゲットを用い，Ar/窒素（N₂）混合の反応性雰囲気中で高周波マグネトロンスパッタリングにより成膜した．使用した Ar および N₂の純度は 99.9995%である．

2.2.3 FBAR の膜質と電気特性の関係

Mo 膜および AlN 膜の表面形態は，走査型電子顕微鏡（Scanning Electron Microscope: SEM）および原子間力顕微鏡（Atomic Force Microscope: AFM）により観察した．AlN/Mo 二層膜の結晶構造は，X 線回折（XRD）の θ -2 θ スキャンおよびロックングカーブにより評価した．

同一のスパッタ条件下で Si, SiO₂および AlN 下地上に成膜した Mo 膜の表面形態を SEM および AFM により観察した結果を図 2.1(a)~2.1(f)に示す．Si および SiO₂下地層の上に成膜された Mo 膜は，それぞれ主軸長が約 50 nm および 100 nm の楕円形粒子となっている（図 2.1(a), 2.1(b)）．一方，AlN 下地層の上の Mo 膜は直径約 20 nm の円形粒子となっている（図 2.1(c)）．AFM により測定した Mo 膜の表面粗さ（ R_{rms} ）は，Si, SiO₂および AlN 下地層でそれぞれ 3.05 nm, 4.81 nm, 1.63 nm であった（図 2.1(d)~2.1(f)）．最も平滑な Mo 膜は AlN 下地層で得られた．

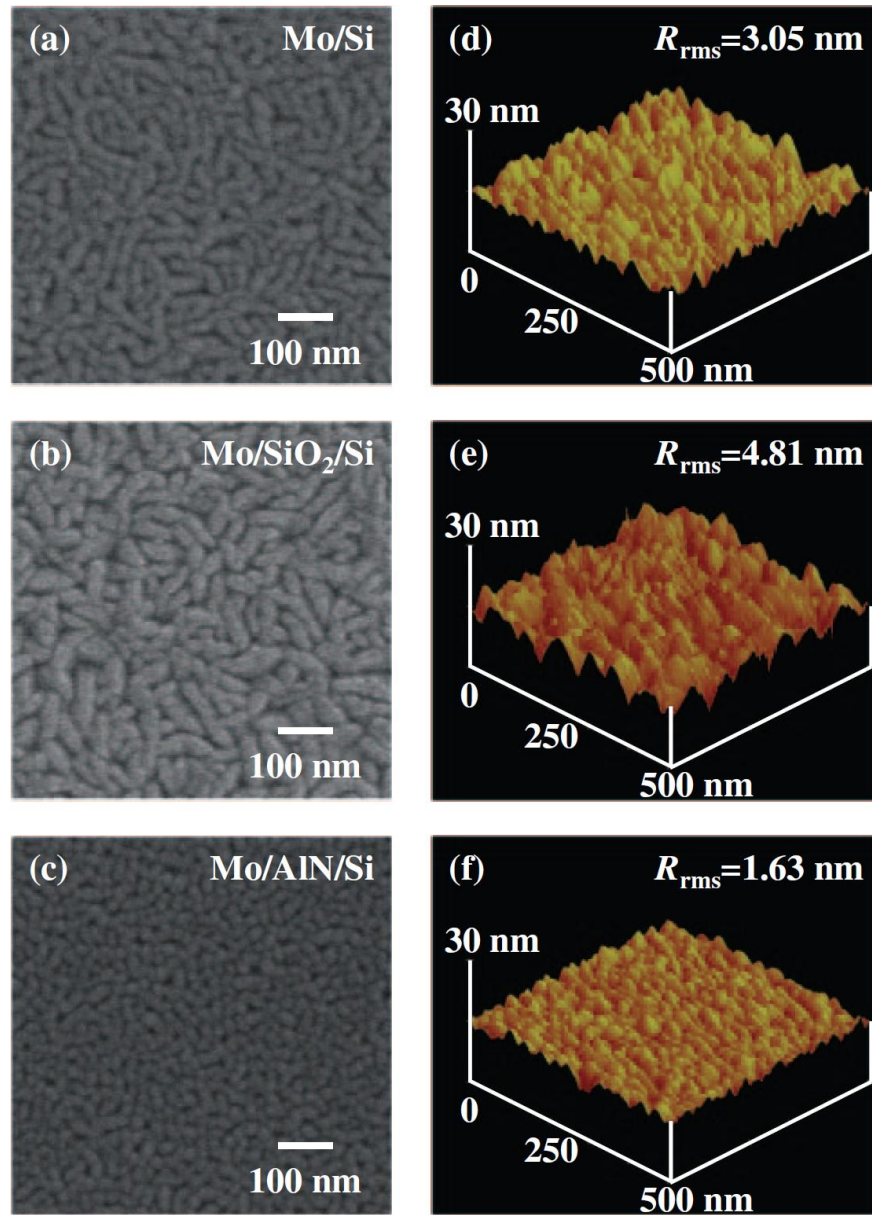


図 2.1 Mo 薄膜の表面形状 (a)Mo/Si, (b)Mo/SiO₂/Si, (c)Mo/AlN/Si の SEM 像と, (d)Mo/Si, (e)Mo/SiO₂/Si, (f)Mo/AlN/Si の AFM 像 (出典: [4]より転載)

図 2.2(a)~2.2(f)には、図 2.1 に示した Mo 膜上に成膜された AlN 膜の表面形態を示す。最も微細な粒子は AlN 下地層を用いた場合に観察された（図 2.2(c)）。AFM 測定の結果（図 2.2(d)~2.2(f)）から、AlN 膜の R_{rms} は、Si, SiO₂および AlN 下地層でそれぞれ 3.19 nm, 5.10 nm, 2.56 nm であった。Mo 膜の表面粗さと同様に、最も平滑な AlN 膜は AlN 下地を用いた場合に得られた。

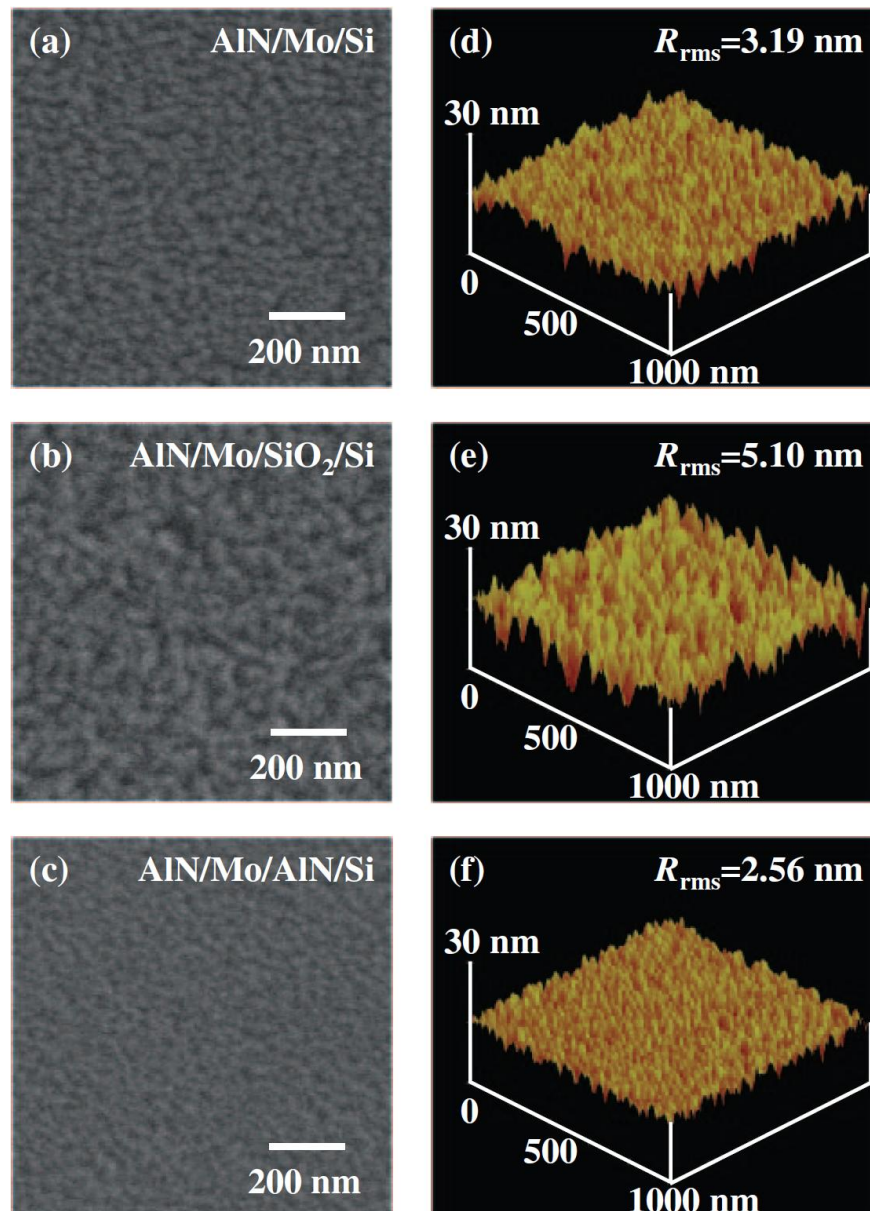


図 2.2 AlN 薄膜の表面形状 (a)AlN/Mo/Si, (b)AlN/Mo/SiO₂/Si, (c)AlN/Mo/AlN/Si の SEM 像と, (d)AlN/Mo/Si, (e)AlN/Mo/SiO₂/Si, (f)AlN/Mo/AlN/Si の AFM 像（出典：[4]より転載）

図 2.3 には、3 種類の下地層の上に成膜された AlN/Mo 二層膜の XRD パターン (θ -2 θ スキャン) を示す。すべての試料において、AlN(0002)および Mo(110)の配向ピークが観測された。同一のスパッタ条件下で成膜されたにもかかわらず、AlN 下地層の上の AlN/Mo 二層膜は他の試料と比較して AlN(0002)および Mo(110)のピーク強度が大きく、AlN/Mo 二層膜の配向性は下地材料に強く依存していることがわかる。

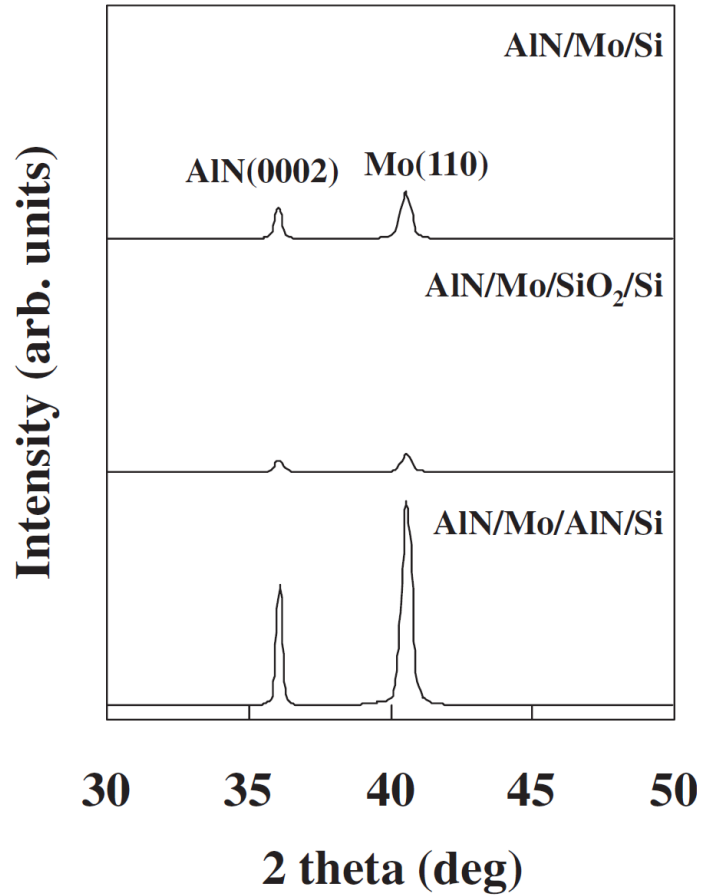


図 2.3 下地層の上に成膜した AlN/Mo の XRD パターン（出典：[4]より転載）

図 2.4 に AlN(0002)および Mo(110)のロックングカーブの FWHM を示す．Lee らの報告と一致して，Mo と AlN の結晶性には明確な相関が見られた．AlN 下地層の上に成膜された AlN/Mo 二層膜では AlN(0002)の FWHM は 2.3° であった．前述の通り，FWHM が 4° 未満の AlN 膜は単結晶 AlN と同等の k_θ^2 を有することが期待でき，FWHM が 2.3° であれば FBAR 用途に十分であると言える．

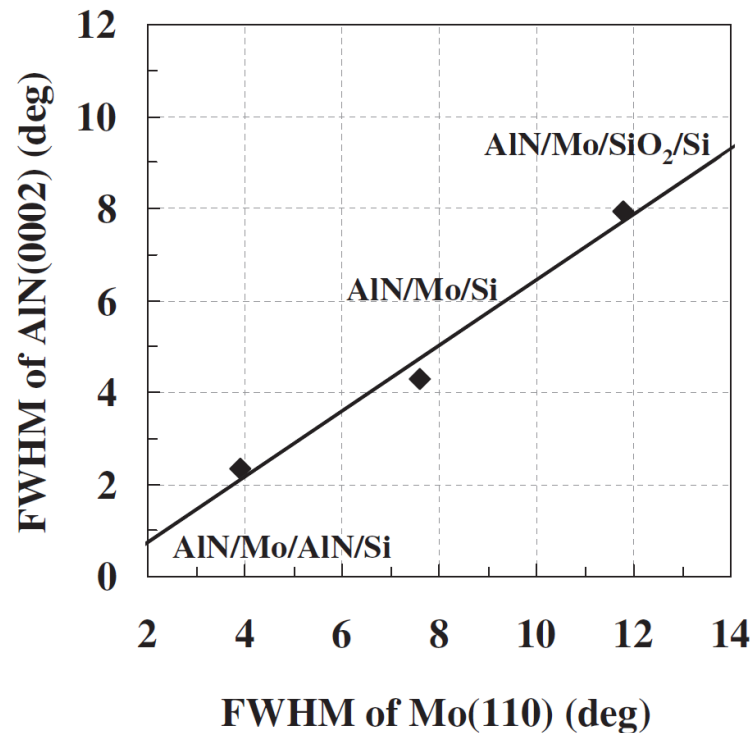


図 2.4 Mo(110)と AlN(0002)の X 線ロックングカーブ FWHM の関係（出典：[4]より転載）

本検討の結果，下地層の材料が Mo 膜の結晶性に大きく影響し，さらに Mo 膜の結晶性が高 c 軸配向の AlN 膜の成長に不可欠であることが示された．特に，AlN 下地膜は優れた Mo 膜を得るために適していることが示された．

AlN 下地膜が Mo 膜の結晶性を向上させる理由として（１）下地層の表面粗さ，（２）下地層と Mo との格子不整合，（３）下地層と Mo との表面エネルギー差，の 3 つの要因を考察した．本実験では，AlN 下地は Si(111)ウェハー上にスパッタ成膜されたものであり，Si や SiO₂下地よりも表面が滑らかであるとは考えにくい．また，格子不整合の程度も，AlN の六方晶構造は Mo の体心立方構造の低指数面と大きな格子不整合を持つため要因として考えにくい．一方で，AlN(0002)と Mo(110)の表面エネルギー差は

主要因である可能性が高い．中島らの報告によれば，AlN(0002)の表面エネルギー γ_s は6.95J/m²と推定されている．これは以下の式により計算される [19]．

$$\gamma_s = \frac{v}{u} \frac{\Delta H}{N_A} N_s \quad (2.1)$$

ここで， u は結晶内部の配位数， v は表面原子のダングリングボンド数， ΔH はモルエンタルピー， N_A はアボガドロ数， N_s は単位面積あたりの原子数である．式(2.1)と表 2.2 から，Si(111)およびMo(110)の表面エネルギーはそれぞれ1.46J/m²および3.90J/m²と計算される．非晶質SiO₂は式(2.1)から表面エネルギーを計算することはできないが，非晶質SiO₂の表面エネルギーは非晶質Siよりも小さいとされている．また，非晶質材料は，化学結合エネルギーに依存する表面エネルギーの性質上，単結晶よりも表面エネルギーが小さくなるはずである．したがって，非晶質SiO₂の表面エネルギーはSi(111)よりも小さくなる．

以上の議論より，SiおよびSiO₂下地層の表面エネルギーはMoよりも小さいのに対し，AlN下地層の表面エネルギーはMoよりも大きいと考えられる．下地層の表面エネルギーが上層膜よりも大きい場合，上層膜は二次元的に成長して良好な結晶性が得られる．したがって，AlN下地層の高い表面エネルギーがMo膜の結晶性を向上させる要因であると考えられる．

表 2.2 表面エネルギーの計算に用いたパラメータ（出典：[4]を基に和訳）

パラメータ	単位	Si(111)	Mo(110)	参考文献
u		4	8	
v		1	2	
ΔH	kJ/mol	450.0	658.1	[20]
N_s		$\frac{4}{\sqrt{3}a^2}$	$\frac{\sqrt{2}}{a^2}$	
格子定数 (a)	Å	5.4307	3.14700	[21]

AlN下地層を用いてFBARを作製した．図 2.5(a)と 2.5(b)にそれぞれネットワークアナライザで測定した反射係数 (S_{11}) および透過係数 (S_{21}) を示す．

FBARの Q 値および k_e^2 を以下の式を用いて測定データから導出した [22]．

$$Q_{r,a} = \frac{f_{r,a}}{2} \frac{\partial \phi_z}{\partial f} \bigg|_{f=f_{r,a}} \quad (2.2)$$

$$k_e^2 = \frac{\phi_r}{\tan \phi_r} \quad \phi_r = \frac{\pi f_r}{2 f_a} \quad (2.3)$$

ここで f_r および f_a はそれぞれ共振周波数および反共振周波数、 ϕ_z はインピーダンスの位相である．本検討で作成した FBAR では、 Q_r および Q_a はそれぞれ 800 および 600、 k_e^2 は 5.7%だった．

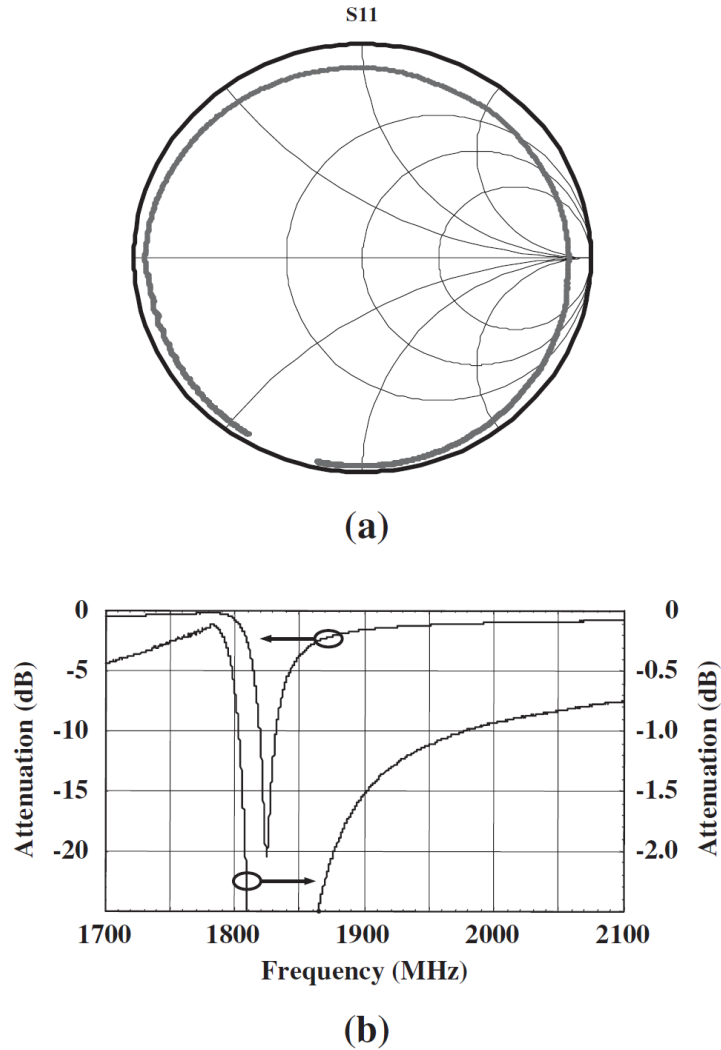


図 2.5 AIN 下地層を適用した FBAR の S パラメータ測定値 (a)S₁₁, (b)S₂₁
(出典：[4]より転載)

2.2.4 FBAR 製造プロセスにおける計測データ活用

前項までで FBAR の成膜プロセスの開発フェーズの検討を詳細に示し、高品質な RF フィルタ特性を得るために必要な高配向 AIN 膜を得るための基本的な条件を明らかにした．これらの検討に基づいて設計される量産フェーズでは、求められる高配向 AIN 膜が安定的に形成できているかをインラインおよびニアラインの SEM, AFM, XRD での計測による、製造歩留まりを高レベルに保つ検査工程の導入が必須である．これらの検査

工程では従来は熟練度の高い従業員による目視検査が必要となるケースが多いが、スループット向上や検査精度の観点で課題があった。これら検査工程を計測データ解析手法の適用で自動化することは製造現場の業務効率化にとって有益であり、特にインライン SEM で薄膜の表面形状を常時計測する上で MEM によるスペクトル解析は強力な手段となる。

なお、本節では無線デバイス製造のシリコンウェハ工程の例として FBAR 成膜プロセスについて詳細を説明したが、その後段のパッケージングやプリント組立でも計測データ解析は生産品質維持の観点で重要であり、無線機の例ではプリント基板上に直接形成する平面パターンアンテナの製造プロセス等での活用が考えられる [23] [24] [25]。

2.3 スペクトル推定法の分類

スペクトル推定法は、時間信号に含まれる周波数成分の強度（パワースペクトル密度）を推定する技術であり、通信、音声、生体信号、レーダー、地震波など幅広い分野で用いられてきた。その研究開発の歴史はまずは古典的な演算手法からスタートし、その後、確率過程論に基づく手法が提案され、近年では機械学習・深層学習を用いた手法に進化している。スペクトルは自己相関関数のフーリエ変換として定義されているが（Wiener-Khinchine の公式），我々の取りうるデータは常に有限かつ離散的であるため、 $[-\infty, \infty]$ の範囲での連続関数を必要とするフーリエ積分を厳密に求めることはできず、この部分からもたらされる不確実さをいかに取り除くかが、以降に述べる様々なスペクトル推定法の要点となる。

2.3.1 古典的手法

ピリオドグラム（Periodogram）

スペクトル推定の起源となった手法で、時系列信号の離散フーリエ変換の振幅二乗を用いてパワースペクトルを推定する。1898 年に A. Schuster が周期性分析のため導入し、自然現象の周期検出（太陽黒点数の周期分析等）に初めて適用された [26]。実装が容易で FFT による高速計算も可能だが、推定値の分散が大きく、記録長が増えても分散が減少しないという欠点が知られている。この欠点を克服するため、その後、平滑化ピリオドグラム、バートレット法、ウェルチ法等の発展的な手法が提案された。

Blackman-Tukey 法

時系列の自己相関関数を計算して、その離散フーリエ変換からスペクトルを得る手法であり、1950 年代後半に通信理論に基づいて提案された [27]。自己相関を用いることで

滑らかなスペクトル推定が可能となり、ピリオドグラムではノイズに埋もれていた微弱的な成分の検出に寄与した。本手法ではまずデータの読み取り間隔とデータ長を決定する必要があり、続いてトレンド除去、プリホワイトニング等の前処理を施したうえで本計算に入る。

高速フーリエ変換 (FFT)

FFT アルゴリズムは 1965 年に Cooley と Tukey により発表され、デジタル信号処理に革新的な進歩をもたらした [28]。FFT の導入によりピリオドグラム計算が飛躍的に高速化し、従来は計算負荷の高かったスペクトル分析がリアルタイム処理や大規模データ解析でも可能となった。この技術的ブレイクスルーにより、スペクトル解析は通信やレーダー信号処理、音声処理、生体信号処理などあらゆる分野に普及・定着した。FFT は本来有限離散データのフーリエ成分を迅速に求めるアルゴリズムで、スペクトル推定法そのものではない。FFT を応用してスペクトルを求めるためには、時系列データのフーリエ成分を直接計算し、スペクトルはそのフーリエ成分を二乗したものとして与えられる。

マルチテーパー法

1982 年に David J. Thomson により提唱された手法で、データに直行する異なる窓関数（テーパー）をかけた複数のスペクトル推定を平均することで、分散を減らしつつバイアスも抑制する [29]。マルチテーパー法は、短いデータ長でも信頼性の高いスペクトル推定を可能にし、地球物理（地震波や気候データの分析）や神経科学（脳波の周波数解析）でノイズに埋もれた信号成分を検出するのに採用された。また近年では通信やレーダー信号の解析でも、高分解能かつロバストな手法として検討されている。

これら古典的手法は、モデル仮定をせずデータから直接スペクトルを推定するアプローチであり、統計的信頼性を高める工夫（平滑化や平均化）が導入された。1960 年代までに現在も標準的に使われる手法のほとんどが登場し、これら古典的方法は、もともと気象や天文学で発展した概念を通信工学や生体信号解析へ横展開したという点でも意義深い。

2.3.2 確率過程論に基づく手法

最大エントロピー法 (MEM)

古典的なスペクトル推定法ではフーリエ変換を単純に離散フーリエ変換に置き換えることでスペクトルを計算しているが、対象とする時系列データが短くなるにつれてスペクトル分解能が急激に低下することが課題であった。1967 年に Burg により提案された

MEM では、有限データから推定できる情報エントロピーを最大化する確率過程論的方法を導入し、短いデータからでも高い分解能を得られることが特徴である [1] [2] [3]. 当初は地球物理の探査データ解析で導入され、後に音声処理、レーダー信号処理、地震工学など幅広い領域で活用が広がった.

自己回帰 (Auto-regressive: AR) モデル

有限長データにおいて未知である将来のデータ点を過去のデータ点の線形結合でモデル化する手法であり、1960 年代に赤池等によって理論的に体系化され、計算アルゴリズムが整備された [30]. AR モデルは情報エントロピー最大という概念から出発した MEM とアルゴリズム的にはほぼ同一であり、自己相関関数の推定法が異なるのみである. ただし、MEM は与えられたデータがすべてであり、恣意的な過程は一切持ち込まないという態度であるのに対して、AR モデルでは将来のデータ点は過去のデータ点群の線形結合であるというモデルに基づく手法であり、概念的には対照的ともいえる立場をとる.

高解像度スペクトル推定法

MEM や AR モデルが短いデータからでも情報を引き出せることを示したことに触発され、非常に近接した周波数成分の分離のための種々の手法が登場した. 例えば、Capon 法では、アレーアンテナにおける電波の到来方向推定法を応用し、所望のスペクトル成分を通してそれ以外を無限減衰させるフィルタを設計することで、より鋭いピークを得ることに成功した [31]. また、MUSIC 法やその発展形である ESPRIT 法では固有値分解に基づき信号サブスペースとノイズサブスペースにデータを分離し、ノイズサブスペースに直行する方向でスペクトルピークを探索することで分解能向上を可能にした [32] [33]. これら高解像度法は観測データに含まれる信号成分や構造に基づくモデル前提を置くことで精度向上を図る戦略であり、その適用には合理的なモデル選択や前提の設定が重要である.

2.3.3 機械学習・深層学習による手法

近年、データ駆動型の機械学習 (ML)、特に深層学習 (DL) 技術がスペクトル推定の分野にも導入されつつある. 2010 年代以降の計算資源向上とビッグデータの蓄積により、ニューラルネットワークが従来手法を補完・代替する事例があらゆる分野で見られる. その特徴は非線形な関係性の学習や高次元データの特徴抽出能力を活かすことで、これまで困難だったスペクトル推定課題にアプローチできる可能性がある.

深層学習によるスペクトル推定・補正

深層学習モデル（多層パーセプトロン，畳み込みニューラルネットワーク，リカレントニューラルネットワークなど）を用いて，信号から直接スペクトルを推定したり，スペクトル上の特定成分を分離・補正する取り組みが登場している．例えば，音声信号処理では雑音のパワースペクトル密度を長短期記憶（Long Short-Term Memory: LSTM）ネットワークでフレームごとに推定し，スペクトル減算によるノイズ除去性能を向上する試みがある [34]．ニューラルネットによるスペクトル推定は，モデルフリーで非線形な特徴を捉えられるため，スペクトル形状が複雑な信号（生体信号の非定常スペクトルや複雑な通信チャネル特性など）への適用が期待されている．一方で，大量の学習データの用意やネットワークの汎化性能の確保が課題となっている．

生成系 AI によるアプローチ

2020 年代に入ると，より高度な深層学習アーキテクチャである敵対的生成ネットワーク（Generative Adversarial Network: GAN）や Transformer がスペクトル推定・生成に応用され始めた．GAN は生成器と識別器のネットワークが競合的に学習する枠組みで，訓練データと同じ統計性質を持つ新たなサンプルを生成できる．これをスペクトル領域に応用した例として，無線通信におけるチャネル周波数応答を GAN でモデリング・シミュレーションする研究がある．特にテラヘルツ帯通信では実測データが限られるため，Transformer ベースの GAN を用いてチャネルの周波数特性を高精度に生成する試みが報告されている [35]．Transformer は本来時系列やテキストの特徴抽出に優れた自己アテンション機構を持つモデルだが，時間周波数解析にも応用されつつある．例えば，直交主波数分割多重（Orthogonal Frequency-Division Multiplexing: OFDM）通信信号のスペクトル欠損を補間・再構成する「Transformer-GAN」が提案されており，高い再現性で信号波形を復元できることが示されている [36]．音響分野では，Transformer に基づく生成モデルがスペクトログラムから高品質な音声波形を再構成するニューラルボコーダーに使われるなど，時間周波数表現そのものを学習して生成・推定する [37]．これら最新手法の技術的特徴は，非常に高次元なスペクトル分布を学習して新たなサンプルを生成できる点で，単なる解析に留まらずデータ拡張や予測にも応用が試みられている．

2.4 特徴量抽出とパターン認識

スペクトル領域における代表的特徴量には、主成分ピークの位置（周波数）、半値幅、ピーク面積、およびハーモニクス比が挙げられる。ピーク位置は固有振動数や画像の周期構造を直接示すため、異常検知や製造プロセスのばらつき解析に有効である。半値幅は減衰定数や形状のゆらぎを反映し、装置劣化や形状均一性を定量的に評価できる。ピーク面積はエネルギー分布の総体を示し、複数年モードが重畳する場合の相対寄与率の指標となる。ハーモニクス比は一次と高次ピーク振幅の比であり、非線形性や共振カップリングの指標として用いられる。MEM スペクトルでは極を直接推定するため、短時間データでもこれらの特徴量を高精度に算出できる利点がある。

スペクトルが時間変化する非定常信号に対しては、短時間フーリエ変換（Short-Time Fourier Transform: STFT）や連続ウェーブレット変換（Continuous Wavelet Transform: CWT）が一般的に用いられる。STFT は固定窓幅のため時間分解能と周波数分解能のトレードオフが生じ、MEM で得られる高分解能を維持することは困難である。CWT はマルチスケール解析が可能であり、周波数依存の可変窓によって非定常成分の局所特性を抽出できるが、小周波数帯域ではスケールが大きくなるため計算負荷が増大しやすい。

機械学習・深層学習に入力する際は、上記スペクトル特徴を低次元ベクトルとして整形する必要がある。具体的には、ピーク位置・幅・面積・ハーモニクス比を周波数帯域ごとに正規化し、さらに統計量（平均・分散・尖度・歪度）を加えた一次特徴ベクトルを構築する。その上で、主成分分析（PCA）等による次元削減を施し、高次元空間における冗長性を除去した特徴ベクトルを生成する。深層学習モデルを用いる場合は、スペクトルマップを 2D 画像として畳み込みニューラルネットワーク（Convolutional Neural Network: CNN）へ入力し、最終全結合層のアクティベーションを特徴として抽出する手法も有効である。いずれの場合も、ドメイン知識に基づく解釈の余地を維持しつつ、モデル汎用性と学習効率を確保することが設計指針となる。

2.5 MEM の産業応用

本節では産業界，特に製造業において計測データ解析に MEM を活用した先行事例について述べる．以降，MEM 活用の目的別に分類して関連研究を整理する．

加工プロセスの異常検出・最適化

切削加工におけるビビリ振動（チャタリング）の早期検出に MEM を用いた高分解能スペクトル解析が応用されている事例がある [38]．MEM は加工時の切削音や主軸加速度信号の短い時間断面からでも微小な不安定振動の周波数成分を検出できるため，加工中に発生するビビリの兆候を他の周波数成分から分離して検知し，工作機械のパラメータ調整に役立てることができると期待されている．実際に，MEM スペクトルの高いピーク検出精度により工具摩耗や加工異常をリアルタイムで検出し，スピンドル速度や送り速度をフィードバック制御する試みも存在する．また，半導体製造装置など高精度が要求される装置でも，ステージの振動やモータ電流の周期的ゆらぎを MEM で解析することで，ナノスケールの加工・搬送プロセスの異常兆候検知を行う事例が存在する．プロセス計測データへの MEM 適用は，従来法では捉えにくい微弱な周期信号を高解像で検出することで，異常検出の早期化，不良低減，品質向上に貢献している．

非破壊検査・品質評価

製品や素材の欠陥検出を目的とした計測データ解析にも MEM スペクトル推定が活用されている．典型的には，超音波探傷試験（Ultrasonic Testing: UT）においてエコー信号の処理に MEM が応用されている [39]．MEM はエコー信号のスペクトル情報を最大エントロピー原理で抽出し，高い時間分解能で反射体イメージを再構築できる．実例として，肉厚金属中のきわめて小さな欠陥（ボイドやクラック）からのエコーを従来より高精細に画像化するため，MEM に基づく逆フィルタリング手法が検討されている．MEM による UT 画像の解像度の向上は，溶接部の欠陥検出や複合材料内部のきず探傷などに応用され，従来は分離困難だった近接欠陥を明瞭に分離・検出することに寄与する．また，MEM により高周波成分を強調することで粒界雑音を低減し，粗大粒材料中での微小欠陥検出性能を向上させる試みもなされている．このように MEM スペクトル推定は非破壊検査領域で画像分解能の飛躍的向上とノイズ低減に寄与し，製品品質評価の信頼性向上に貢献している．

材料分析・計測精度向上

材料評価の高精度化にも MEM スペクトル推定が活用されている．たとえば，半導体・化学材料分野で用いられる表面分析である X 線光電子分光（X-ray Photoelectron

Spectroscopy: XPS) 等において、スペクトルデータの解析に MEM が応用された例がある [40]. MEM は限られた実験データから情報エントロピーを最大化することでスペクトル推定を行うため、バックグラウンド分離やピーク位置・幅の推定精度が向上する. これは材料特性評価や組成解析の精度向上につながり、新素材開発や不良解析の深化に貢献するものである.

製造業での計測データ解析に MEM の活用が進む一方、FFT のようにブラックボックス的に使える手法と異なり、MEM が導くスペクトル推定の結果はユーザの知見による検証が必要となることが課題となっている. FFT ではノイズフロアとの比較でピーク有意性を議論しやすいが、MEM スペクトルの場合ピークの統計的有意性判断が難しく、判別閾値の設定に明確な指針が不足している.

2.6 本研究の位置づけ

本研究では MEM の理論に基づきその特徴を明らかにし、MEM スペクトルの周波数分解能と推定誤差について現時点で明らかになっていることをまとめ、産業分野で MEM を活用する上で利便性の高い解析フレームワークについて考察する.

第3章 最大エントロピー法による計測データ解析

本章では、MEMによるスペクトル推定の理論と誤差特性について整理し、産業分野での計測データ解析にMEMを汎用的に適用可能とするための解析フレームワークについて考察する。

3.1 MEM 理論

時間に関する不規則変量を $x(t)$ とすると、 τ 時間隔たった二つの変動の積の平均値

$$C(t, \tau) = E[x(t)x(t + \tau)] \quad (3.1)$$

で定義される統計的関数を自己相関関数と呼ぶ。また、隔たり時間 τ をラグ (lag) という。ここでの平均操作は原義的にはアンサンブル平均であるが、定常確率過程では多くの場合これを式(3.2)のように時間平均で置き換えることができ、また時刻 t には無関係で τ のみの関数である。

$$C(\tau) = \overline{x(t)x(t + \tau)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)x(t + \tau) dt \quad (3.2)$$

また自己相関関数 $C(\tau)$ とパワースペクトル $P(f)$ は互いにフーリエ変換の関係にあることが知られている (Wiener-Khinchine の公式)。

$$C(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} P(f) e^{i2\pi f \tau} df \quad (3.3)$$

$$P(f) = \int_{-\infty}^{\infty} C(\tau) e^{-i2\pi f \tau} d\tau \quad (3.4)$$

実際のスペクトル推定では有限長のデータしか得られず、自己相関もある有限のラグまでの推定値しか得られない。このため、古典的なピリオドグラム法では自己相関をある最大ラグで打ち切り (未知の領域を0と仮定し) 窓関数を掛けてフーリエ変換する。しかしこの手法では、窓長や窓形の選択に依存してスペクトルの分解能と推定分散のトレードオフが生じる。一般に周波数分解能を上げれば推定分散が大きくなり、逆に分散を下げる (平滑化を強める) と分解能が劣化する。さらに、自己相関をゼロで打ち切る操作自体が観測データに含まれない情報を仮定することになり、スペクトル推定にバイ

アスを導入することになる．このような問題を克服するために提案されたのが MEM である．

Burg はこの問題に対して，スペクトルのフーリエ変換が相関関数であるという Wiener-Khintchine の関係の制約の下で情報エントロピーを増加させないように未知部分の自己相関関数を推定することが最も合理的であると提案した [1] [2] [3]．

$$\frac{\partial H}{\partial C(k)} = 0 \quad (3.5)$$

ここで H は情報エントロピーである．この最大エントロピー条件をスペクトル $P(f)$ についての関係で表して整理することで，式(3.6)の Yule-Walker 方程式と式(3.7)の MEM スペクトルの式が得られる．

$$\begin{bmatrix} C(0) & C(1) & C(2) & \cdots & C(m) \\ C(1) & C(0) & C(1) & \cdots & C(m-1) \\ C(2) & C(1) & C(0) & \cdots & C(m-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C(m) & C(m-1) & C(m-2) & \cdots & C(0) \\ C(m+1) & C(m) & C(m-1) & \cdots & C(1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_m \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$P(f) = \frac{\Delta t P_m}{\left| \sum_{k=0}^m \gamma_k e^{i2\pi f k \Delta t} \right|^2} \quad (3.7)$$

Burg は係数 γ_k を数値フィルターとみなし，これに信号を正および逆向きに通した時の出力の平均が最小になるように γ_k を決定した．ここで係数 γ_k は予測誤差フィルターと呼ばれる．また P_m は予測誤差の分散である．

3.2 周波数分解能・推定誤差に関する考察

MEM によるスペクトル推定は，短いデータ長からでも極めて高い周波数分解能のスペクトルを得られる点が大きな特徴である．これは最大エントロピー条件により自己相関を無限遠まで外挿することで，有限長データでも事実上無限のインパルス応答長を持つ系を仮定できるためである．例えばデータに含まれるごく近接した周波数成分であっても，適切な次数の予測誤差フィルターを用いれば別個のスペクトルピークとして分離でき，FFT に基づく従来法では困難な細かなピークの識別が可能である．ただし，分解能を極度に高く設定した場合には推定値のばらつき（不確かさ）が増大することが経験的に知られている．一般に，高い周波数分解能を求めれば推定分散が大きくなり，低分

散を求めれば分解能が低下するというトレードオフの関係が存在する．過度に高い予測誤差フィルター次数を選択するとノイズまで精細にフィッティングしてしまい，実際には存在しない狭帯域の偽ピークを生じることがある（過適合による分散の増大）．したがって現実には，必要十分な分解能を持つ適切な予測誤差フィルター次数を選ぶことが重要である．

Burg 法による MEM スペクトル推定は，従来の Welch 法などの古典的手法と比べて，小さなサンプル数でも系統誤差（バイアス）とランダム誤差（分散）の双方が低減できることが示されている．ピリオドグラムのような直接的な FFT 法は理論的にバイアスがない代わりに分散が非常に大きいのに対し，MEM 法は適度なバイアスを許容して分散を大幅に低減しているとも解釈できる．総合的には，MEM は短いデータからでも安定で信頼性の高いスペクトル推定を可能にし，高い分解能と低い推定誤差を両立できる優れた方法である．ただし最適な結果を得るには予測誤差フィルター次数が妥当であることが前提であり，現実のデータに対しては適切な次数を選択しつつ，結果のバイアスやスプリアスピークの有無を検証することが望ましい．

3.3 MEM による計測データ解析フレームワーク



図 3.1 現象のデジタル化の流れ

前節までの考察を踏まえ，計測データに対して MEM を活用するための解析フレームワークについて考察する．図 3.1 に現象のデジタル化の概念図を示す．生産現場で取得されるさまざまな計測データに対してスペクトル解析が行われた場合，素の解析データはまだ価値化されておらず，計測対象に関する理解に基づいて解析データが解釈されることで初めて意味のある情報となる．すなわちそれぞれの生産現場で知りたい特徴量をいかに効率的に抽出するかが課題となる．産業分野にて生産性向上に寄与する強力な解析フレームワークを構築するためには，計測データ取得，スペクトル解析，特徴量抽出の 3つのステップのそれぞれが重要であるが，本研究ではスペクトル解析法として MEM を採用しており，その後段の特徴量抽出は MEM の周波数分解能や推定誤差の特徴を踏まえた方法が選ばれるべきである．

具体的には、MEM 推定スペクトルから有益な情報を抽出するため、あらかじめ想定される特徴周波数リストとスペクトルピークをマッチングさせる仕組みを持つことが有効である。ピーク抽出にはしきい値法だけでなく、統計的な有意性評価を導入しノイズ起因の疑似ピークを排除する工夫も盛り込む。また、スペクトルの連続監視では、時間軸方向にピーク推移を追跡するスペクトルトラッキング手法も取り入れ、異常進展の傾向を把握できるようにする。MEM スペクトルは高解像ゆえにピークが鋭敏に出現するため、その安定性評価（直前区間との比較で再現しているか等）も自動で判定し、信頼できる成分のみを次工程に渡す仕組みが有用である。

計測データ解析フレームワークの考察のため、第4章及び第5章で具体例を用いた検討を行った。第4章では軸受け診断に対する MEM の適用に取り組み、あらかじめ想定される特徴周波数リストとスペクトルピークのマッチングとして、軸受の基本励振周波数に対応するピークの有無を確認し、損傷の検出を行った。第5章では SPM 像の薄膜表面構造の分析のための2次元 MEM 解析手法を提案し、主要ピークと2次元概周期関数と原画像との LSM により特徴量である原子（分子）構造の抽出を試みた。

第4章 産業事例Ⅰ：回転機械の軸受診断

本章は、回転機械軸受の振動データに MEM フレームワークを適用し、高精度な故障診断を実証することを目的とする [41]。得られた結果は、MEM が 産業 IoT 時代の保全要求に応え得ることを示し、第5章の画像解析事例との比較検討の基礎となる。

4.1 産業 IoT 時代における軸受診断の要求と課題

国内の労働人口は下降を続けており、今後も減少の一途をたどると予想されている [42]。働き手が確保できなくなる中で社会活動を維持するためには、AI や IoT 等の先端技術を活用した社会・産業インフラ運用の効率化、自動化が必須である。製造業においては、工場設備の運用および保守に要する工数削減が重要な課題となっている。従来、生産ラインの安定稼働は生産技術者による日々の現場作業で維持されてきたが、これらを遠隔化もしくは自動化することができれば大きな工数削減効果が得られる。工場内のあらゆる設備にセンサーを取り付け、取得された情報をデータセンターに集約し、それらの稼働状況を常時監視するインダストリアル IoT (IIoT) の実用化検討が進められている [43]。

本研究では、将来の IIoT 実現に向け、工場の主要な動力源である回転機械の予知保全手法について検討した。工場ではタービン、ポンプ、空気圧縮機等の回転機械が多く用いられており、その安定運用は工場の生産効率に直結する。回転機械で最も発生件数の多い不具合の一つが機械的な負荷が集中する軸受の故障であり、内輪、外輪、転動体の接触部に、欠け、かじり、フレーキング等の欠陥が生じやすい [44]。欠陥のある軸受をそのまま使い続けると不具合の度合いが進行し、最悪のケースでは軸受の焼損のような重大な設備トラブルに陥ることもある。

軸受の診断法には、振動や音、Acoustic Emission、電流、温度、摩擦粉を分析する方法などがあるが、軸受のハウジングに加速度センサを取り付けて損傷の発生に伴うパルス状の振動を計測する方法が最も良く用いられる。取得した加速度データから固有振動の有無を評価するため、FFT、ウェーブレット変換、カートグラム解析等を用いた時間領域や周波数領域での解析法が提案されている [45] [46]。また、近年では機械学習に基づく分類器で状態判別する方法も検討されており、クラスター分析法、サポートベクターマシン、ディープラーニング等の適用が進められている [47] [48] [49]。

軸受の振動診断を IIoT システムとして実現することを考えたとき、取得するデータ量をいかに最小限にとどめるかが重要な観点となる。スマートファクトリーでは、あらゆる生産設備やユーティリティ設備の稼働データを常時取得するため、ネットワークの逼

迫を防ぐには個々の設備のデータ量がなるべく小さくなるように処理方式設計を行うべきである．そこで本研究では，軸受の振動診断のための周波数解析法として，短い時系列データに対しても高いスペクトル分解能が得られる MEM の適用を検討した．スペクトル分解能は異なるピークを識別できる最小の周波数差であり，通常ピークの半値幅で測られる．過去に Y. Gao と R. B. Randall が低速回転の軸受の振動診断として，鉄道車両の車軸向け円すいころ軸受に MEM を適用した例を報告しており，スペクトル分解能の面で優れていることを示している [50]．本研究では製造業で用いられる高速回転の玉軸受を対象に，短時間の加速度データから故障予兆信号である特徴周波数を推定する目的で MEM を適用し，従来法である FFT との比較からその効果を検討した．円すいころ軸受に比べ，玉軸受は接触面積が小さいため欠陥通過時のインパルスが低振幅かつ短時間となる．インパルス強度が弱いことから高感度なスペクトル推定が必要であり，本論文では MEM スペクトルを計算する際の予測誤差フィルター係数を通常よりも大きくすることで短時間振動データから高分解能な鋭いスペクトルピークを計算することを試みた．従来，予測誤差フィルター係数はデータ長の 5～20% の範囲で選ばれることが多いが⁹⁾，本研究ではデータ長の 70% に設定した．

なお，本論文では軸受の回転数は一定とした．回転速度に揺らぎがあるとスペクトルが広がって診断精度が低下するため，同期サンプリングによる補正等を検討する必要があるが，本論文ではそこまで踏み込まない．

4.2 振動診断手法

4.2.1 IIoT 向け振動診断方式

IIoT システムとして回転機械の振動診断機能を実装した概念図を図 4.1 に示す．モーター等の回転機械に組み込まれた振動センサーのデータ $x(t)$ は工場内に配備された IoT ゲートウェイで信号処理され，特徴量が抽出される．抽出された特徴量のみをインターネットを介してデータセンターに送信することで通信トラフィックを最小限に抑えることができる．データセンターではサーバが，工場から送られてくる特徴量を用いた機械学習を行い，工場で稼働する回転機械に不具合の兆候が無いかわかり監視する．

本論文では，図 4.1 の IoT ゲートウェイに実装するスペクトル解析法について検討した．インターネットと同様に，工場内ネットワークにおいても $x(t)$ のデータ量を極力抑えることが求められる． $x(t)$ のデータ量は「データ長（計測時間）×サンプリングレート×量子化数」で決まるため，データ量を削減するには，データ長，サンプリングレート，量子化数のそれぞれを減らす方法が考えられる．サンプリングレートは検出したい最大周波数，量子化数は検出したい信号強度から比較的簡単に決定できる．一方でデータ長は検出したい最小周波数に関係するが，解析法によってその限界値は大きく異な

る．本論文ではデータ長の削減を観点として，スペクトル解析法として，短い時系列データに対しても高い分解能を持つ MEM を採用し，以下の手順で信号処理することを考えた．

- (1) 回転機械に取り付けられた加速度センサにて振動データを取得する．
- (2) 取得した振動データの包絡線信号をヒルベルト変換により抽出する．
- (3) 抽出した包絡線信号に MEM を適用して包絡線スペクトルを推定する．
- (4) 推定した包絡線スペクトルに含まれる主要なピーク周波数を特徴量として抽出する．
- (5) 抽出した周波数から軸受の異常の有無と異常個所を診断する．

上記の手順において，包絡線スペクトル推定の精度は最終的な診断結果に決定的な影響を及ぼす重要な要素である．本論文では MEM によるデータ長の短い振動データの包絡線スペクトル推定に関して，模擬データおよび実測データを用いた精度の検証を行った．検証には商用ソフトウェアである MATLAB を用い [51]，MEM アルゴリズムは MATLAB に実装されている Burg 法 [1] [2] [3] に基づくプログラムである「pburg」関数を利用した．また，手順(3)の包絡線スペクトル推定に関して従来手法と比較するため，高速フーリエ変換（Fast Fourier Transform: FFT）による計算も同様に MATLAB 上で実施した．MEM の演算量は FFT に比べると数桁大きいですが，近年の高性能 SoC を搭載した IoT ゲートウェイであれば十分実装可能である．一方で無線通信も活用する IIoT システムでは帯域制限が厳しく，通信コストが演算コストを上回るケースが増加している．

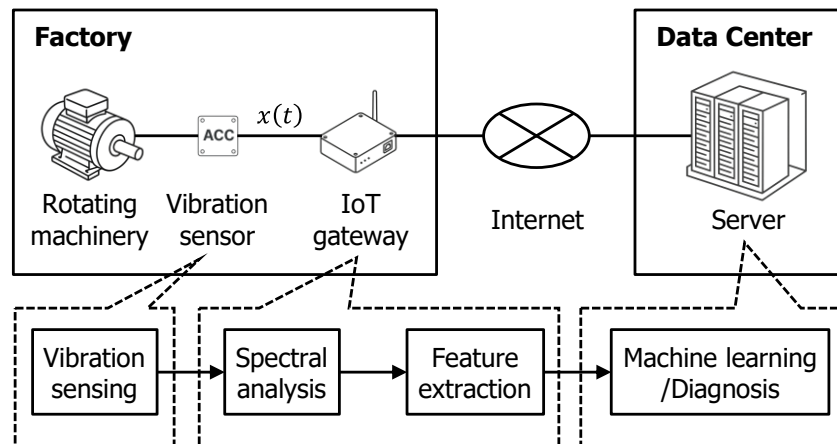


図 4.1 IoT システムによる回転機械の軸受診断コンセプト（出典：[41]より転載）

4.2.2 軸受の固有振動

転がり軸受の損傷個所と励振周波数の関係は軸受の構造パラメータを用いて定式化で

きる [52]. 図 4.2 に玉軸受の構造パラメータを示す. 玉軸受は保持器, 外輪, 内輪, および N 個の玉を要素として構成される. 各要素に損傷が生じた際の基本励振周波数の計算式を表 4.1 に示す (外輪固定の場合). 表 4.1 の式で計算される周波数と, 包絡線スペクトルのピーク周波数を比較評価することで, 玉軸受の各構成要素への損傷の有無を予測することができる. なお, 軸受の損傷による振動は回転軸に垂直な方向に大きなエネルギーを持つため, 本研究では回転軸の径方向に感度を持つように加速度センサーを取り付けることを想定している.

本研究では, データ長の短い軸受振動データに対する MEM のスペクトル推定精度を調査するため, まず, 故障した玉軸受の振動をモデル化した模擬データによる検証を行い, 次に実際に故障した玉軸受の実測データによる検証を行った.

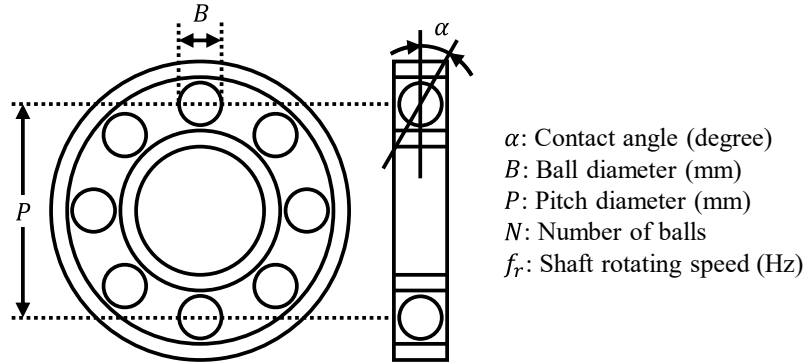


図 4.2 玉軸受の構造パラメータ (出典: [41]より転載)

表 4.1 玉軸受の励振周波数 (外輪固定) (出典: [41]より転載)

Fault frequency name	Equation of fundamental exciting frequency (Hz)
Fundamental Train Frequency (FTF)	$\frac{f_r}{2} \left(1 - \frac{B}{P} \cos \alpha \right)$
Ball Pass Frequency Outer (BPFO)	$N \frac{f_r}{2} \left(1 - \frac{B}{P} \cos \alpha \right)$
Ball Pass Frequency Inner (BPFI)	$N \frac{f_r}{2} \left(1 + \frac{B}{P} \cos \alpha \right)$
Ball Spin Frequency (BSF)	$\left(\frac{P}{B} \right) \frac{f_r}{2} \left[1 - \left(\frac{B}{P} \right)^2 \cos^2 \alpha \right]$

4.3 模擬データでの評価

4.3.1 模擬データの生成

提案手法の評価に用いる軸受振動の模擬データを作成した．例えば，玉軸受の内輪に傷が生じた場合，玉が内輪の傷の箇所を通過する際にインパルス状のリングング振動が発生する．このリングング振動は軸受の構造と軸回転数によって決まる周期で励振されるが，その周期が表 4.1 に示した数式で求められる．

損傷を持つ軸受の振動データ $x(t)$ は以下の式でモデル化できる [53]．

$$x(t) = \sum_{i=1}^l h_i(t) + n(t) \quad (4.1)$$

$$h_i(t) = A_i e^{-\beta(t-\frac{i}{f_a})} \sin \left[2\pi f_c \left(t - \frac{i}{f_a} \right) \right] \quad (4.2)$$

ここで， $h_i(t)$ は i 番目のリングング振動， $n(t)$ は白色ガウス雑音， l はスポット傷により玉が内外輪に衝突する回数， A_i は i 番目のリングング振動の振幅， β はリングング振動の減衰定数， f_a は損傷周波数， f_c はリングング振動の励振周波数である． $n(t)$ は平均 0，分散 σ^2 の正規分布に従い， σ^2 は $\sum_{i=1}^l h_i(t)$ の信号電力に信号対雑音比（SNR）を乗じた値である．

軸受振動の模擬データを式(4.1)，式(4.2)，および表 4.2 のパラメータを用いて作成した．ここで， f_a は次節で評価する軸受振動の実測データの損傷周波数と一致するように， α が 0 度， B が 5.969 ミリメートル， P が 31.623 ミリメートル， N が 8 個， f_r が 25 Hz のときの BPF として表 4.1 の式で計算される 118.88 Hz に設定した．作成した模擬データを図 4.3 に示す．図 4.3 では，80 ミリ秒の観測期間の中で 9 回のリングング振動が発生している．図 4.3 の信号を加速度センサーで計測するためには f_c の振動周波数である 8 kHz を捕捉できる広帯域な製品を選ぶ必要があるが，近年は共振周波数が数十 kHz の汎用加速度センサー IC が安価で入手可能である [54]．

表 4.2 玉軸受振動の模擬データに用いたパラメータ（出典：[41]より転載）

Parameter	Value
Data length	80 ms
Sampling rate	48,828 Hz
Signal-to-noise ratio	30 dB
A_i	Uniform random number between 0.5 and 2.0
β	2,700
f_a	118.88 Hz
f_c	8 kHz

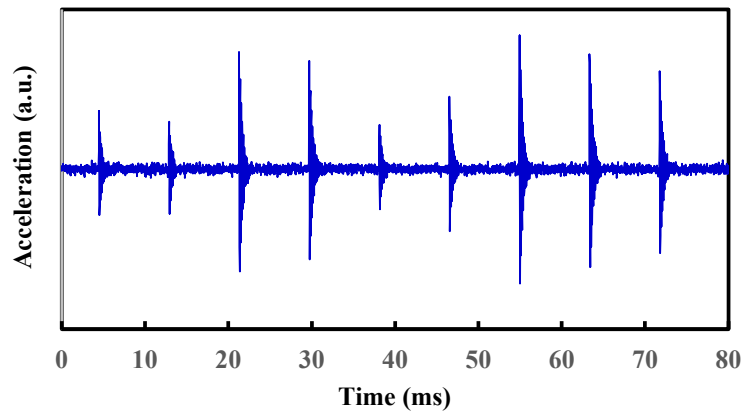


図 4.3 玉軸受振動の模擬データ（出典：[41]より転載）

4.3.2 包絡線信号の抽出

模擬データの包絡線信号をヒルベルト変換により計算した結果を図 4.4 に示す．本論文におけるヒルベルト変換は以下の手順で行った．

- (1) 振動データを離散フーリエ変換で周波数領域に変換
- (2) 正周波数を 2 倍，負周波数をゼロにするマスクを乗算
- (3) 逆離散フーリエ変換で復元して絶対値を計算

本論文では短い時系列データに対するスペクトル分解能を評価するため，図 4.3 の模

擬データの全体（80 ミリ秒）、前半 2 分の 1（40 ミリ秒）、前半 4 分の 1（20 ミリ秒）、前半 8 分の 1（10 ミリ秒）のデータの包絡線スペクトルをそれぞれ計算した．ここで最も短い 10 ミリ秒のデータは f_a に対して約 1.19 周期の長さであり、含まれるリングング振動は 1 回のみとなる．なお、図 4.4 では 80 ミリ秒のデータから計算した包絡線信号を示したが、40 ミリ秒、20 ミリ秒、10 ミリ秒のデータからそれぞれ計算される包絡線信号は厳密には一致しないことに注意を要する．

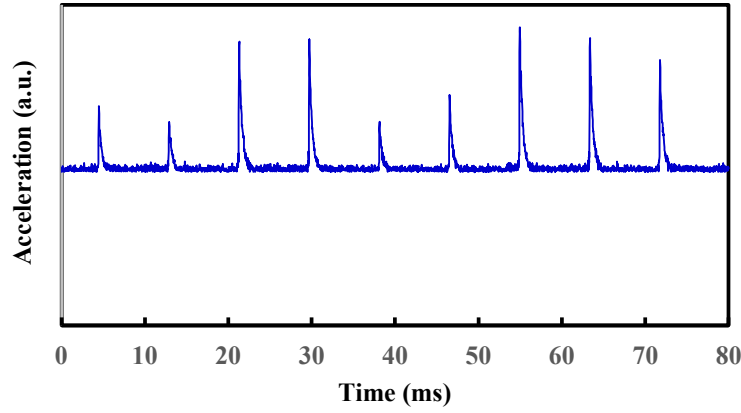


図 4.4 玉軸受振動の模擬データの包絡線信号（出典：[41]より転載）

4.3.3 包絡線スペクトルの推定

MEM では、有限長の時系列信号のスペクトルを計算するために情報エントロピーの概念を導入し、スペクトルのフーリエ変換が相関関数であるという制約のもとで情報エントロピーが最大となるように未知部分の自己相関関数を推定する [1] [2] [3]．MEM スペクトルは以下の式で計算される．

$$P(f) = \frac{P_m \Delta t}{\left| 1 + \sum_{k=1}^m \gamma_k e^{j2\pi f k \Delta t} \right|^2} \quad (4.3)$$

ここで、 f は周波数、 Δt は時系列データの刻み幅、 P_m は予測誤差の分散である． γ_k は予測誤差フィルター係数と呼ばれ、最大エントロピー条件に基づいて導出された次の Yule-Walker 方程式で求められる．

$$\begin{bmatrix} C_0 & C_1 & \dots & C_m \\ C_1 & C_0 & \dots & C_{m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_m & C_{m-1} & \dots & C_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

ここで、 $C_k = C(k\Delta t)$ は離散時系列 $x(k\Delta t)$ の自己相関関数である．式(4.4)で求めた γ_k を式(4.3)に代入することで、情報エントロピーが最大となるように未知部分を推定した自己相関関数に対するパワースペクトル $P(f)$ が得られる．なお、MEM では窓関数は不要である．

MEM スペクトルを計算するには予測誤差フィルターの打ち切り項数 m を与える必要がある． m を大きくすると信号の細かい構造をより詳細に捉えることができるようになるためスペクトル分解能が向上するが、データ長に対して過度に大きな m をとるとピークの分裂や消失・平坦化が生じる [55]．図 4.4 の包絡線信号に対して m の値を変えた MEM で包絡線スペクトルを計算した結果を図 4.5(a)～4.5(d)に示す．模擬データのサンプル点数 N_s (3906 点) に対して m を 30% (1172 点), 50% (1953 点), 70% (2734 点), および 90% (3515 点) の 4 種類に選んだ．なお、本論文ではスペクトル強度を正規化して示した．MEM では鋭い線スペクトルが計算されるため、1Hz あたりの平均パワー量であるピークの高さはその成分波の振幅には対応せず、成分波のエネルギーを求めるには帯域幅で積分する必要がある．ただし、それぞれの成分波の帯域幅を特定することは難しいため、MEM ではスペクトル強度を正規化し、ピーク高さの相対比較でエネルギー比を議論することが多く、本論文でもそれに倣った．

m をデータ長の 30%としたとき (図 4.5(a))、スペクトルは高調波成分が徐々に減衰する単純な構造として推定されているが、 m をデータ長の 50%および 70%とすると (図 4.5(b), 4.5(c))、スペクトルは入力データにより適合するために複雑な構造になっている．また、基本周波数として推定されている f_a の値は m を増やすに従って真の値である 118.88Hz に近づいていることがわかる． m をデータ長の 90%としたとき (図 4.5(d))、検出されるスペクトルピーク数の減少が見られ、過剰あてはめによるピーク減衰が起こっていると考えられる．本論文では短時間時系列データに対するスペクトル分解能をなるべく高くする目的で、 m は時系列信号のデータ長の 70%の値に設定した．

図 4.3 の軸受振動の模擬データの包絡線信号から、MEM を用いて包絡線スペクトルを計算した結果を図 4.6(a)～4.6(d)に示す．80 ミリ秒、40 ミリ秒、20 ミリ秒、10 ミリ秒の 4 種類のデータ長で評価するため、図 4.3 の模擬データの全体、前半 2 分の 1、前半 4 分の 1、前半 8 分の 1 のデータからそれぞれ包絡線信号を抽出し、その包絡線スペクトルを MEM で計算した結果を図 4.6(a), 4.6(b), 4.6(c), 4.6(d)に示す．図 4.6(a)～4.6(d)では周期的なインパルス列の周波数特性である等間隔に並ぶスペクトルピークが推定できている．また、データ長が 80 ミリ秒 (サンプル点数 3906)、40 ミリ秒 (サンプル点数 1953)、20 ミリ秒 (サンプル点数 977) の時、MEM で鋭い線スペクトルが計算されており、最大ピークの周波数はそれぞれ 118.65 Hz, 120.61 Hz, 119.14 Hz であり、リングング振動の周期である 118.88 Hz と 0.2～1.5%の誤差であった．一方で、データ長 10 ミリ秒 (サンプル点数 488) の時、MEM スペクトルはブロードな形状になり、最大ピークが示す周波数は 159.18 Hz で、リングング振動の周波数と 30%以上のずれとなった．

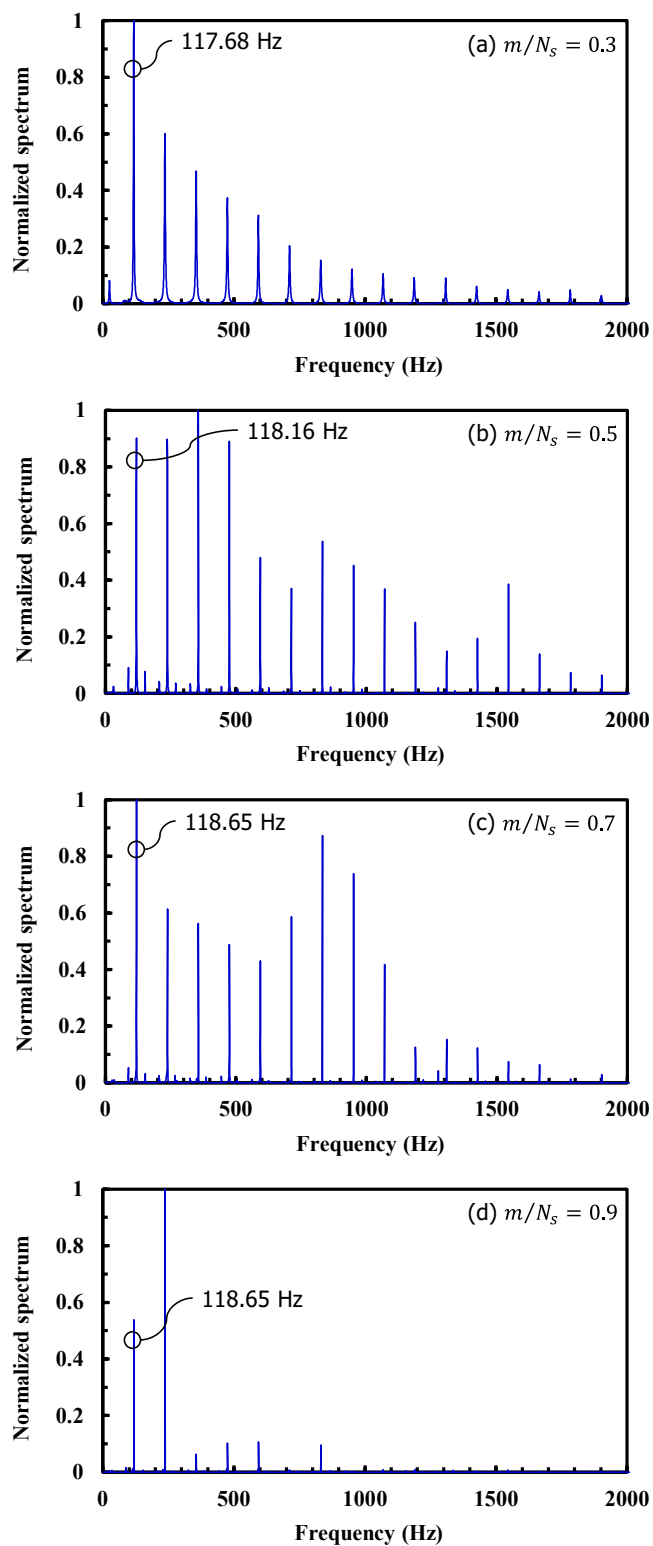


図 4.5 模擬データ（データ長 80 ミリ秒）の包絡線 MEM スペクトル

(m/N_s : (a)0.3, (b)0.5, (c)0.7, (d)0.9) (出典 : [41]より転載)

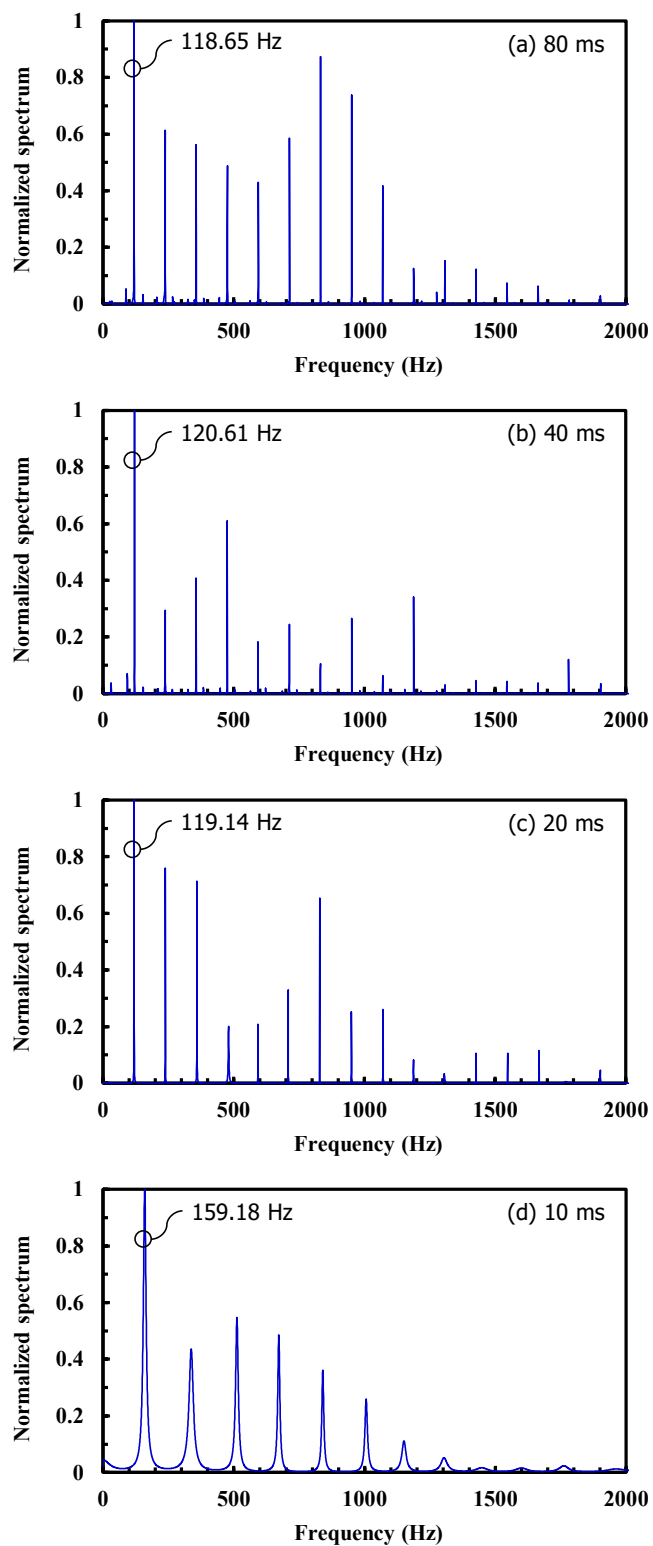


図 4.6 模擬データの包絡線 MEM スペクトル

(データ長 : (a)80ms, (b)40ms, (c)20ms, (d)10ms) (出典 : [41]より転載)

次に同じ模擬データの包絡線スペクトルを FFT を用いて計算した結果を図 4.7(a)～4.7(d)に示す．ここで窓関数は主ローブの半値幅が狭く，スペクトル分解能に優れる矩形窓を採用した．MEM による検討と同様に，図 4.3 の模擬データの全体（80 ミリ秒），前半 2 分の 1（40 ミリ秒），前半 4 分の 1（20 ミリ秒），前半 8 分の 1（10 ミリ秒）のデータからそれぞれ包絡線信号を抽出し，その包絡線スペクトルを FFT で計算した結果を図 4.7(a)，4.7(b)，4.7(c)，4.7(d)に示す．FFT はアルゴリズム上，周波数領域のデータ点数が入力された時系列信号のサンプル点数と同数になるため，短い時系列データに対しては周波数の刻み幅 Δf が粗くなる．図 4.7(a)～4.7(d)を見ると，データ長が短くなるにつれて FFT スペクトルの形状が平滑化されており，ピーク周波数の特定が困難になっている．基本周波数として検出された値は，データ長 80 ミリ秒と 40 ミリ秒の時に 125 Hz，20 ミリ秒と 10 ミリ秒の時に 100 Hz と， Δf が粗いため十分なスペクトル推定精度が得られていないことが分かる．

前述の通り，MEM では情報エントロピーが最大となるように未知部分の自己相関関数を推定することで，短い時系列データからでも高い周波数分解能が得られる．従来のスペクトル解析法では周波数の特定が困難な 1 周期程度のデータからでも鋭いスペクトルピークが計算できることが報告されている [56]．ただし，MEM スペクトルの分解能は利用できる予測誤差フィルターの項数 m に依存し，データが極端に短い場合は十分な項数を取ることができずにピーク位置のシフトやスペクトルの広がりが生じる．図 4.6(d)に示したデータ長 10 ミリ秒では模擬データに含まれるリングング振動は約 1.19 周期と短いため， f_a から大きくシフトしたピークが導出されたと考えられる．MEM スペクトルは式(4.3)で連続関数として与えられるため周波数の刻み幅は任意の細かさで計算できるが，スペクトル分解能（ピークの半値幅）は入力データ長，SNR， m の打ち切り項数， γ_k が与える極の配置等によって決まる下限が存在する [57]．

一方でスペクトル推定法として FFT を用いた場合，スペクトル分解能は与えられたデータ長で決まる周波数の刻み幅 Δf の制約を受ける．データ長を T とすると， $\Delta f = 1/T$ であり，データ長が 80 ミリ秒，40 ミリ秒，20 ミリ秒，10 ミリ秒の時， Δf はそれぞれ 12.5Hz，25Hz，50Hz，100Hz となり，その値がスペクトル分解能の限界となる．通常，工場での回転機械の予兆診断では，様々な機器が発する周期性雑音が存在する環境で軸受の基本励振周波数を検出する必要がある．少なくとも数 Hz 以下のスペクトル分解能が求められる．したがって本論文が対象とする短い時系列データに対しては FFT の適用は困難である．

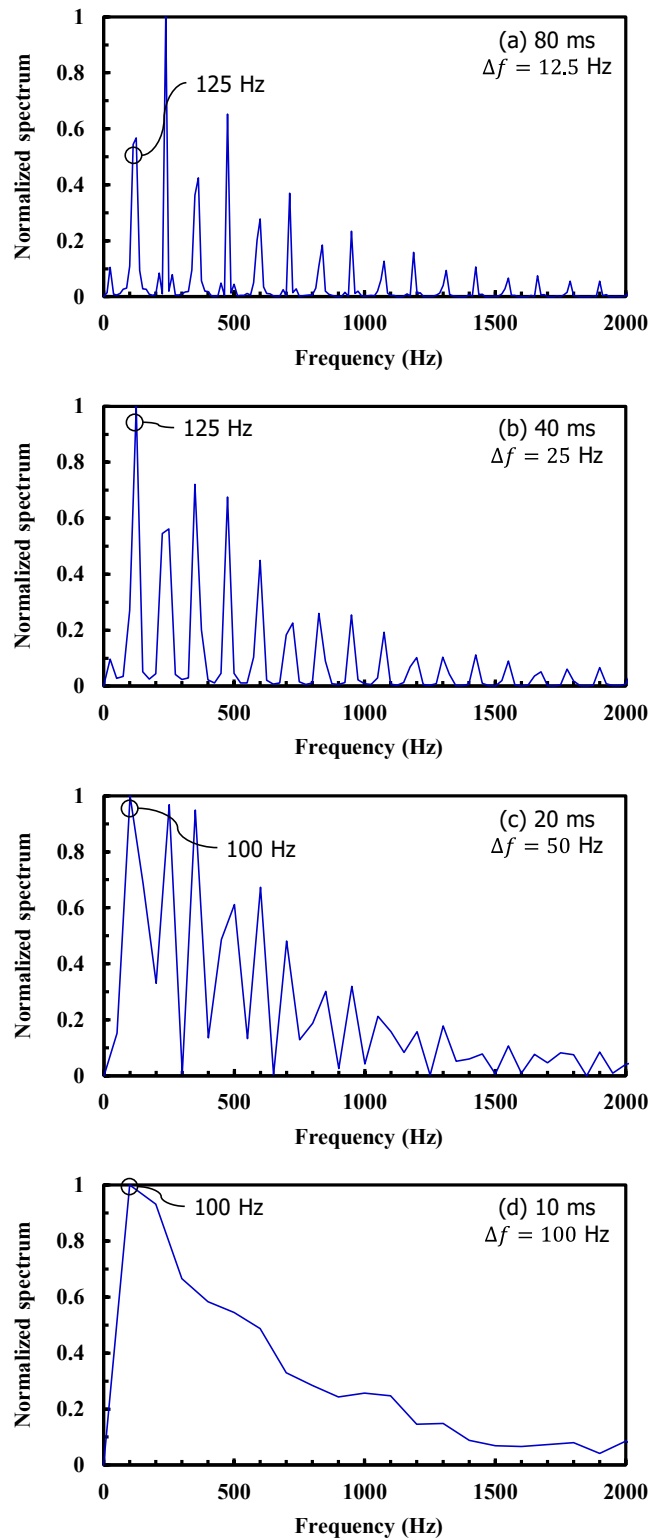


図 4.7 模擬データの包絡線 FFT スペクトル

(データ長 : (a)80ms, (b)40ms, (c)20ms, (d)10ms) (出典 : [41]より転載)

4.4 実測データでの評価

4.4.1 サンプルデータ

提案手法を評価する実測データとして Machinery Failure Prevention Technology Society が公開する軸受故障データセットを利用した [58]. 公開データセットには軸受テスト装置で収集した 20 種類の異なる軸受振動データが含まれるが、本論文ではその中から無荷重条件で計測された内輪故障の軸受振動データをサンプルデータとして用いた. 表 4.3 にサンプルデータの玉軸受の構造パラメータと振動データのサンプリング条件を示す. 公開データセットのデータ長は 3 秒であったが、本論文では最初の 80 ミリ秒のデータのみを切り出して評価に用いた. 公開データセットから切り出したサンプルデータを図 4.8 に示す. 80 ミリ秒の期間内に 9 回のリングング振動が確認できる. 個々のリングング振動の波形は、図 4.3 の模擬データではインパルス状に振動が立ち上がり、その後、指数関数的に減衰するようにモデル化されたが、図 4.8 ではリングング振動の発生は瞬間的ではなく、ある時間幅を持って立ち上がり、ピークに達した後に急速に減衰する特徴を持っている. これは、軸受に発生する損傷が有限の寸法を持つことから、引き起こされるリングング振動も有限時間で立ち上がった後にエネルギーが急速に減衰するためと思われる.

表 4.3 玉軸受振動の実測データの構造パラメータ（出典：[41]より転載）

Parameter	Value
Contact angle (α)	0 degree
Ball diameter (B)	5.969 mm
Pitch diameter (P)	31.623 mm
Number of balls (N)	8
Shaft rotating speed (f_r)	25 Hz
Fault part	Inner race
BPMI	118.88 Hz
Data length	80 ms
Sampling rate	48,828 Hz

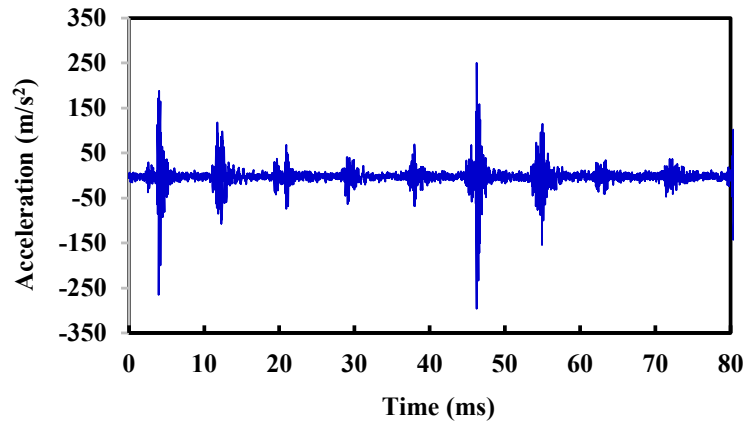


図 4.8 玉軸受振動の実測データ（出典：[41]より転載）

4.4.2 包絡線信号の抽出

図 4.8 の実測データの包絡線信号をヒルベルト変換で求めたものを図 4.9 に示す．ここでは一例として，図 4.8 の実測データの全体（80 ミリ秒）から計算された包絡線信号を示した．

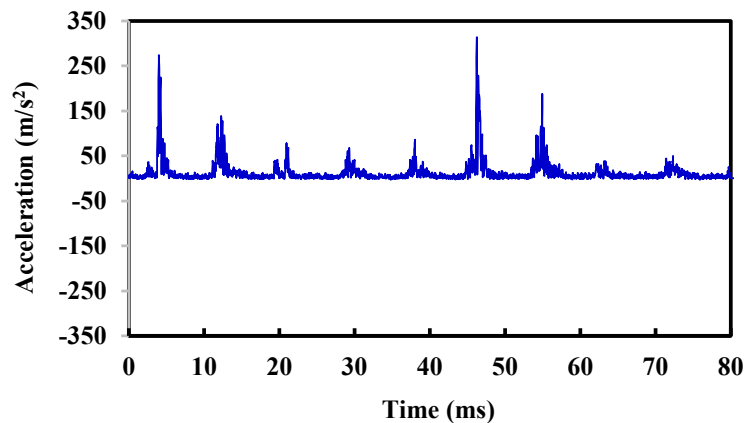


図 4.9 玉軸受振動の実測データの包絡線信号（出典：[41]より転載）

4.4.3 包絡線スペクトルの推定

図 4.8 の実測データの包絡線信号から，MEM を用いて包絡線スペクトルを計算した結果を図 4.10(a)～4.10(d)に示す．図 4.8 の実測データの全体（80 ミリ秒），前半 2 分の 1

(40 ミリ秒), 前半 4 分の 1 (20 ミリ秒), 前半 8 分の 1 (10 ミリ秒) のデータからそれぞれ包絡線信号を抽出し, そのスペクトルを MEM で計算した結果を図 4.10(a), 4.10(b), 4.10(c), 4.10(d)に示す. ここでも模擬データによる評価結果と同様に, MEMにより鋭い線スペクトルが得られている. 一方で, 図 4.10(a)~4.10(d)では図 4.6(a)~4.6(d)で見られた等間隔に並ぶスペクトルピークが明確には現れていない. これは, 図 4.8 の実測データは図 4.3 の模擬データに比べるとリングング振動が有限の立ち上がり時間を持つ上に振幅も小さく, インパルス列としての特徴が不明瞭であるため, スペクトルの高調波成分のパワーが減衰したものと思われる. また, 図 4.10(a)~4.10(d)を見ると, データ長が短くなるに従ってスペクトルピーク数が減少し, 個々のスペクトルピークも徐々にブロードになっているように見える. これは, データ長が短くなって予測誤差フィルターの項数 m が小さくなることで, 表現できるスペクトルピーク数が減少し, 分解能も低下したと解釈できる. 最大ピークが示す周波数は図 4.10(a), 4.10(b), 4.10(c), 4.10(d)でそれぞれ 118.65 Hz, 120.12 Hz, 123.05 Hz, 127.44 Hz であり, BPFI との誤差はそれぞれ 0.2%, 1.0%, 3.5%, 7.2%と, データ長が短くなるにつれて徐々に誤差が大きくなる傾向が見られる. これはデータ長が短くなるにつれてスペクトル分解能は低下し, ピーク周波数の分散は増加するという, スペクトル解析の一般的な原理に対応している.

比較のため, 同じ実測データの包絡線スペクトルを FFT を用いて計算した結果を図 4.11(a)~4.11(d)に示す. ここで窓関数は矩形窓とした. MEM と同様に, 図 4.8 の実測データの全体 (80 ミリ秒), 前半 2 分の 1 (40 ミリ秒), 前半 4 分の 1 (20 ミリ秒), 前半 8 分の 1 (10 ミリ秒) のデータからそれぞれ包絡線信号を抽出し, その包絡線スペクトルを FFT で計算した結果を図 4.11(a), 4.11(b), 4.11(c), 4.11(d)に示す. 模擬データの時と同様に, データ長が短くなるにつれて FFT スペクトルの形状が平滑化されており, ピーク周波数の特定が困難になっている. 基本周波数として検出された値は, データ長 80 ミリ秒で 112.5 Hz, 40 ミリ秒で 125 Hz, 20 ミリ秒で 150 Hz, 10 ミリ秒で 100 Hz であった. FFT では時系列信号のデータ長が短い場合は周波数の刻み幅が粗く, スペクトル推定が困難である.

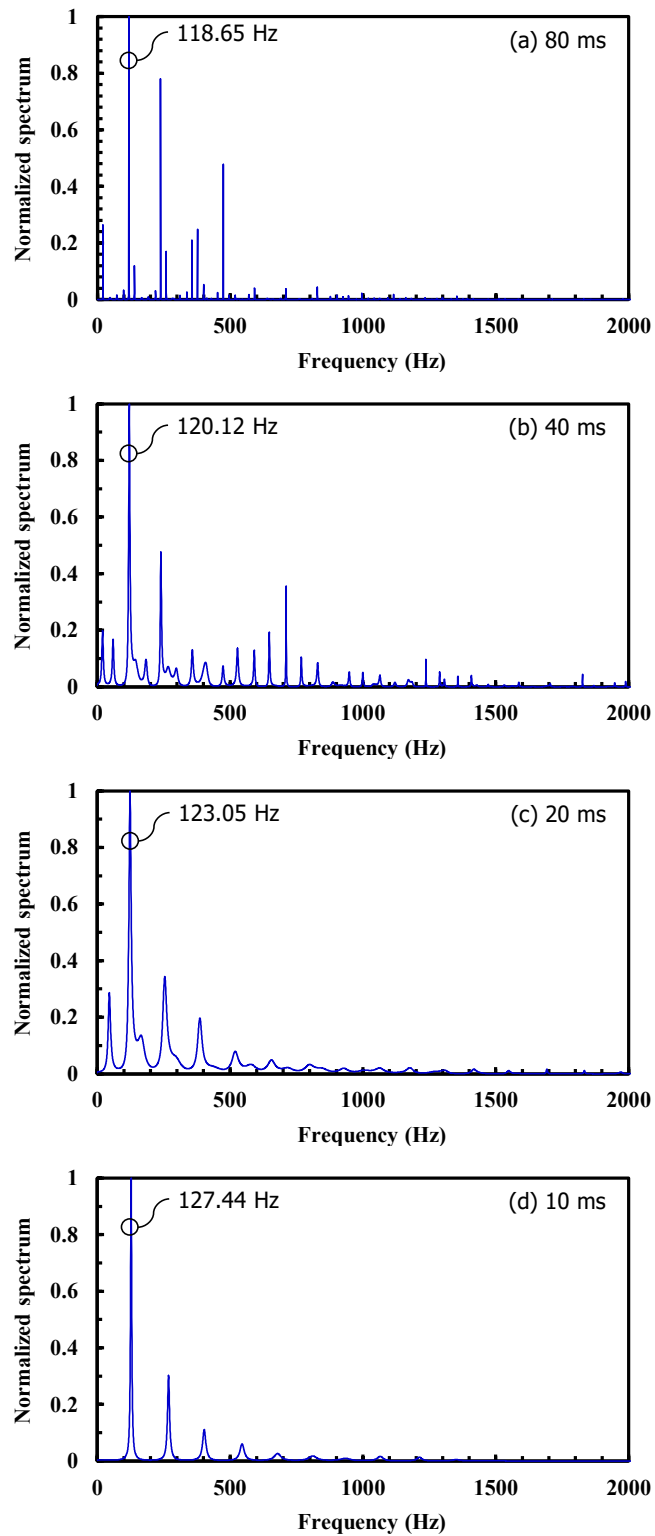


図 4.10 実測データの包絡線 MEM スペクトル

(データ長 : (a)80ms, (b)40ms, (c)20ms, (d)10ms) (出典 : [41]より転載)

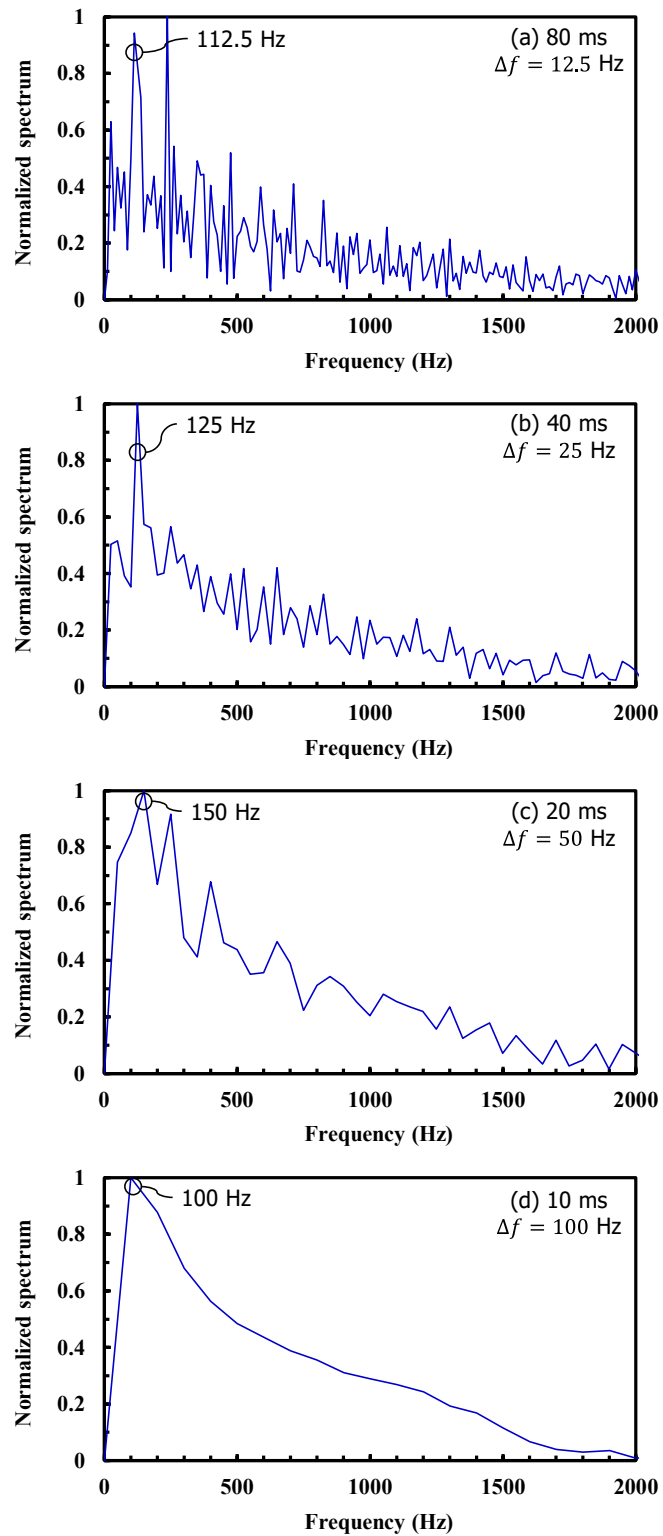


図 4.11 実測データの包絡線 FFT スペクトル

(データ長 : (a)80ms, (b)40ms, (c)20ms, (d)10ms) (出典 : [41]より転載)

4.5 まとめ

将来の IoT システムへの実装を念頭に、MEM を用いた短時間振動データのスペクトル推定による玉軸受診断について検討した。損傷周波数が数波長程度しか含まれない短い振動データに対するスペクトル解析を、模擬データと実測データを用いて評価した結果、MEM スペクトルでは損傷周波数を高精度に推定できることを示した。従来、広く用いられている FFT スペクトルとの比較から、短いデータ長でも鋭いスペクトルピークが得られる MEM は短時間振動データの周波数解析に有効であると言える。一方で、MEM のピーク半値幅は入力データの長さやノイズ特性により変動し、予測誤差フィルターの項数 m の値による影響も大きいことから、それらのパラメータに対する MEM スペクトルの系統的なふるまいの調査が次の課題である。

本研究により、IIoTに向けた回転機械の軸受診断にとって、MEMが有力なスペクトル解析法であることを示した。

第5章 産業事例Ⅱ：走査型プローブ顕微鏡像の解析

本章では、走査型プローブ顕微鏡（Scanning Probe Microscopy: SPM）像に対して2次元に拡張されたMEMと最小二乗法（Least Square Method: LSM）適用による微細周期構造の定量評価手法を検証する[59]。SPM像のノイズ除去法についてはこれまで多くの検討がなされており[60][61][62][63][64]、特にラスタスキャンに起因する $1/f^\beta$ 雑音の原因と対処法が様々に議論されてきた[65][66][67]。産業界でニーズの高い2次元データに対する有効性を示すことで、MEMフレームワークの汎用性を評価する。

5.1 周波数領域解析

不規則データ中に含まれる決定論的変動を推定する問題において、周波数領域解析は有効なアプローチの一つである。確率過程を統計的に扱う必要性から、本研究では周波数領域解析のために、MEMに基づいたスペクトル推定法を採用した。種々のスペクトル推定法の中で、MEMは統計的な考察に裏付けられた唯一の方法である。

5.1.1 パワースペクトルと自己相関関数

2次元パワースペクトル

不規則データは種々の波長の波の合成と考えられる。そのことの数学的表現がフーリエ変換である。いま、ある2次元不規則データを $z(x, y)$ とすると、フーリエ変換は

$$\begin{aligned} Z(f_x, f_y) &= \mathcal{F}[z(x, y)] \\ &= \int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{y=-\infty}^{\infty} z(x, y) e^{-i2\pi f_x x} e^{-i2\pi f_y y} dx dy \end{aligned} \quad (5.1)$$

のように定義され、また逆フーリエ変換は

$$\begin{aligned} z(x, y) &= \mathcal{F}^{-1}[Z(f_x, f_y)] \\ &= \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} Z(f_x, f_y) e^{i2\pi f_x x} e^{i2\pi f_y y} df_x df_y \end{aligned} \quad (5.2)$$

のように定義される．フーリエ成分 $Z(f_x, f_y)$ は周波数 (f_x, f_y) の波の振幅であり， $|Z(f_x, f_y)|^2$ はそのエネルギーを表している．周波数 (f_x, f_y) と成分波のエネルギー $|Z(f_x, f_y)|^2$ の分布の関係はエネルギースペクトルと定義される．

孤立波や過渡的信号など有限区間 $(-X/2 < x < X/2)$ かつ $(-Y/2 < y < Y/2)$ でのみ変動する信号のエネルギーは有限である．しかし区間 X あるいは Y が無限の場合には，単位時間あたりの平均エネルギーをとってパワースペクトル密度 (Power Spectrum Density: PSD) $P(f_x, f_y)$ を定義する．

$$P(f_x, f_y) = \lim_{X, Y \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{X \cdot Y} |Z(f_x, f_y)|^2 \right] = \lim_{X, Y \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{X \cdot Y} Z(f_x, f_y) Z^*(f_x, f_y) \right] \quad (5,3)$$

ところで，不規則データ $z(x, y)$ の平均パワー $\overline{z^2}$ は，

$$\overline{z^2} = \lim_{X, Y \rightarrow \infty} \frac{1}{X \cdot Y} \int_{x=-X/2}^{X/2} \int_{y=-Y/2}^{Y/2} z^2(x, y) dx dy \quad (5,4)$$

である．周波数 (f_x, f_y) と $(f_x + df_x, f_y + df_y)$ の間に含まれる成分波の変動エネルギー $\overline{z^2}$ への寄与率がスペクトル $P(f_x, f_y) df_x df_y$ である．したがって，スペクトルの概念を数式で表現すれば次式となる．

$$\overline{z^2} = \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} P(f_x, f_y) df_x df_y \quad (5,5)$$

2次元自己相関関数

不規則データ $z(x, y)$ について， x 方向に τ_x ， y 方向に τ_y 隔たった二つの変動の積の平均値

$$C(x, y, \tau_x, \tau_y) = E[z(x, y) z(x + \tau_x, y + \tau_y)] \quad (5,6)$$

で定義される統計的関数を自己相関関数 (Auto-Correlation Function: ACF) と呼ぶ．ここに， E はアンサンブル平均を意味する．いま， $z(x, y)$ が不規則現象に共通な一般的性質である定常性とエルゴード性をもつと仮定すると，式(5,6)のアンサンブル平均は空間平均でおきかえることができ，また位置 (x, y) には無関係で (τ_x, τ_y) のみの関数である．

$$\begin{aligned}
C(\tau_x, \tau_y) &= \overline{z(x, y)z(x + \tau_x, y + \tau_y)} \\
&= \lim_{X, Y \rightarrow \infty} \frac{1}{X \cdot Y} \int_{x=-X/2}^{X/2} \int_{y=-Y/2}^{Y/2} z(x, y)z(x + \tau_x, y + \tau_y) dx dy \quad (5,7)
\end{aligned}$$

2次元での Wiener-Khinchine の公式

不規則データの取り扱い上最も重要な統計的概念である ACF と PSD はそれぞれが表している直接の意味は異なるが、互いに関連づけられ一方を知れば他の量はそれから導きうるものである。ある任意の自己相関関数 $C(\tau_x, \tau_y)$ に対して、フーリエの積分定理により、以下の条件を満たす関数 $S(f_x, f_y)$ が存在するはずである。

$$C(\tau_x, \tau_y) = \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} S(f_x, f_y) e^{i2\pi f_x \tau_x} e^{i2\pi f_y \tau_y} df_x df_y \quad (5,8)$$

$$S(f_x, f_y) = \int_{\tau_x=-\infty}^{\infty} \int_{\tau_y=-\infty}^{\infty} C(\tau_x, \tau_y) e^{-i2\pi f_x \tau_x} e^{-i2\pi f_y \tau_y} d\tau_x d\tau_y \quad (5,9)$$

式(5,7)および式(5,8)において、 $\tau_x = \tau_y = 0$ とすれば、

$$\begin{aligned}
C(0,0) &= \lim_{X, Y \rightarrow \infty} \frac{1}{X \cdot Y} \int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{y=-\infty}^{\infty} z^2(x, y) dx dy \\
&= \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} S(f_x, f_y) df_x df_y \quad (5,10)
\end{aligned}$$

となる。式(5,4)、(5,5)および(5,10)から、関数 $S(f_x, f_y)$ はパワースペクトル密度 $P(f_x, f_y)$ に一致することがわかる。式(5,8)と式(5,9)より自己相関関数 $C(\tau_x, \tau_y)$ とパワースペクトル $P(f_x, f_y)$ は互いにフーリエ変換、逆フーリエ変換の関係にあることが明確である。

$$C(\tau_x, \tau_y) = \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} P(f_x, f_y) e^{i2\pi f_x \tau_x} e^{i2\pi f_y \tau_y} df_x df_y \quad (5,11)$$

$$P(f_x, f_y) = \int_{\tau_x=-\infty}^{\infty} \int_{\tau_y=-\infty}^{\infty} C(\tau_x, \tau_y) e^{-i2\pi f_x \tau_x} e^{-i2\pi f_y \tau_y} d\tau_x d\tau_y \quad (5,12)$$

式(5,11)、(5,12)の関係を Wiener-Khinchine の公式という。実際に PSD を求めるには、式(5,11)、(5,12)の関係がしばしば用いられる。

5.1.2 MEM によるパワースペクトル推定

離散的に測定された 2 次元不規則データ $z(n_x, n_y)$ がある．各データ点は一定の距離 Δn の間隔で碁盤目状に配列されているとする． $z(n_x, n_y)$ の自己相関関数 $C(k_x, k_y)$ を得られれば，Wiener-Khinchine の公式にしたがってパワースペクトル $P(f_x, f_y)$ が求められる．理論上， $C(k_x, k_y)$ を得るためには $z(n_x, n_y)$ が無限のデータ長を持つ必要がある．しかし，現実では我々のとりうる測定データは有限であり，したがって k_x および k_y の値がデータ長を超えるような点での $C(k_x, k_y)$ は未知である．現実の測定データのパワースペクトル推定をおこなうためには，この部分からもたらされる不確かさを除かなくてはならない． $C(k_x, k_y)$ の未知部分を推定するために，MEM では情報理論におけるエントロピーの概念を導入している．エントロピーは生起する事象に関する情報がなにもないときに最大値をとる性質がある．いま $z(n_x, n_y)$ は不規則データであるので，その ACF である $C(k_x, k_y)$ もまた不規則データである． $C(k_x, k_y)$ の未知部分の推定は無数の可能性を有している．MEM ではその中からエントロピーが最大のものを $C(k_x, k_y)$ の推定として選り出す．これは $C(k_x, k_y)$ の未知部分を推定する際に，既知範囲内の $C(k_x, k_y)$ が持っている構造以外に，外部から恣意的な情報を付け加えないということに相当する．

2 次元信号に対する MEM

正規確率分布をもつ不規則データのエントロピー H は，

$$H \propto \int_{f_x=-f_{\max}}^{f_{\max}} \int_{f_y=-f_{\max}}^{f_{\max}} \log P(f_x, f_y) df_x df_y \quad (5,13)$$

に比例する．ここに， $f_{\max} = 1/(2\Delta n)$ は Nyquist 周波数と呼ばれる．

いま $C(k_x, k_y)$ が既知である自己相関点 (k_x, k_y) の集合を領域 A と名付ける． $(k_x, k_y) \notin A$ における $C(k_x, k_y)$ を推定するためには，Wiener-Khinchine の関係

$$C(k_x, k_y) = \int_{f_x=-\infty}^{\infty} \int_{f_y=-\infty}^{\infty} P(f_x, f_y) e^{i2\pi f_x k_x \Delta n} e^{i2\pi f_y k_y \Delta n} df_x df_y \quad [(k_x, k_y) \in A] \quad (5,14)$$

の制約のもとでエントロピー H を最大化させることが要求される．すなわち，

$$\frac{\partial H}{\partial C(k_x, k_y)} = 0 \quad [(k_x, k_y) \notin A] \quad (5,15)$$

が必要とされる．

パワースペクトル $P(f_x, f_y)$ についての関係で式(5,15)を表すと、式(5,13)および(5,14)より

$$\int_{f_x=-f_{\max}}^{f_{\max}} \int_{f_y=-f_{\max}}^{f_{\max}} \frac{e^{-i2\pi f_x k_x \Delta n} e^{-i2\pi f_y k_y \Delta n}}{P(f_x, f_y)} df_x df_y = 0 \quad [(k_x, k_y) \notin A] \quad (5,16)$$

でなければならない。これは $1/P(f_x, f_y)$ が領域 A に含まれる自己相関観点の数と同じ項数の有限級数で展開表示されることを示している。

$$\frac{1}{P(f_x, f_y)} = \sum_{(k_x, k_y)} \sum_{\in A} \lambda(k_x, k_y) e^{-i2\pi f_x k_x \Delta n} e^{-i2\pi f_y k_y \Delta n} \quad (5,17)$$

ここで係数 $\lambda(k_x, k_y)$ は $1/P(f_x, f_y)$ をパワースペクトルとする ACF と見ることができる。その結果、2次元 MEM-PSD は以下のように与えられる。

$$P(f_x, f_y) = \frac{1}{\sum \sum_{(k_x, k_y) \in A} \lambda(k_x, k_y) e^{-i2\pi f_x k_x \Delta n} e^{-i2\pi f_y k_y \Delta n}} \quad (5,18)$$

式(5,14), (5,18)をみると、自己相関関数 $C(k_x, k_y)$ と係数 $\lambda(k_x, k_y)$ は互いにフーリエ変換を介し、パワースペクトル $P(f_x, f_y)$ を経由して接合されていることがわかる。また、パワースペクトル $P(f_x, f_y)$ は係数 $\lambda(k_x, k_y)$ を用いて計算できる。

MEMにおいて、パワースペクトルを求めることはすなわち λ 係数の値を求めることに相当する。1次元信号に対するMEMの場合、 λ 係数の推定はBurgアルゴリズムを利用することで達成できる[1][2][3]。しかし2次元信号に対するMEMの場合、係数 $\lambda(k_x, k_y)$ の推定は高次の非線形問題となり、これを求めるために過去に様々な研究がなされた[68][69][70][71][72]。

反復アルゴリズム

係数 $\lambda(k_x, k_y)$ を推定するため、本研究ではLimとMalikによって提案された反復アルゴリズムを採用した[72]。式(5,14), (5,18)より、自己相関関数 $C(k_x, k_y)$ は係数 $\lambda(k_x, k_y)$ から得ることができ、逆もまた可であることが明白である。相関領域において、ACFの推定が既知の $C(k_x, k_y)$ と $(k_x, k_y) \in A$ の部分で一致するならば、そのときの $P(f_x, f_y)$ は $z(n_x, n_y)$ のPSD推定の一つである[式(1,14)より]。係数領域において、 $\lambda(k_x, k_y)$ が $(k_x, k_y) \notin A$ の部分ですべてゼロになるならば、そのときの $P(f_x, f_y)$ は最大エントロピー条件を満たすPSDの一つである[式(1,17)より]。これら二つの条件を同時に満たした

とき, $P(f_x, f_y)$ は $z(n_x, n_y)$ の唯一の MEM-PSD となる. 反復アルゴリズムの概要は以下のようになる.

- ① $\lambda(k_x, k_y)$ の推定の初期値を与える.
- ② ステップ①で与えられた $\lambda(k_x, k_y)$ の推定から自己相関関数の推定 $C'(k_x, k_y)$ を得る.
- ③ $(k_x, k_y) \in A$ での $C'(k_x, k_y)$ を既知の $C(k_x, k_y)$ で補正する.
- ④ ステップ③で補正された自己相関関数の推定から新たな λ 係数の推定 $\lambda'(k_x, k_y)$ を得る.
- ⑤ $(k_x, k_y) \notin A$ での $\lambda'(k_x, k_y)$ を切り捨てる.

以上で一回の反復が完了する. 収束解が得られるまで, この反復手順が繰り返される.

上記の単純な反復アルゴリズムでは多くの場合スペクトルのゼロ交差問題 (zero crossing problem) が発生する. ゼロ交差は, $(k_x, k_y) \in A$ での $C'(k_x, k_y)$ を既知の $C(k_x, k_y)$ で補正した後に (ステップ③), 式(5,14)および(5,17)にしたがって逆数演算を行う際と, $(k_x, k_y) \notin A$ での $\lambda'(k_x, k_y)$ の切捨ての後に (ステップ⑤), 式(5,18)にしたがって逆数演算を行う際に問題となる. もしパワースペクトルの推定が一箇所でもゼロ交差を持つと, その逆数は無限大に発散してしまう. ゼロ交差問題を防ぐために, Lim と Malik はあるパラメータを線形補間することで反復アルゴリズムを修正した. これは収束速度の向上もまた意図されている.

2次元 MEM-PSD 推定のための反復アルゴリズムの手順を図 5.1 の左側に示す (周波数領域解析). ここに, $C^0(k_x, k_y)$ と $\lambda^0(k_x, k_y)$ はそれぞれ ACF と λ 係数の推定の初期値, L はフーリエ変換に代用される有限離散フーリエ変換 (Discrete Fourier Transform: DFT) の長さ, ε は既知の $C(k_x, k_y)$ と $C'(k_x, k_y)$ の間の誤差, $C^m(k_x, k_y)$ と $\lambda^m(k_x, k_y)$ はそれぞれ ACF と λ 係数の m 回目の反復後の推定値, p_1 と p_2 はゼロ交差問題を防ぐために線形補間されたパラメータである.

図 5.1 の左側に示したアルゴリズムを用いて 2次元 MEM-PSD の推定を実行するためには, いくつか議論すべき問題がある. 以下, それらについて述べる.

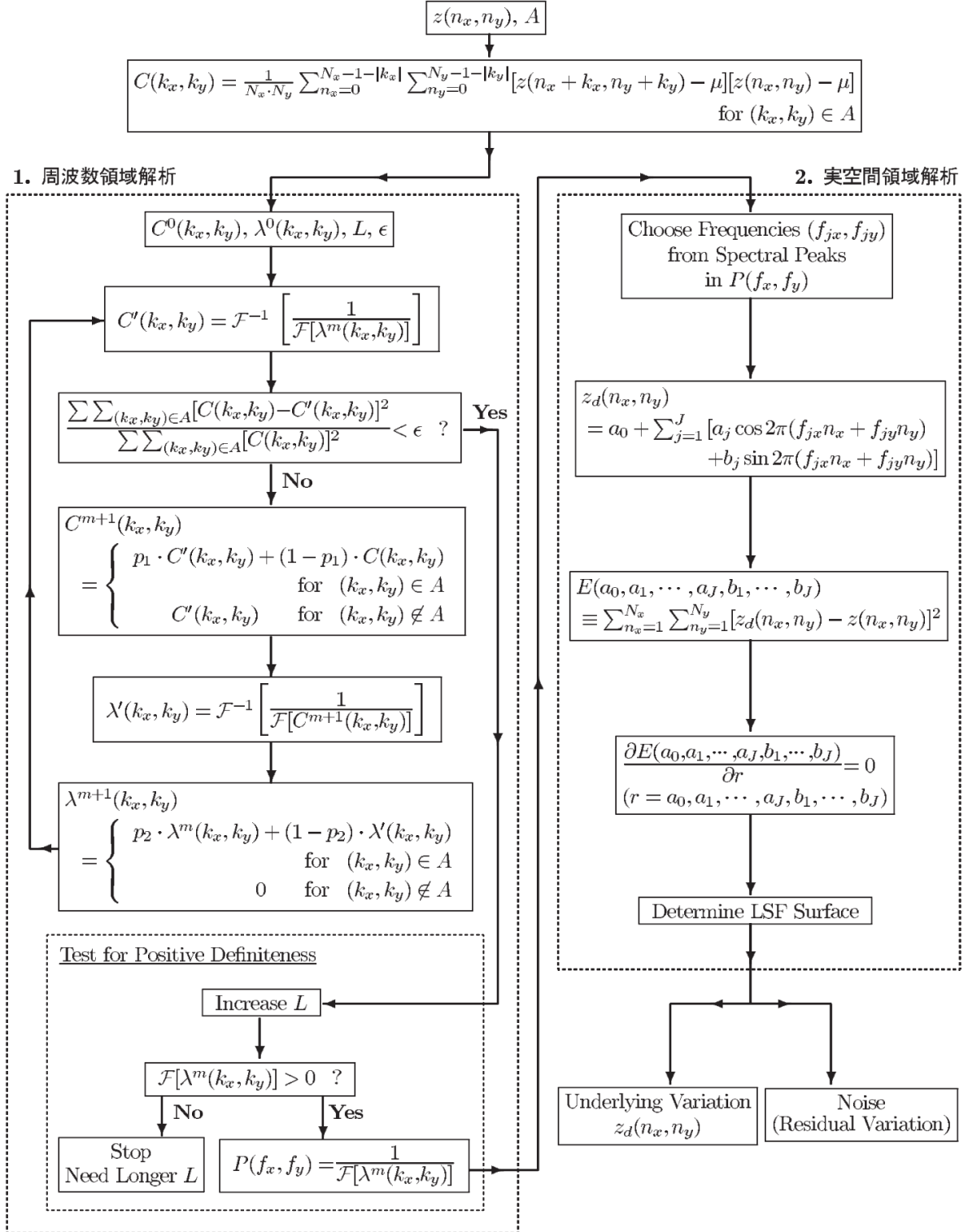


図 5.1 2次元 LSM-MEM 処理の流れ図 左側：反復アルゴリズムによる 2 次元 MEM-PSD の計算（周波数領域解析）．右側：2 次元三角関数多項式の LSF の計算（実空間領域解析）
（出典：[59]より転載）

離散フーリエ変換の長さの決定

理論上、相関領域と係数領域との往復を行うためにはフーリエ変換が必要である。現実の計算では、フーリエ変換は DFT によって代用される。そのため、DFT を行う領域の範囲 $L \times L$ を事前に決める必要がある。MEM は本質的には、 $(k_x, k_y) \in A$ において既知である $C(k_x, k_y)$ を、 $(k_x, k_y) \notin A$ について外挿する試みである。そのため、 L は拡張される $C(k_x, k_y)$ が $L \times L$ の外側で本来的にゼロになるように設定されるべきである。そのような L を選ぶことによって、次項で言及されるような DFT、あるいは FFT が内包する諸問題を最小限にすることができる。ただし、 L の長さは反復計算の速度に大きく影響するため、 L は必要最小限の長さで設定されることが望まれる。反復アルゴリズムの最終段階で、設定された L が適切なものであったかどうかを調査する。 $\lambda(k_x, k_y)$ の収束解が得られた後に、 L の長さを反復計算に用いられたものよりも増やした状態でもう一度、得られた $\lambda(k_x, k_y)$ が正定値 (positive definiteness) であるかどうかを調べる。最初に設定した $L \times L$ について、反復計算によって得られた $\lambda(k_x, k_y)$ および $C(k_x, k_y)$ は正定値である。最初に設定した $L \times L$ の外側で $C(k_x, k_y) = 0$ になっていれば、 $L \times L$ の領域を広くしても $\lambda(k_x, k_y)$ および $C(k_x, k_y)$ の正定値は保たれるはずである。もし、増加させた L に関して、 $\lambda(k_x, k_y)$ の正定値が保たれていなければ、最初に置いた L は不適切であったということになり、反復計算は新たな L をもって最初からやり直される。

初期値 $C^0(k_x, k_y)$, $\lambda^0(k_x, k_y)$ の決定

ACF と λ 係数の推定の初期値 $C^0(k_x, k_y)$ と $\lambda^0(k_x, k_y)$ を決定しなくてはならない。適切な $C^0(k_x, k_y)$ と $\lambda^0(k_x, k_y)$ の設定がなされないと、解の収束は円滑に前進しない。反復回数 m の増加に対して誤差 ε が安定に減少せず、振動や発散などの挙動を示すことがある。本研究では、Lim と Malik の提案に従い、 $C^0(k_x, k_y)$ と $\lambda^0(k_x, k_y)$ を以下のように与えた。

$$C^0(k_x, k_y) = C(0,0) \cdot \delta(k_x, k_y) \quad (5,19)$$

$$\lambda^0(k_x, k_y) = \frac{1}{C(0,0)} \cdot \delta(k_x, k_y) \quad (5,20)$$

ここに、領域 A は原点 $(k_x, k_y) = (0,0)$ を含み、 $C(0,0) > 0$ であることを想定している。

パラメータ p_1, p_2 の決定

p_1 と p_2 の決定には二つの考慮すべき事柄がある．一つ目は $C^{m+1}(k_x, k_y)$ と $\lambda^{m+1}(k_x, k_y)$ を正定値にすることであり，二つ目は可能な限り p_1, p_2 を 0 に近い値にとることである．後者はアルゴリズムの進行速度を最速に保つために要請される．しかし，Lim と Malik によると， p_1 と p_2 を $C^{m+1}(k_x, k_y)$ と $\lambda^{m+1}(k_x, k_y)$ を正定値とする最小値に選んだとき，アルゴリズムは極限軌道に落ち着き，収束は得られない．

p_1 と p_2 の値を決めるために，Lim と Malik が用いた方法は以下のとおりである．

● p_1 の決定

(i) $\min_{(f_x, f_y)} [\mathcal{F}[C(k_x, k_y) - C'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]] < 0$ のとき

$$p_1^{m+1} = \max \left[p_1^m, (1 - \gamma) \cdot \frac{\min_{(f_x, f_y)} [\mathcal{F}[C'(k_x, k_y)]]}{\left| \min_{(f_x, f_y)} \mathcal{F}[(C(k_x, k_y) - C'(k_x, k_y)) \cdot w(k_x, k_y)] \right|} \right]$$

(ii) $\min_{(f_x, f_y)} [\mathcal{F}[C(k_x, k_y) - C'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]] \geq 0$ のとき

$$p_1^{m+1} = p_1^m$$

● p_2 の決定

(i) $\min_{(f_x, f_y)} [\mathcal{F}[\lambda'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]] < 0$ のとき

$$p_2^{m+1} = \left[1 + (1 - \gamma) \cdot \left(\frac{1}{p_{\min}} - 1 \right) \right] \cdot p_{\min}$$

$$\text{ただし, } p_{\min} = \frac{|\min_{(f_x, f_y)} \mathcal{F}[\lambda'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]|}{\min_{(f_x, f_y)} \mathcal{F}[\lambda^m(k_x, k_y)] + |\min_{(f_x, f_y)} \mathcal{F}[\lambda'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]|}$$

(ii) $\min_{(f_x, f_y)} [\mathcal{F}[\lambda'(k_x, k_y) \cdot w(k_x, k_y)]] \geq 0$ のとき

$$p_2^{m+1} = 0$$

ここに， p_1^m と p_2^m はそれぞれ m 回目の反復での p_1 と p_2 の値， $p_{\min}$ は $\lambda^{m+1}(k_x, k_y)$ を半正定値 (positive semi-definiteness) とする p_2 の最小値， $\max[,]$ は二つの独立変数の最大値， $\min_{(f_x, f_y)}[]$ は (k_x, k_y) についての関数の最小値である． $w(k_x, k_y)$ は以下のような方形窓である．

$$w(k_x, k_y) = \begin{cases} 1 & [(k_x, k_y) \in A] \\ 0 & [(k_x, k_y) \notin A] \end{cases} \quad (5,21)$$

γ は $0 < \gamma < 1$ で与えられる収束速度パラメータである． γ の初期値は 0.5 程度の値にとり，反復の前後で収束誤差 ε が増加するようなら減らす．要するに，最初，アルゴリズムは迅速に求めたい解に向かい，そして収束に近づくにつれ，必要に応じてその速度を落としていく．本研究では，上記の方法を用いて p_1 と p_2 の決定を行った．

収束条件の決定

反復計算を終えるために、どの時点で収束が得られたかを判断する条件を設定する必要がある。我々はある収束誤差 ε を用いて、以下の条件が満たされたときに解は収束したと判断する。

$$\frac{\sum \sum_{(k_x, k_y) \in A} [C(k_x, k_y) - C'(k_x, k_y)]^2}{\sum \sum_{(k_x, k_y) \in A} [C(k_x, k_y)]^2} < \varepsilon \quad [(k_x, k_y) \in A] \quad (5,22)$$

数値計算の有限精度に起因して、式(5,22)の左辺は厳密に0にはならない。 ε の値は対象とするデータに応じて、無視できる非常に小さな値に設定されなくてはならない。

5.1.3 2次元FFTの欠点

FFTの本来の意味は、無限空間にわたる周期的データのフーリエ級数展開である。すなわち、ある有限範囲($0 \leq n_x \leq N_x, 0 \leq n_y \leq N_y$)において観測された不規則データ $z(n_x, n_y)$ のFFTによって得られる結果は、 $z(n_x, n_y)$ が周期的に無限に繰り返されたデータのフーリエ係数の値である。ここで注意すべき点は二つある。第一に、FFTが対象とする $z(n_x, n_y)$ が周期的に無限に繰り返されたデータと確率過程的現象の標本である $z(n_x, n_y)$ とは本質的に無関係なものである。そして第二に、FFTはフーリエ級数展開であるため、それによって得られる結果は離散的に存在するフーリエ係数の値であって、それは連続的に分布するスペクトルとは異質なものである。

しかしながら、FFTはそのアルゴリズムの理解のしやすさと、圧倒的な計算速度の速さ、という実用上の優位点を持っている。そのため、FFTはその理論面・性能面における欠点にもかかわらず、幅広い分野でスペクトル推定法の代用として利用されている。離散的に計測された2次元不規則データ $z(n_x, n_y)$ （大きさは $N_x \times N_y$ ）のFFTおよび逆FFTは次式で表される。

$$Z(l_x, l_y) = \frac{1}{N_x \cdot N_y} \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} z(n_x, n_y) e^{-i2\pi \frac{l_x n_x}{N_x}} e^{-i2\pi \frac{l_y n_y}{N_y}} \quad (5,23)$$

$$\begin{pmatrix} l_x = 0, 1, 2, \dots, N_x - 1 \\ l_y = 0, 1, 2, \dots, N_y - 1 \end{pmatrix}$$

$$z(n_x, n_y) = \sum_{l_x=0}^{N_x-1} \sum_{l_y=0}^{N_y-1} Z(l_x, l_y) e^{i2\pi \frac{l_x n_x}{N_x}} e^{i2\pi \frac{l_y n_y}{N_y}} \quad (5,24)$$

$$\begin{pmatrix} n_x = 0, 1, 2, \dots, N_x - 1 \\ n_y = 0, 1, 2, \dots, N_y - 1 \end{pmatrix}$$

式(5,23), (5,24)とフーリエ変換の定義式(5.1), (5.2)を比較すると, 本来, フーリエ変換では積分範囲は $-\infty$ から ∞ までであるものが, FFT ではデータの観測範囲内だけでの総和におきかえられている. これは測定データ $z(n_x, n_y)$ を一周期とする無限周期関数に対するフーリエ級数展開を行うことに相当する. 現実的には, 観測範囲外で信号が周期的に繰り返されているとは考えにくく, そのような恣意的な仮定をおくことは観測した物理現象に矛盾する.

測定データの周期的繰り返しを仮定するためには, データの上縁と下縁, および左縁と右縁はつねに一致しなくてはならない. しかし多くの場合, それらの接合は不連続になる. この不連続性を解消するために, FFT では前処理として測定データに窓関数を掛ける. これにより, データは縁の部分は全て 0 になり, 接合は連続的になる. ただし, 窓関数は測定データを著しく変形させるものである. これは重大なデータ加工にあたるものである.

5.2 実空間領域解析

離散的な (n_x, n_y) に対してだけ与えられている不規則データ $z(n_x, n_y)$ より, その決定論的変動 $z_d(x, y)$ を連続的な (x, y) で得るために, 本研究では統計学的手法である LSM を利用した.

5.2.1 2次元三角関数多項式

$z(n_x, n_y)$ の決定論的変動を以下のような一般化された2次元三角関数多項式 $z_d(x, y)$ によって表現する.

$$z_d(x, y) = a_0 + \sum_{j=1}^J [a_j \cos 2\pi(f_{jx}x + f_{jy}y) + b_j \sin 2\pi(f_{jx}x + f_{jy}y)] \quad (5,25)$$

ここに, f_{jx} と f_{jy} は j 番目の成分の周波数, a_j と b_j は j 番目の成分の振幅, a_0 は水準値, J は成分の総数である. 式(5,25)は STM 像中の各走査線の基底的部分を表すために土田らによって用いられた数式表現を単純に2次元拡張したものである [64].

5.2.2 最小二乗法

式(5,25)を用いて, 誤差の評価関数 E を次式のような残差二乗和で定義する.

$$E(a_0, a_1, \dots, a_J, b_0, b_1, \dots, b_J) \equiv \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} [z_d(n_x, n_y) - z(n_x, n_y)]^2 \quad (5,26)$$

未定係数 $a_0, a_1, \dots, a_J, b_0, b_1, \dots, b_J$ の値は式(5,26)を最小にする組が選ばれる．すなわち，以下の条件が要求される．

$$\frac{\partial E(a_0, a_1, \dots, a_J, b_0, b_1, \dots, b_J)}{\partial r} = 0 \quad (5,27)$$

$$(r = a_0, a_1, \dots, a_J, b_0, b_1, \dots, b_J)$$

式(5,27)は以下の $2j + 1$ 個の条件式を導く．

(i) $r = a_0$ のとき

$$2 \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} [z_d(n_x, n_y) - z(n_x, n_y)] = 0$$

(ii) $r = a_j$ ($j = 1, 2, \dots, J$) のとき

$$2 \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} \{ [z_d(n_x, n_y) - z(n_x, n_y)] \cos 2\pi (f_{jx} n_x + f_{jy} n_y) \} = 0$$

(iii) $r = b_j$ ($j = 1, 2, \dots, J$) のとき

$$2 \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} \{ [z_d(n_x, n_y) - z(n_x, n_y)] \sin 2\pi (f_{jx} n_x + f_{jy} n_y) \} = 0$$

よって，解くべき正規方程式は次式になる．

$$\begin{bmatrix} N_x \cdot N_y & \sum C_1 & \sum S_1 & \cdots & \sum C_J & \sum S_J \\ \sum C_1 & \sum C_1^2 & \sum C_1 S_1 & \cdots & \sum C_1 C_J & \sum C_1 S_J \\ \sum S_1 & \sum C_1 S_1 & \sum S_1^2 & \cdots & \sum C_J S_1 & \sum S_1 S_J \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \sum C_J & \sum C_1 C_J & \sum C_J S_1 & \cdots & \sum C_J^2 & \sum C_J S_J \\ \sum S_J & \sum C_1 S_J & \sum S_1 S_J & \cdots & \sum C_J S_J & \sum S_J^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ \vdots \\ a_J \\ b_J \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum z \\ \sum z C_1 \\ \sum z S_1 \\ \vdots \\ \sum z C_J \\ \sum z S_J \end{bmatrix} \quad (5,28)$$

ただし，以下の省略表記を用いた．

$$\Sigma : \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1}$$

$$C_j : \cos 2\pi (f_{jx} n_x + f_{jy} n_y)$$

$$S_j : \sin 2\pi (f_{jx} n_x + f_{jy} n_y)$$

$z : z(n_x, n_y)$

式(5,28)において、未定係数は各成分の振幅 a_j 、 b_j と周波数 (f_{jx}, f_{jy}) であり、その個数は条件の数を超えている。すなわち、式(5,26)のLSF計算は非線形問題となり、これを解くためには膨大な反復計算を必要とし、かつ、得られた解が一意的な最適解だという保証がない。

本論文では、 (f_{jx}, f_{jy}) の値として2次元MEM-PSDのピークが指し示す周波数値を用いることで式(5,28)の線形化を実現する（次節）。周波数 (f_{jx}, f_{jy}) が既知であるとき、式(5,26)の自由度は条件式の数と一致するので、全ての未定係数の値はLSFによって一意的に決定される。

5.3 決定論的変動の抽出

本章で提案する処理方法は不規則データに対するデータ解析法であるLSM-MEMの2次元拡張である。この2次元LSM-MEMは反復アルゴリズムによる2次元MEMスペクトル推定法と三角関数多項式のLSFを組み合わせることにより実現した。本節では、2次元LSM-MEMの具体的な処理の手順を説明する。

5.3.1 自己相関関数の計算

反復アルゴリズムを用いて2次元MEM-PSDを計算するためには、対象とするデータのACFの一部を既知のものとして事前に与えなくてはならない。本研究では、2次元不規則データ $z(n_x, n_y)$ ($n_x = 0, 1, \dots, N_x - 1, n_y = 0, 1, \dots, N_y - 1$)の自己相関関数 $C(k_x, k_y)$ を計算するために、以下の式を用いる。

$$C(k_x, k_y) = \frac{1}{N_x \cdot N_y} \sum_{n_x=0}^{N_x-1-|k_x|} \sum_{n_y=0}^{N_y-1-|k_y|} [z(n_x + k_x, n_y + k_y) - \mu][z(n_x, n_y) - \mu] \quad [(k_x, k_y) \in A] \quad (5,29)$$

ここに、 μ は $z(n_x, n_y)$ の平均値である。式(5,29)において、 k_x および k_y の絶対値が大きくなるにつれて空間平均に用いる標本数が減少するが、分母は N_x, N_y で一定である。これは、 $n_x \geq N_x$ もしくは $n_y \geq N_y$ に対し $z(n_x, n_y) = 0$ と見なすことに相当する。このACFの定義は、1次元MEMスペクトル推定のYule-Walker法において、JenkinsとWattsによって「推定の二乗誤差が最も小さい」とされたACF計算法の単純な2次元拡張にあたるものである[73]。

5.3.2 処理の手順

2次元 LSM-MEM 処理の全体的な流れを図 5.1 に示し、以下に各工程の説明を順次与える。

① 対象データと既知の相関領域の範囲の設定

処理の対象の 2 次元不規則データ $z(n_x, n_y)$ を設定する。必要なスペクトル分解能と $z(n_x, n_y)$ のデータ範囲 $N_x \times N_y$ を考慮して適度な広さ A を原点を含む領域で決定する ($k_x = 0.5N_x$, $k_y = 0.5N_y$ を限度とする)。本論文では、 A は常に原点を中心とする正方形の領域にとった。

② 既知の ACF の計算

式(5,29)によって、 $(k_x, k_y) \in A$ での $C(k_x, k_y)$ を計算する。

③ 周波数領域解析

反復アルゴリズムを用いて、2 次元 MEM-PSD を計算する。このアルゴリズムでは、相関領域と係数領域の間を移動するための手段として、FFT アルゴリズムを利用しているため、DFT の長さ L は 2 の累乗にとらなくてはならない。収束解が得られた後に行う正定値の確認において、もし増加させた L について収束解が正定値を満たしていないなら、はじめに設定した $L \times L$ の外側で ACF がゼロになっていなかったということである。演算はもっと大きな L をもってやり直されなければならない。

④ 実空間領域解析

2 次元三角関数多項式の対象データ $z(n_x, n_y)$ に対する LSF を行うことにより、決定論的変動 $z_d(x, y)$ を抽出する。式(5,25)中の各成分の周波数 (f_{jx}, f_{jy}) はステップ③で計算された $P(f_x, f_y)$ のピークが指し示す周波数値から選ばれる。ピークをもつ周波数の集合より、白色雑音が支配的である高周波領域に存在するものはカットオフ周波数 f_c を導入することで切り捨てられる。さらに、検出下限値を設定し、最大の強度を持つピークに対して無視できるような大きさのピークをもつ周波数もまた除外する。選出された周波数値を用いることで、式(5,28)は線形方程式となり、未定係数の組 $(a_0, a_1, \dots, a_J, b_0, b_1, \dots, b_J)$ は一意的に決定できる。

⑤ 決定論的変動の決定

決定論的変動 $z_d(x, y)$ が最適な LSF 曲面として得られる。ここで $z_d(x, y)$ は連続関数であることが重要である。すなわち、提案された手法は離散的な 2 次元データの合理的な補間法としての価値も併せ持っている。また、雑音成分は $z(n_x, n_y)$ から $z_d(n_x, n_y)$ を引いた残差変動として得られる。

なお、対象データへの前処理として、傾き補正操作を常に施した。具体的には、1 次 (平面) 関数のデータに対する LSF を行ない、決定された平面をデータから減じた。

5.4 モデルデータへの適用

本節以降，提案した 2 次元 LSM-MEM を SPM データに対して適用する．対象としたデータは，STM モデルデータ，HOPG の STM データ，8CB の STM データ，および NiO の NC-AFM データである．それぞれのデータの 2 次元 LSM-MEM における各計算パラメータを表 5.1 にまとめた．

表 5.1 2 次元 LSM-MEM 処理に用いた各パラメータ

SPM データ	A [pixel]	L [pixel]	ε	f_c [1/nm]	検出下限値
STM のモデルデータ	129	512	10^{-3}	—	—
HOPG の STM データ	129	512	10^{-3}	11.5	10^{-2}
8CB の STM データ	129	512	10^{-3}	2.6	10^{-3}
NiO の NC-AFM データ	129	512	10^{-3}	4.4	10^{-2}

5.4.1 対象データ

STM モデルデータとして，Weisman らによって提案されたモデルを用いた [74]．この STM モデルデータは，120 度間隔で回転した 3 つの余弦波で近似したグラフィトモデル像と，白色雑音に x 方向にのみ $1/f^\beta$ 特性を付加した雑音モデルとを合成して作成されたものである [65] [66] [67]．本論文では， β の値を 2，信号対雑音比を 1 に選んだ．データ範囲は 128×128 [pixel] とした．

5.4.2 処理結果

グラフィトモデル像を矢印部分での縦断面とともに図 5.2(a) に示す．図 5.2(a) から分かるように，グラフィトモデル像は 6 回対称構造をもつ．グラフィトモデル像の縦断面において，2 種類の谷状の構造，すなわち小さな谷と大きな谷が交互に現れる特徴的な構造を見ることができる．図 5.2(b) に STM モデルデータをその縦断面とともに示す．ここで，STM モデルデータの縦断面の位置は図 5.2(a) で示したグラフィトモデル像の横断面の位置と同じである．STM モデルデータでは，像中に $1/f^2$ 特性に起因する目立った水平な縞状の雑音が生じている．雑音の影響によって，6 回対称構造を形成する個々の原子の境界が不鮮明になっている．STM モデルデータの縦断面では，小さいほうの谷状の構造がほとんど識別できない．

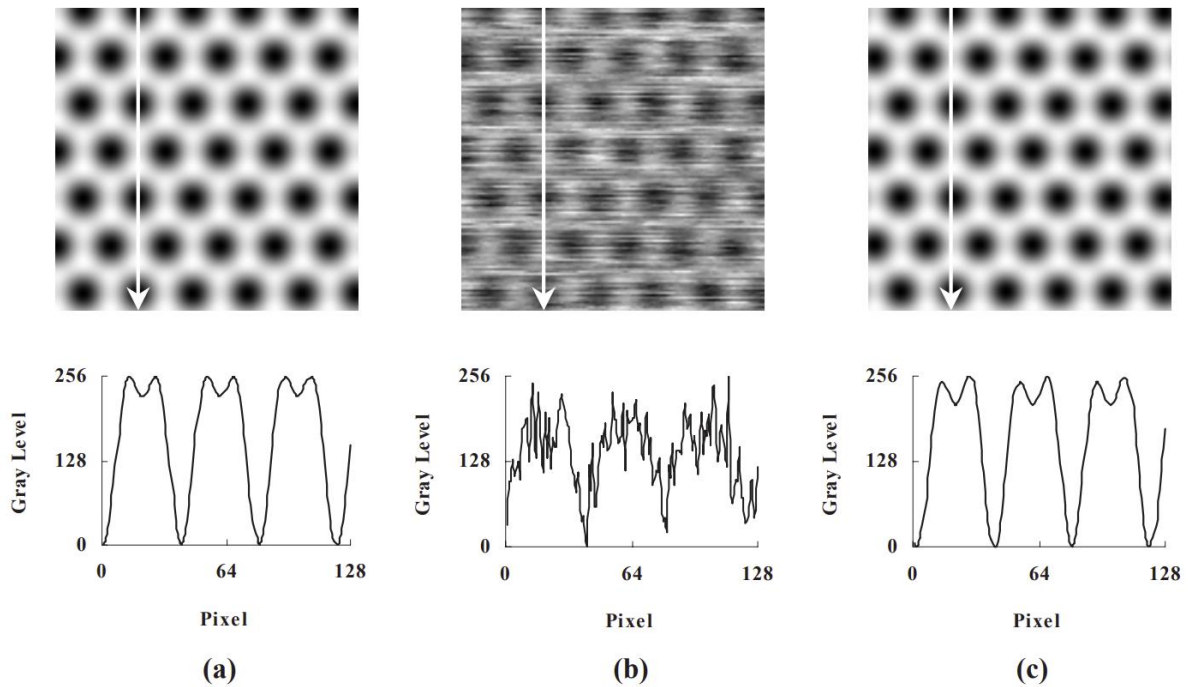


図 5.2 STM モデル像および断面図

(a)グラファイトモデル像, (b)STM モデルデータ, (c)提案した手法による復元像

(出典 : [59]より転載)

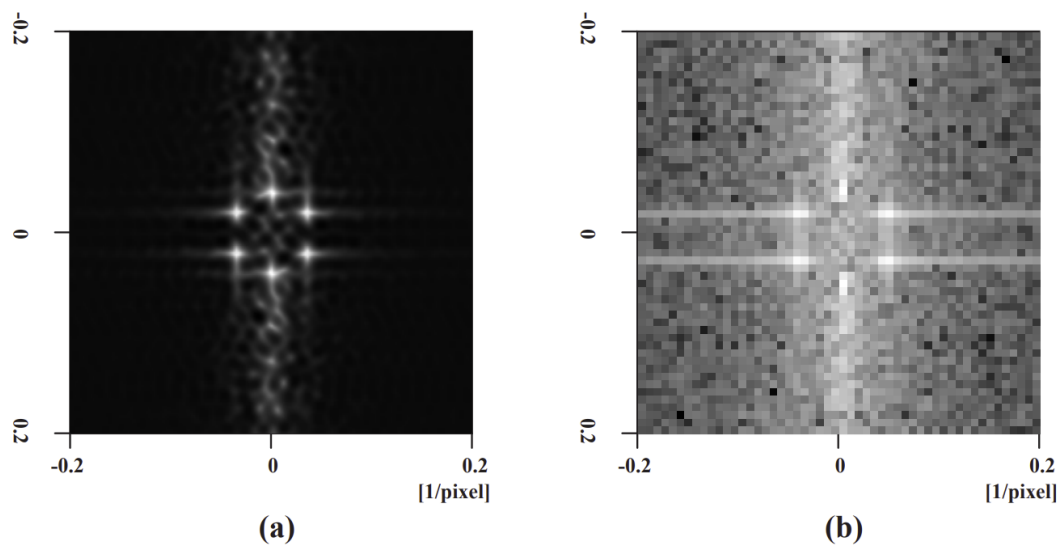


図 5.3 STM モデルデータの 2 次元スペクトル推定

(a)2 次元 MEM-PSD, (b)2 次元 FFT エネルギースペクトル (出典 : [59]より転載)

表 5.2 グラファイトモデルの周波数成分と MEM-PSD が推定した周波数ピーク
(出典：[59]を基に和訳)

	(f_{1x}, f_{1y})	(f_{2x}, f_{2y})	(f_{3x}, f_{3y})
モデルの周波数成分	0, 0.0500	0.0433, 0.0250	-0.0433, 0.0250
推定した周波数	0, 0.0508	0.0449, 0.0254	-0.0449, 0.0254

反復アルゴリズムによって STM モデルデータから計算された 2 次元 MEM-PSD を図 5.3(a)に示す．ここで，スペクトルは原点を取り囲む 6 つの際立ったピークをもっているのがよく分かる．周波数領域で対角に位置する象限（第 1 象限と第 3 象限，第 2 象限と第 4 象限）は鏡面像であることから，6 つのピークで原点对称なものは互いに同じ意味をもつものである．すなわち，ここでスペクトル中の 6 つのピークによって示されているものは実空間領域において支配的な 3 つの空間周波数成分である．表 5.2 にグラファイトモデル像を作成する際に用いた 3 つの周波数成分と，2 次元 MEM-PSD によって推定された支配的な 3 つの周波数成分を比較して示す．表 5.2 を見ると，STM モデルデータの 2 次元 MEM-PSD が指し示した 3 つの主要な周波数成分がグラファイトモデル像を形成している 3 つの周波数成分と正確に一致していることが分かる．

また，図 5.3(a)では， $f_x = 0$ の線に沿って帯状のスペクトルが現れていることが観測できる．これは $1/f^2$ ゆらぎを示すものであり，雑音モデルがもつ非対称な特性をはっきりと表している．

図 5.2(c)は STM モデルデータの 2 次元 MEM-PSD が指し示した 3 つの主要な周波数成分を用いて行った 2 次元 LSM-MEM 処理によって得られた復元像とその縦断面である．水平な縞状の雑音は完全に取り除かれ，グラファイトモデル像の 6 回対称構造が抽出された．また，復元像の縦断面を見ると，STM モデルデータの横断面においてほぼ失われていた小さい谷状の構造が再現されていることが認められる．

2 次元 MEM-PSD との比較のため，図 5.3(b)に FFT によって STM モデルデータから計算された 2 次元エネルギースペクトルを示す．本来，グラファイトモデル像より得られるはずの 6 つの線スペクトルは $1/f^2$ スペクトルに埋もれた幅広の連続スペクトルとして推定されている．さらに，FFT は与えられたデータ範囲の逆数よりも細かな格子で周波数領域を分解することができない．そのため，図 5.3(b)に示した FFT エネルギースペクトルはスペクトルのピーク値を精度良く指し示すことができない．

5.5 走査型トンネル顕微鏡像への適用

5.5.1 対象データ

図 5.4(a)および 5.4(b)にそれぞれ HOPG および 8CB の STM 像を示した（走査範囲はそれぞれ 4.0×4.0 [nm] および 25×25 [nm]）。双方とも大気中で高さ一定モードで測定されたものであり、 256×256 画素のデータである。

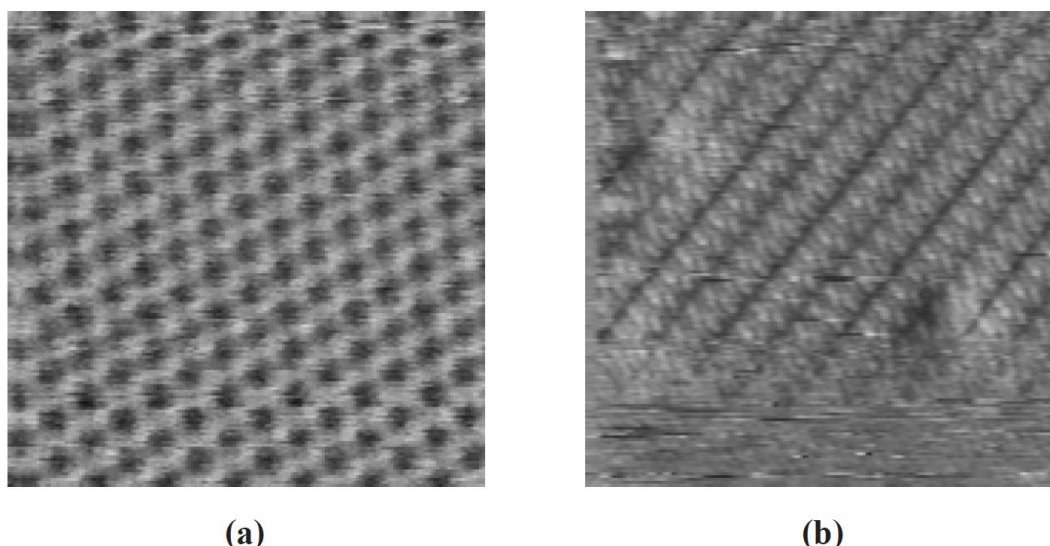


図 5.4 STM 像 (a)HOPG（捜査範囲： 4.0×4.0 [nm²], 標本点数： 256×256 [pixel], 高さ一定モードで大気中で測定），(b)8CB（捜査範囲： 25×25 [nm²], 標本点数： 256×256 [pixel], 高さ一定モードで大気中で測定）

図 5.4(a)において、HOPG に典型的である六方最密充填構造を見ることができる。個々の原子がつながって見えており、走査方向に走る縞状の雑音が顕著に表れている。図 5.4(b)において、個々の液晶分子は棒状の模様として見える。明るい楕円形の領域は芳香族シアノビフェニル基を表し、あまり明るくない棒状の領域はアルキル基を示している。また、8CB の STM 像はところどころ欠陥を持っており、下部では分子配列が見えていない。提案した手法はこれら 2 つの STM 像の一部分を切り出したものに対して適用した。

5.5.2 処理結果

HOPG の STM 像

HOPG の STM 像から切り出された $2.0 \times 2.0 \text{ nm}^2$ の領域に対して処理を行なった．処理前の測定像を図 5.5(a) に示す． $1/f^\beta$ 雑音が特定の位置を識別することを難しくしている．反復アルゴリズムによって測定像から計算された 2 次元 MEM-PSD を図 5.6(a) に示した．スペクトルが 6 つの鋭いピークを持つことが確認できる．この点において，HOPG の STM 像の 2 次元 MEM-PSD は図 5.3(a) に示した STM モデルデータのそれと類似している．

図 5.5(b) は提案した手法によって得られた復元像である．この処理において，カットオフ周波数 $f_c = 11.5 \text{ [1/nm]}$ ，検出下限値 10^{-2} が用いられた．図 5.5(b) では，水平な縞状の雑音は除去されており，六方最密充填構造がより明瞭に確認できるようになった．提案した手法による復元像との比較のため，1 次元 LSM-MEM 処理によって得られた復元像を図 5.5(c) に，また FFT と低域通過フィルタの組み合わせによって処理された像を図 5.5(d) にそれぞれ示す．条件を同じにするために，双方の処理において f_c は図 5.5(b) の処理で用いられたものと同じ値にした．1 次元 LSM-MEM 処理による復元像では（図 5.5(c)），処理が行なわれた各 1 次元データ列がその継ぎ目において不連続になることに起因して，像中に x 方向に走る線を見つけることができる．2 次元 MEM-PSD との比較対象として，図 5.6(b) に測定像の FFT エネルギースペクトルを示した．FFT エネルギースペクトルには鋭いピークは確認できず，実空間領域において支配的な周波数成分を弁別することは困難である．

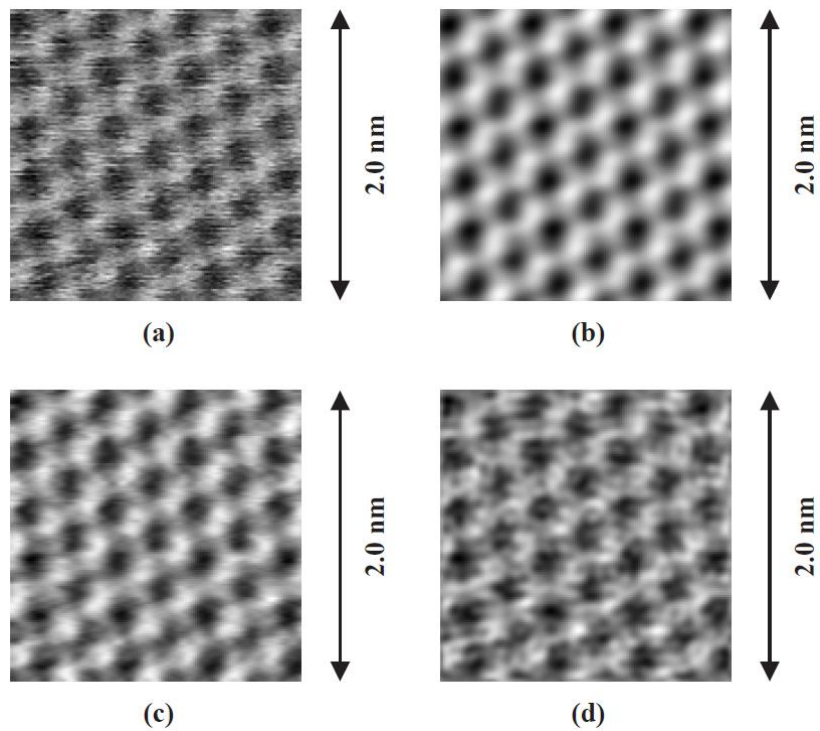


図 5.5 HOPG の STM 像の処理部分 (a)測定像, (b)提案した手法による復元像, (c)1 次元 LSM-MEM 処理による復元像, (d)FFT と低域通過フィルタの組み合わせによる処理像
(出典 : [59]より転載)

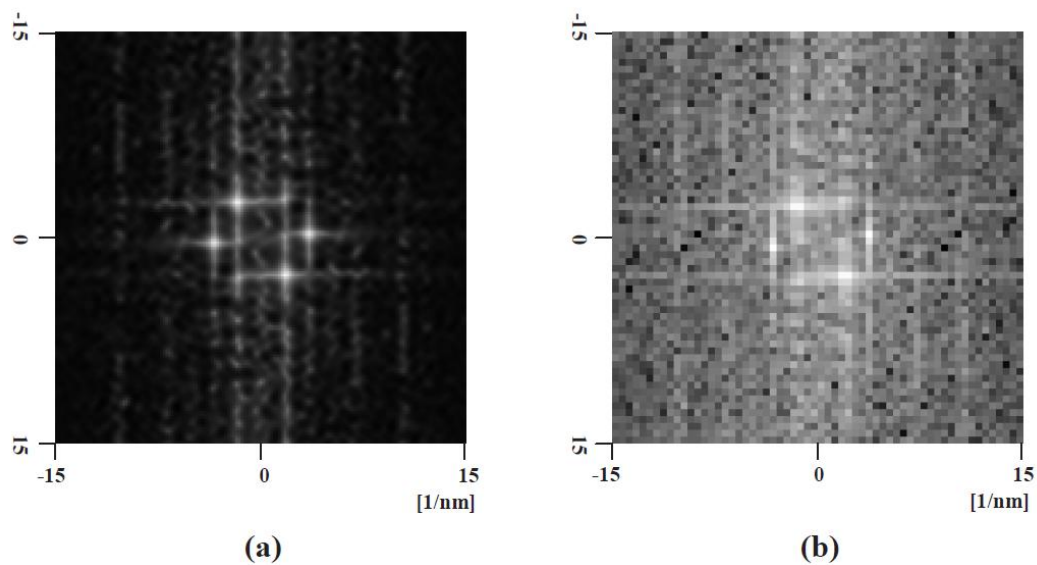


図 5.6 HOPG の STM 像の 2 次元スペクトル推定 (a)2 次元 MEM-PSD, (b)2 次元 FFT エネルギースペクトル (出典 : [59]より転載)

8CB の STM 像

8CB の STM 像から分子配列がきれいに見える $2.0 \times 2.0 \text{ nm}^2$ の領域を切り出し、それに対して処理を行なった．図 5.7(a)は処理前の測定像である．HOPG の STM 像に比べると，8CB の STM 像はより複雑な構造をもっている．図 5.8(a)に測定像の 2 次元 MEM-PSD を示す．互いに近接して存在する多くのスペクトルピークが精細に分解されている．

提案した手法によって得られた復元像を図 5.7(b)に示す．ここで， $f_c = 2.6 \text{ [1/nm]}$ ，検出下限値 10^{-3} が用いられた．各分子列において，シアノビフェニル基とアルキル基が交互に配列する周期的な単層構造がより明確になった [75]．この成果は提案した手法が 8CB のような入り組んだ構造をもつデータに対しても効果的であることを証明するものである．1 次元 LSM-MEM 処理，および FFT と低域通過フィルタの組み合わせによって処理された像をそれぞれ図 5.7(c)および 5.7(d)に示す．また，測定像の FFT エネルギースペクトルを図 5.8(b)に示す．FFT エネルギースペクトルにおいて，分子像を形成している主要な周波数成分を指し示すピークは広範囲にわたる $1/f^\beta$ スペクトルに埋もれてしまっており，個々のピーク値を見極めることは非常に困難である．

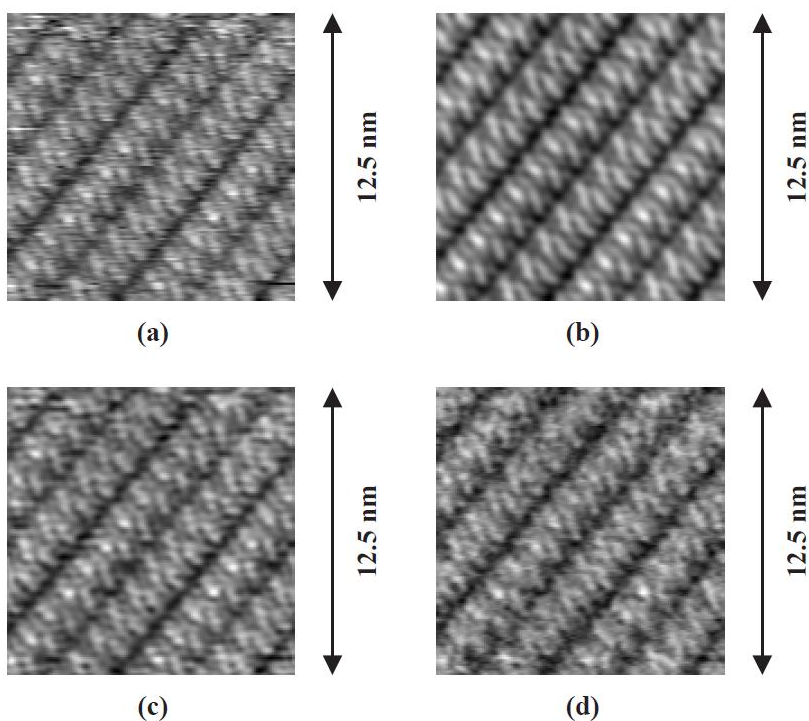


図 5.7 8CB の STM 像の処理部分 (a)測定像，(b)提案した手法による復元像，(c)1 次元 LSM-MEM 処理による復元像，(d)FFT と低域通過フィルタの組み合わせによる処理像（出典：[59]より転載）

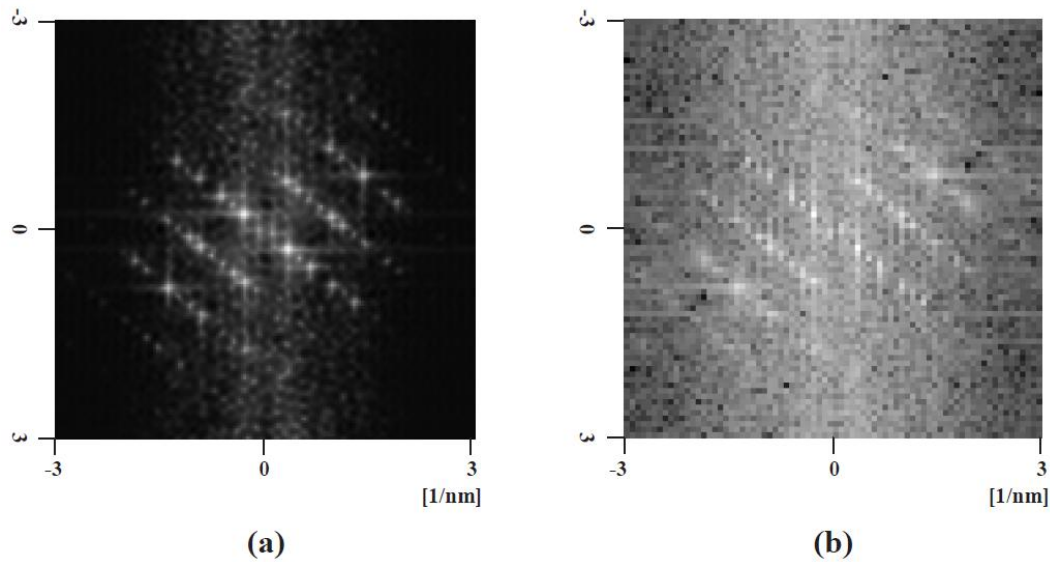


図 5.8 8CB の STM 像の 2 次元スペクトル推定 (a)2 次元 MEM-PSD, (b)2 次元 FFT エネルギースペクトル (出典: [59]より転載)

5.6 非接触原子間力顕微鏡像への適用

本節では、非接触原子間力顕微鏡法 (non-contact atomic force microscopy: NC-AFM) による測定データに対して、2 次元 LSM-MEM データ解析法の適用を行う。

5.6.1 対象データ

図 5.9 に NiO(100)劈開面を観察した NC-AFM 像を示した [76]。走査範囲は $8.1 \times 8.1 \text{ nm}^2$ である。超高真空中で測定されたものであり、 512×512 画素のデータである。絶縁物である NiO が原子分解能で観察されている。NiO は面心菱面体型格子であるが、格子定数は室温で $a = 4.17 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ 3.8'$ であり、面心立方格子にほぼ等しい構造である。図 5.9 において格子が菱形に見えるのは測定中の試料のドリフトの影響であると考えられる。提案した手法を NiO(100)表面 NC-AFM 像の一部分を切り出したものに対して適用した。

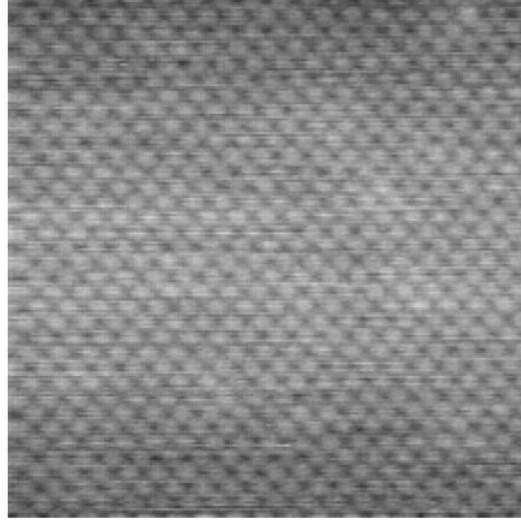


図 5.9 NiO(100)表面 NC-AFM 像，超高真空中で測定， $8.1 \times 8.1 \text{ nm}^2$ ($512 \times 512 \text{ pixel}^2$)

5.6.2 処理結果

NiO の NC-AFM 像から切り出された $2.0 \times 2.0 \text{ nm}^2$ の領域に対して処理を行った．図 5.10 に NiO の NC-AFM 像の処理部分を示す（左側：階調表示．右側：等高線表示）．処理前の測定像を図 5.10(a)に示す．測定像の 2 次元 MEM-PSD を図 5.11(a)に示した．スペクトル中の最も明るく見える 4 本のピークは NiO の基本格子を形成する周波数成分を指し示すものである．この 4 本のピークにより推定された主要周波数値より計算した NiO の原子間距離は $4.6 \text{ \AA}$ であり， $a = 4.17 \text{ \AA}$ とよく一致している． $f_x = 0$ の線に沿った帯状のスペクトルが強く表れており，これは対象とした像が強い $1/f$ 雑音を含んでいることを意味している．

図 5.10(b)は提案した手法によって得られた復元像である．この処理において， $f_c = 4.4 [1/\text{nm}]$ ，検出下限値 10^{-2} を用いた．図 5.10(b)では， $1/f$ 雑音が完全に取り除かれ，個々の原子がきれいに分解されている．図 5.10(c)に 1 次元 LSM-MEM 処理によって得られた復元像，図 5.10(d)に FFT と低域通過フィルタの組み合わせによって処理した像を示す．図 5.10(c)を見ると，1 次元 LSM-MEM 処理が像中に人工的な水平線を発生させていることが分かる．FFT と低域通過フィルタの組み合わせによる処理像（図 5.10(d)）では原子同士がところどころでつながって見え，それぞれの突起がうまく分解できていない．それぞれの像の等高線表示を見比べると，提案した処理による復元像において個々の原子位置が最も明確である．比較のために，図 5.11(b)に測定像の FFT エネルギースペクトルを示した．

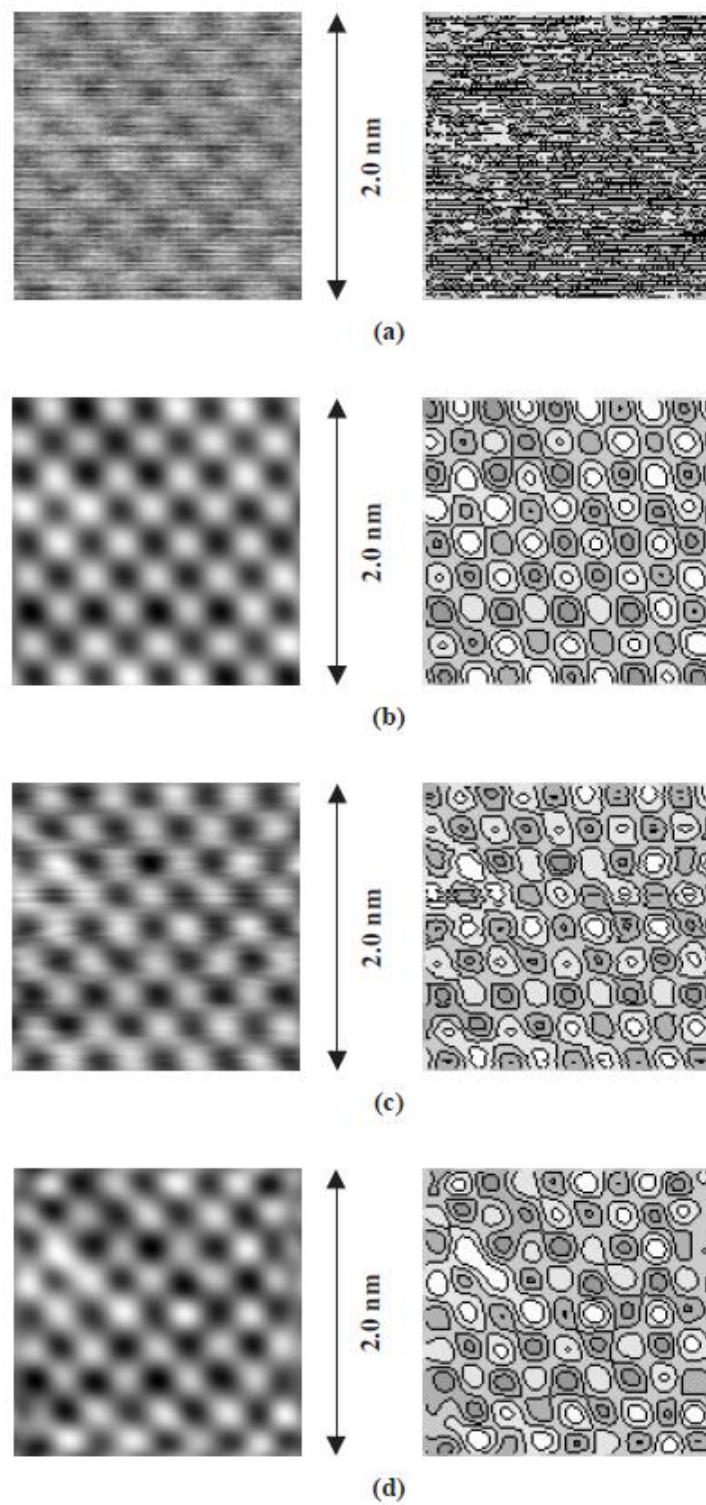


図 5.10 NiO の NC-AFM 像の処理部分（左側：階調表示. 右側：等高線表示）. (a)測定像. (b)提案した手法による復元像. (c)1 次元 LSM-MEM 処理による復元像. (d)FFT と低域通過フィルタの組み合わせによる処理像

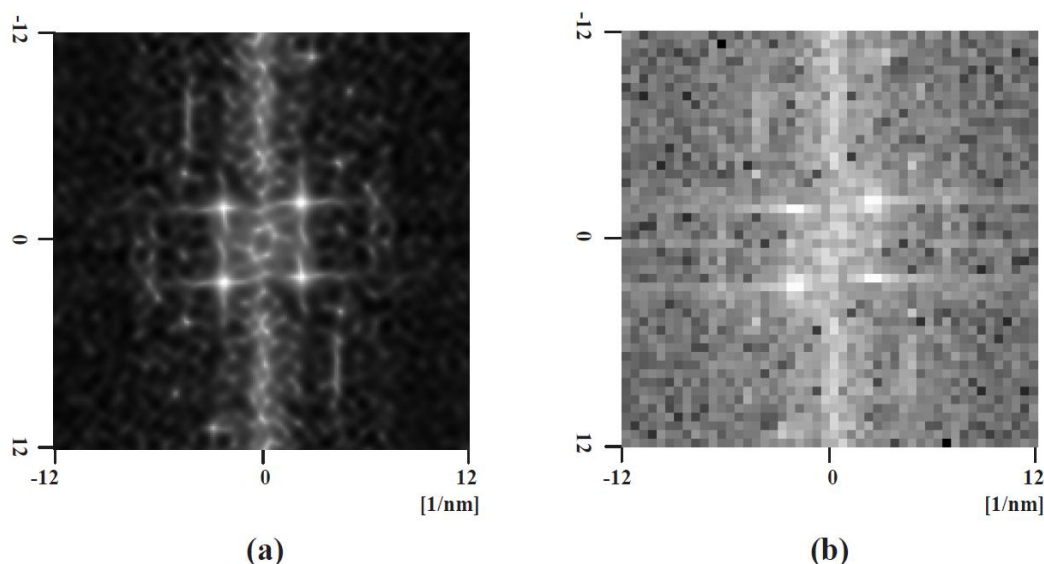


図 5.11 NiO の NC-AFM 像の 2 次元スペクトル推定. (a)2 次元 MEM-PSD. (b)2 次元 FFT エネルギースペクトル

5.7 まとめ

LSM-MEM データ解析法の 2 次元拡張による, 2 次元不規則データのための新たな解析法を提案した. この 2 次元 LSM-MEM データ解析法は, 2 次元 MEM パワースペクトル推定と一般化された 2 次元三角関数多項式の LSF の組み合わせから成り, 不規則データ中に含まれる決定論的変動を抽出することができる. 2 次元 MEM-PSD を推定するために, Lim と Malik によって開発された反復アルゴリズムを採用した.

さらに, 2 次元 LSM-MEM データ解析法を SPM 像に適用することで, 雑音によって歪められた測定像からの原画像の復元を行った. この際, SPM 像を確率過程の一つの実現であるとしており, 物質表面の物理的構造を表す基底的部分と雑音との合成であると考えた. ここで, SPM 像の基底的部分は決定論的であり, 雑音は確率論的であると想定している. すなわち, 本研究における復元とは, 不規則データとしての SPM 像から決定論的変動を抽出することである.

提案した手法は SPM 像の 2 次元 MEM-PSD を推定することができ, その PSD がもつ鋭いピークが指し示す位置から SPM 像を構成する主要な空間周波数の値を決定することが可能である. その優れたスペクトル分解能は従来法である FFT との比較から明白に示された. また 2 次元 MEM-PSD が推定した主要な周波数値をもった 2 次元三角関数多

項式の LSF によって，SPM 像の基底的部分が一意的な最適解として確定された．なおかつ，対象とする SPM 測定像がピクセルデータであるにもかかわらず，提案した手法では，復元像は連続的な関数として与えられる．本検討において，2 次元 LSM-MEM データ解析法は従来の 1 次元 LSM-MEM データ解析法を根本的に改良したものであり，合理的な SPM 復元像が得られることを示した．

第 6 章 結論および今後の課題

6.1 研究成果のまとめ

本研究では、産業分野における計測データに活用可能な解析手法の検討を目的とし、MEM が短いデータに対しても高分解能である特徴を生かした解析フレームワークの検討を行った。またその有用性を理論と実証の両面から議論した。主な成果を以下に列記する。

1. MEM の理論的特徴の整理と解析フレームワークの検討

第 2 章で産業分野における計測データの特徴とニーズを整理し、第 3 章で MEM の理論およびスペクトル分解能と推定誤差についての特徴をまとめ、計測データ解析フレームワークの概要を議論した。本研究における解析フレームワークは計測データ取得、スペクトル解析、特徴量抽出の 3 ステップで構成されることを述べ、スペクトル解析に用いる MEM の特性を踏まえた特徴量抽出手法の設定が重要であることを見出した。

2. MEM の予測誤差フィルター項数 m の最適値の検討

従来、MEM は AR モデルと数学的に同一の理論であるとみなされ、項数 m は AR モデルにおける AIC を利用することで、データ長の 5~20%程度の値が最適値として選ばれてきた。一方で本研究では、特定のモデルを仮定しない MEM は、将来の値は過去の値の線形結合で予測できるという AR モデルとは概念的に異なるという認識から出発し、MEM では項数 m を大きくするに従い真のスペクトルに漸近するという考えに基づいた。特に、小 SNR の短データに対しては AIC が導く 5~20%程度の m では不十分で、 m をデータ長の 70%程度にとることで高いスペクトル精度を得られることを示した。また、 m をデータ長の 100%に近い値まで大きくすると、現実のデータの場合はスペクトルピークの分離や減衰といった現象が発生し、 m の値に最適値が存在することを示唆した。

3. 産業事例 I：回転機械軸受診断

特徴量抽出手法として、機械工学的に計算可能な軸受の基本励振周波数で MEM スペクトルを検定する方法を提案し、軸受振動の模擬データおよび実測データでその効果を検証した。その結果、短時間 (≤ 80 ms) の振動信号でも MEM は FFT 比で 10 倍以上細かな周波数刻みを実現し、内輪損傷周波数を $\pm 1\%$ 以内で推定できることを示した。模擬データと実測データの双方で、FFT が分解能不足に陥る領域でも MEM は有意ピークを安定検出し、産業 IoT エッジ実装に適した省データ診断の可能性を実証した。

4. 産業事例 II : SPM 像解析

特徴量抽出手法として、主要スペクトルピークと概周期関数を用いた LSM による原子（分子）像の規定成分の抽出法を提案し、模擬 SPM 像および実測 SPM 像を用いて周期構造をノイズから分離、復元できることを示した。本検討では 2 次元データを対象とするため、MEM を Lim と Malik の反復アルゴリズムで 2 次元拡張し、1 次元と同様の MEM の特徴である鋭い線スペクトルが得られることを確認した。模擬データの周期構造及び実測データの格子定数の値と比較し、2 次元 MEM が高い周波数分解能を持つことを示した。

6.2 残された課題

MEM で得られる鋭いピークは統計的優位性の指標が定式化されていない。本研究では MEM スペクトル解析の結果を、その後段の特徴量抽出のステップでそれぞれの適用分野のドメイン知識に基づいて検定することで（軸受診断の基本励振周波数、SPM 像解析の格子定数等）推定されたスペクトルの信頼性を確認するフレームワークとしたが、より原理的な指標を明らかにすることができれば産業応用上非常に価値がある。

また、本研究では予測誤差フィルター項数の最適値が従来考えられていたデータ長の 5-20% という値よりも大きい、70% 程度の値となることを示したが、対象データ毎の予測フィルター項数の最適値を求めるための手法については言及していない。対象とする不規則データ毎の予測誤差フィルター項数の最適化手法は MEM を製造現場に適用する上で非常に重要である。

6.3 今後の研究展開と応用可能性

本論文では 2 つの産業事例に対して MEM による解析フレームワークの適用を検討したが、本手法は広範に活用されうるものであり、より幅広い分野での応用研究が望まれる。また、様々な応用研究の仮定で、前節で指摘した MEM スペクトルの統計的優位性の指標および予測誤差フィルター次数の合理的な決定方法についての知見が蓄積されることが期待できる。

さらに、近年発展著しい深層学習および生成 AI と組み合わせることで本論文で提案した手法の性能を飛躍的に向上させることも可能であると考えられる。すでに物理シミュレーションの世界では、様々な理論式に基づく数値演算をニューラルネットワークに置き

換えたサロゲートモデルや PINNs (Physics Informed Neural Networks) と呼ばれる手法が急速に発展しており，従来の数値シミュレーションに比べて劇的な計算コストの削減を実現している．同様のアプローチで 1 次元もしくは 2 次元の MEM スペクトルの計算を効率化する方法を見出すことができれば，絶え間ない高スループット化を要求される産業分野において大きなメリットをもたらすと考えられる．

謝辞

本論文の作成にあたり，終始ご指導とご支援を賜りました末岡和久教授に深く感謝申し上げます．研究の着想から論文の構成に至るまで，常に的確な助言をいただき，本研究の進展に不可欠な支えとなりました．

また，副査として貴重なご意見を賜りました浅井哲也教授，竹井邦晴教授に厚く御礼申し上げます．先生方からのご助言は，本論文の完成度を高めるうえで極めて重要なものでした．

さらに，日頃より有益な議論や技術的な支援をいただいた株式会社日立製作所および株式会社日立産機システムの諸氏に感謝いたします．FBAR 成膜プロセスの検討では，疋田光孝博士，磯部敦博士，浅井健吾氏，柴垣信彦氏にご指導いただきました．産業無線向け小形平面アンテナの開発では，相馬憲一博士，藤井健二郎博士，谷川原誠博士，小檜山智久氏にご支援いただきました．回転機械の軸受診断の手法に関して，木下勝治氏，松井遼平氏に重要なご助言をいただきました．倉田英明博士，竹村理一郎博士，山岡雅直博士には研究所の上長として私の博士論文の研究活動を終始支えていただきました．これらの皆様に心より謝意を表します．

最後に，長きにわたる学業・研究生活を支え，理解と励ましを惜しみなく与えてくれた家族に心から感謝いたします．本来は家族と過ごすべき膨大な週末の時間を博士論文に費やしました．家族の寛容さと温かな支えがなければ，本論文を完成させることは到底できませんでした．今後は，これまで以上に家族と過ごす時間を大切にすることをここに約束いたします．

本論文がここまで至ることができたのは，以上の皆様のご厚情とご支援の賜物であり，ここに深く感謝の意を表します．

参考文献

- [1] P. J. Burg, “Maximum Entropy Spectral Analysis,” PhD thesis, Stanford University, 1975.
- [2] 日野幹雄, スペクトル解析, 朝倉出版, 1977.
- [3] 常盤野和男, 大友詔雄, 田中幸雄, 最大エントロピー法による時系列解析, 北海道大学図書刊行会, 2002.
- [4] H. Matsumoto, K. Asai, N. Kobayashi, S. Nagashima, A. Isobe, N. Shibagaki, M. Hikita, “Influence of Underlayer Materials on Preferred Orientations of Sputter-Deposited AlN/Mo Bilayers for Film Bulk Acoustic Wave Resonators,” Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 43, No. 12, 2004.
- [5] T. W. Grudkowski, J. F. Black, T. M. Reeder, D. E. Cullen, R. A. Wagner, “Fundamental-mode VHF/UHF miniature acoustic resonators and filters on silicon,” Appl. Phys. Lett. 37, No. 11, 993, 1980.
- [6] J. S. Wang, K. M. Lakin, “Acoustic bulk wave composite resonators,” Appl. Phys. Lett. 38, No. 3, 125, 1981.
- [7] K. Nakamura, H. Sasaki, H. Shimizu, “ZnO/SiO₂-diaphragm composite resonator on a silicon wafer,” Electron. Lett. 17, No. 14, 507, 1981.
- [8] R. Ruby, P. Bradley, J. D. Larson III, Y. Oshmyansky, “PCS 1900 MHz duplexer using thin film bulk acoustic resonators (FBARs),” Electron. Lett. 35, 794, 1999.
- [9] K. M. Lakin, J. S. Wang, “Low-temperature coefficient bulk acoustic wave composite resonators,” Appl. Phys. Lett. 40, 308, 1982.
- [10] J. D. Larson, C. Ruby, P. D. Bradley, J. Wen, S. -L. Kok, A. Chien, “Power handling and temperature coefficient studies in FBAR duplexers for the 1900 MHz PCS band,” Proc. 2000 IEEE Ultrason. Symp. (IEEE, San Juan), 869, 2000.
- [11] R. S. Naik, J. J. Lutsky, R. Reif, C. G. Sodini, A. Becker, L. Fetter, H. Huggins, R. Miller, J. Pastalan, G. Rittenhouse, Y. -H. Wong, “Thin film bulk acoustic wave resonators for RF filter applications,” IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. 47, 292, 2000.

- [12] H. Matsumoto, A. Isobe , K. Asai, “Multilayer Film Piezoelectric Lamb Wave Resonator for Several GHz Applications,” Proc. 2006 IEEE Int. Freq. Contr. Symp., pp. 797-800, 2006.
- [13] K. Tsubouchi , N. Mikoshiba, “Zero-Temperature-Coefficient SAW Devices on AlN Epitaxial Films,” IEEE Trans. Sonics Ultrason. 32, 634, 1985.
- [14] H. Okano, T. Tanaka, K. Shibata , S. Nakano, “Preparation of aluminum nitride thin films by reactive sputtering and their applications to GHz-band surface acoustic wave devices,” Jpn. J. Appl. Phys. 31, 3017, 1992.
- [15] R. D. Vispute, J. Narayan, H. Wu , K. Jagannadham, “Properties of aluminum nitride thin films for piezoelectric transducers,” J. Appl. Phys. 77, 4724, 1995.
- [16] M. -A. Dubois , P. Muralt, “Piezoelectric properties of AlN thin films for MEMS applications,” J. Appl. Phys. 89, 6389, 2001.
- [17] S. -H. Lee, J. -K. Lee , K. H. Yoon, “Correlation between Mo properties and AlN orientation in sputtered films,” J. Vac. Sci. & Technol. A 21, 1, 2003.
- [18] O. Kitatani, S. Okamoto , Y. Shimada, “Effect of underlayers on magnetic properties of thin films,” J. Appl. Phys. 79, 6880, 1996.
- [19] K. Nakajima, T. Ujihara, S. Miyashita , G. Sazaki, “Surface energy estimation of AlN(0002),” J. Appl. Phys. 89, 146, 2001.
- [20] D. R. Lide, Handbook of Chemistry and Physics, 79th ed., Sect. 5, Washington, D.C.: CRC Press LLC, 1998.
- [21] P. Eckerlin , H. Kandler, Landolt-Bornstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group III: Crystal and Solid State Physics, eds. K.-H. Hellwege and A. M. Hellwege, Vol. 6, Chap. 2, New York: Springer-Verlag, 1971.
- [22] K. M. Lakin, G. R. Kline , K. T. McCarron, “Modified Butterworth-Van Dyke circuit for FBAR resonators and automated measurement system,” IEEE Trans. Microwave Theory Technol. 41, 2139, 1993.

- [23] H. Matsumoto, M. Tanikawara , T. Kohiyama, “Variable Beamwidth Shorted Patch Antenna Array for Indoor Positioning,” Proc. 2014 IEEE Radio and Wireless Symp., pp. 64-66, 2014.
- [24] H. Matsumoto, K. Fuji, M. Tanikawara , T. Kohiyama, “Electrically Small Shorted Patch Antenna Array with Switchable Patterns for Indoor Messaging System,” Proc. IEEE Int. Conf. Wireless Inform. Technol. Systems and Appl. Comput. Electromagnetics, pp. 1-2, 2016.
- [25] H. Matsumoto , M. Tanikawara, “Circularly polarized microstrip antenna with an airgap for multi-GNSS applications,” Proc. IEEE-APS Topical Conference on Antennas and Propagation in Wireless Communications, 2017.
- [26] A. Schuster, “On the investigation of hidden periodicities with application to a supposed 26-day period of meteorological phenomena,” Terrestrial Magnetism, vol. 3, pp. 13-41, 1898.
- [27] R. B. Blackman , J. W. Tukey, The Measurement of Power Spectra from the Point of View of Communications Engineering, New York, NY, USA: Dover, 1959.
- [28] J. W. Cooley , J. W. Tukey, “An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series,” Math. Comput., vol. 19, no. 90, pp. 297-301, 1965.
- [29] D. J. Thomson, “Spectrum estimation and harmonic analysis,” Proc. IEEE, vol. 70, no. 9, pp. 1055-1096, 1982.
- [30] H. Akaike, “Power spectrum estimation through autoregressive model fitting,” Ann. Inst. Statist. Math., vol. 21, no. 1, pp. 407-419, 1969.
- [31] J. Capon, “High-resolution frequency-wavenumber spectrum analysis,” Proc. IEEE, vol. 57, no. 8, pp. 1408-1418, 1969.
- [32] R. O. Schmidt, “Multiple emitter location and signal parameter estimation,” IEEE Trans. Antennas Propag., vol. 34, no. 3, pp. 276-280, 1986.
- [33] R. Roy , T. Kailath, “ESPRIT–Estimation of signal parameters via rotational invariance techniques,” IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Process., vol. 37, no. 7, pp. 984-995, 1989.

- [34] X. Li, S. Leglaive, L. Girin , R. Horaud, “Audio-noise power spectral density estimation using long short-term memory,” *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 26, no. 6, pp. 918-922, 2019.
- [35] Z. Hu, Y. Li , C. Han, “Transfer learning enabled transformer-based generative adversarial networks for modeling and generating terahertz channels,” *Communications Engineering*, vol. 3, art. 153, 2024.
- [36] Y. Li, “TOR-GAN: A transformer-based OFDM signals reconstruction GAN,” *Electronics*, vol. 13, no. 4, art. 750, 2024.
- [37] H. Miao, Y. Bai, X. Song , X. Chen, “A compact transformer-based GAN vocoder,” *Proc. Interspeech*, 2022.
- [38] D. -H. Chin, M. -C. Yoon, S. -K. Son , H. -D. Cho, “Spectral analysis of malfunction mode in endmilling,” *Journal of Mechanical Science and Technology*, vol. 21, no. 10, pp. 1637-1643, 2007.
- [39] A. E. Bazulin , E. G. Bazulin, “Deconvolution of complex echo signals by the maximum entropy method in ultrasonic nondestructive inspection,” *Acoustical Physics*, vol. 55, no. 6, pp. 832-842, 2009.
- [40] R. P. Vasquez, J. D. Klein , F. J. Grunthner, “Application of maximum-entropy spectral estimation to deconvolution of XPS data,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 23, 1981.
- [41] 松本久功 , 末岡和久, “最大エントロピー法を用いた短時間振動データのスペクトル解析による玉軸受診断,” *電気学会論文誌 D（産業応用部門誌）*, 掲載予定, 12月号, 2025.
- [42] 国立社会保障・人口問題研究所, “日本の将来推計人口：令和 5 年推計,” 厚生労働統計協会, 2023.
- [43] P. Raj, A. Kumar, N. Singhal , A. Kumar, *Industry Automation: The Technologies, Platforms and Use Cases*, River Publishers, 2024.
- [44] T. A. Harris , M. N. Kotzalas, *Rolling Bearing Analysis*, Fifth Edition, CRC Press, 2006.

- [45] D. Strömbergsson, D. P. Marklund, K. Berglund , P. -E. Larsson, “Bearing Monitoring in the Wind Turbine Drivetrain: A Comparative Study of the FFT and Wavelet Transforms,” *Wind Energy*, 23, pp. 1381-1393, 2020.
- [46] J. Antoni , R. B. Randall, “The Spectral Kurtosis: Application to the Vibratory Surveillance and Diagnostics of Rotating Machines,” *Mechanical Systems and Signal Processing*, 20, pp. 308-331, 2006.
- [47] C. T. Yiakopoulos, K. C. Gryllias , I. A. Antoniadis, “Rolling Element Bearing Fault Detection in Industrial Environments Based on a K-Means Clustering Approach,” *Expert Systems with Applications*, 38, pp. 2888-2911, 2011.
- [48] 中尾浩二, 外山達斎, 林孝則, 堀隆雅 , 濱上知樹, “One-class Support Vector Machine を用いたクラス集合逐次作成法による回転機の異常予兆検知,” *電学論 D*, Vol. 137, No. 12, pp. 858-865, 2017.
- [49] D. Neupane , J. Seok, “Bearing Fault Detection and Diagnosis Using Case Western Reserve University Dataset with Deep Learning Approaches: A Review,” *IEEE Access*, Vol. 8, pp. 93155-93178, 2020.
- [50] Y. Gao , R. B. Randall, “Estimation of Envelope Spectra Using Maximum Entropy Spectral Analysis and Spectrum Interpolation,” *Int. Journal of COMDEM*, Vol. 1, No. 3, pp. 15-22, 1998.
- [51] S. D. Stearns , D. R. Hush, *Digital Signal Processing with Examples in MATLAB (Electrical Engineering & Applied Signal Processing Series)*, Second Edition, CRC Press, 2016.
- [52] 松下修己, 田中正人, 小林正生, 古池治孝 , 神吉博, 続 回転機械の振動 ―実機の振動問題と振動診断―, コロナ社, 2012.
- [53] D. Liu, J. Tao, A. Luo , Q. Wang, “An optimized Kurtogram method for early fault detection of rolling element bearings using acoustic emission,” *Proc. 2018 Int. Conf. Inf. Sys. and Computer Aided Education*, Changchun, China, 2018.
- [54] Analog Devices Inc, “ADXL1001/ADXL1002: Low Noise, High Frequency MEMS Accelerometers Data Sheet (Rev.A),” 2024. [オンライン]. Available: <https://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/adxl1001-1002.pdf>. [アクセス日: 12 8 2025].

- [55] Pardo-Igúzquiza , F. J. Rodríguez-Tovar, “Maximum Entropy Spectral Analysis,” Encyclopedia of Mathematical Geosciences, B. S. Daya Sagar, Ed., Encyclopedia of Earth Sciences Series,” Springer, 2023.
- [56] T. J. Ulrych, “Maximum entropy power spectrum of truncated sinusoids,” J. Geophys. Res., 1972.
- [57] J. -L. Lacoume, M. Gharbi, C. Latombe , J. -L. Nicolas, “Close frequency resolution by maximum entropy spectral estimators,” IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Process., 1984.
- [58] E. Bechhoefer, “Condition Based Maintenance Fault Database for Testing Diagnostics and Prognostic Algorithms,” Society for Machinery Failure Prevention Technology, 27 2 2020. [オンライン]. Available: <https://www.mfpt.org/fault-data-sets/>. [アクセス日: 22 6 2025].
- [59] H. Matsumoto, K. Tokiwano, H. Hosoi, K. Sueoka , K. Mukasa, “Restoration of Scanning Tunneling Microscope Images by means of Two-Dimensional Maximum Entropy Method,” Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 41, Pt. 1, No. 5A, 2002.
- [60] L. Rosenthaler, H. -R. Hidber, A. Tonin, L. Eng, U. Staufer, R. Wiesendanger , H. -J. Güntherodt, “Digital image processing applied to STM images,” J. Vac. Sci. Technol. A, 6, 393, 1988.
- [61] E. Stoll , O. Marti, “Noise analysis in scanning probe microscopy,” Surf. Sci., 181, 222, 1987.
- [62] M. Aguilar, E. Anguiano, A. Diaspro , M. Pancorbo, “Image restoration in microscopy using statistical methods,” J. Microsc., 165, 311, 1992.
- [63] S. Park , C. F. Quate, “Image enhancement in scanning probe microscopy,” J. Appl. Phys., 62, 312, 1987.
- [64] M. Tsuchida, K. Tokiwano, H. Hosoi, K. Sueoka, N. Ohtomo, Y. Tanaka , K. Mukasa, “Restoration of STM Images by Statistical Approach Using LSM-MEM,” Jpn. J. Appl. Phys., 37, 3500, 1998.

- [65] T. Tiedje, J. Varon, H. Deckman , J. Stkes, “Origin of low frequency noise and 1/f fluctuations of tunneling current in scanning tunneling microscopes,” J. Vac. Sci. Technol. A, 6, 37, 1988.
- [66] R. Möller, A. Esslinger , B. Koslowski, “Noise in vacuum tunneling: Application for a novel scanning microscope,” Appl. Phys. Lett., 55, 2360, 1989.
- [67] K. Maeda, S. Sugita, H. Kurita, M. Uota, S. Uchida, M. Hinomaru , Y. Mera, “Noise reduction in STM images using wavelet transform,” J. Vac. Sci. Technol. B, 12, 2140, 1994.
- [68] J. W. Woods, “Two-dimensional maximum entropy spectral estimation,” IEEE Trans. Inf. Theory, 22, 552, 1976.
- [69] S. J. Wernecke , L. R. D'Addario, “Maximum entropy spectral analysis for multidimensional signals,” IEEE Trans. Comput., 26, 351, 1977.
- [70] W. I. Newman, “Maximum entropy methods in astrophysical data analysis,” Astron. Astrophys., 54, 369, 1977.
- [71] J. H. McClellan, “Spectral estimation techniques for multidimensional signals,” Proc. IEEE, 70, 1029, 1982.
- [72] J. E. Lim , N. A. Malik, “A new algorithm for two-dimensional maximum entropy power spectrum estimation,” IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing, vol. 29, p. 401, 1981.
- [73] S. L. Marple Jr., Digital Spectral Analysis with Applications, Baltimore, Maryland: Martin Marietta Aerospace, 1987.
- [74] A. D. Weisman, E. R. Dougherty, H. A. Mizes , R. J. D. Miller, “Restoration of STM images using entropy-based methods,” J. Appl. Phys., 71, 1565, 1992.
- [75] M. Hara, Y. Iwakabe, K. Tochigi, H. Sasabe, A. F. Garito , A. Yamada, Molecular arrangement of liquid crystal monolayers on MoS₂, Nature, 344, 228, 1990.
- [76] H. Hosoi, K. Sueoka, K. Hayakawa , K. Mukasa, “Atomic Resolved Imaging of Cleaved NiO(100) Surfaces by NC-AFM,” Appl. Surf. Sci. vol. 157, p. 218, 2000.