

修士論文

原子間力顕微鏡を用いた試料弾性推定法と 出力飽和予測制御に関する研究

Study on Sample Elasticity Estimation Method and
Predictive Control for Output Saturation
using Atomic Force Microscope

指導教員 藤本 博志 准教授

平成 26 年 2 月 6 日提出

東京大学大学院
工学系研究科 電気系工学専攻
37126498
渡辺 早紀矢

要約

原子間力顕微鏡 (AFM) は、原子レベルの分解能を持つ顕微鏡である。AFM はカンチレバと呼ばれるプローブと試料との間に生じる原子間力を利用することで画像を取得する顕微鏡であり、エレクトロニクスやバイオニクスなど広い分野で用いられている。AFM の制御には、高度な制御理論は用いられておらず、1 枚の画像の取得に時間がかかるという問題があった。そこで近年、制御理論やハードウェアの改善により AFM の大幅な高速化が実現している。

AFM の特徴の一つとして、試料とカンチレバが物理的に接触することがあげられる。この特徴のため、AFM は試料の粘弾性や凝着効果を測定できると期待されている。特にタンパク質をはじめとするソフトマテリアル系では、試料のダイナミクスの測定が重要であり、これらの力学情報をナノスケールで調べることができれば新しい材料科学の可能性が拓けると言われている。しかし AFM を用いた試料のダイナミクスの測定は AFM の高速化の技術に比べて進んでおらず、特に制御理論の視点からの提案は少ない。

本稿では制御理論の視点から、AFM を用いた試料の表面形状と弾性特性の同時推定法を提案する。本手法は逐次型最小二乗法を用いた推定法であり、試料を 1 度走査するだけで表面形状と、試料の場所ごとに異なる弾性特性を逐次的に推定できる。さらに推定精度の向上を目的として、表面形状オブザーバと完全追従制御法を導入する。

また本稿では、タッピングモード AFM 特有の問題である出力飽和問題を扱う。タッピングモード AFM はカンチレバをその共振周波数で振動させ、試料とカンチレバの距離が変化すると原子間力により、振動振幅が変動することを利用した計測手法である。しかし試料との距離により、カンチレバが振動しなくなったり最大振幅となることで出力飽和が生じる。これによりフィードバック追従特性が劣化し、カンチレバの破損や取得した画像情報の劣化の原因となる。

この出力飽和問題はタッピングモード AFM の測定でごく普通に起こりうるにもかかわらず、有効な対策がなされていない。そこで本稿では、出力飽和予測制御を提案する。本手法は飽和条件を考慮した制約付きモデル予測制御である。本制御器は非飽和領域では線形に働き、飽和領域では非線形な制御器として働く。つまり飽和領域において、出力を非飽和領域に戻そうと強力な制御が働くため、飽和時間が短縮され追従特性が改善する。

本稿では上述の提案法に関してシミュレーションと実験を行い有効性を示す。

目次

1 序論	1
1.1 原子間力顕微鏡の概要	1
1.2 研究背景	1
1.2.1 AFM による試料弾性測定 of 現状	2
1.2.2 出力飽和問題 of 現状	2
1.3 先行研究	2
1.3.1 ハードウェア of 改善による性能向上	3
1.3.2 制御理論 of 改善による性能向上	3
1.3.3 AFM を用いた粘弾性測定	5
1.3.4 出力飽和に対するダイナミック PID 制御	7
1.4 本稿 of 構成	8
2 原子間力顕微鏡 of 測定原理と出力飽和問題	12
2.1 コンタクトモード AFM of 測定原理	12
2.2 タッピングモード AFM of 測定原理	12
2.3 タッピングモード AFM of 出力飽和問題	13
3 実験環境	16
3.1 実験装置	16
3.2 カンチレバ of 走査経路	16
4 コンタクトモード AFM を用いた試料弾性推定法	19
4.1 コンタクトモード AFM of 力学モデル	19
4.2 コンタクトモード AFM of 周波数応答	20
4.3 前列表面形状を用いた試料弾性推定法	20
4.3.1 逐次最小二乗法	21
4.3.2 前列表面形状を用いた試料弾性推定法 (提案法 1)	22
4.4 往復型 of 弾性推定法	25
4.4.1 表面形状オブザーバ	25

4.4.2	完全追従制御法	26
4.4.3	シグナルジェネレータ	27
4.4.4	往復型の試料弾性推定法	29
4.5	弾性推定のシミュレーションと実験	30
4.5.1	シミュレーション	30
4.5.2	実験	30
4.6	プラスチック試料の測定と提案手法の検証	33
4.6.1	表面形状と弾性特性の3次元マップ	33
4.6.2	提案法の検証	34
5	出力飽和予測制御	38
5.1	タッピングモードAFMの周波数特性	38
5.2	出力飽和により追従特性の劣化	38
5.3	モデル予測制御	39
5.3.1	制約なしモデル予測制御	39
5.3.2	制約付きモデル予測制御	44
5.4	有効制約法	45
5.4.1	有効制約法のアルゴリズム	45
5.4.2	有効制約法の一例	47
5.5	シミュレーションと実験	48
5.5.1	シミュレーション	48
5.5.2	実験	49
6	結論	52
6.1	まとめ	52
6.2	今後の展望	53
	謝辞	54
	参考文献	55
	発表文献	58

目 次

1	電荷駆動方式の回路図 [25]	3
2	ピエゾアクチュエータの特性 [25]	4
3	Schitte らによって提案されたピエゾステージ [26]	4
4	カンチレバの Q 値制御のブロック線図	5
5	Q 値制御によるカンチレバの周波数特性と応答性 [27]	6
6	タンパク質の粘弾性推定のシミュレーション結果	7
7	タンパク質の粘弾性推定のシミュレーション結果 [19]	8
8	ダイナミック PID 制御器のブロック線図	8
9	ダイナミックオペレータ	9
10	ダイナミック PID 制御の実験結果 [22]	10
11	本研究の枠組み	11
12	コンタクトモード AFM	13
13	タッピングモード AFM	14
14	出力飽和問題	15
15	実験装置 (JSPM-5200)	17
16	AFM のブロック線図	17
17	カンチレバの走査経路と表面形状	18
18	コンタクトモード AFM の力学モデル	20
19	コンタクトモードの周波数特性 (Si 試料)	21
20	提案法 1 のブロック線図	23
21	提案法 1 の概要	24
22	コンタクトモード AFM の STO	26
23	マルチレート制御	27
24	PTC の構成	27
25	提案法 2 のブロック線図	28
26	シグナルジェネレータ	29
27	弾性推定のシミュレーション結果	31
28	実験結果	32
29	コンタクトモードの周波数特性 (プラスチック試料)	33

30	プラスチック試料の3次元マップ	35
31	S/N比の影響	36
32	検証手法のブロック線図	37
33	検証手法の実験結果	37
34	タッピングモードAFMのブロック線図	39
35	タッピングモードAFMの測定で生じる出力飽和	40
36	タッピングモードAFMの周波数特性 (Si 試料)	41
37	出力飽和による追従特性の劣化	42
38	モデル予測制御	43
39	モデル予測制御のブロック線図	44
40	有効制約法の例	47
41	出力飽和予測制御のシミュレーション	50
42	出力飽和予測制御の実験	51

第 1 章

序論

1.1 原子間力顕微鏡の概要

精密計測分野における，最も高分解能な計測装置として，走査型プローブ顕微鏡 (SPM : Scanning Probe Microscope) がある。SPM の代表的なものの 1 つとして，1982 年にビニッツらによって開発された走査型トンネル顕微鏡 (STM : Scanning Tunneling Microscope) がある。STM は，カンチレバ先端の探針と試料表面間に流れるトンネル電流が一定となるように，試料を設置したステージの位置を制御し，そのフィードバック信号から試料の表面形状を計測する。しかし STM を動作させる際には，試料-探針間の相互作用力によって試料や探針に生じる変形が問題となる。この相互作用力を測定するため，同じくビニッツらは 1986 年に原子間力顕微鏡 (AFM : Atomic Force Microscope) を開発している [1]。AFM は，カンチレバ探針と試料間の相互作用力を一定にするようにステージを操作することで試料の表面形状を得る。このため AFM は，STM では不可能だった絶縁体試料の計測や，液中での計測が可能である。従って現在では，AFM は STM よりも多用されている [2][3]。

1.2 研究背景

AFM の課題の 1 つとして，1 枚の画像を得るのに時間がかかることが挙げられる。そこで AFM を高速化，高精度化するため，制御理論の視点やハードウェアの視点から様々な手法が提案されている [4]–[8]。また，本研究グループでも学習制御や表面形状オブザーバ (STO : Surface Topography Observer) を用い，大幅な高速化に成功している [9]–[11]。以上より，AFM の高速化，高精度化に関しては高いレベルでの研究がなされているといえる。

本節では，高速化，高精度化に比べてあまり技術が進んでいないとされる AFM による試料弾性測定と出力飽和問題について述べる。

1.2.1 AFMによる試料弾性測定の実状

近年、遺伝子配列情報などをより具体的な側面から理解するために、タンパク質をはじめソフトマテリアルの表面形状だけでなく、そのダイナミクスの測定の必要性が高まっている。これは、バイオ分野のみならず材料力学の観点からも重要性の高い課題である。実際、X線1分子追跡法による生体分子間相互作用力の測定 [12] をはじめ様々な試みがなされている。

AFMの特徴の1つに、カンチレバが試料に物理的に接触する点がある。これにより AFM は、ナノマニピュレーションのように幅広い用途への利用が可能である [13]–[15]。この特徴を生かし、試料表面の凹凸情報に加えてソフトマテリアルの弾性、凝着効果の測定を目的としたナノ力学特性マッピングが研究されている [16]–[20]。特にソフトマテリアル系では、表面形状の他に粘弾性、凝着効果の影響が大きいため、これら力学的情報をナノスケールで調べることができれば、新しい材料科学の可能性が開けると考えられている。しかし、AFMの高速化、高精度化に比べて粘弾性測定の技術は進んでいない [21]。特に制御理論の観点からの粘弾性測定法に関しては、それほど多く研究されていないのが現状である。

1.2.2 出力飽和問題の実状

出力飽和は、AFMの一計測法であるタッピングモード AFM で起こる現象である。タッピングモード AFM は、試料との相互作用力によりカンチレバの振動振幅が変動することを利用した手法であり、もっとも多用される計測方法である。タッピングモード AFM において、試料とカンチレバが極端に近づいたり離れる場合に、カンチレバが振動しなくなったり、最大振幅となる場合がある。これがタッピングモード AFM における出力飽和问题である。

出力値が飽和を起こすことで、制御性能が劣化し、取得した試料画像の劣化やカンチレバの破損を引き起こす。出力飽和问题はタッピングモード AFM の測定において、一般的に起こりうる。これに対して、ダイナミック PID 制御や非飽和型 STO などが提案されているものの、有効な解決策が無いのが現状である [22]–[24]。

1.3 先行研究

本節では AFM の研究に関して特に、

1. ハードウェアによる高速化
2. 制御理論による高速化
3. AFM を用いた試料の粘弾性測定
4. タッピングモード AFM の出力飽和问题

取り上げて簡単に先行研究を述べる。

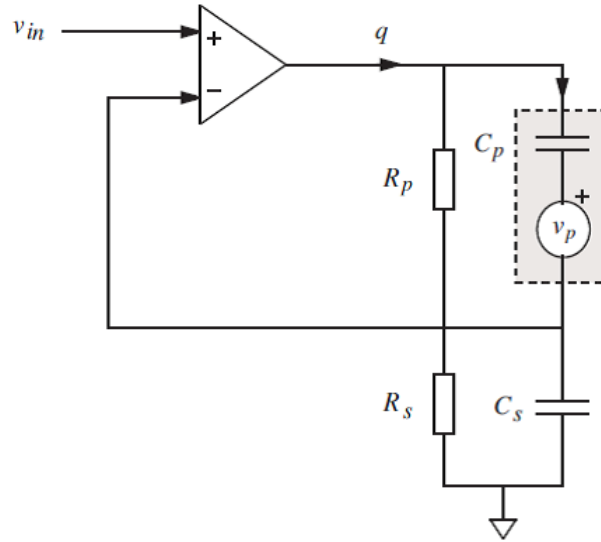


図 1: 電荷駆動方式の回路図 [25]

1.3.1 ハードウェアの改善による性能向上

ハードウェアの精度自体を高めることで、AFM の画像取得の高速化、高精度化を目指す研究がなされている。本節で、それに関連していくつか研究を紹介する。

ピエゾ素子には電圧で駆動した際、図 2(a) のようなヒステリシスな特性を示す。これは AFM の X - Y ステージの制御に影響し、取得した画像の精度劣化につながる。このヒステリシス特性を抑えるために、Fleming らは電荷駆動方式のふえぞステージを提案している [25]。電荷駆動方式を用いたピエゾアクチュエータを図 1 に示す。図 1 中で、 C_p 、 v_p はピエゾの等価回路を示している。また、その有効性を図 2 に示す。図 2 より、ピエゾのヒステリシス特性の影響が大幅に抑えられていることがわかる。

また、Schitter らは Z 方向の剛性を維持したままでの X - Y 方向の操作幅の拡大を目的として、新しいピエゾスキャナーを提案し、有限要素解析により検証を行なっている [26]。図 3 に Schitter らによって提案されたピエゾステージを示す。

他にも、 X 、 Y 軸のヒステリシスやクロスカップリングを抑えるために、 X 、 Y ステージに静電容量センサを取り付け、正位置帰還を取り入れた研究なども報告されている [6]。

1.3.2 制御理論の改善による性能向上

タッピングモード AFM は本来、空気中・真空中でカンチレバの Q 値が高いことを利用して測定することで、試料に与える負荷を抑えることを目的として開発された。しかし、液体中で測定を行う場合、 Q 値が極端に低下してしまう。これにより液中での高精度な画像取得が困難となる。そこで、オブザーバ理論を用いた Q 値制御法が提案されている [27]。

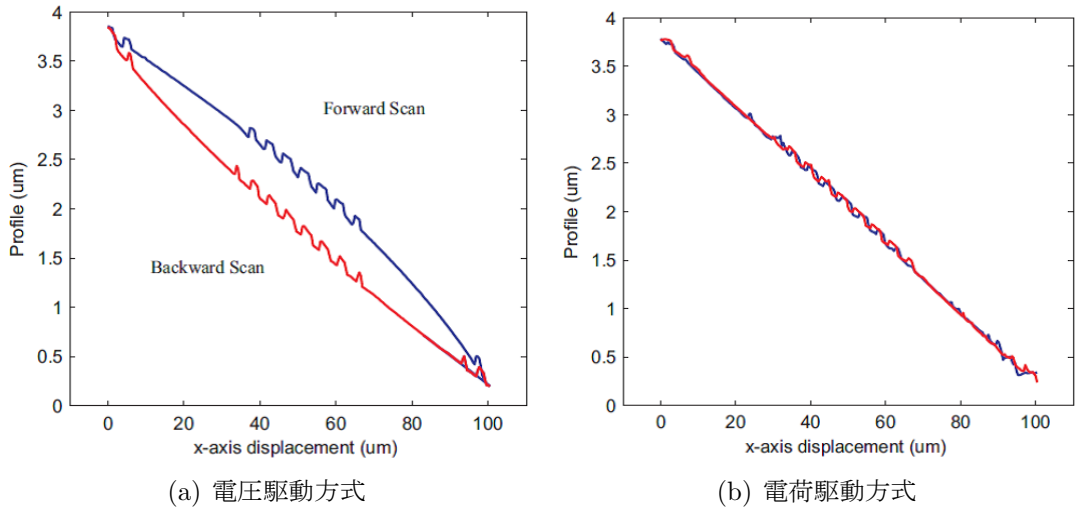


図 2: ピエゾアクチュエータの特性 [25]

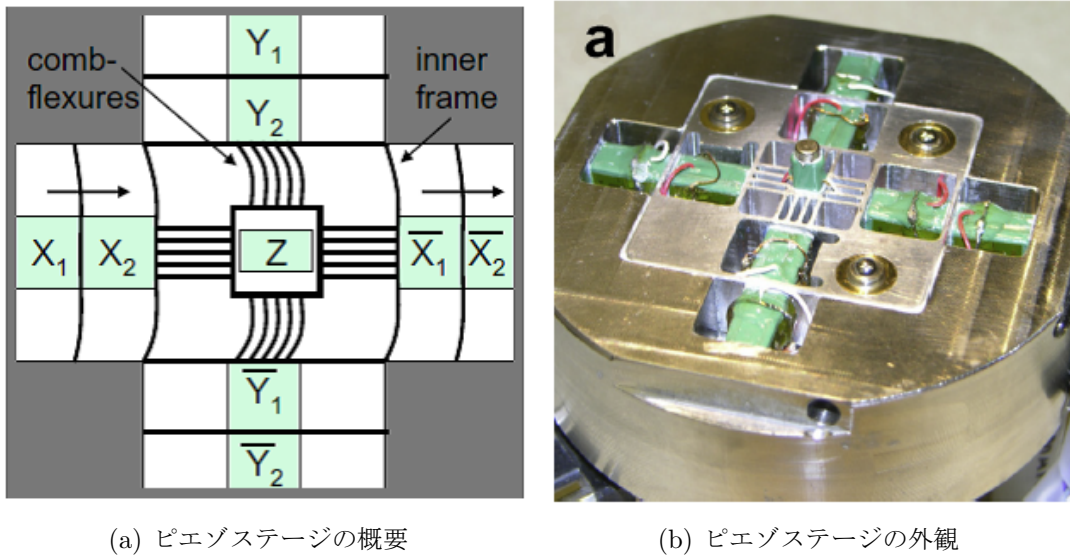


図 3: Schitte らによって提案されたピエゾステージ [26]

カンチレバの正弦波振動から、カンチレバの位置までの伝達関数は、

$$G(s) = \frac{k/m}{s^2 + \frac{\omega_0}{Q}s + \omega_0^2} \quad (1-1)$$

で表される。このプラントに対して、図 4 の様に、オブザーバを設計する。ここで、 h , η , v はそれぞれ、カンチレバ先端が試料から受ける力、熱ノイズ、観測ノイズである。

これを状態方程式で表すと以下ようになる。

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{\tilde{x}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A + BF & -BF \\ 0 & A - LC \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \tilde{x} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} g + \begin{bmatrix} B_1 \\ B_1 \end{bmatrix} (h + \eta) - \begin{bmatrix} 0 \\ L \end{bmatrix} v \quad (1-2)$$

$$y = Cx + v \quad (1-3)$$

ただし、 $\tilde{x} = x - \hat{x}$ である。上式より、 L , F に適当な値を用いることで Q 値を変更することができる。これにより、液中での測定の制度を上げることができる。

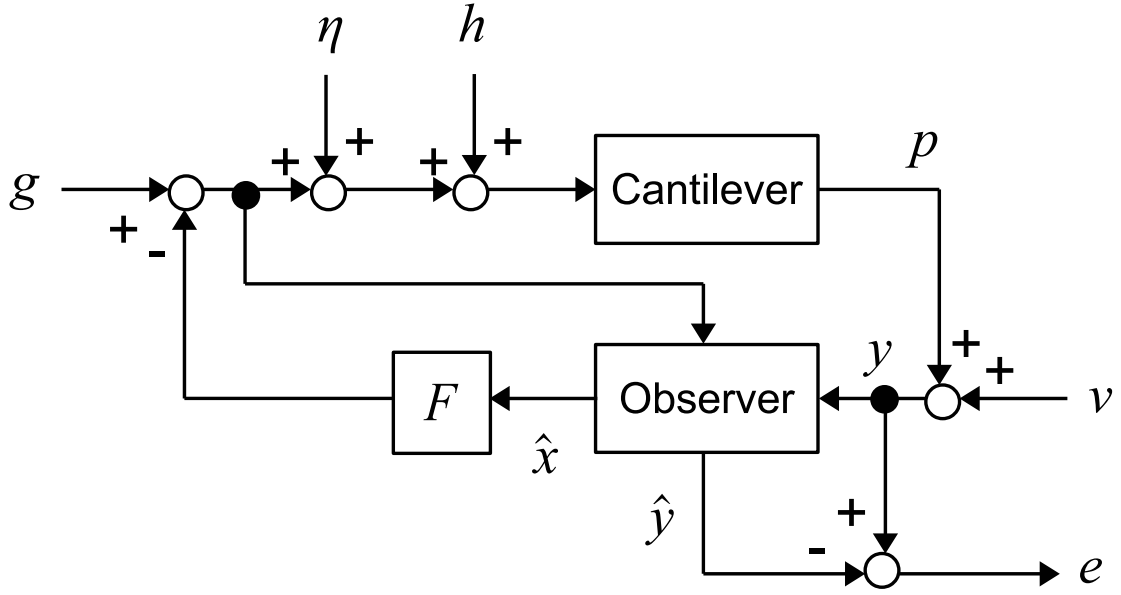


図 4: カンチレバの Q 値制御のブロック線図

図 5 に Q 値制御によるカンチレバの周波数特性とその応答性を示す。図 5(a), (c) は空気中でのカンチレバの周波数特性とステップ上の表面形状に対する応答である。図 5(b), (d) は液中でのカンチレバの周波数特性とステップ上の表面形状に対する応答である。フィードバックのゲインを調整することでカンチレバの Q 値が変動し、液中でも高精度な測定が行われていることがわかる。

1.3.3 AFM を用いた粘弾性測定

試料に物理的に接触するという AFM の特徴を生かし、かつプラントのダイナミクスを考慮した上で、逐次最小二乗法を用いたタンパク質の粘弾性測定法が Kim らによって提案されている [19]。

Kim らによる提案手法の概要を図 6 に示す。ここで、 m_c , k_c , η_c はそれぞれカンチレバの有効質量、弾性、粘性である。この図からカンチレバの運動方程式は、

$$m_c \ddot{z} + \eta_c \dot{z} + k_c(z - u) = F \quad (1-4)$$

$$-F_{\text{ext}} - F_d = F \quad (1-5)$$

となる。上式に関して、 F_{ext} はカンチレバが測定試料から受ける抗力である。また、 F_d は液中をカンチレバが振動することで生じる抗力であり、

$$F_d = 3\pi R^2 \sqrt{2\eta_l \rho \omega} \dot{z} + \frac{2}{3}\pi R^3 \ddot{z} \quad (1-6)$$

である。ここで、 ω はカンチレバを振動させた時の角周波数、 η_l , ρ はそれぞれ液体の粘性と密度を表す。また、 R はカンチレバ先端の半径である。

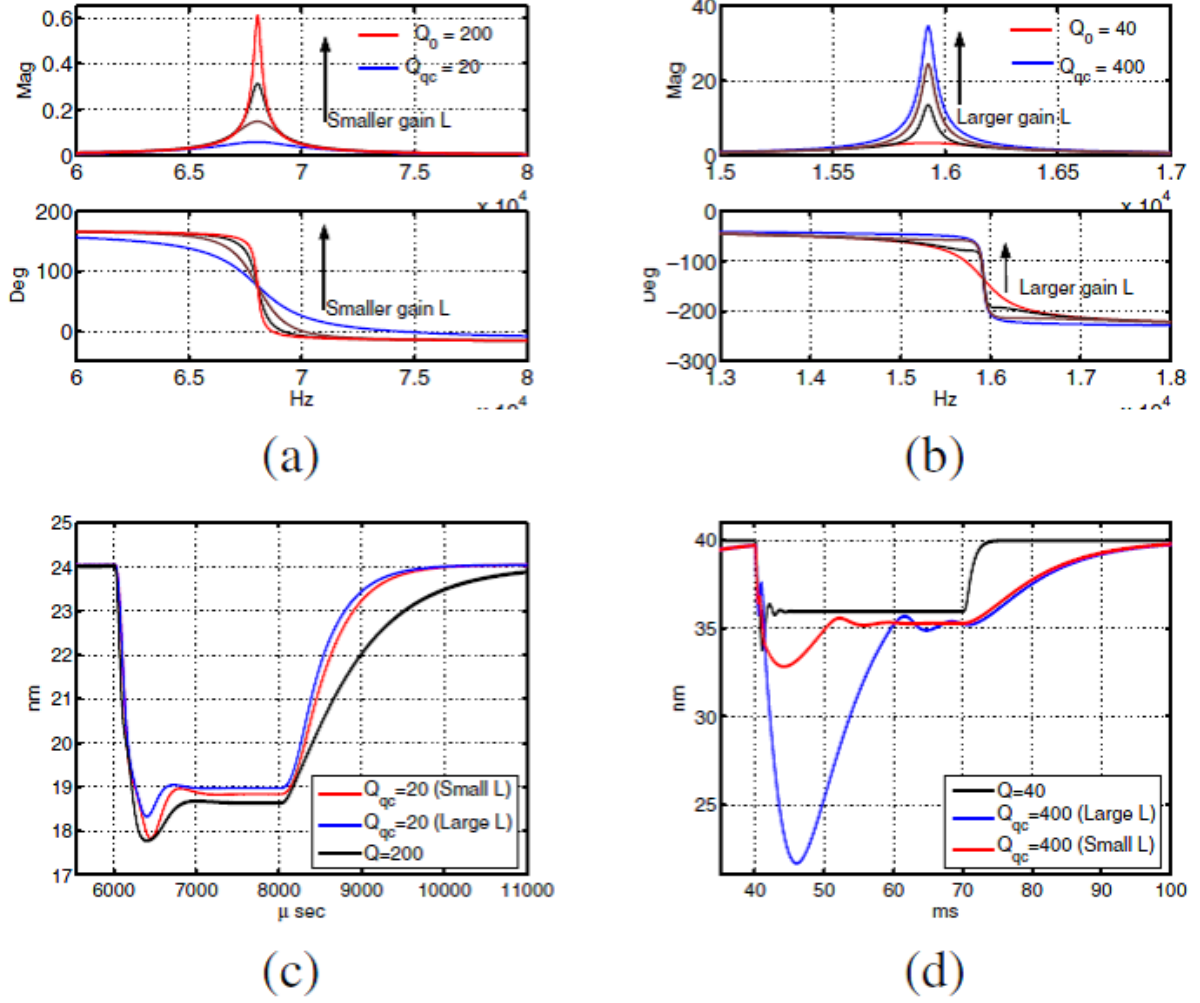


図 5: Q 値制御によるカンチレバの周波数特性と応答性 [27]

同様に、タンパク質の運動方程式は、

$$m_p \ddot{z} + \eta_p \dot{z} + k_p z = F_{ext} \quad (1-7)$$

で表される。 m_p , η_p , k_p はそれぞれタンパク質の質量, 粘性, 弾性である。

(1-5)~(1-7) より、

$$(m_c + m_p + \frac{2}{3}\pi R^3) \ddot{z} + (\eta_c + \eta_p + 3\pi R^2 \sqrt{\eta_l \rho \omega}) \dot{z} + (k_c + k_p) z = k_c u \quad (1-8)$$

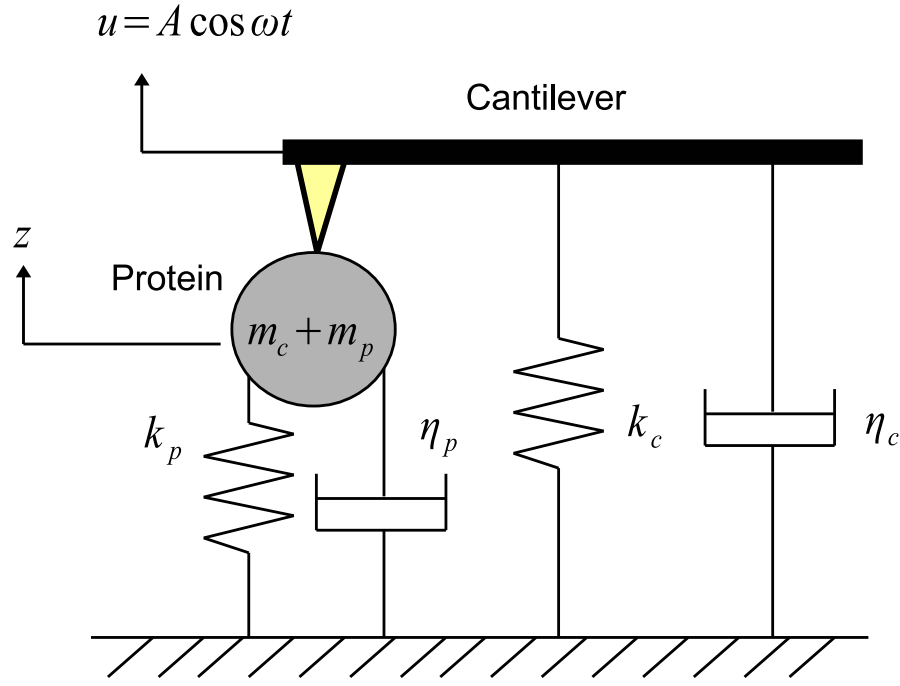
が得られる。ここで、

$$\theta[k] = \begin{bmatrix} \ddot{z}[k] & \dot{z}[k] & 3\pi R^2 \sqrt{2\eta_l \rho \omega} \dot{z}[k] & z[k] \end{bmatrix}^T \quad (1-9)$$

$$\varphi[k] = \begin{bmatrix} M_c^* + m_p + \frac{2}{3}\pi R^3 & \eta_c + \eta_p & 1 & k_c + k_p \end{bmatrix}^T \quad (1-10)$$

と回帰ベクトルと未知パラメータベクトルを定義することで、

$$y[k] = \theta^T[k] \varphi[k] \quad (1-11)$$



(a) タンパク質とカンチレバの力学モデル

図 6: タンパク質の粘弾性推定のシミュレーション結果

が得られる。ただし、 $y[k] = k_c u[k]$ である。この式に逐次最小二乗のアルゴリズムを用いることで、逐次的に未知パラメータを推定できる。

本手法のシミュレーションを図 7 に示す。ただし、 $k_c = 6 \text{ pN/nm}$ 、 $\eta_p = 60 \text{ pN m/s}$ である。

図 7 より、液体の粘度が異なってもタンパク質の粘弾性を正しく推定できていることがわかる。ただし、Kim らは、

- カンチレバとタンパク質の結合方法
- タンパク質の特性を検知するためのカンチレバの高感度化

を問題点として挙げ、シミュレーションにより有効性を示すのみに留まっている。

1.3.4 出力飽和に対するダイナミック PID 制御

上述したとおりタッピングモード AFM では、出力飽和がごく普通に起きるにもかかわらず、有効な対策が取られていない。これに対し、ダイナミック PID 制御が提案されている [22]。図 8 にダイナミック PID のブロック線図を示す。 z はカンチレバの振動振幅を表し、 $0, z_{max}$ で飽和を起こす。また、 z_s はセットポイントの値である。

ダイナミック PID 制御器は、ダイナミックオペレータによって飽和を回避する。ダイナミックオペレータを図 9 に示す。図中で黒実線はカンチレバの振幅を表す。このときセットポイントからの誤差を赤実線で示す。ダイナミックオペレータは、カンチレバの振幅 z が任意に決められた z_{lower}, z_{upper} を超えた場合にある定数を掛けることで実際の誤差よりも大きな仮想的な

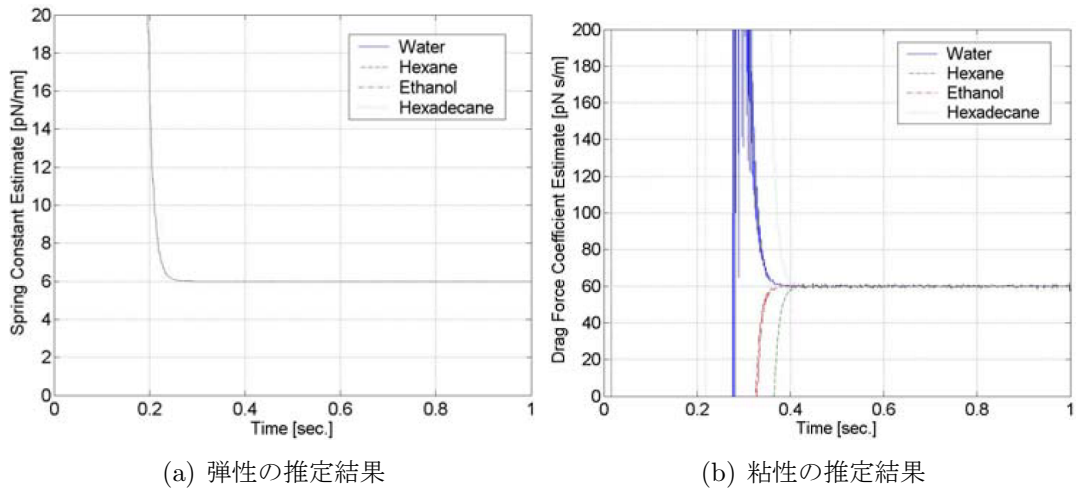


図 7: タンパク質の粘弾性推定のシミュレーション結果 [19]

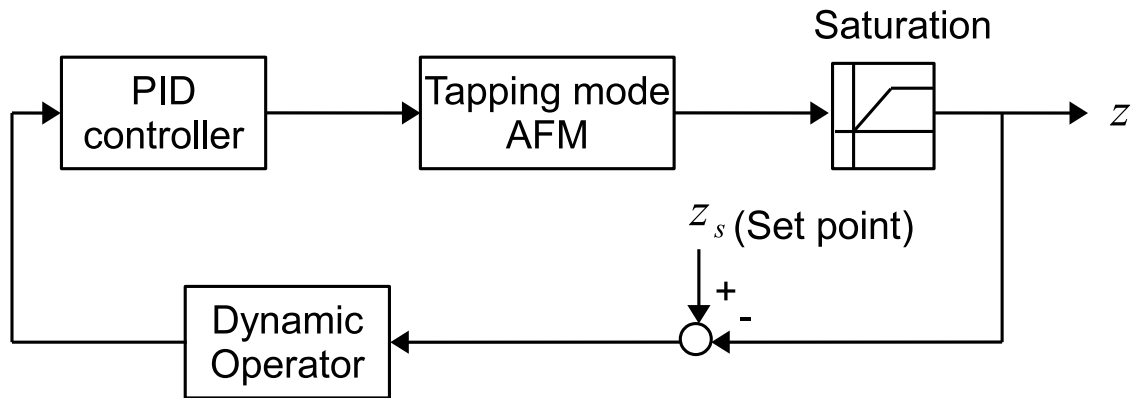


図 8: ダイナミック PID 制御器のブロック線図

誤差を出力する。つまり，出力が飽和領域に近づくときフィードバックのゲインを大きくすることで飽和を回避する制御手法である。図 9 において，ダイナミックオペレータにより得られる仮想的な追従誤差を青点線で表す。

ダイナミック PID 制御の実験結果を図 10 に示す。図 10(a), (b) は通常の PID 制御により取得した表面形状画像と制御入力である。出力飽和によりフィードバックの追従特性が劣化し，正確な画像が得られていないことがわかる。図 10(c), (d) はダイナミック PID 制御を用いた場合の実験結果である。従来の PID 制御に比べて，正確な画像が取得できている。

1.4 本稿の構成

本研究は，これまで制御理論の観点から議論されてこなかった課題に取り組んだものである。図 11 に本研究の枠組みを示す。コンタクトモード AFM の課題として，試料の弾性特性の計測

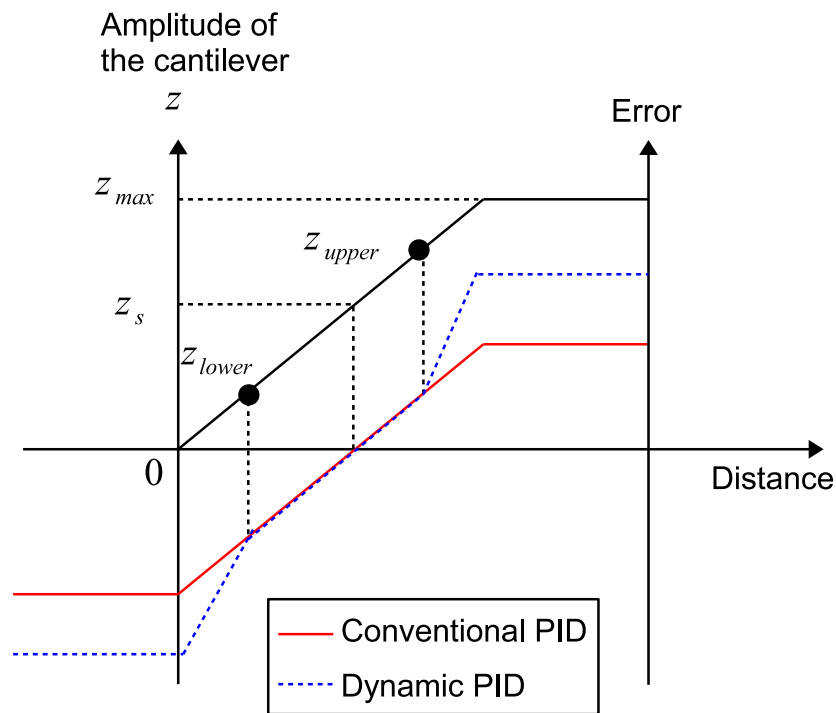


図 9: ダイナミックオペレータ

を取り上げる。これに対して、制御的な視点から試料の表面形状と弾性測定を同時に推定する2つの手法を提案する。従来、AFMを用いた弾性測定は、試料表面形状を予め取得した上で行うのが基本であった。これに対して本提案法により、試料を1度走査するだけで表面形状と弾性特性の取得が可能となる。

またタッピングモードAFMに関しては、これまであまり議論されてこなかった出力飽和問題を扱った。そこで、飽和条件を制約としたモデル予測制御である出力飽和予測制御を提案する。本手法により、飽和時間の大幅な短縮が達成され、表面形状の高精度な測定が可能となる。

本稿は以下の構成である。まず、第1章で序論を述べる。第2章では、コンタクトモードAFMとタッピングモードAFMについて詳細に述べ、タッピングモードAFM特有の問題である出力飽和問題を示す。第3章では、本研究で用いた実験装置について説明する。第4章で、試料の表面形状と弾性特性の同時推定を目指し、2つの手法を提案する。1つは、前列表面形状を用いた試料弾性推定法、もう1つは往復型の試料弾性推定法である。その後第5章では、出力飽和を制約とした出力飽和予測制御を提案する。最後に、第6章で結論を述べる。

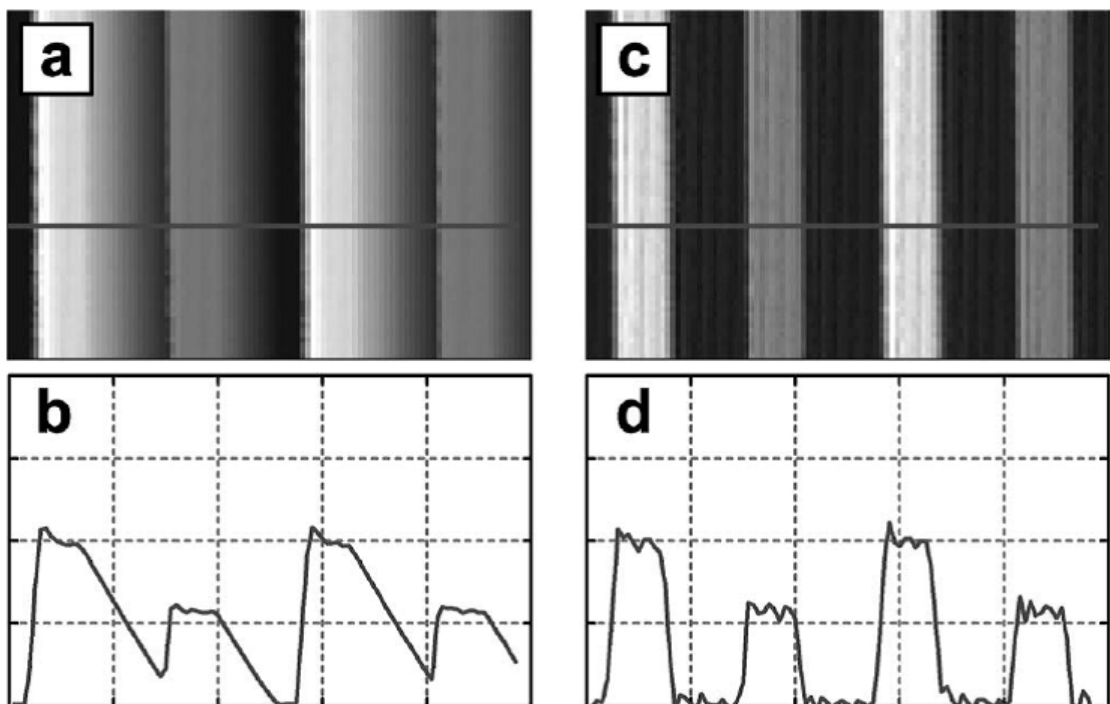


図 10: ダイナミック PID 制御の実験結果 [22]

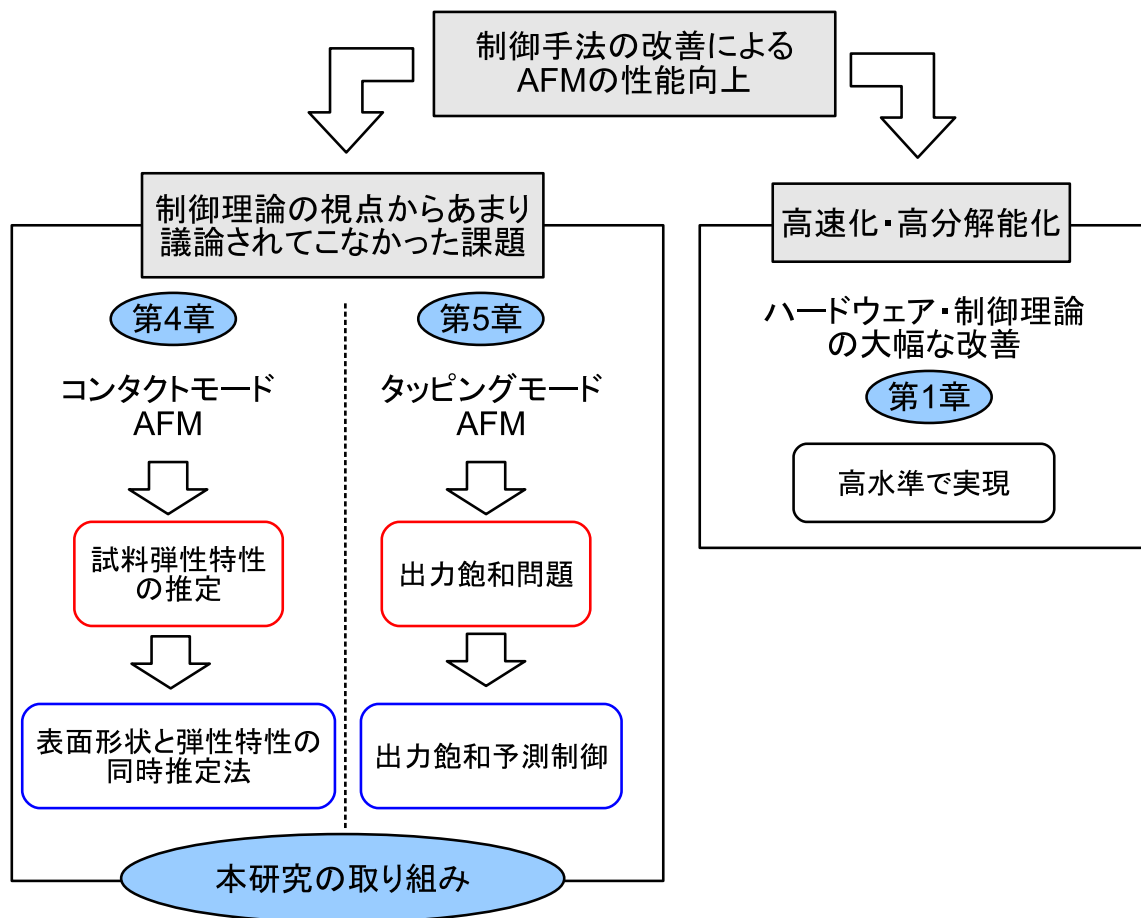


図 11: 本研究の枠組み

第 2 章

原子間力顕微鏡の測定原理と出力飽和問題

AFM の測定手法は、コンタクトモード AFM とダイナミックモード AFM に大きく二分される。本章では、コンタクトモード AFM とダイナミックモード AFM の一計測法であるタッピングモード AFM について述べる。

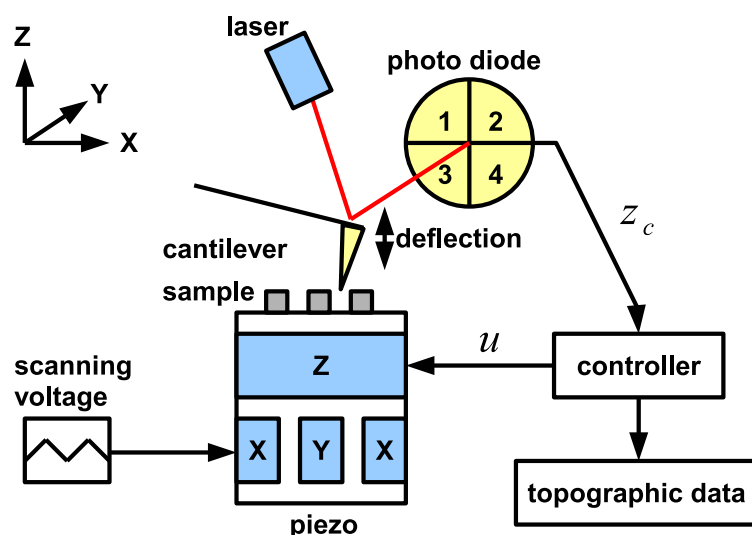
2.1 コンタクトモード AFM の測定原理

コンタクトモード AFM の概要を図 12(a) に示す。これは、図 12(b) のようにカンチレバの先端を常に接触させて試料を走査する計測手法である。ただし、 x_c はコンタクトモード AFM のカンチレバの軌跡を表す。コンタクトモード AFM による試料の表面形状の測定は、カンチレバのたわみ量 z_c を一定に保つようにピエゾステージの Z 軸を制御し、その操作量 u を表面形状として記録する方法が一般的である。またカンチレバのたわみは、レーザー光の反射角の変位を測定する光てこ方式により測定される。

本測定手法は、高精度な測定が可能であり、かつ、簡易な力学モデルであることが知られている。

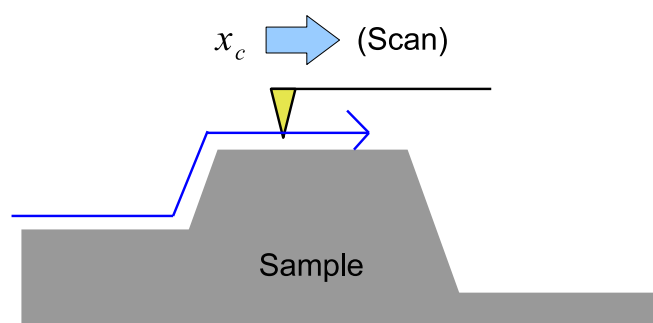
2.2 タッピングモード AFM の測定原理

タッピングモード AFM の概要を図 13(a) に示す。タッピングモード AFM は図 13(b) のようにカンチレバ先端をその共振周波数で振動させた際に、試料表面との距離が変化すると、カンチレバ先端の振動振幅 z_t が振幅変調することを利用した測定手法である。そのためタッピングモード AFM は、振幅変調型 AFM (AM-AFM : Amplitude Modulation type AFM) とも呼ばれる。ただし、 x_t はタッピングモード AFM のカンチレバの軌跡を表す。コンタクトモード AFM は試料表面とカンチレバが常に接触したまま走査するのに対し、タッピングモード AFM は周期的な接触を行うため、試料に対する接触力が小さい。従って、タッピングモード AFM は生体分子などの柔らかい試料に対して優位な測定手法である。



(a) コンタクトモード AFM の概要

Trajectory of the cantilever



(b) コンタクトモード AFM におけるカンチレバの軌跡

図 12: コンタクトモード AFM

2.3 タッピングモード AFM の出力飽和问题

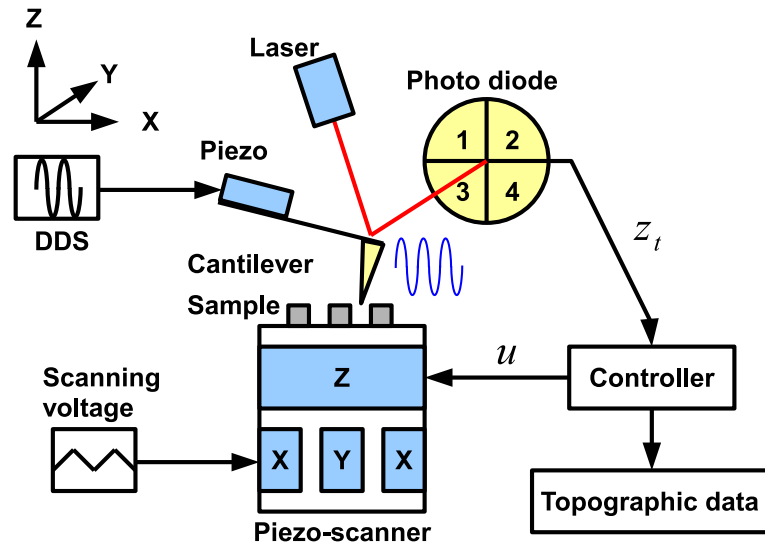
タッピングモード AFM 特有の問題点の 1 つに、出力飽和问题がある。本小節では、この出力飽和问题について説明する。タッピングモード AFM は一般に、以下の手順により計測が行われる。

Step.1 試料をピエゾスキャナ上に設置する。

Step.2 カンチレバ先端を共振周波数で持続振動させる。ここでは、Direct Digital Synthesizer (DDS) により振動用ピエゾ素子をカンチレバの共振周波数で振動させる。

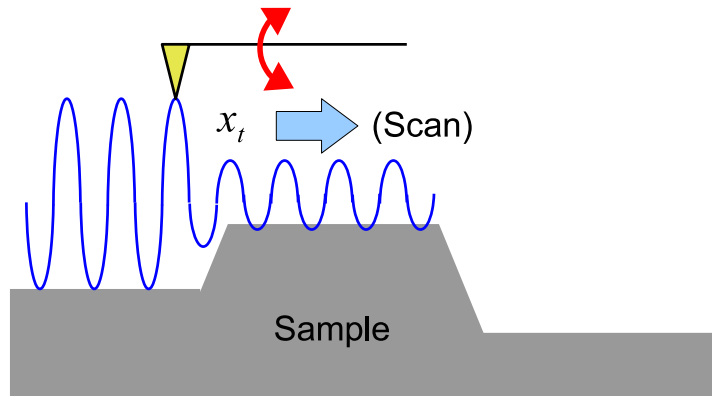
Step.3 試料とカンチレバを近づける。すると原子間力によりカンチレバ先端の振動振幅が小さくなる。この振幅値をセットポイント r とする。

Step.4 カンチレバ先端にレーザを照射し、その反射光をフォトダイオードにより検出する。



(a) タッピングモード AFM の概要

Trajectory of the cantilever



(b) タッピングモード AFM におけるカンチレバの軌跡

図 13: タッピングモード AFM

Step.5 試料を X - Y 方向に走査すると、表面形状により試料とカンチレバの距離が変化する。これにより、カンチレバ先端の振動は AM 変調される。

Step.6 フォトダイオードの出力を AM 復調させるために、実効値換算する。これを制御すべき出力 z_t とする。

Step.7 出力 z_t をセットポイントに定位させるために、 Z スキャナをフィードバック制御する。

Step.8 Z スキャナへの制御入力 u は表面形状に追従するように与えられるため、これを試料表面形状の測定値として画像化する。

Step. 6 で AM 復調を行うが、ここで出力飽和がおきる。図 14 で、この出力飽和問題を示す。図 14 中で、カンチレバは左から右へ移動する。また、カンチレバの終端部と試料は上下方向に

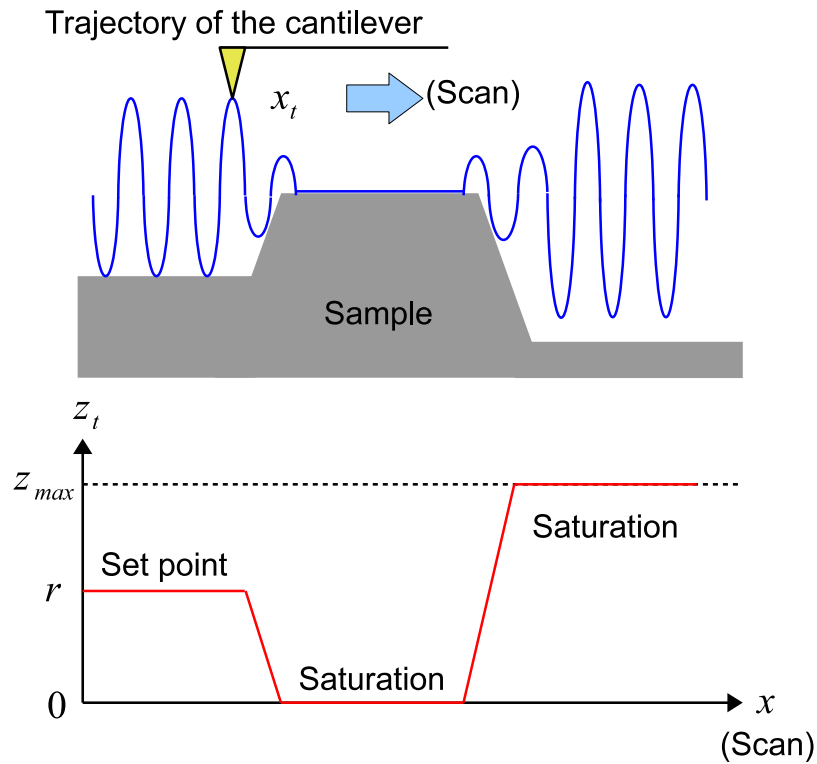


図 14: 出力飽和問題

動かないとする。このときカンチレバの軌道は、

$$x_t(t) = X(\cdot)\sin\omega_t t \quad (2-1)$$

で振動する。ここで、振動振幅は $0 < X(\cdot) < X_{\max}$ である。従って、出力も $0 < z_t < z_{\max}$ となる。

カンチレバが試料の凸部を走査する際、カンチレバの振動振幅は試料表面との距離に応じて小さくなる。さらに、カンチレバと試料表面が常に接触するほど近づくと振幅は0となり、そのときの出力 z_t も0となる。逆に、試料の凹部を走査する際、振動は最大振幅 X_{\max} となり出力も z_{\max} となる。また、図14のように試料とカンチレバが完全に離れている場合においても出力は z_{\max} となる。これらの飽和状態においては、見かけの追従誤差 $e(t)$ が小さく見える。つまり飽和領域では正しい出力 z_t は、飽和値0, z_{\max} よりも小さい、大きいという情報しか得られない。この出力飽和問題はタッピングモードAFMの測定においてごく普通に発生し、フィードバック制御系の追従特性やオブザーバの性能の劣化を引き起こす。これらは取得した表面形状画像の劣化やカンチレバの破損の原因となる。

第 3 章

実験環境

3.1 実験装置

本研究で用いた AFM は，日本電子製の JSPM-5200 の特別仕様である。本実験機を図 15 に示す。通常，市販の AFM はコントローラがブラックボックス化されており，ユーザがアルゴリズムを変更することはできない。本実験装置では，必要なインターフェースを用意し，dSPACE-1104 により制御系を構成する改造を行っている。

一般的な AFM のブロック線図を図 16 に示す。図 16 中で， $P(s)$, $C_{fb}(s)$ はそれぞれ，AFM, フィードバックコントローラを表す。また， z_c , u , r はそれぞれ，AFM の出力，ピエゾへの Z 方向の位置指令，セットポイントを表す。また，フィードバックコントローラには PI 制御器や 1 次遅れ補償器が用いられるのが一般的である。

従って AFM の制御系は，試料の表面形状 d を外乱とみなした際のサーボ系とみなすことができる。

3.2 カンチレバの走査経路

AFM の測定において，試料の表面形状は X 方向走査に関して開始位置から走査幅だけ右方向へ走査するフォワードスキャン (FWS)，同じ経路を左方向へ走査するバックワードスキャン (BWS) により測定される。これを Y 方向に繰り返し走査することで，図 17(a) のように面走査を行う。ここで，表面形状 $d_{i,j}$ は，カンチレバの走査の i 列目， j 行目の表面形状である。

このとき表面形状としての外乱は，FWS と BWS で図 17 のように折り返し状の外乱となる。一般的な AFM は，FWS か BWS のどちらか一方のみで取得した情報のみを用いて試料の表面形状を取得する。



図 15: 実験装置 (JSPM-5200)

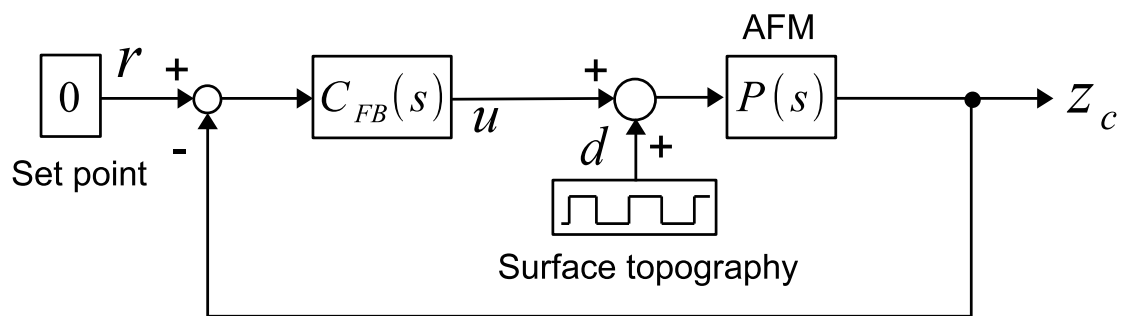
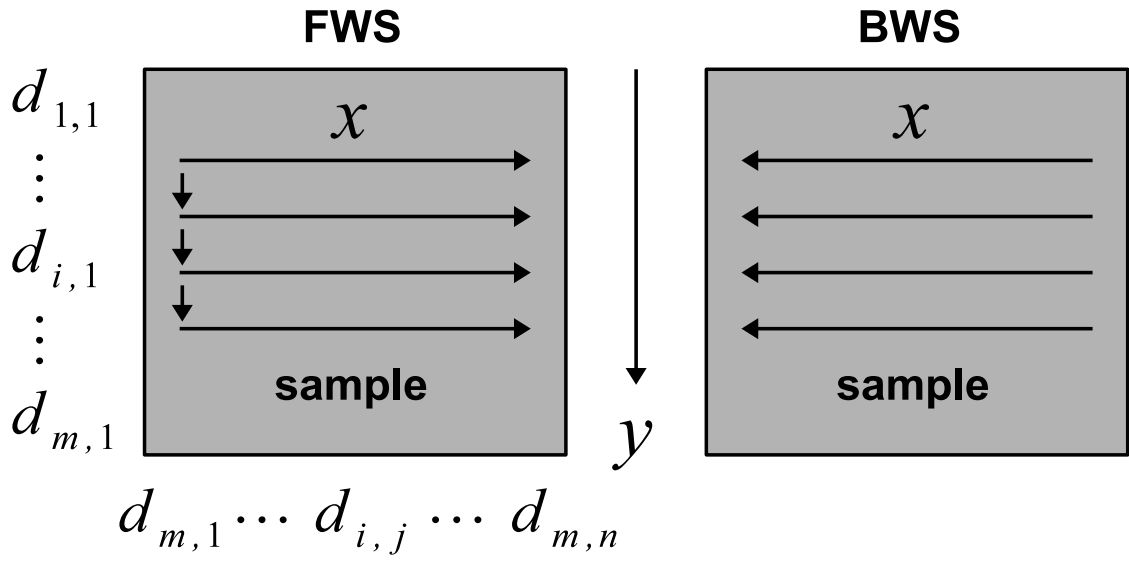
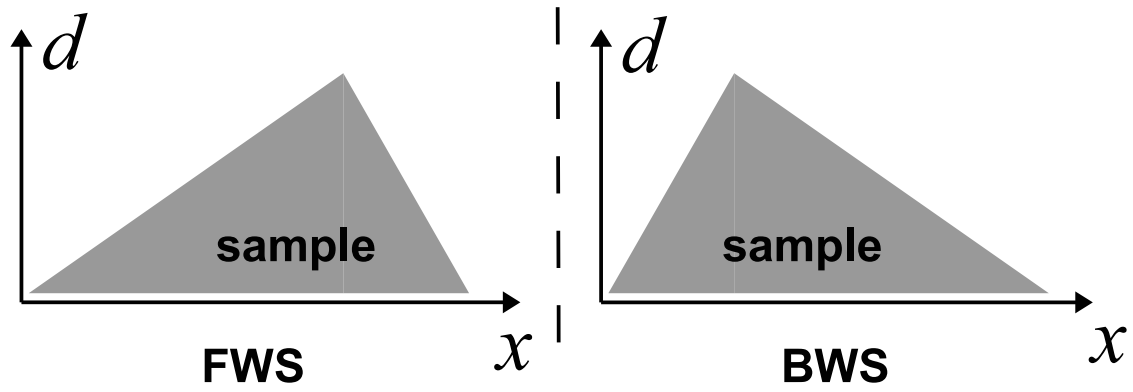


図 16: AFM のブロック線図



(a) カンチレバの試料走査経路



(b) FWS と BWS における表面形状

	FWS				BWS			
N	1	2	\cdots	n	n	\cdots	2	1
Previous Line	$d_{i-1,1}$	$d_{i-1,2}$	\cdots	$d_{i-1,n}$	$d_{i-1,n}$	\cdots	$d_{i-1,2}$	$d_{i-1,1}$
Scanning Line	$d_{i,1}$	$d_{i,2}$	\cdots	$d_{i,n}$	$d_{i,n}$	\cdots	$d_{i,2}$	$d_{i,1}$

(c) AFM の折り返し外乱

図 17: カンチレバの走査経路と表面形状

第 4 章

コンタクトモード AFM を用いた試料弾性推定法

本章では、コンタクトモード AFM を用いて試料の表面形状と弾性特性を同時に取得する手法を 2 つ提案する。1 つ目は、前列表面形状を用いた弾性推定法である。2 つ目は、往復型の弾性推定法である。

4.1 コンタクトモード AFM の力学モデル

文献 [28] で提案されているコンタクトモード AFM の力学モデルを図 18 に示す。図 18 において、 m , b , k はそれぞれシステムの質量、粘性係数、弾性係数を表す。また、 z_c , u , d , k_a はそれぞれカンチレバの変位、ピエゾへの位置指令、試料の表面形状、試料の弾性係数を表す。

図 18 の力学モデルについて、 u から z_c までの入出力関係は、

$$z_c = \frac{k_a}{ms^2 + bs + (k + k_a)}(u + d) \quad (4-1)$$

で与えられる。ここで、プラントの弾性係数は試料の弾性係数よりも十分に大きいと仮定し、 $k_a \ll k$ とすれば、式 (4-1) は

$$z_c \simeq \frac{k_a}{ms^2 + bs + k}(u + d) \quad (4-2)$$

と近似される。実際のコンタクトモード AFM のプラントは、フォトダイオードでカンチレバの変位を検出する際のゲイン g を考慮し、

$$\begin{aligned} P(s) &= \frac{z_c}{u} = g \frac{k_a}{ms^2 + bs + k} \\ &= \frac{k'_a}{s^2 + b's + k'} \end{aligned} \quad (4-3)$$

で表される。ただし、 $k' = \frac{k}{m}$, $b' = \frac{b}{m}$, $k'_a = g \frac{k_a}{m}$ である。

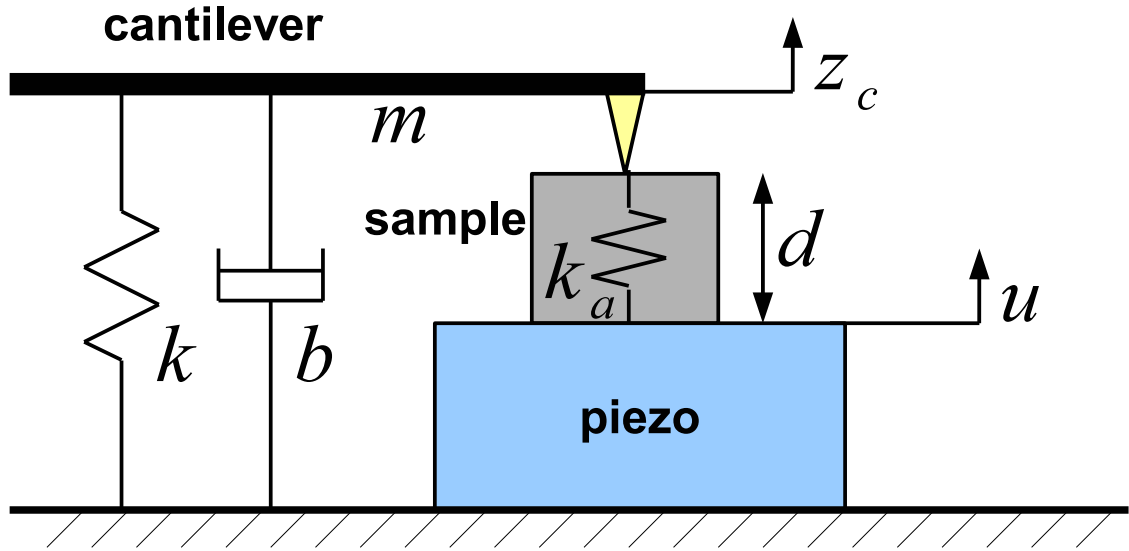


図 18: コンタクトモード AFM の力学モデル

また、本章で用いるフィードバック制御器は製品に用いられている位相遅れ補償器とし、

$$\begin{aligned} C_{fb}(s) &= \frac{\omega}{s + \omega_c} k_p \\ k_p &= 100 \\ \omega_c &= 2\pi f_c \quad (f_c = 0.5) \end{aligned} \quad (4-4)$$

を用いる。ただし、フィードバック制御器の各定数は装置のマニュアルに従って調整した。

4.2 コンタクトモード AFM の周波数応答

試料として Si 試料を用いた際の、サーボアナライザにより得られた位置指令 u からカンチレバの変位 z_c までの周波数特性を図 19 に記す。この周波数特性からフィッティングにより求まるノミナルプラントを、

$$P_n(s) = \frac{5.07 \times 10^8}{s^2 + 1.90 \times 10^4 s + 2.98 \times 10^8} \quad (4-5)$$

とした。ただし、式 (5-1) は試料のある一点における周波数特性である。実際の試料は、場所ごとに k'_a が異なる。従って、弾性係数を正しく推定する必要がある。

4.3 前列表面形状を用いた試料弾性推定法

試料の弾性係数 k_a は同一の試料内で常に均一であるとは限らない。そこで、弾性係数を随時推定するために逐次最小二乗 (RLS : Recursive Least-Squares) 法を用いる。

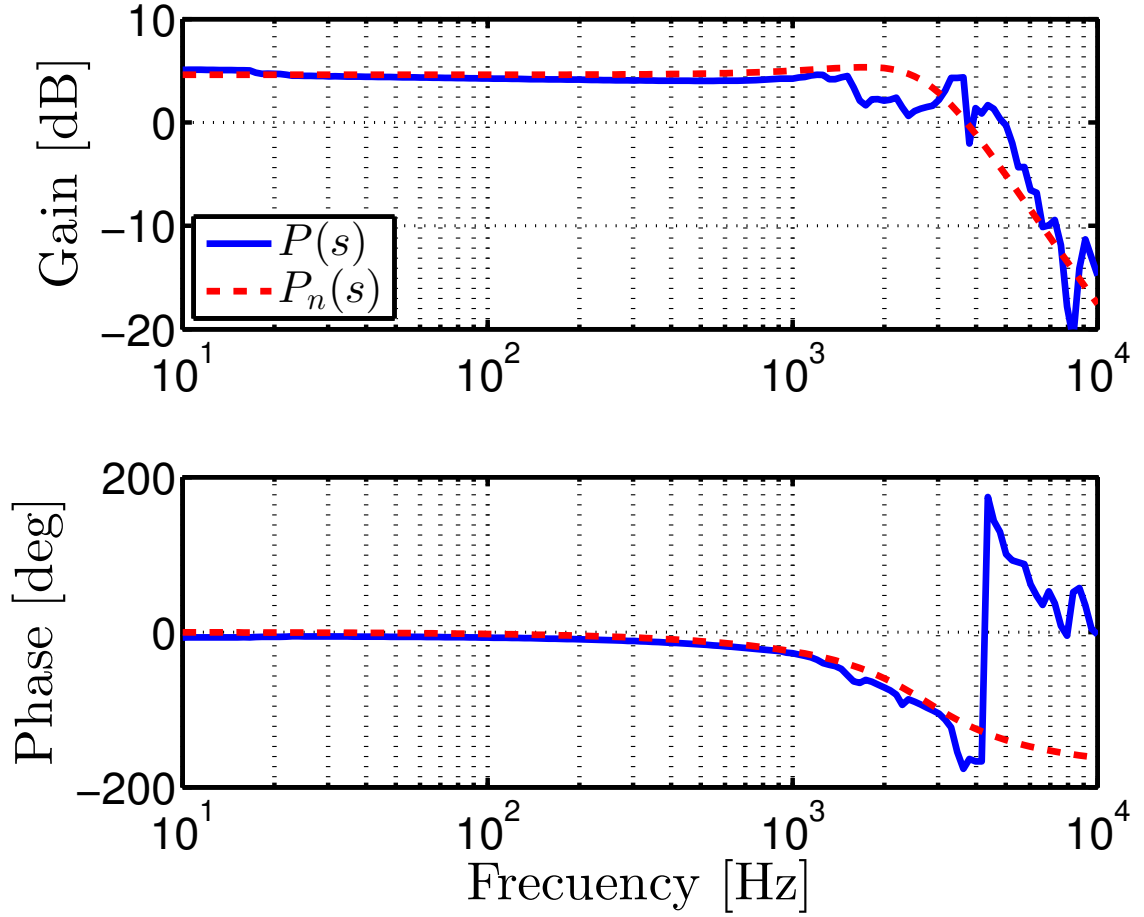


図 19: コンタクトモードの周波数特性 (Si 試料)

本節では AFM による試料弾性推定の提案法 1 として、前列表面形状を用いた試料弾性推定法について述べる。本手法では、カンチレバの走査の FWS のみを考える。このとき試料走査の奇数列目で試料の表面形状を測定する。偶数列目では、1 列前で取得した表面形状を利用して試料の弾性特性を推定する。つまり提案法 1 は、表面形状と弾性特性を 1 列おきの交互に取得する手法である。

4.3.1 逐次最小二乗法

逐次最小二乗 (RLS : Recursive Least-Squares) 法は、制御工学のシステム同定の分野で多く使われている手法である [29][30]。本節では、RLS 法のアルゴリズムについて述べる。

システムの入出力関係が、

$$\begin{aligned} y[k] + a_1 y[k-1] + \cdots + a_{n_a} y[k-n_a] \\ = b_1 u[k-1] + \cdots + b_{n_b} u[k-n_b] \end{aligned} \quad (4-6)$$

で表せるとする。このとき、未知のパラメータベクトル $\theta[k]$ 、測定可能な再帰ベクトル $\varphi[k]$ を

用いて,

$$y[k] = \boldsymbol{\theta}^T[k] \boldsymbol{\varphi}[k] \quad (4-7)$$

の関係式が得られる。ただし,

$$\boldsymbol{\theta}[k] = \left[a_1, \dots, a_{n_a}, b_1, \dots, b_{n_b} \right]^T \quad (4-8)$$

$$\boldsymbol{\varphi}[k] = \left[-y[k-1], \dots, -y[k-n_a], u[k-1], \dots, u[k-n_b] \right]^T \quad (4-9)$$

とする。

式(4-7)に関して, 未知のパラメータベクトル $\boldsymbol{\theta}$ は重み付き逐次最小二乗法から以下の更新式が得られる。

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}[k] = \hat{\boldsymbol{\theta}}[k-1] + \frac{\mathbf{P}[k-1] \boldsymbol{\varphi}[k]}{\lambda + \boldsymbol{\varphi}[k]^T \mathbf{P}[k-1] \boldsymbol{\varphi}[k]} \epsilon[k] \quad (4-10)$$

$$\epsilon[k] = y[k] - \boldsymbol{\varphi}^T[k] \hat{\boldsymbol{\theta}}[k-1] \quad (4-11)$$

$$\mathbf{P}[k] = \frac{1}{\lambda} \left(\mathbf{P}[k-1] - \frac{\mathbf{P}[k-1] \boldsymbol{\varphi}[k] \boldsymbol{\varphi}^T[k] \mathbf{P}[k-1]}{\lambda + \boldsymbol{\varphi}^T[k] \mathbf{P}[k-1] \boldsymbol{\varphi}[k]} \right) \quad (4-12)$$

ただし, λ は忘却係数であり 1 以下の正定数, $\hat{\boldsymbol{\theta}}[0] = 0$, $\mathbf{P}[0] = \gamma \mathbf{I}$ (γ は正定数) である。式(4-10)~(4-12)の更新式により, 未知パラメータの推定値 $\hat{\boldsymbol{\theta}}[k]$ が得られる。

4.3.2 前列表面形状を用いた試料弾性推定法 (提案法 1)

提案法 1 のブロック線図を図 20 に示す。コンタクトモード AFM は, カンチレバの歪みをなくすようにフィードバック制御を行う。つまり, 制御入力について,

$$\hat{d} = -u \simeq d \quad (4-13)$$

を試料の表面形状として測定する。従って, 1 列前の走査で得られたの表面形状と現在の走査列での表面形状がほぼ一致するとすれば,

$$d_{i,j} \simeq \hat{d}_{i-1,j} = -u_{i-1,j} \quad (4-14)$$

となる。

また, 式(4-3) より,

$$\begin{aligned} Q_r(s) (s^2 + b's + k') z_c &= Q_r(s) k'_a (u_{i,j} + d_{i,j}) \\ &\simeq Q_r(s) k'_a (u_{i,j} - u_{i-1,j}) \end{aligned} \quad (4-15)$$

が得られる。ただし, $Q_r(s) = \frac{\omega_r^2}{(s + \omega_r)^2}$ はプロパーとするための 2 次のローパスフィルタであり, $\omega_r = 500$ rad/s とした。ここで,

$$\theta = k'_a \quad (4-16)$$

$$\varphi = Q_r(s) (u_{i,j} - u_{i-1,j}) \quad (4-17)$$

$$y = Q_r(s) (s^2 + b's + k') z_c \quad (4-18)$$

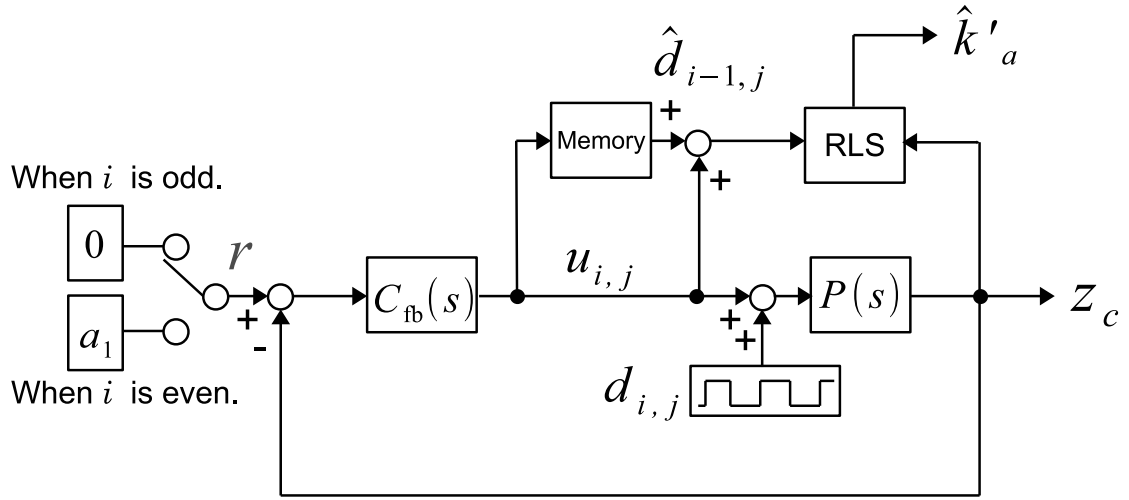


図 20: 提案法 1 のブロック線図

とすれば、RLS 法の更新式である式 (4-10)~(4-12) により試料の弾性特性 k'_a を逐次的に推定できる。ただし、式 (4-3) よりプラントの弾性係数が試料の弾性係数よりも十分に大きければ、伝達関数の分母係数は弾性特性に依存しないため、

$$b' = 1.9 \times 10^4 \quad (4-19)$$

$$k' = 2.9 \times 10^8 \quad (4-20)$$

を用いる。

式 (4-17) の左辺について式 (4-15) より、

$$\varphi = Q_r(s)(u_{i,j} - u_{i-1,j}) \simeq 0 \quad (4-21)$$

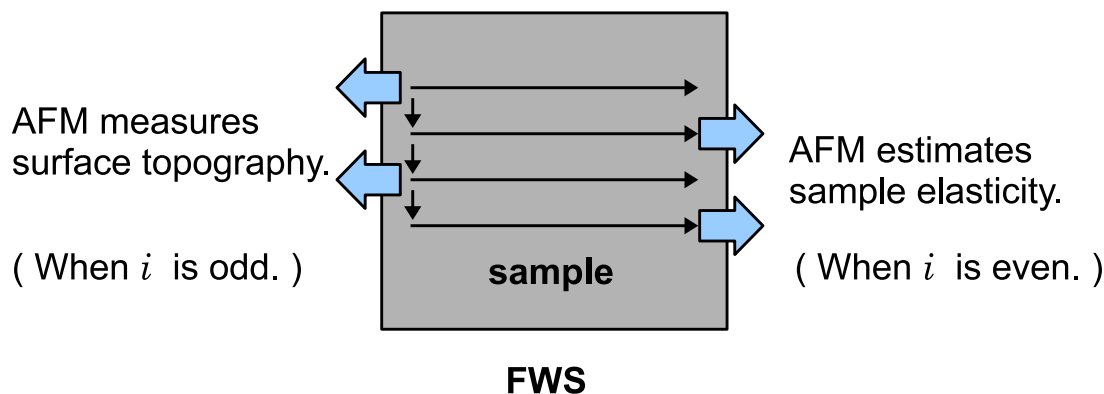
となり、これがプラントへの入力の推定値となる。実際の測定では出力の測定値には雑音が入るため、入力信号が小さければ出力端における S/N 比が劣化する。これはシステム同定の精度を劣化させるため、雑音対策の視点からはプラント入力のレベルは大きい方が望ましい。

AFM においてプラント入力の増加は、カンチレバが試料に与える力の増加を意味する。弾性推定が特に必要とされるソフトマテリアル系では、カンチレバから受ける力により表面が歪み、正確な表面形状が得られず、試料を破壊する場合もある。従って、プラント入力の値を常に大きな値にするのは好ましくない。そこで、図 20 のように、指令値 r の切り替えを考える。このとき、制御入力

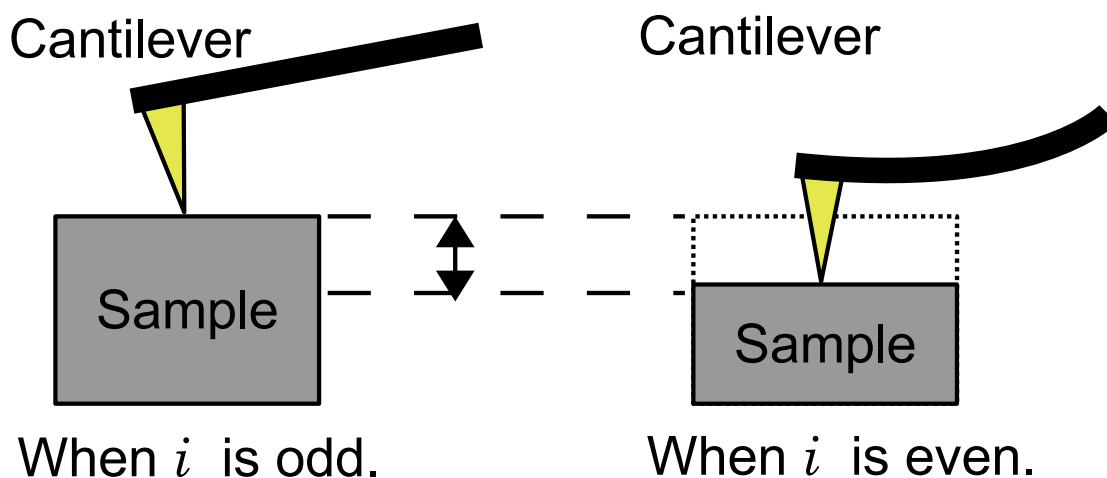
$$u_{i,j} = \frac{C_{fb}}{1 + PC_{fb}} r - \frac{PC_{fb}}{1 + PC_{fb}} d_{i,j} \quad (4-22)$$

$$r = \begin{cases} 0 & \text{When } i \text{ is odd,} \\ a_1 > 0 & \text{When } i \text{ is even,} \end{cases} \quad (4-23)$$

である。ただし、 a_1 は表面形状へ極端な歪みを与えない程度の値を用いる。



(a) 測定順序



(b) 試料とカンチレバの関係

図 21: 提案法 1 の概要

図 20 において, $r = 0$ のときはカンチレバが歪まないように制御することで試料の表面形状を得る。また, このときに得られる表面形状を FIFO メモリに記録する。 $r = a_1$ のときは, カンチレバを適当な強さで試料に押し付けることで S/N 比が改善する。このとき 1 列前の走査で記憶した表面形状を用いて試料の弾性特性を高精度で推定できる。

提案法 1 の概要を図 21 に示す。提案法 1 において表面形状, 弾性推定はそれぞれ, 図 21(a) のように FWS の奇数列目, 偶数列目の走査で行う。そのとき指令値を切り替えるため, カンチレバと試料は図 21(b) のような関係となる。弾性推定時にカンチレバにより試料を適当な力で押すことで, 試料に与える負荷を抑えながら S/N 比が改善され弾性推定の精度が上がる。これを交互に繰り返すことで試料全体を走査する。

4.4 往復型の弾性推定法

提案法1の問題点として、FWSの1列置きの交互に表面形状と弾性推定を行うため、AFMの分解能が半減することがある。また、1列前にメモリへ記憶した表面形状情報を用いて弾性推定を行うため、現在走査している表面形状と記憶した表面形状との誤差が弾性推定の誤差として現れる。

そこで本節では提案法2として、FWSで試料表面形状を測定し、BWSで弾性推定する手法を提案する。本手法では、表面形状を高精度に取得するため、表面形状オブザーバ(STO: Surface Topography Observer)を用いる[9]–[11]。また、より高精度な弾性推定のためBWSで完全追従制御(PTC: Perfect Tracking Control)法を用いる[31]。

4.4.1 表面形状オブザーバ

一般にAFMは、制御入力 u を用いて試料の画像を取得する。これに対して、我々の研究グループではSTOを提案している。STOのブロック線図を図22に示す。

AFMの状態方程式を、

$$\dot{\mathbf{x}}_p(t) = \mathbf{A}_p \mathbf{x}_p(t) + \mathbf{B}_p(u(t) + d(t)) \quad (4-24)$$

$$z_c(t) = \mathbf{C}_p \mathbf{x}_p(t) \quad (4-25)$$

とする。ここで、 z_c, u, d はそれぞれ、カンチレバの振幅、ピエゾステージへの Z 方向の制御入力、測定試料の表面形状を表す。また、表面形状の状態方程式は、

$$\dot{\mathbf{x}}_d(t) = \mathbf{A}_d \mathbf{x}_d(t) \quad (4-26)$$

$$d(t) = \mathbf{C}_d \mathbf{x}_d(t) \quad (4-27)$$

で表される。ただし、本稿では表面形状はランプ状外乱までを仮定し、

$$\mathbf{A}_d = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_d = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4-28)$$

を用いる。従って、拡大系の状態方程式は、

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}_s \mathbf{x}(t) + \mathbf{B}_s u(t) \quad (4-29)$$

$$z_c = \mathbf{C}_s \mathbf{x}(t) \quad (4-30)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_p \\ \mathbf{x}_d \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_p & \mathbf{B}_p \mathbf{C}_d \\ \mathbf{O} & \mathbf{A}_d \end{bmatrix} \\ \mathbf{B}_s &= \begin{bmatrix} \mathbf{B}_p \\ \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_p & \mathbf{O} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4-31)$$

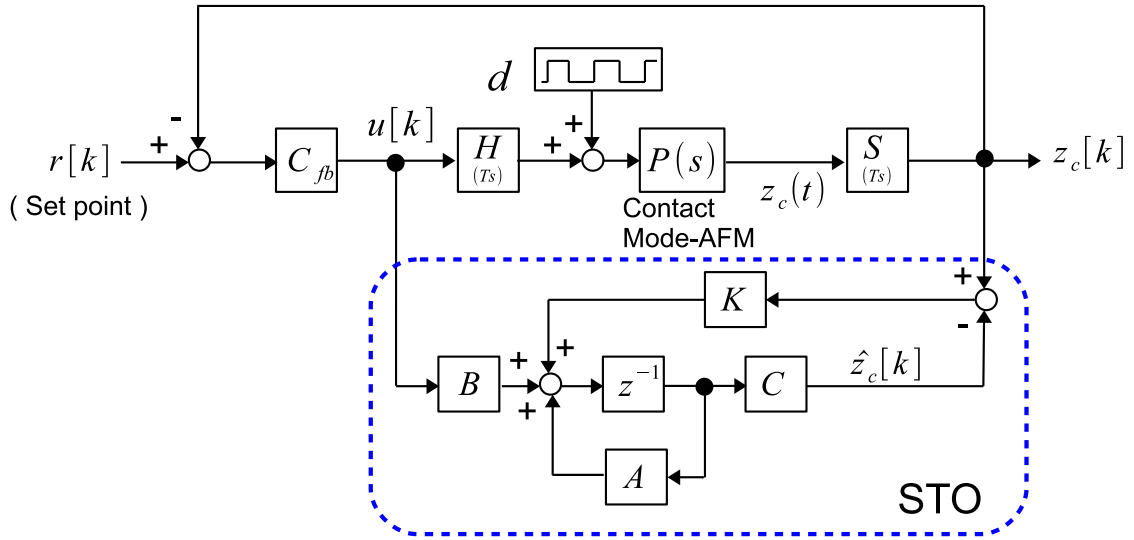


図 22: コンタクトモード AFM の STO

であり，拡大系に対する同次元オブザーバは，

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{A}_s \hat{\mathbf{x}}(t) + \mathbf{B}_s u(t) + \mathbf{K}_s (z_c(t) - \hat{z}_c(t)) \quad (4-32)$$

$$\hat{z}_c = \mathbf{C}_s \hat{\mathbf{x}}(t) \quad (4-33)$$

となる。本オブザーバにより，制御入力を用いる手法よりも高速な画像習得が可能となる。

4.4.2 完全追従制御法

PTC 法は，図 23 のようなマルチレートサンプリング制御を利用した制御法で，フィードバック制御器とマルチレートフィードフォワード制御器からなる 2 自由度制御系である。

フィードフォワード制御器はプラントの安定な逆システムであり， n 次の制御対象に対して 1 周期に n 回制御入力を切り替えることで，ノミナルプラントに対してサンプル点上で指令値に完全追従する。外乱やプラント変動が生じた場合には，FB 制御器により追従誤差を抑圧する。図 24 に一般的な PTC の概形を示す。

式 (4-24), (4-25) をサンプリング時間 $T_u (= \frac{1}{2}T_y)$ で 0 次ホールドすれば，

$$\mathbf{x}_o[k+1] = \mathbf{A}_o \mathbf{x}[k] + \mathbf{B}_o u[k] \quad (4-34)$$

$$z_c[k] = \mathbf{C}_o \mathbf{x}[k] \quad (4-35)$$

を得る。コンタクトモード AFM のプラント次数 $n = 2$ に注意すると，マルチレート化された状態方程式は，

$$\mathbf{x}_m[i+1] = \mathbf{A}_m \mathbf{x}_m[i] + \mathbf{B}_m \mathbf{u}_m[i] \quad (4-36)$$

$$z_c[i] = \mathbf{C}_m \mathbf{x}_m[i] \quad (4-37)$$

となる。ただし， $\mathbf{A}_m = \mathbf{A}_o^2$, $\mathbf{B}_m = [\mathbf{A}_o \mathbf{B}_o, \mathbf{B}_o]$, $\mathbf{C}_m = 1$, $\mathbf{u}_m[i] = [u_1[i], u_2[i]]^T$ である。

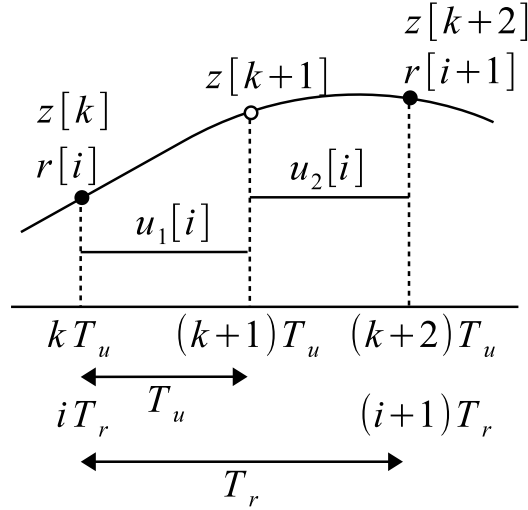


図 23: マルチレート制御

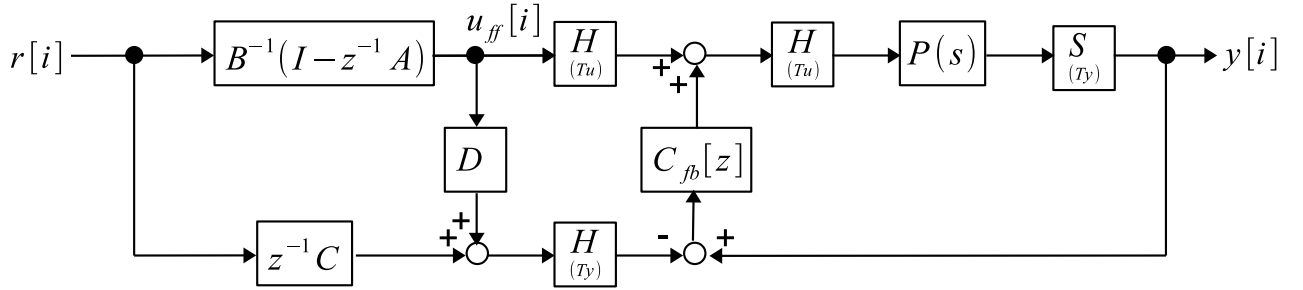


図 24: PTC の構成

式 (4-37) について安定な逆システムから，FF 制御入力は，

$$\mathbf{u}_{ff} = \mathbf{B}_m^{-1}(\mathbf{I} - z^{-1}\mathbf{A}_m)\mathbf{x}_m[i+1] \quad (4-38)$$

で表される。

従って，制御対象に対する目標軌道の予見値 $\mathbf{x}_m[i+1]$ を与えれば，ノミナルプラントに対してはサンプル点上で完全追従が達成される。また，外乱やプラント変動がある場合はフィードバック制御器により補償される。

4.4.3 シグナルジェネレータ

本節では，AFM の BWS において PTC 法により，表面形状に対して完全追従を達成するためのシグナルジェネレータについて説明する。状態変数を $\mathbf{x} = [z, \dot{z}]$ ，速度指令値を

$$\dot{r}[i] = \frac{r[i+1] - r[i-1]}{2T_y} \quad (4-39)$$

とする。このとき PTC は，状態変数の 1 サンプル先を指令値として与えれば，目標値に対して完全追従が達成される。

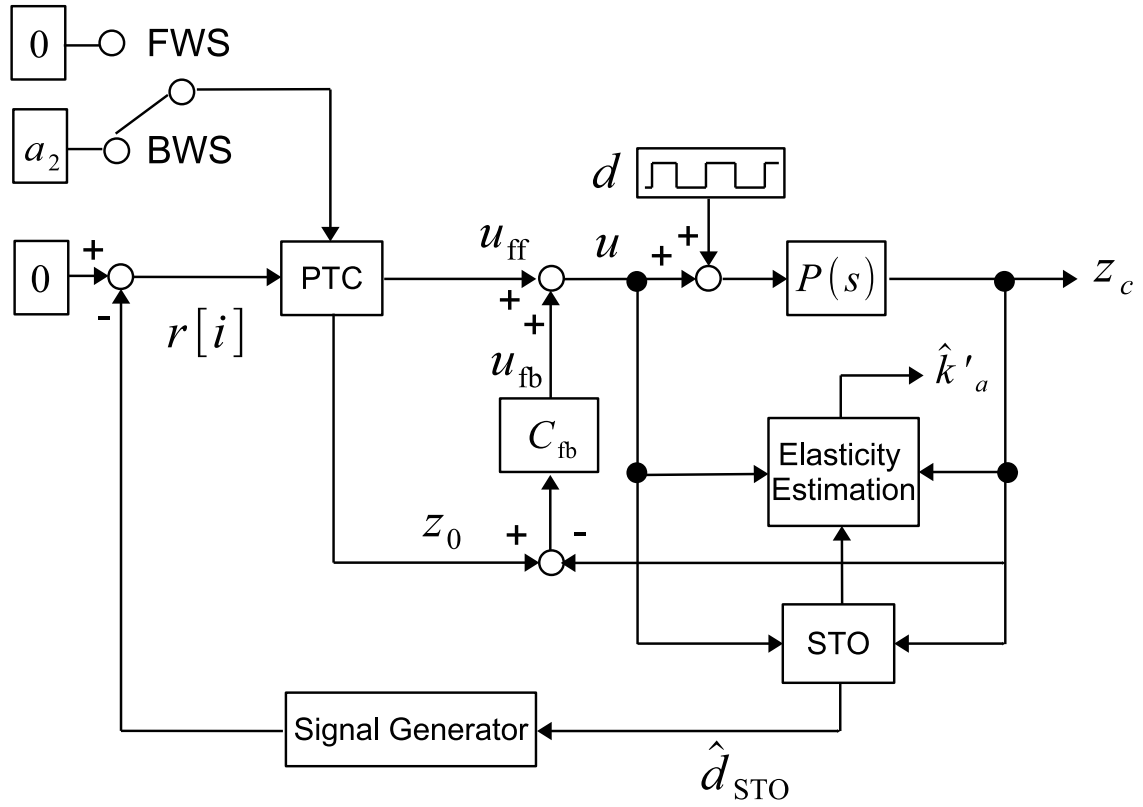


図 25: 提案法 2 のブロック線図

AFMにおいて表面形状を外乱とすれば、FWSとBWSで周期的な外乱とみなせる。つまり、FWSで得られた情報を元にBWSで指令値を生成することで、BWSにて表面形状に完全追従する。ただし、AFMではFWSとBWSでの走査経路が反転するため、外乱は図17(c)のように折り返し外乱となる。従って、コントローラとプラントのダイナミクスの影響のため、同じ表面形状を走査しているにもかかわらず、FWSとBWSでシステムの外乱応答が異なる。

そこで本稿では、FWSにてSTOで表面形状 \hat{d} を推定しスタック型メモリに記憶した上で、BWSにて、

$$r = -\frac{P_n}{1 + C_{fb}P_n}\hat{d}_{STO} \quad (4-40)$$

のように外乱応答を指令値とするとする。これにより、コントローラとプラントのダイナミクスを考慮した上での正しい指令値を得る。

本稿で用いるシグナルジェネレータを図26に示す。また、ノイズカットのため位相遅れの無いローパスフィルタとして、カットオフ周波数1.8 kHzのQフィルタ

$$Q[z] = \left(\frac{z + 2 + z^{-1}}{4}\right)^2 \quad (4-41)$$

を用いる。

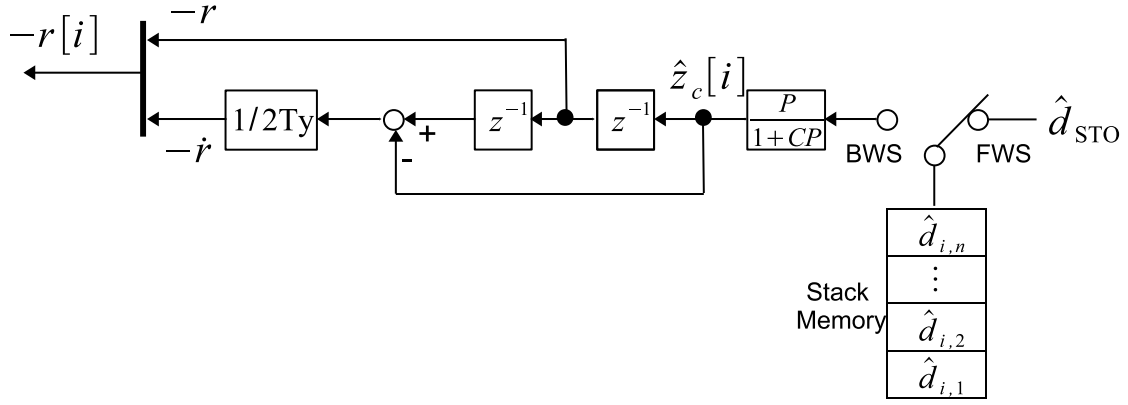


図 26: シグナルジェネレータ

4.4.4 往復型の試料弾性推定法

提案法では、図 25 のように FWS でフィードバックコントローラのみで制御し、STO により推定された表面形状をスタックメモリに記憶する。BWS では、PTC により表面形状に対して完全追従する。ここで、

$$\theta = k'_a \quad (4-42)$$

$$\varphi = Q_r(s)(u + \hat{d}_{STO}) \quad (4-43)$$

$$y = Q_r(s)(s^2 + b's + k')z_c \quad (4-44)$$

とし、RLS 法により弾性推定を行う。

BWS の弾性推定時では表面形状に完全追従するため、

$$\varphi = Q_r(s)(u + \hat{d}_{STO}) \simeq 0 \quad (4-45)$$

となり、提案法 1 と同様に S/N 比が劣化する。そこで、BWS では制御入力を a_2 だけ増加させることで、試料を少し押さえつけた状態で走査をする。従って、 a_2 から出力までの応答は、

$$\begin{aligned} z_c &= \frac{P(1 + C_{fb}P_n)}{1 + PC_{fb}}a_2 \\ &\simeq Pa_2 \end{aligned} \quad (4-46)$$

となり、S/N 比が改善され正確な弾性推定が可能となる。

本手法では FWS で表面形状を推定し、BWS で弾性推定を行うため、提案法 1 に比べて分解能が 2 倍に改善する。また、FWS と BWS では試料の同じ経路を互いに逆に走査する。従って、弾性推定時の表面形状はスタックメモリに記憶された表面形状と一致するため、提案法 1 で問題であった記憶した 1 列前の表面形状と現在の走査列での表面形状の誤差による弾性推定の誤差がなくなる。

4.5 弾性推定のシミュレーションと実験

本節ではシミュレーションと実験により、提案法 1 と提案法 2 を比較し、検討する。

4.5.1 シミュレーション

本節では、シミュレーションにより提案法の有効性を示す。シミュレーションに用いるプラントモデルは、式 (5-1) を用いた。シミュレーションの結果を図 27 に示す。図 27(a) はプロローブの走査経路であり、三角波の増減がそれぞれ FWS, BWS を表す。図 27(b) は表面形状 d である。また、図 27(c), 27(d) はそれぞれプラントの出力 z_c , プラントへの入力 $u + \hat{d}$ である。BWS では、カンチレバを歪ませた状態で表面形状に完全追従していることがわかる。

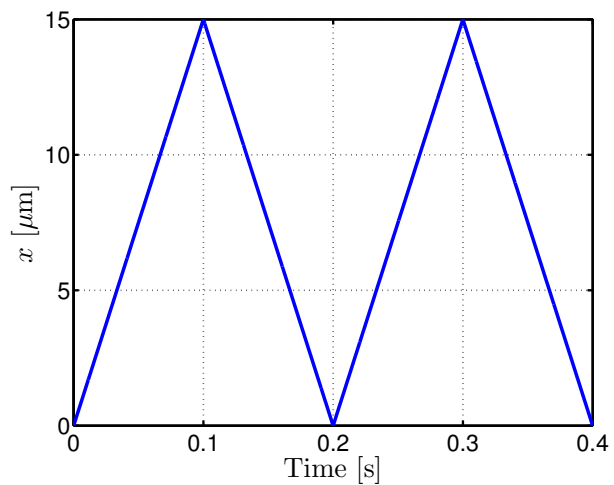
図 27(e) は、推定した弾性特性 \hat{k}_a' である。提案法 1 は、1 列おきの FWS で弾性推定を行なっているのに対して、提案法 2 は各走査の BWS で弾性推定を行う。従って、提案法 1 は図 27(e) 中の $0.2 \sim 0.3$ s で、提案法 2 は $0.1 \sim 0.2$ s, $0.3 \sim 0.4$ s で弾性推定が行われている。これにより、提案法 2 では提案法 1 に比べて分解能が 2 倍に改善している。また、本シミュレーションでは式 (5-1) より、 $\hat{k}_a' = 5.07 \times 10^8$ である。提案法 1 は、 $\hat{d} \simeq -u$ を用いて推定を行うため、コントローラの遅れの影響により推定結果に誤差が生じているのに対し、提案法 2 ではより正確な推定がなされている。

4.5.2 実験

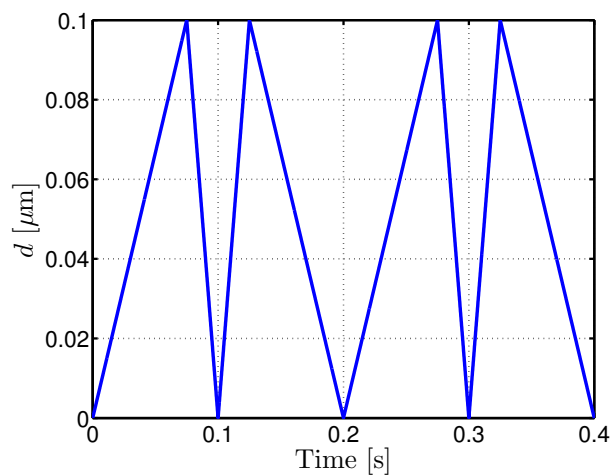
本節では、実験により提案法の有効性を示す。実験結果を図 42 に示す。図 28(a) について、三角波の増減はそれぞれ FWS, BWS を表す。また、図 28(b) は STO で推定した試料表面形状である。図 28(c), 28(d) はそれぞれ、プラントの出力 z_c , プラントへの入力 $u + \hat{d}$ である。図 28(e) は弾性推定値 \hat{k}_a' である。提案法 1 については $1.8 \sim 2.6$ s で、提案法 2 では $1.1 \sim 1.8$ s, $2.6 \sim 3.4$ s で弾性推定が行われている。提案法 2 では提案法 1 に比べ、より正確に推定が行われており、分解能も 2 倍に改善している。

しかし、提案法 2 で推定された弾性特性について、 $1.1 \sim 1.2$ s, $1.7 \sim 1.8$ s 付近で推定の精度が劣化している。これは、FWS でメモリに記憶した表面形状 \hat{d}_{STO} と BWS での実際に走査している表面形状 d の誤差が原因である。

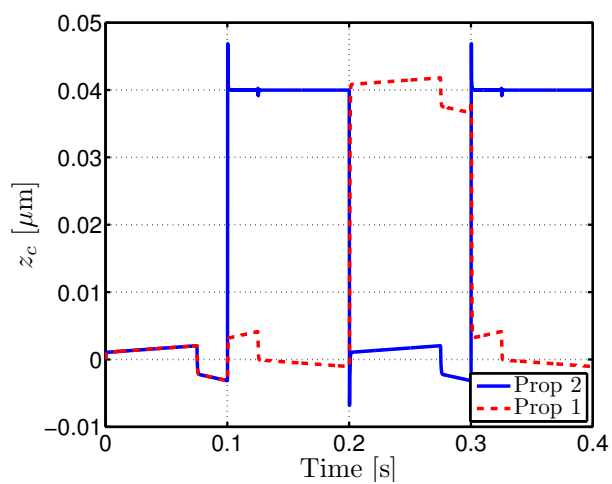
また図 28(c) の 1.8 s のように、提案法 2 では FWS と BWS の切替時に出力が乱れている。これは、PTC の位置指令を FWS と BWS でステップ状に切り替えたため、速度指令が差分により非常に大きなものとなることによる。この乱れを改善するには、PTC の位置指令をなまらせた上で PE 性の取れた指令値を用いる必要がある。



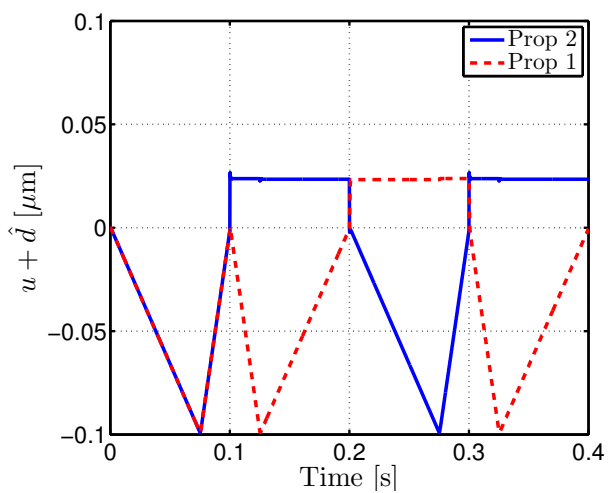
(a) Scanning (x).



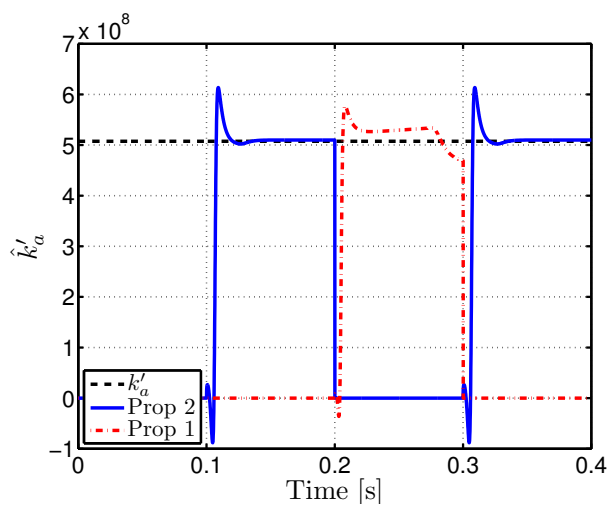
(b) Surface topography (d).



(c) Plant output (z_c).

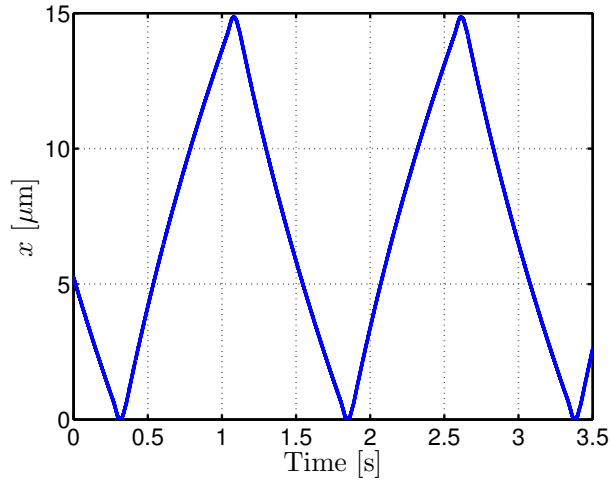


(d) Plant input ($u + \hat{d}$).

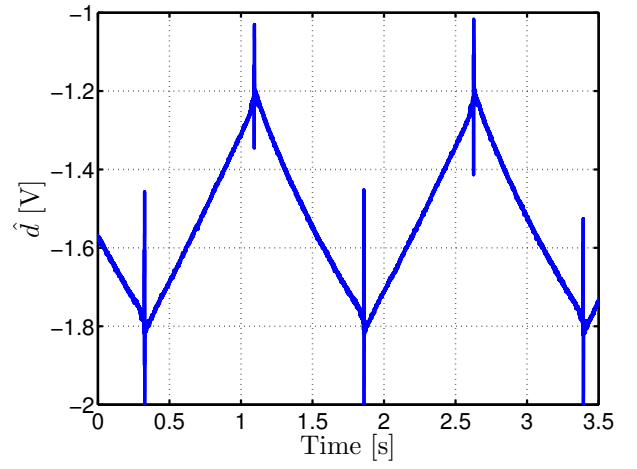


(e) Estimated elasticity (\hat{k}'_a).

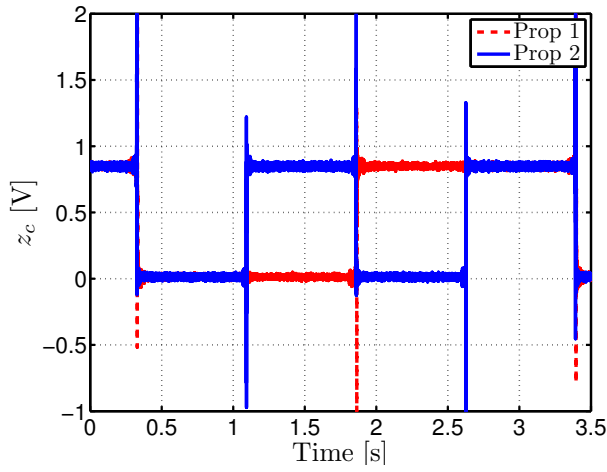
図 27: 弾性推定のシミュレーション結果



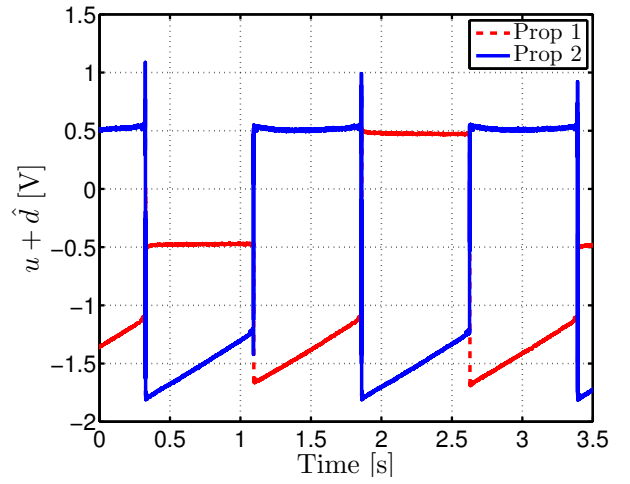
(a) Scanning (x).



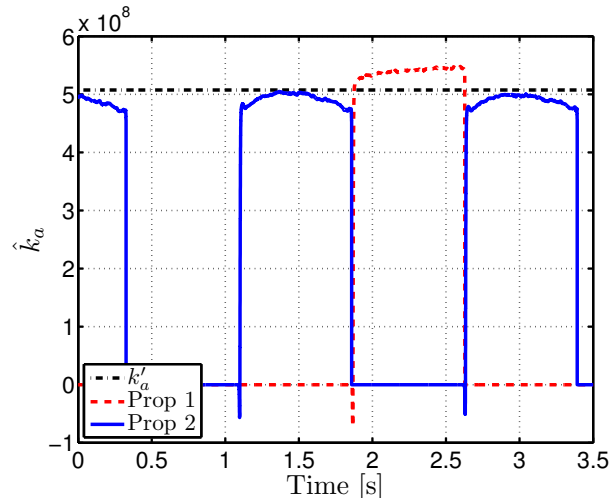
(b) Surface topography (\hat{d}_{STO}).



(c) Plant output (z_c).



(d) Plant input ($u + \hat{d}$).



(e) Estimated elasticity (\hat{k}'_a).

図 28: 実験結果

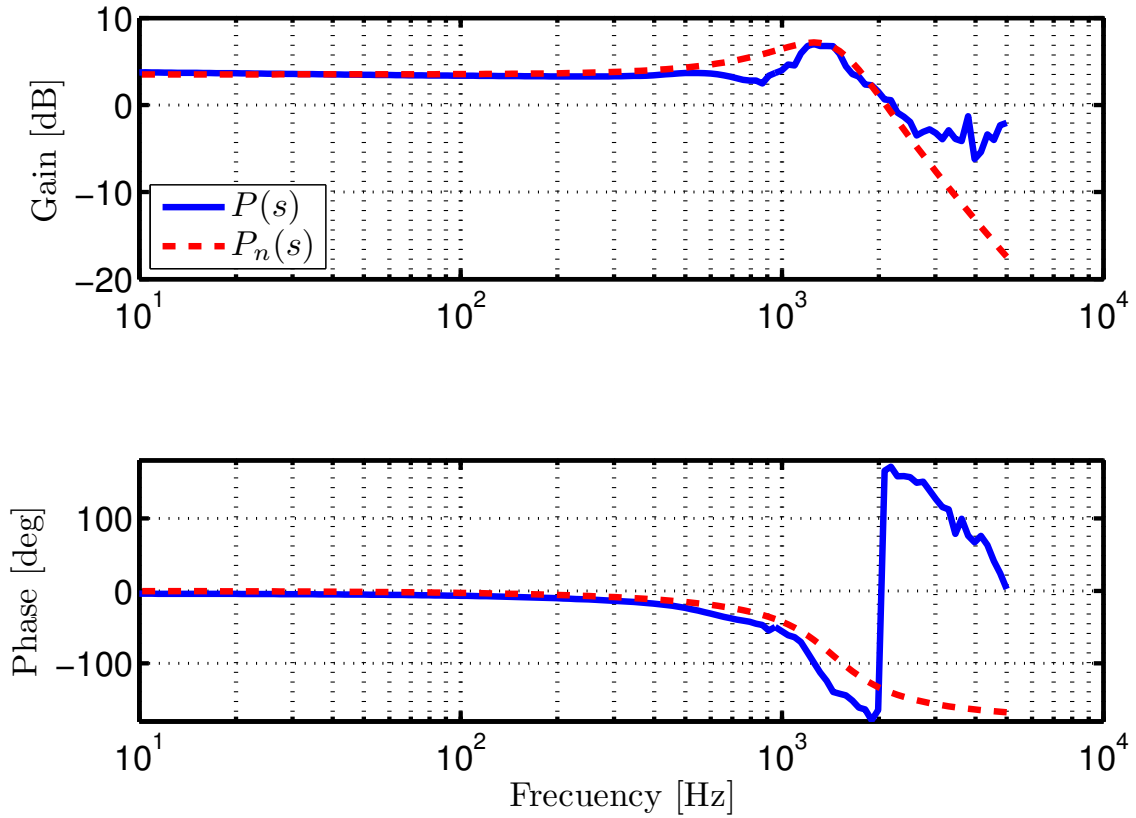


図 29: コンタクトモードの周波数特性 (プラスチック試料)

4.6 プラスチック試料の測定と提案手法の検証

本節では、プラスチック試料について提案法 1 により取得した表面形状と弾性特性の 3 次元マップについて述べる。また、提案法の妥当性を検証する手法について述べる。

4.6.1 表面形状と弾性特性の 3 次元マップ

本節で用いたプラスチック試料の周波数特性を図 29 に示す。フィッティングにより得られたノミナルプラントは、

$$P_n(s) = \frac{1.25 \times 10^8}{s^2 + 6.38 \times 10^3 s + 8.30 \times 10^7} \quad (4-47)$$

である。

提案法 1 で得られたプラスチック試料の表面形状と弾性特性の 3 次元マップを図 31 に示す。一般的に AFM は表面形状の画像しか取得できないが、本手法により 1 度試料を走査するだけで表面形状と弾性特性の両方の画像を取得することが可能となる。

図 31 に $a_1 = 0.1, 0.2, 0.3$ として推定したプラスチック試料の弾性特性のマップを示す。 $a_1 = 0.1$ では S/N 比が悪く推定がなされていない。 $a_1 = 0.2, 0.3$ ではどちらも S/N 比が改善され、正しい値が推定されていることがわかる。従って、指令値 a_1 は試行錯誤的に決定する必要がある。

4.6.2 提案法の検証

上述した提案手法のうち，による測定結果について，その妥当性を実験により検証する。

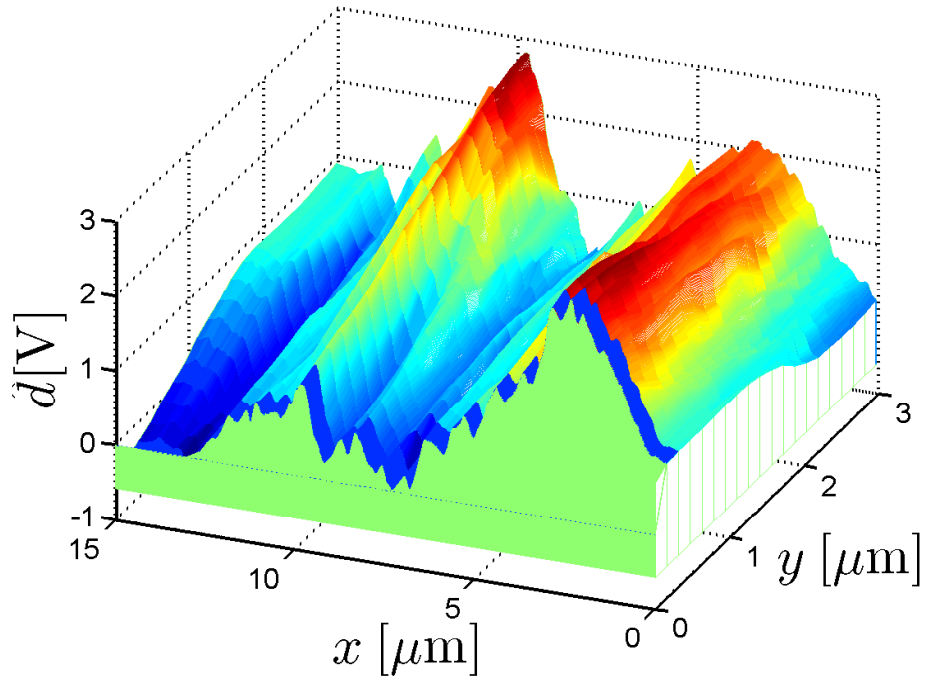
検証方法の概要を表したブロック図を図 32 に示す。まず，試料のある区間について提案手法により弾性特性と表面形状を測定する。次に，弾性特性を得た区間に対してステップ状の信号をプラントへ入力し，そのときの出力 z を得る。また，提案手法で得られる弾性特性を用いた時変システムについて，実験で用いたものと同じステップ状信号を用い，シミュレーション上でプラント出力 z_a を得る。 z と z_a を比較し一致すれば，提案法により得られた弾性特性は妥当なものであるといえる。

弾性特性を用いた時変システムのステップ応答は，式 (4-3) の

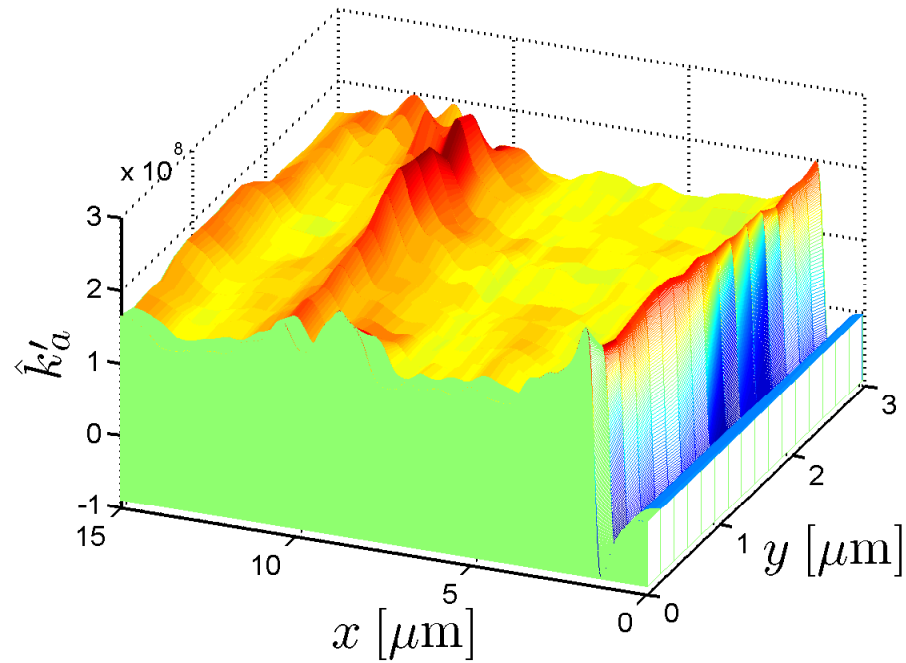
$$\hat{P}(s) = \frac{\hat{k}'_a}{s^2 + b's + k'} \quad (4-48)$$

として，時変システムを作成し，検証を行う。

この検証の実験結果を図 33 に示す。図 33(a)，33(b) はそれぞれ，試料表面形状，推定された弾性特性である。また，弾性特性の推定区間で図 33(c) の位置指令を入力した。図 33(d) より，実験で得られたカンチレバの変位 z とシミュレーションで得られたカンチレバの変位 z_a が一致しているため，提案手法の妥当性が示された。

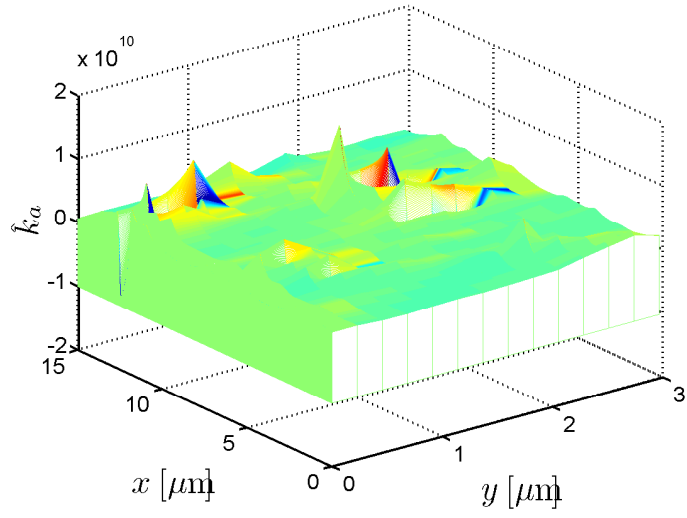


(a) 表面形状の3次元マップ

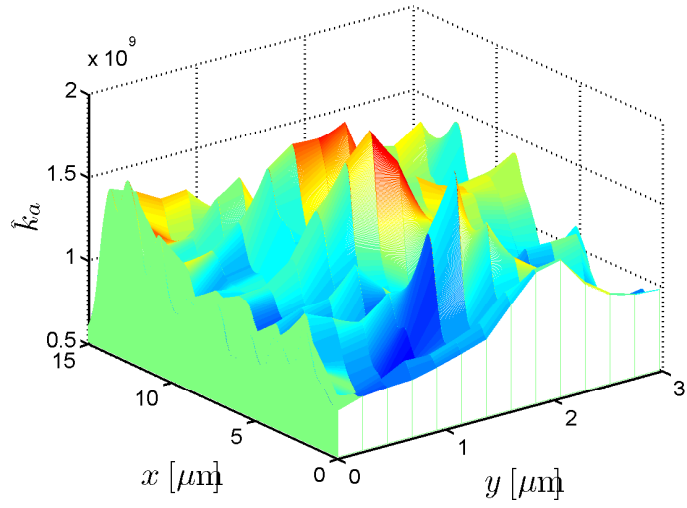


(b) 弾性特性の3次元マップ

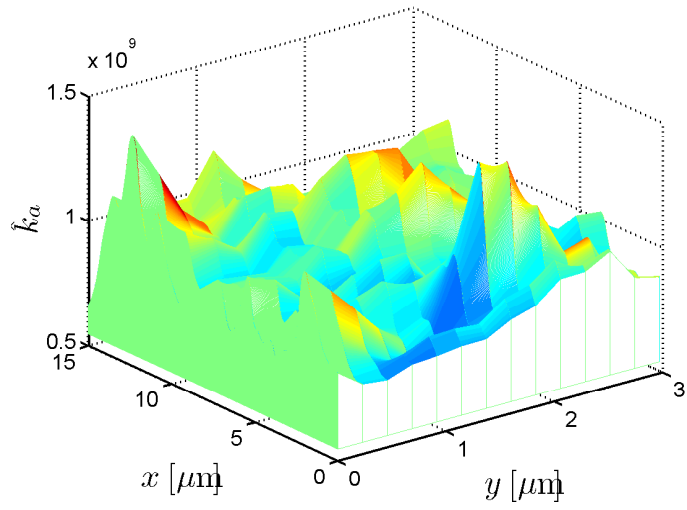
図 30: プラスチック試料の3次元マップ



(a) $a_1 = 0.1$



(b) $a_1 = 0.2$



(c) $a_1 = 0.3$

図 31: S/N 比の影響

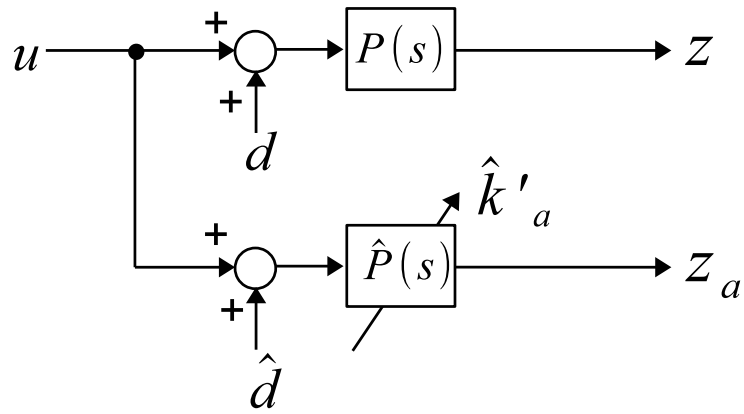
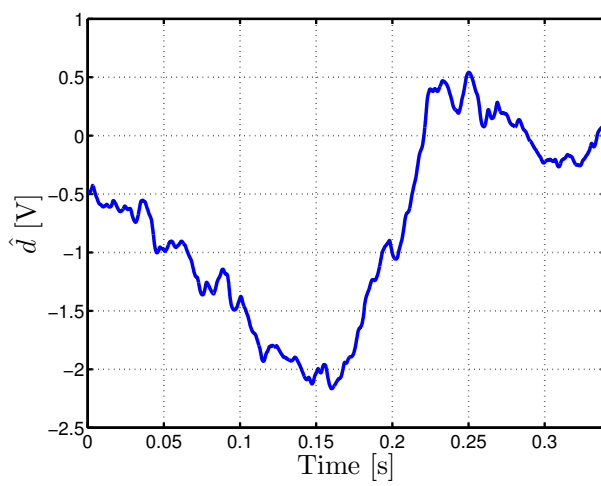
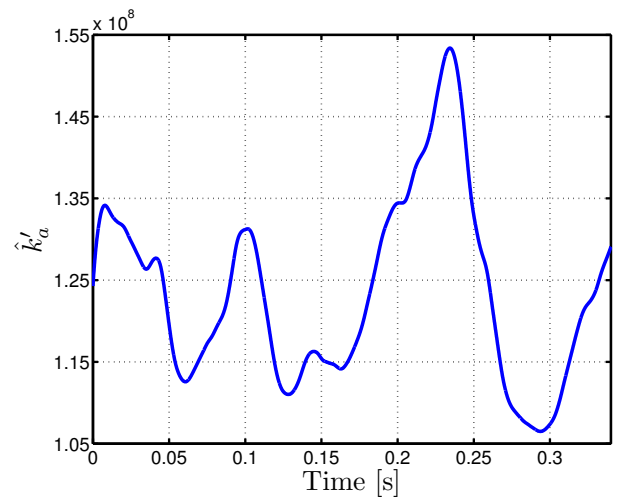


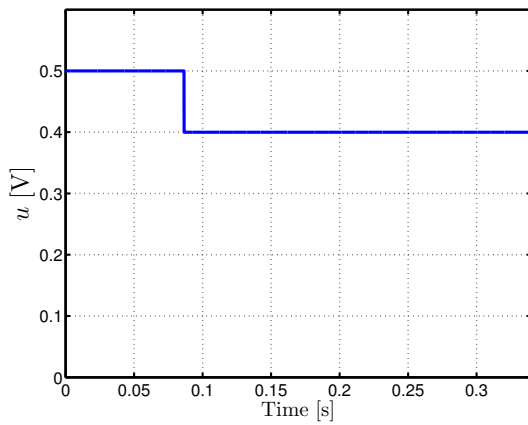
図 32: 検証手法のブロック線図



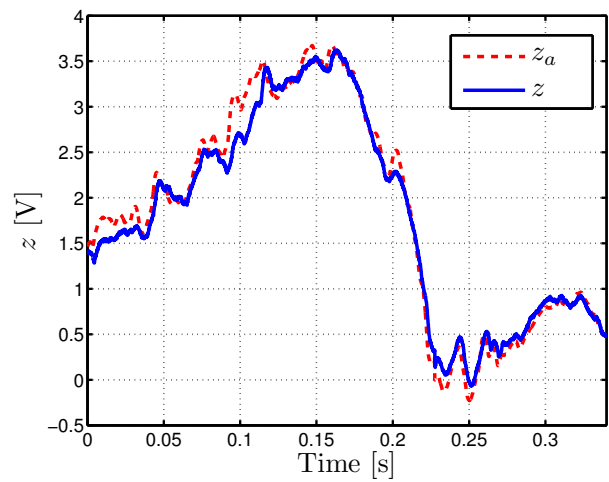
(a) 表面形状 (\hat{d})



(b) 推定された弾性特性 (\hat{k}'_a)



(c) 制御入力 (u)



(d) 出力の比較 (z, z_a)

図 33: 検証手法の実験結果

第 5 章

出力飽和予測制御

一般的なタッピングモード AFM のブロック線図を図 34 に示す。第 2 章で述べたように、タッピングモード AFM ではカンチレバの振動振幅が飽和を起こす。図 35 に、タッピングモード AFM の測定により生じる出力飽和問題を示す。この出力飽和は、フィードバックの追従特性が劣化、飽和領域でのオブザーバの推定精度の劣化を引き起こす。

本節では、タッピングモード AFM の出力飽和問題に対して、出力飽和予測制御を提案する。本手法は、飽和条件を制約として考慮したモデル予測制御モデル予測制御 (MPC : Model Predictive Control) である。これは、非飽和領域では制御器が線形に働き、飽和領域では非線形な制御器として働く。つまり飽和領域において、出力を非飽和領域に戻そうと強力な制御が働くため、飽和時間が短縮され追従特性が改善する。

5.1 タッピングモード AFM の周波数特性

試料として Si 試料を用いた際の、サーボアナライザにより得られた位置指令 u からカンチレバの振動振幅 z_{am} までの周波数特性を図 36 に示す。この周波数特性からフィッティングにより求まるノミナルプラントは、

$$P_n(s) = \frac{2.8 \times 10^9}{s^2 + 5.0 \times 10^4 s + 2.5 \times 10^7} \quad (5-1)$$

である。

5.2 出力飽和により追従特性の劣化

出力飽和を無視したシミュレーションと出力飽和を考慮したシミュレーションの結果を図 37 に示す。本実験機の飽和特性は $z_{\min} = 0$, $z_{\max} = 7 \sim 9$ 程度である。そこで本シミュレーションでは、 $0 \leq z_{am} \leq 8$ とした。また、フィードバック制御器は従来法である PI 制御器とし、

$$C_{PI} = 1.0 \times 10^{-3} \times \frac{T_{pi}s + 1}{T_{pi}s} \quad (5-2)$$

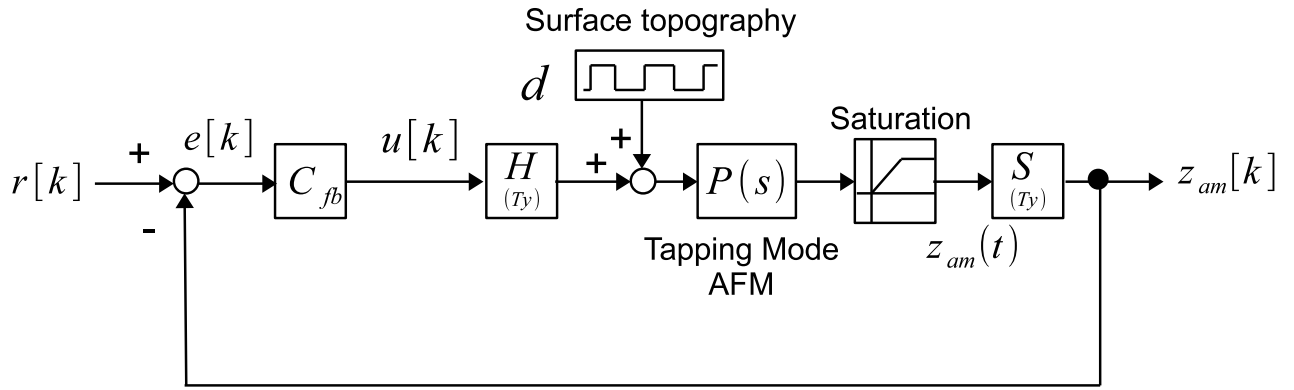


図 34: タッピングモード AFM のブロック線図

$$T_{\text{pi}} = \frac{1}{2\pi \times 200} \quad (5-3)$$

を用いた。

図 37 は、PI 制御器を用いた際の、出力飽和がない場合と出力飽和がある場合の比較である。図 5.2, 5.2, 5.2 はそれぞれ、制御入力、出力、STO による表面形状の推定値を表す。図 5.2 より、0.1 ~ 0.17 s で出力飽和を起こしていることがわかる。図 5.2 において飽和領域では制御入力 u は、実際に必要とされる制御量が得られていない。これは出力飽和により、見かけの出力が実際の出力よりも小さく得られるためである。さらに図 5.2 において、飽和領域では STO が表面形状を正しく推定できていないことがわかる。このように AM-AFM は出力飽和により、飽和領域でのフォードバック追従特性が劣化する。

5.3 モデル予測制御

MPC は、現時刻の状態変数から未来の状態変数の予測値を計算し、設定した評価関数が最小となるように制御する手法である [32]。本来、MPC は産業プロセス制御で注目を浴びていた。しかし、計算機の発達や制約を取り扱えるという特徴から、サーボ機構のような帯域幅の高いものにも応用されている。また、連続時間系への拡張など近年では様々な研究がなされている [33]。

AFM においては、 X - Y スキャナの制御に MPC を適用した研究は存在するものの、 Z スキャナに適用した例は無い [34]。本節では、AM-AFM の出力飽和問題を制約として考慮した上で、 Z スキャナへと MPC を適用する。

5.3.1 制約なしモデル予測制御

本節では、AM-AFM の出力飽和を考慮しない MPC を考える。MPC の概要を図 38 に示す。

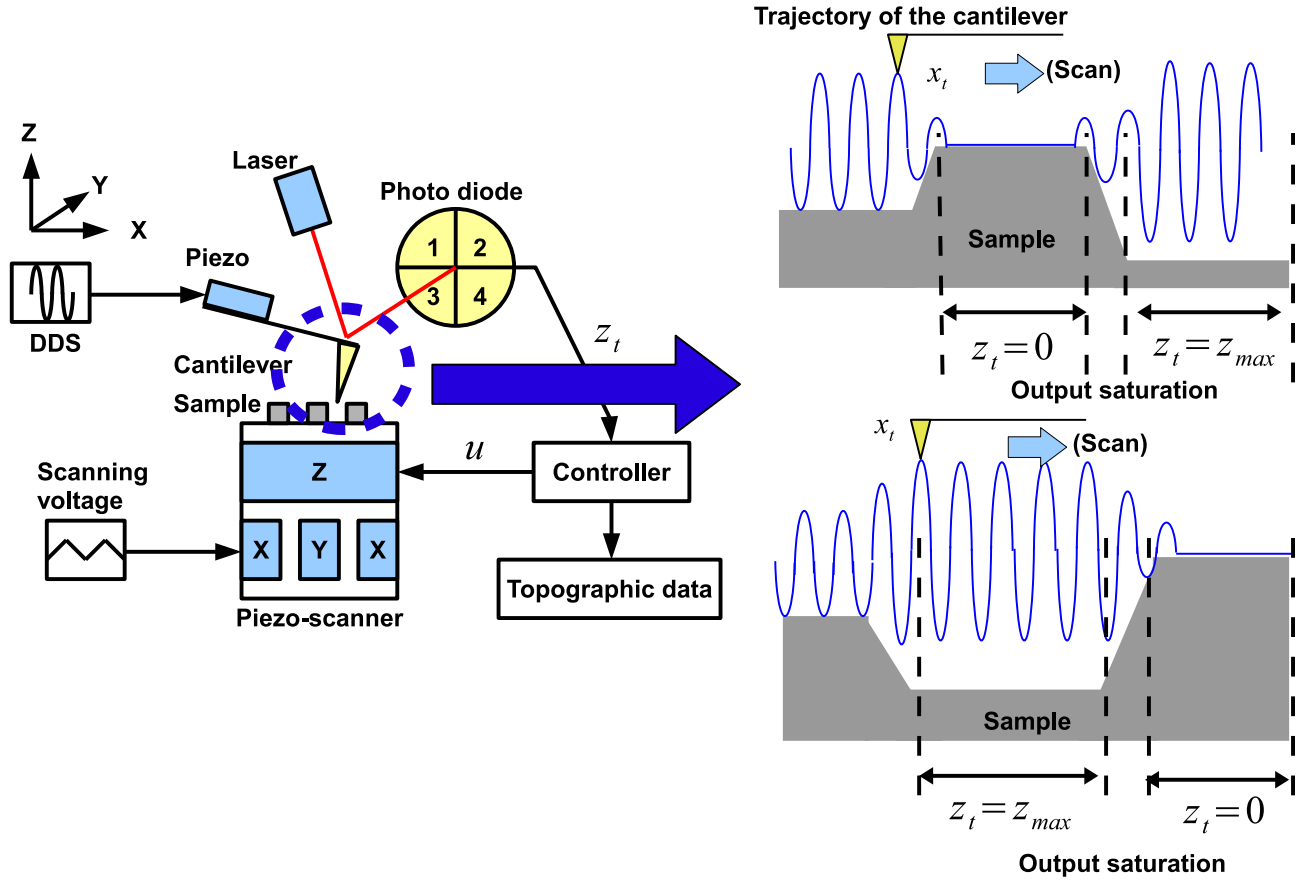


図 35: タッピングモード AFM の測定で生じる出力飽和

MPC 制御器は内部モデルを有しており、現時刻から H_p サンプル先までのプラントの振る舞いを予測する。これにより、評価関数を最小化するような現時刻 k から未来の時刻 $k + H_p$ までの最適な制御入力を計算し、そのうち時刻 k の制御入力を実際の制御入力として用いる。次のサンプル時刻 $k + 1$ では、同様に時刻 $k + H_p + 1$ までを予測し、制御入力を決定する。ただし、 H_p は予測ホライズンと呼ばれる。

$\hat{u}[k + i | k]$ は、時刻 k で計算して得られた時刻 $k + i$ における入力の予測値を表す。また、 $i \geq H_u$ において、 $\Delta \hat{u}[k + i | k] = 0$ とする。つまり、すべての $i \geq H_u$ に対して、 $\hat{u}[k + i | k] = \hat{u}[k + H_u - 1 | k]$ である。ただし、 H_u は制御ホライズンと呼ばれ、 $H_p \geq H_u$ である。

今、式 (4-29), (4-30) を離散化した状態方程式を

$$\mathbf{x}[k + 1] = \mathbf{A}\mathbf{x}[k] + \mathbf{B}u[k] \quad (5-4)$$

$$z_c[k] = \mathbf{C}\mathbf{x}[k] \quad (5-5)$$

とすれば、現時刻 k から H_p サンプル先までの状態変数、出力の推定値は式 (5-6), (5-7) で表される。

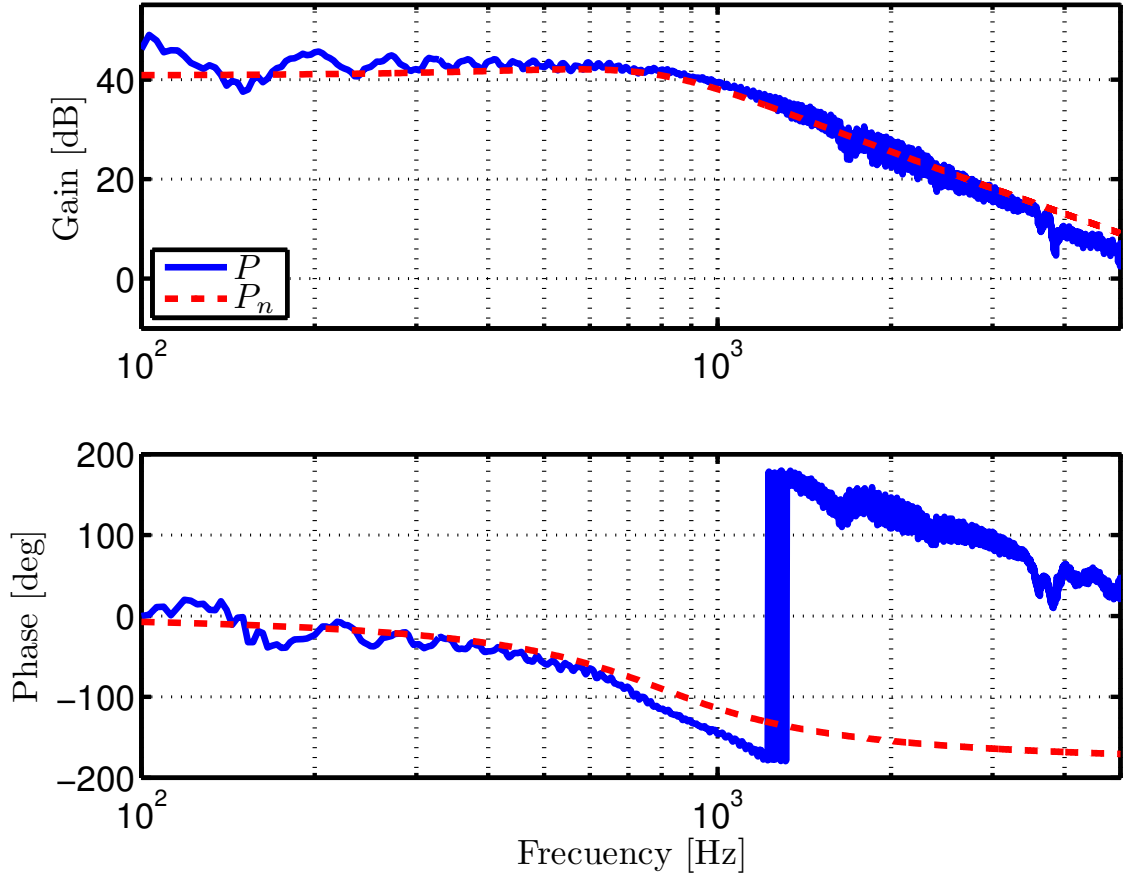


図 36: タッピングモード AFM の周波数特性 (Si 試料)

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}[k+1|k] \\ \hat{\mathbf{x}}[k+2|k] \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{x}}[k+H_p|k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{A}^{H_p} \end{bmatrix} \mathbf{x}[k] + \begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{AB} \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} \mathbf{A}^i \mathbf{B} \end{bmatrix} \mathbf{u}[k-1] + \begin{bmatrix} \mathbf{B} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{AB} + \mathbf{B} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} \mathbf{A}^i \mathbf{B} & \cdots & \sum_{i=0}^{H_p-H_u} \mathbf{A}^i \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \hat{\mathbf{u}}[k|k] \\ \Delta \hat{\mathbf{u}}[k+1|k] \\ \vdots \\ \Delta \hat{\mathbf{u}}[k+H_u-1|k] \end{bmatrix} \quad (5-6)$$

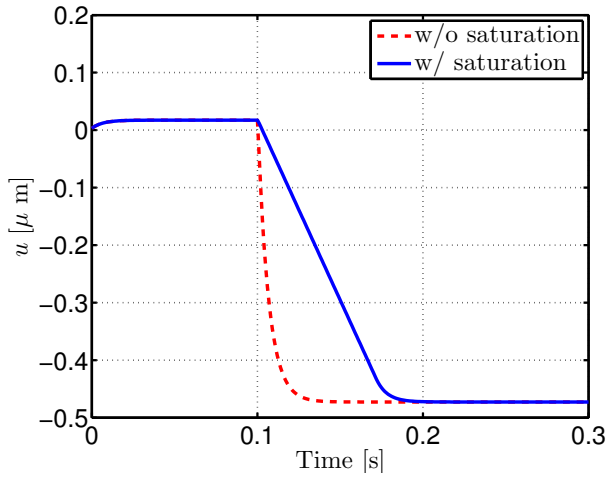
$$\begin{bmatrix} \hat{z}_c[k+1|k] \\ \vdots \\ \hat{z}_c[k+H_p|k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} & \cdots & \mathbf{O} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}[k+1|k] \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{x}}[k+H_p|k] \end{bmatrix} \quad (5-7)$$

このとき、MPCにおいて最小化すべき評価関数は、

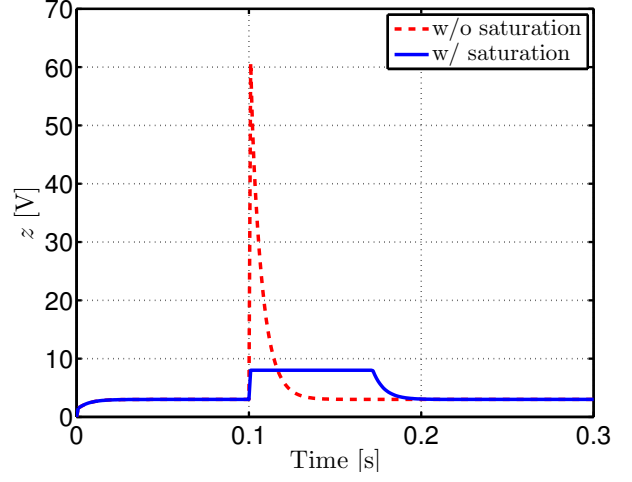
$$V[k] = \| \mathbf{Z}[k] - \mathbf{T}[k] \|_{\mathbf{Q}}^2 + \| \Delta \mathbf{U}[k] \|_{\mathbf{R}}^2 \quad (5-8)$$

である。ただし、 $r[k]$ をカンチレバの振幅のセットポイントとしたとき、

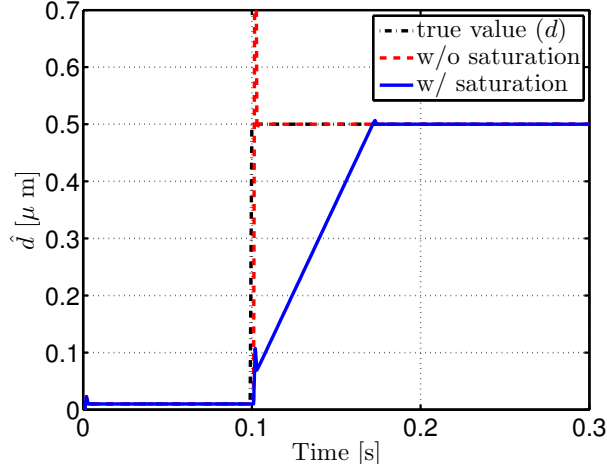
$$\mathbf{Z}[k] = \begin{bmatrix} \hat{z}_c[k+1|k] & \cdots & \hat{z}_c[k+H_p|k] \end{bmatrix}^T \quad (5-9)$$



(a) 制御入力



(b) カンチレバの振動振幅 (出力)



(c) 表面形状

図 37: 出力飽和による追従特性の劣化

$$\mathbf{T}[k] = \begin{bmatrix} r[k+1 | k] & \cdots & r[k+H_p | k] \end{bmatrix}^T \quad (5-10)$$

$$\Delta \mathbf{U}[k] = \begin{bmatrix} \Delta \hat{u}[k | k] & \cdots & \Delta \hat{u}[k+H_u-1 | k] \end{bmatrix}^T \quad (5-11)$$

でありそれぞれ、時刻 k で推定された予測ホライズンまでの出力の推定値、指令値、制御入力の変化量である。また、 \mathbf{Q} , \mathbf{R} はそれぞれ、追従誤差とエネルギーに関する重みである。

ここで、

$$\mathbf{Z}[k] = \mathbf{\Psi}x[k] + \mathbf{\Upsilon}u[k-1] + \mathbf{\Theta}\Delta \mathbf{U}[k] \quad (5-12)$$

$$\mathcal{E}[k] = \mathbf{T}[k] - \mathbf{\Psi}x[k] - \mathbf{\Upsilon}u[k-1] \quad (5-13)$$

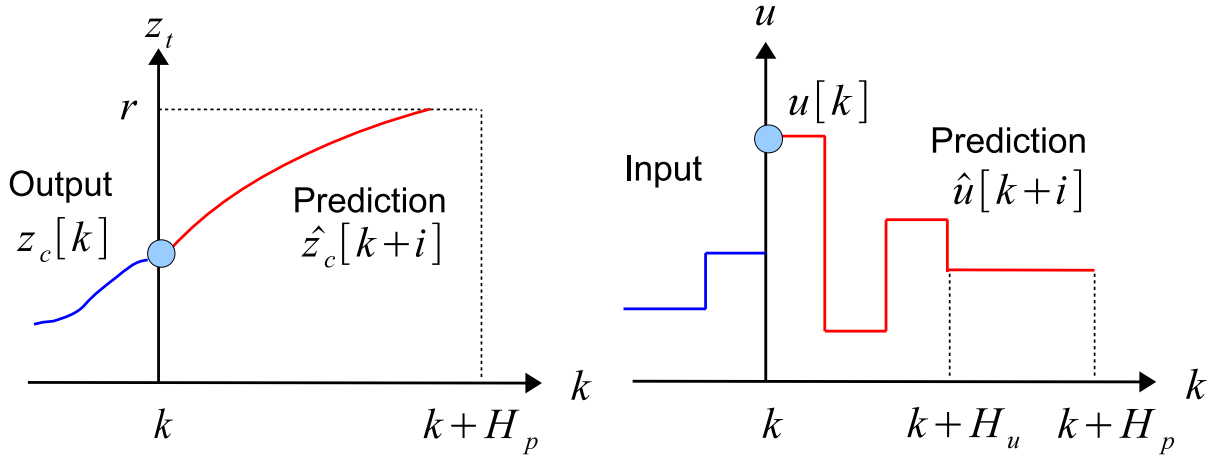


図 38: モデル予測制御

と定義する。ただし、各係数は、

$$\Psi = \begin{bmatrix} C & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ \vdots \\ A^{H_p} \end{bmatrix} \quad (5-14)$$

$$\Upsilon = \begin{bmatrix} C & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \\ AB \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p} A^i B \end{bmatrix} \quad (5-15)$$

$$\Theta = \begin{bmatrix} C & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B & \cdots & 0 \\ AB+B & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} A^i B & \cdots & \sum_{i=0}^{H_p-H_u} A^i B \end{bmatrix} \quad (5-16)$$

である。このとき、式 (5-8), (5-12), (5-13) より、

$$\begin{aligned} V[k] &= [\Delta U[k]^T \Theta^T - \mathcal{E}^T[k]] Q [\Delta U[k] \Theta - \mathcal{E}[k]] + \Delta U^T[k] R \Delta U[k] \\ &= \mathcal{E}[k]^T Q \mathcal{E}[k] - \Delta U^T[k] \mathcal{G} + \Delta U^T[k] \mathcal{H} \Delta U[k] \end{aligned} \quad (5-17)$$

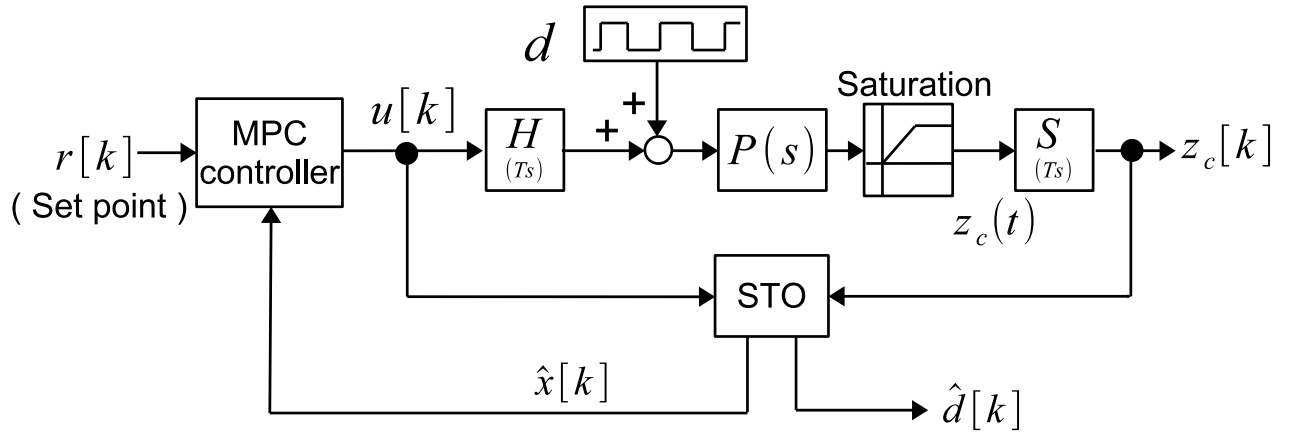
が得られる。ただし、 $\mathcal{G} = 2\Theta^T Q \mathcal{E}[k]$, $\mathcal{H} = \Theta^T Q \Theta + R$ とした。

このとき、最小化すべき目的関数

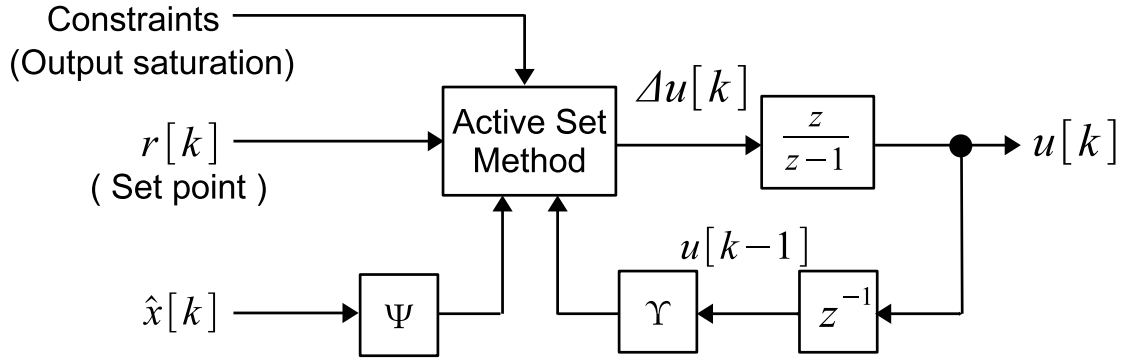
$$\Delta U^T[k] \mathcal{H} \Delta U[k] - \Delta U^T[k] \mathcal{G} \quad (5-18)$$

は凸関数であるため、最適解は ΔU に関する微分により得られる。従って、MPC の最適入力、

$$\begin{aligned} \Delta u_{\text{opt}} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \Delta U_{\text{opt}}[k] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{2} \mathcal{H}^{-1} \mathcal{G} \end{aligned} \quad (5-19)$$



(a) モデル予測制御のブロック線図



(b) 制約付き MPC 制御器

図 39: モデル予測制御のブロック線図

である。つまり制約なし MPC は制御プラントのモデルさえ既知であれば、線形な計算によりあらかじめ制御器を計算することのできる制御器である。従って、計算機のパワーに依存することなく実装することが可能である。

5.3.2 制約付きモデル予測制御

タッピングモード AFM の出力飽和を最適化問題の制約とすれば、上述の最適化問題は制約付き 2 次計画問題で表される。本節では、出力飽和を考慮した制約付き MPC について述べる。

今、カンチレバの振幅が $z_{\min} \leq z_c \leq z_{\max}$ で出力飽和を起こすとする。このとき予測ホライズンにおける制約は、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Z}[k] \\ -\mathbf{Z}[k] \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -z_{\max} \\ \vdots \\ z_{\min} \\ \vdots \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5-20)$$

で与えられる。これを式 (5-12) を用いて変形すれば,

$$\begin{bmatrix} \Gamma & g \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi x[k] + \Upsilon u[k-1] + \Theta \Delta U[k] \\ 1 \end{bmatrix} \leq O \quad (5-21)$$

を得る。ただし,

$$\Gamma = \begin{bmatrix} I & -I \end{bmatrix}^T \quad (5-22)$$

$$g = \begin{bmatrix} -z_{\max} & \cdots & z_{\min} & \cdots \end{bmatrix}^T \quad (5-23)$$

である。以上より, 出力飽和問題の制約は, $\Delta U[k]$ に関する不等式制約に変換される。従って上式と式 (5-18) を用いて, 出力飽和を考慮した MPC の解くべき最適化問題は,

$$\begin{aligned} \min_{\Delta U} \quad & \Delta U^T[k] \mathcal{H} \Delta U[k] - \Delta U^T[k] \mathcal{G} \\ \text{subject to} \quad & \Gamma \Theta \Delta U[k] \leq -\Gamma [\Psi x[k] + \Upsilon u[k-1]] - g \end{aligned} \quad (5-24)$$

で定式化される。この 2 次計画問題を各サンプル時間毎に解くことで時刻 k における最適な制御入力 that 得られる。

この制約付き MPC は, 飽和領域では強力なフィードバックにより非飽和領域へと戻そうと強力な制御を行う。これは各サンプリング時間毎に制約付き最適化問題を解くことで制御入力を決定するためである。従って制約付き MPC は計算機のパワーにより計算時間が制限されるため, 計算機に応じてサンプリング時間や制約の数を決定する必要がある。本稿で用いる制御系のブロック線図を図 39 に示す。

5.4 有効制約法

5.4.1 有効制約法のアルゴリズム

制約条件がある場合は, 各サンプル時間で式 (5-24) の最適問題を解く。従って, 制約条件の範囲外ではすぐさま制約条件の範囲に戻そうと強力な制御が行われる。一般に MPC では, 各サンプル時間で 2 次計画問題を解くために, 内点法や有効制約法といった数理的手法が用いられる。また, 最適制御自体が実時間に依存することに着目し, その時間変化を追跡することにより高速に最適解を求める MPC に特化した解法も存在する [35][36]。

本節では, AFM へのモデル予測制御の実装を目的として, 有効制約法 (Active Set Method) について述べる。

まず, 簡単のため式 (5-24) を

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \frac{1}{2} x^T Q_{qp} x - C_{qp} x \\ \text{subject to} \quad & A_{qp} x \leq B_{qp} \end{aligned} \quad (5-25)$$

の2次計画問題の一般形に置き換える。凸2次計画問題の最適解が満たすべき KKT 条件は,

$$\mathbf{A}_{\text{qp}}\mathbf{y} + \mathbf{Q}_{\text{qp}}\mathbf{x} - \mathbf{C}_{\text{qp}} = \mathbf{0} \quad (5-26)$$

$$\mathbf{y} \geq \mathbf{0} \quad (5-27)$$

$$\mathbf{A}_{\text{qp}}\mathbf{x} \leq \mathbf{B}_{\text{qp}} \quad (5-28)$$

$$\mathbf{y}^T(\mathbf{A}_{\text{qp}}\mathbf{x} - \mathbf{B}_{\text{qp}}) = 0 \quad (5-29)$$

で表される。ここで, \mathbf{y} はラグランジュ乗数である。ある実行可能解を $\hat{\mathbf{x}}^{(k)}$ としたとき, この解について制約条件 (5-25) のうち, 等式が成立している制約を有効制約と定義する。

この有効制約の集合は $I^{(k)} = \{i \mid \mathbf{a}_i^T \hat{\mathbf{x}}^{(k)} = \mathbf{b}_i\}$ で与えられる。ただし, $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i$ はそれぞれ $\mathbf{A}_{\text{qp}}, \mathbf{B}_{\text{qp}}$ の i 行目の要素を表す。また, 有効制約のに対応する行列, ラグランジュ乗数を抜き出した行列をそれぞれ,

$$\mathbf{A}_{\text{qp}}^{(k)} = [\mathbf{a}_i^{(k)} \dots]^T \quad (5-30)$$

$$\mathbf{B}_{\text{qp}}^{(k)} = [\mathbf{b}_i^{(k)} \dots]^T \quad (5-31)$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(k)} = [\mathbf{y}_i^{(k)} \dots]^T \quad (5-32)$$

とすれば,

$$\mathbf{A}_{\text{qp}}^{(k)}\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{B}_{\text{qp}}^{(k)} \quad (5-33)$$

が得られるまた, KKT 条件より

$$\mathbf{A}_{\text{qp}}^{(k)T} \mathbf{y}^{(k)} + \mathbf{Q}_{\text{qp}}\hat{\mathbf{x}}^{(k)} - \mathbf{C}_{\text{qp}} = \mathbf{0} \quad (5-34)$$

が得られる。これらをまとめて,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{\text{qp}} & \mathbf{A}_{\text{qp}}^{(k)T} \\ \mathbf{A}_{\text{qp}}^{(k)} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}^{(k)} \\ \hat{\mathbf{y}}^{(k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{\text{qp}} \\ \mathbf{B}_{\text{qp}}^{(k)} \end{bmatrix} \quad (5-35)$$

が得られる。このとき有効制約法のアルゴリズムは以下のように表される。

Step.1 制約条件を満足する実行可能解 \mathbf{x}_0 が与えられたとし, $k = 0, W^{(0)} = I^{(0)}$ とする。

Step.2 式 (5-35) を解き, その解を $\hat{\mathbf{x}}^{(k)}, \hat{\mathbf{y}}^{(k)}$ とする。 $\hat{\mathbf{x}}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)}$ なら Step.4 へ。

Step.3 $\mathbf{d}^{(k)} = \hat{\mathbf{x}}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k)}$ とおき, 以下のように $\bar{\alpha}$ を決定する。

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= \min_{i \notin I^{(k)}} \left\{ \frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)}}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{d}^{(k)}} \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{d}^{(k)} > 0 \right\} \\ \alpha^{(k)} &= \min\{1, \bar{\alpha}\} \end{aligned}$$

その後, $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}$ とする。

$\mathbf{x}^{(k+1)}$ で有効となった制約条件があればそれを $W^{(k)}$ に加え, $W^{(k+1)}$ とする。 $k = k + 1$ として Step. 2 へ戻る。

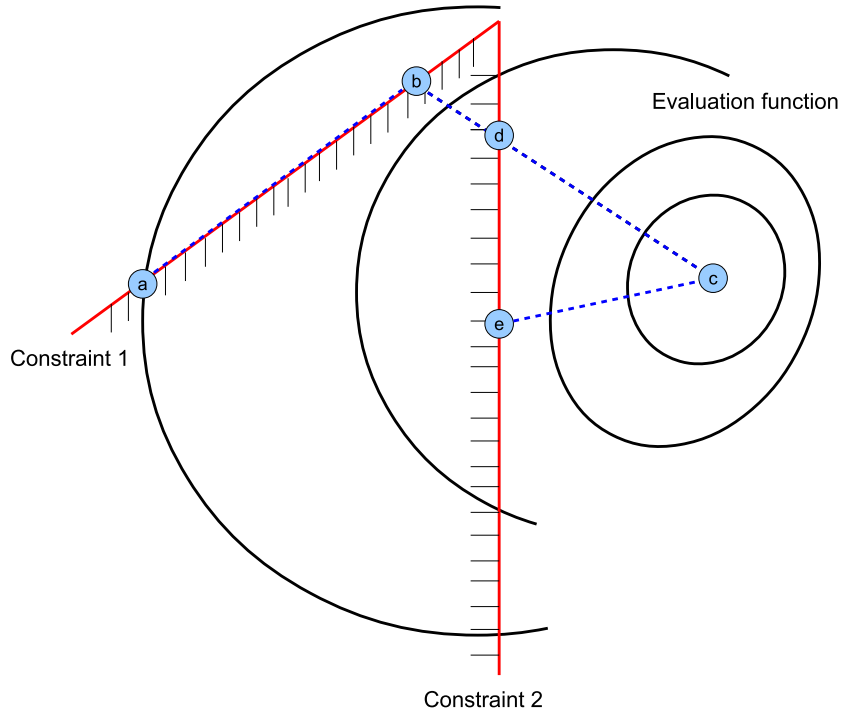


図 40: 有効制約法の例

Step.4 $\hat{\mathbf{y}}^{(k)} \geq \mathbf{0}$ なら終了し、最適解 \mathbf{x}^k を得る。

$\hat{\mathbf{y}}^{(k)} \not\geq \mathbf{0}$ のときは、

$$\hat{\mathbf{y}}_t^{(k)} = \min_{i \in I^{(k)}} \hat{y}_i^{(k)}$$

として、 $W^{(k)} = W^{(k)} - \{t\}$ とおいて Step. 2 へ戻る。

5.4.2 有効制約法の一例

図 40 で有効制約法の 1 例を挙げ、説明する。ここで赤線は制約条件 1, 2 であり斜線側が実行可能な領域を表す。黒線は評価関数である。また、実行可能な初期解として解 a が与えられているとする。

まず、解 a では制約 1 が有効であるため、制約 1 を I に加える。そこで、制約 1 が有効でありかつ評価関数を最小化するように解を求めると解 b が得られる。次に制約 1 を I から取り除き、評価関数を最小化する解を計算し直す。今、有効な制約は無いいため大域的な最適解である解 c が得られる。しかし、解 c は実行不可能である。そこで、1Step 前に求めた解 b の方向へと解が実行可能となるまで更新していく。これにより解 d が得られ、制約 2 が I に加わる。最後に、制約 2 が有効でありかつ評価関数を最小化する解を求めれば解 e が求まる。同様に、 I から制約 2 を取り除き最適解を求めれば、解 d を再び得る。解 d から e の方向に解が実行可能とな

るまで更新すれば、解 e で初めて実行可能となる。1Step 前で得られた解と一致するため、解 e が最適解として求まる。

5.5 シミュレーションと実験

本章では、シミュレーションと実験により従来法である PI 制御と制約なし MPC、出力飽和を考慮した制約付き MPC を比較し、その有効性を示す。

5.5.1 シミュレーション

本節では、シミュレーションにより提案法の有効性を示す。シミュレーションに用いるプラントモデルは、式 (5-1) を用い、サンプリング時間は $T_s = 1 \text{ ms}$ とする。また、出力飽和は $0 \leq z_c \leq 8$ で起こるとする。

本稿では従来法として、

$$C_{\text{PI}} = 1.0 \times 10^{-3} \times \frac{T_{\text{pi}}s + 1}{T_{\text{pi}}s} \quad (5-36)$$

$$T_{\text{pi}} = \frac{1}{2\pi \times 200} \quad (5-37)$$

の PI 制御器を用いた。また、STO の極は 1000 Hz に重根配置となるように設計した。

さらに提案法として制約なし MPC 制御器と出力飽和を考慮した制約付き MPC 制御器を設計した。ただし、 $H_p = 5$, $H_u = 3$ である。追従誤差、エネルギーに関する重みは、制約なし MPC 制御器の応答速度が式 (5-36) と同程度になるように、 $\mathbf{Q} = 2.0 \times 10^{-6} \times \mathbf{I}$, $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ とした。セットポイントを $r = 3 \text{ V}$ とした際のシミュレーション結果を図 37, 41 に示す。

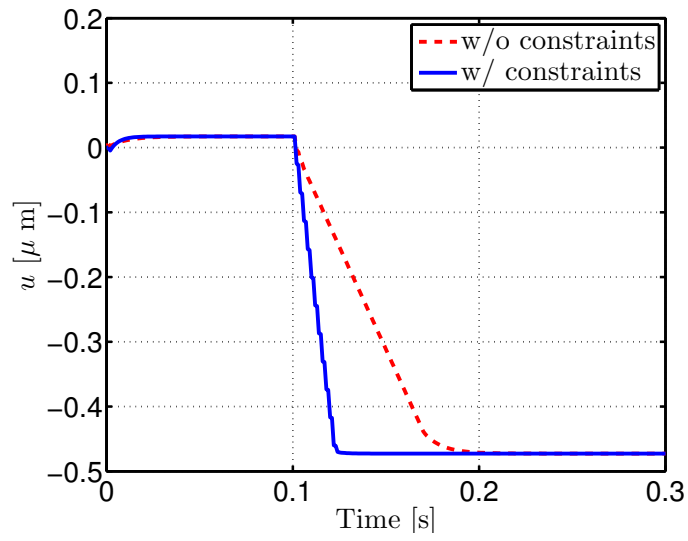
図 37 は、PI 制御器を用いた際の、出力飽和がない場合と出力飽和がある場合の比較である。図 37(a), 37(b), 37(c) はそれぞれ、制御入力、出力、STO による表面形状の推定値を表す。図 37(b) より、 $0.1 \sim 0.17 \text{ s}$ で出力飽和を起こしていることがわかる。図 37(a) において飽和領域では制御入力 u は、実際に必要とされる制御量が得られていない。これは出力飽和により、見かけの出力が実際の出力よりも小さく得られるためである。さらに図 37(c) において、飽和領域では STO が表面形状を正しく推定できていないことがわかる。このようにタッピングモード AFM は出力飽和により、飽和領域でのフォードバック追従特性が劣化する。

図 41 は、出力飽和がある場合の MPC を用いたシミュレーションである。図 41(a), 41(b), 41(c) は同様に、制御入力、出力、STO による表面形状の推定値である。図 41(b) より、制約なし MPC は図 37 の PI 制御器を用いた場合と同程度の飽和時間なのに対して、制約付き MPC では飽和時間が、 $0.1 \sim 0.13 \text{ s}$ と大幅な短縮がなされている。また、図 41(c) において、STO の推定精度が改善されている。

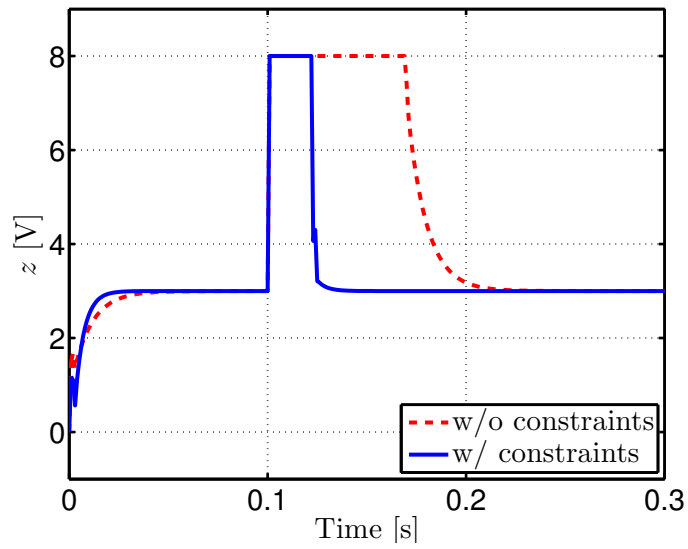
5.5.2 実験

本節では、実験により提案法の有効性を示す。表面形状として 0.2 s に 0.5 V のステップ状外乱を与えた際の PI 制御と制約なし MPC, 制約付き MPC の実験による比較を図 42 に示す。図 42(a), 42(b), 42(c) はそれぞれ、制御入力、出力、STO による表面形状の推定値を表す。

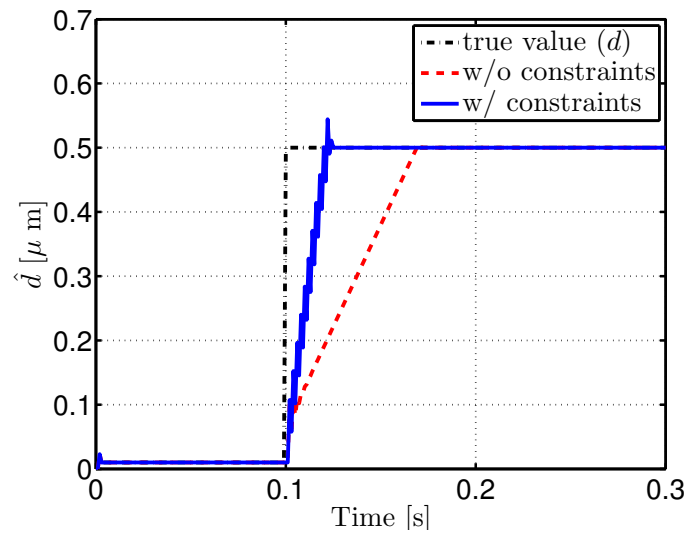
本実験機の飽和特性は $z_{\min} = 0$, $z_{\max} = 7 \sim 9$ 程度である。そこで、 $0 \leq z_c \leq 8$ として制約付き MPC を設計した。図 42(b) から、PI 制御、制約なし MPC では 0.06 s の飽和時間なのに対して、制約付き MPC では 0.02 s 未満の飽和時間と大幅な改善がなされている。また、図 42(c) より、制約付き MPC ではより正確な表面形状の推定が行われている。



(a) 制御入力

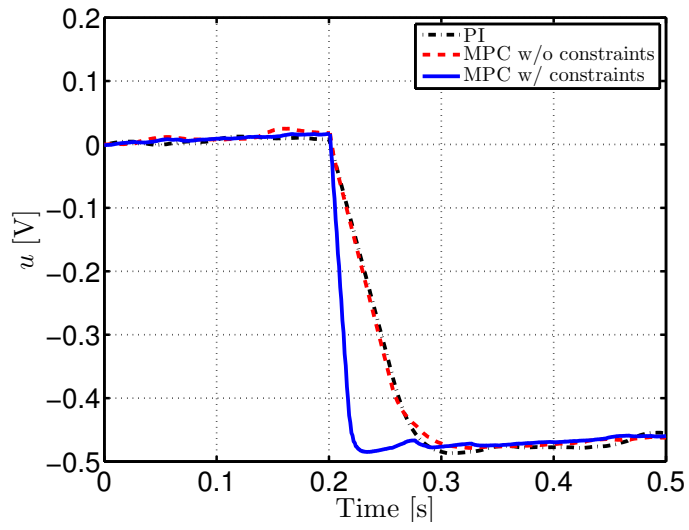


(b) カンチレバの振動振幅 (出力)

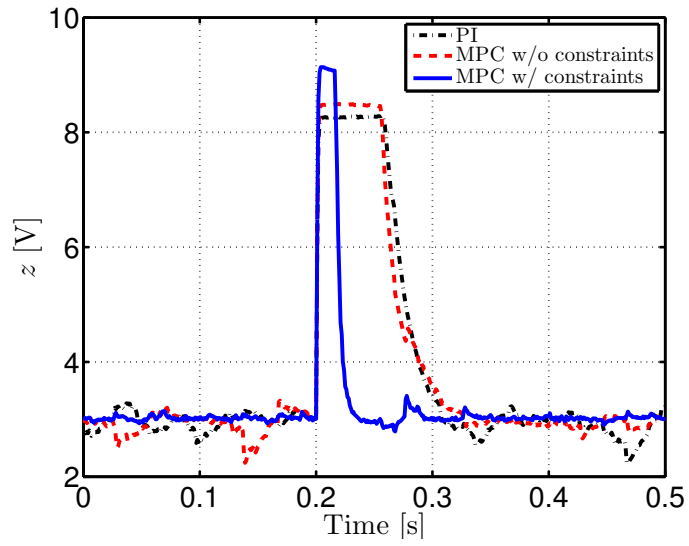


(c) 表面形状

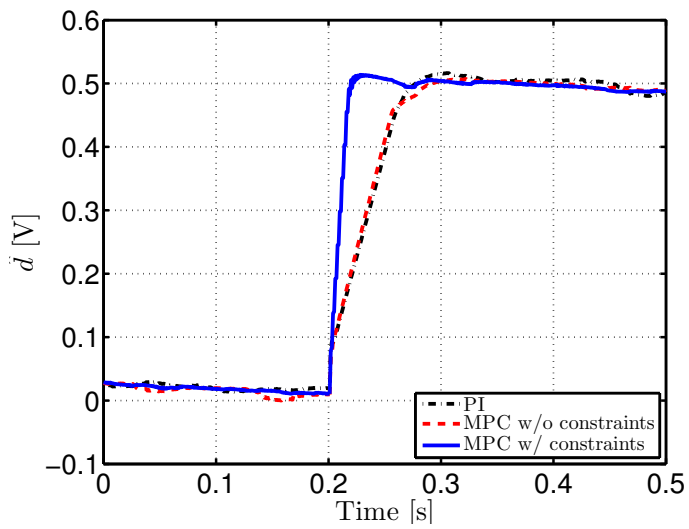
図 41: 出力飽和予測制御のシミュレーション



(a) 制御入力



(b) カンチレバの振動振幅 (出力)



(c) 表面形状

図 42: 出力飽和予測制御の実験

第 6 章

結論

6.1 まとめ

制御理論やハードウェアの改善により，AFM の高速化，高精度化は高い水準で実現している。AFM はその汎用性の高さから，表面形状だけでなく試料ダイナミクスの測定やナノマニピュレーションのように，単なる顕微鏡以上の役割を期待されている。しかし，これらの技術は AFM の高速化，高精度化に比べるとさらなる技術革新が必要とされている。また，タッピングモード AFM の出力飽和问题のような AFM 特有の問題に対しての技術革新が，さらなる性能向上に繋がると考えられる。

本稿では AFM に関して制御理論の視点から 3 つの提案を行った。まず，コンタクトモード AFM に関して試料の弾性特性を取得する手法を 2 つ提案した。1 つ目は逐次最小二乗を用いて FWS の走査の 1 列おきの交互に，表面形状と弾性特性を推定する手法である。しかし本手法は，表面形状と弾性特性を交互に取得するため分解能が半減する。

これに対して 2 つ目の提案として FWS で表面形状を，BWS で弾性特性を推定する往復型の試料弾性推定法を提案した。これにより，通常の AFM と同じ分解能で表面形状と弾性特性の取得が可能となった。また，より高精度な推定を目的として表面形状オブザーバと完全追従制御法を適用した。これら 2 つの提案により，試料を 1 度走査するだけで表面形状と弾性特性を同時に取得することが可能となった。

さらに本稿では，これまであまり扱われてこなかったタッピングモード AFM の出力飽和问题を扱った。出力飽和はフィードバック追従特性を劣化させ，カンチレバの破損などに繋がる。この出力飽和问题は，タッピングモード AFM の測定でごく普通に起こりうる。しかし，飽和領域では制御対象が不可観測となるため制御が難しい。これに対して，出力飽和予測制御を提案した。本手法は飽和条件を考慮した制約付きモデル予測制御であり，たとえ飽和しても強力なフィードバックにより出力を直ちに非飽和領域へと制御する。本手法により飽和時間の大幅な短縮が達成され，追従特性が改善した。これにより，制御器の変更のみで高精度な画像取得が可能となった。

6.2 今後の展望

本研究では、試料の弾性推定のみに注目している。そこで今後の展開としては、制御入力 of PE 性を考慮することにより試料の粘性の推定が期待できる。本稿で提案した手法は、PTC 法により BWS で指令値に対して完全追従する。従って任意の指令値を用いれば、 N 次の PE 性を持たせた上で推定を行えるため、試料のダイナミクスの測定に優位であるといえる。また、AFM 以外の測定装置で得られる試料のダイナミクスとを比較することで、より正確な試料の測定が可能となる。

出力飽和予測制御については、評価関数の重み、予測ホライズンの最適値を定量的に決定することでさらなる高精度化の実現が期待される。また、1 列前に測定した表面形状の情報を活かした上で出力飽和を予測できれば、さらなる性能向上が期待される。

謝辞

本論文を終えるにあたり，日頃よりご指導ご鞭撻を賜りました堀洋一教授と藤本博志准教授に心から感謝いたします。原子間力顕微鏡で研究を進めるにあたり，様々なお助言および多くのご協力を賜りました東京都立産業高等専門学校の白石貴行助教に深く感謝いたします。また，日頃から研究のご相談に乗ってくださいました朱洪忠さんをはじめとするナノスケールサーボチームの皆様に深く感謝いたします。研究生活においてご指導ご協力を賜りました東京大学堀・藤本研究室の先輩方，ともに切磋琢磨をしあった同輩，後輩の皆様に心から感謝いたします。最後に，ここまで育て見守ってくれた家族に深く感謝をいたします。

参考文献

- [1] G. Binning, C. F. Quate, “Atomic Force Microscope”, Physical review letters, Vol. 56, pp. 930–933, 1986
- [2] 森田清三, “走査型プローブ顕微鏡”, 丸善株式会社, 2009
- [3] 重川秀実, 吉村雅満, 河津璋, “走査プローブ顕微鏡–正しい実験とデータ解析のために必要なこと–”, 共立出版, 2009
- [4] T. Ando, “Control Techniques in High–speed Atomic Force Microscopy”, American Control Conference, pp. 3194–3200, 2008
- [5] J. Butterworth, L. Pao, D. Abramovith, “The Effect Nonminimum–Phase Zero Location on the Performance of Feedforward Model–Inverse Control Techniques in Discrete–Time System”, American Control Conference, pp. 2698–2702, 2008
- [6] I.Mahmood, S.Moheimani, “Improvement of accuracy and speed of a commercial AFM using Positive Position Feedback control”, American Control Conference, pp.973–978, 2009
- [7] Y. Wu, Q. Zou, C. Su, “A Currenc Cycle Feedback Iterative Larning Control Approach for AFM Imaging”, IEEE Transaction on Nanotechnology, Vol. 8, No. 4, pp. 515–527, 2009
- [8] N. Kodera, H. Yamashita, T. Ando, “Active damping of the scanner for high-speed atomic force microscopy”, Review of Scientific Instruments, Vol. 76, pp. 053708–1–5, 2005
- [9] K. Aoki, H. Fujimoto, “Nano Scale Servo Control of Atomic Force Microscope Based on Surface Topography Observer”, IIC–06–132, pp. 1–6, 2006(in Japanese)
- [10] H. Fujimoto, T. Ohshima, “Contact–mode AFM Control with Modified Surface Topogra–phy Learning Observer and PTC”, The 34th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society, pp. 2515–2520, 2008
- [11] T. Shiraishi, H. Fujimoto, “High–Speed Atomic Force Microscope by Surface Topography Observer”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 51, pp. 026602–026602–7, 2012

- [12] 佐川琢麻, 東隆親, 佐々木裕次, “X線1分子追跡法による生体分子間相互作用の定量測定”, 生物物理 83, vol. 48, pp. 46–51, 2008
- [13] 阿部将之, 杉本宜昭, 森田清三, “原子分解能を有する原子間力顕微鏡法の新展開—原子種識別法や原子走査を行う新技術—”, 日本物理学会誌, Vol. 62, No. 11, pp. 829–837, 2007
- [14] Y. A. Lim, C. G. Lee, J. P. Lim, J. Ryu, “Stable Haptic Interaction for AFM-based Nanomanipulation”, IEEE International Symposium on Industrial Electronics, pp. 983–988, 2009
- [15] C. D. Onal, M. Sitti, “Teleoperated 3-D Force Feedback From the Nanoscale With an Atomic Force Microscope”, IEEE Transactions on Nanotechnology, Vol. 9, No. 1, pp. 46–54, 2010
- [16] K. Nakajima, S. Fujinami, D. Wang, T. Nishi, “Evaluation of Viscoelastic Properties of Polymeric Materials by Atomic Force Microscopy”, Journal of the Japan Society of Colour Material, Vol. 83, pp. 108–144, 2010(in Japanese)
- [17] H. Sekiguchi, A. Hidaka, Y. Shiga, A. Ikai, T. Osada, “High-sensitivity detection of proteins using gel electrophoresis and atomic force microscopy”, Ultramicroscopy, Vol. 30, pp. 351–356, 2009(in Japanese)
- [18] F. Gaboriaud, Y. F. Dufrene, “Atomic force microscopy of microbial cells: Application to nanomechanical properties, surface forces and molecular recognition forces”, Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, Vol. 54, No. 1, pp. 10–19, 2006
- [19] D. Kim, J. Park, M. Kim, K. Hong, “AFM-based identification of the dynamic properties of globular protein : simulation study”, Journal of Mechanical Science and Technology, Vol. 22, pp. 2203–2212, 2012
- [20] Y. Wei, Z. Dong, C. Wu, “An Automatic Surface Elasticity Measurement and Error Compensation Method Based on Contact Mode AFM”, IEEE Transaction on Nanotechnology, vol.10, 2011
- [21] “AFMによる弾性計測ロードマップ”, 日本学術振興会 ナノプローブテクノロジー第167委員会, 2012
- [22] N. Kodera, M. Sakashita, T. Ando, “Dynamic proportional integral-differential controller for high-speed atomic force microscopy”, Review of Scientific Instruments, Vol. 77, pp. 083704, 2006
- [23] T. Shiraishi, H. Fujimoto, “Proposal of Anti-saturation Surface Topography Observer for Amplitude Modulation type Atomic Force Microscope”, IIC-09–109, 2009

- [24] Y. Fang, Y. Zhang, N. Qi, X. Dong, “AM–AFM System Analysis and Output Feedback Control Design With Sensor Saturation”, IEEE Transaction on Nanotechnology, Vol. 12, No. 2, pp. 190–202, 2013
- [25] A. Flemming, “A Method for Reduction Piezoelectric Non–Linearity in Scanning Probe Microscope Images”, American Control Conference, pp. 2861–2866, 2011
- [26] G. Schitter, P. Thurner, P. Hansma, “Design and input–shaping control of a novel scanner for high–speed atomic force microscopy”, IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, Vol. 18, pp. 282–288, 2008
- [27] D. Sahoo, T. De, M. Salapaka, “Observer based imaging methods for Atomic Force Microscopy”, 44th IEEE Conference on Decision and Control, and European Control Conference, pp.1185–1190, 2005
- [28] A. Sebastian, M. Salapaka, D. Chen, J. Cleveland, “Harmonic analysis based modeling of tapping-mode AFM”, American Control Conference, Vol. 1, pp.232–236, 1999
- [29] H. Fujimoto, B. Yao, “Multirate Adaptive Robust Control for Discrete–Time Non–Minimum Phase System and Application to Linear Motors” , IEEE/ASNE Transaction on Mechatronics, Vol. 10, pp. 371–377, 2005
- [30] 足立修一, “MATLAB による制御のためのシステム同定”, 東京電機大学出版局, 1996
- [31] H. Fujimoto, Y. Hori, A. Kawamura “Perfect Tracking Control Method Based on Multirate Feedforward Control”, Journal of SICE, Vol. 36, No. 9, pp. 766–772, 2000(in Japanese)
- [32] J. M. Maciejowski, “Predictive Control with Constraints”, Prentice Hall, 2000
- [33] Y. Sakurai, T. Ohtsuka, “Offset Compensation of Continuous Time Model Predictive Control by Disturbance Estimation”, Journal of ISCIE, Vol. 25, No. 7, pp. 172–180, 2012(in Japanese)
- [34] M. S. Rana, H. R. Pota, I. R. Petersen, “High-Speed AFM Image Scanning Using Observer–Based MPC–Notch Control”, IEEE Transactions on Nanotechnology, Vol. 12, No. 2, pp. 246–254, 2013
- [35] T. Ohtsuka, H. A. Fujii, “Real–Time Optimization Algorithm for Nonlinear Receding Horizon Control”, Automatica, Vol. 33, No. 6, pp. 1147–2254, 1997
- [36] T. Ohtsuka, “Continuation/GMRES Method for Fast Algorithm of Nonlinear Receding Horizon Control”, the 39th IEEE Conference on Decision and Control, pp. 766–771, 2000

発表文献

投稿中の学会誌

著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志

題 名 コンタクトモード AFM を用いた試料表面形状と弾性特性の同時推定法の提案

学会誌名 電気学会論文誌 D (産業応用部門誌) (査読中)

査読あり国際学会

[1] 著 者 Sakiya Watanabe, Hiroshi Fujimoto

題 名 Elasticity Estimation for Sample by AFM Utilizing Previous Line
Sample Surface Topography

会 議 名 The 39th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society, Vienna

発 表 日 13th, November, 2013

[2] 著 者 Sakiya Watanabe, Hiroshi Fujimoto

題 名 Simultaneous Estimation of Sample Surface Topography and Elasticity
Utilizing Contact-Mode AFM

会 議 名 The 13th International Workshop on Advanced Motion Control, Yokohama

発 表 日 March, 2014 (accepted)

国内学会

- [3] 著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志
題 名 前列表面形状を用いた原子間力顕微鏡による試料弾性推定法
会 議 名 平成 25 年産業計測制御/メカトロニクス制御合同研究会
発 表 日 2013 年 3 月 8 日
- [4] 著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志
題 名 コンタクトモード AFM を用いた試料表面形状と弾性特性の同時推定法
会 議 名 平成 25 年メカトロニクス制御研究会「ナノスケールサーボのための制御技術」
発 表 日 2013 年 9 月 3 日
- [5] 著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志
題 名 振幅変調型原子間力顕微鏡における出力飽和を考慮したモデル予測制御
会 議 名 第 1 回計測自動制御学会 制御部門マルチシンポジウム
発 表 日 2014 年 3 月発表予定

受賞

- [1] 受 賞 電気学会メカトロニクス制御技術委員会優秀論文賞
著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志
題 名 前列表面形状を用いた原子間力顕微鏡による試料弾性推定法
会 議 名 平成 25 年産業計測制御/メカトロニクス制御合同研究会
受 賞 日 2014 年 1 月 10 日
- [2] 受 賞 平成 25 年電気学会産業応用部門研究会論文発表賞
本部表彰 (A 賞)
著 者 渡辺 早紀矢, 藤本 博志
題 名 前列表面形状を用いた原子間力顕微鏡による試料弾性推定法
会 議 名 平成 25 年産業計測制御/メカトロニクス制御合同研究会
受 賞 日 2014 年予定