

機械学習を用いた SPM データ解析法の確立

システム工学群

極限ナノプロセス研究室 1190048 春日井 翔

1. 序論

ナノテクノロジーを推進していくうえでは、研究対象となる物質の微細構造を観察する技術が必要不可欠となる。近年、そのような微細構造の観察ツールとして、走査型プローブ顕微鏡(Scanning probe microscopy: SPM)が広く利用されている。一般的な構造分析に用いられる X 線回折法(X-ray diffraction: XRD)等と比較すると、SPM には XRD では得られない局所構造を原子分解能で明らかにできる利点がある。しかしながら、SPM では測定領域が探針で走査可能な狭い領域に限られるため、XRD で得られるような構造の統計性には乏しい。そのため、SPM 観察で得られた局所構造に対して、それが「物質に固有な性質を反映したもの」なのか、もしくは「特定の要因で偶発的に生じたものなのか」を判別することは難しい。したがって、今後 SPM を構造解析ツールとして発展させるには、試料全体にわたる微細構造の観察と、それらを統計的に解析(識別)する手法の開発が求められる。現在、前者は、SPM の高速化⁽¹⁾に伴い解消されつつあるが、後者については、膨大な画像データを人的に処理しているのが現状である。そこで、本研究では機械学習、特にその一分野である深層学習に着目した。SPM 画像を適切に識別可能な学習法を確立できれば、膨大なデータ処理を人的ミスなしに高速で行える。本研究では、そのような学習法の確立を目的として、以下の課題に取り組んだ。

- (1) 深層学習で SPM 画像の学習・検出が可能かを検証。
- (2) 高精度な検出を行うための効果的な学習法の確立。

2. 学習方法

本研究では、SPM 画像解析に用いる物体検出手法として YOLOv3⁽²⁾を採用した。検出対象には Si(111)-(7×7)表面に形成される鉛ナノクラスター⁽³⁾を用いた。

学習に用いる画像として、Si(111)-(7×7)表面の鉛ナノクラスターが含まれる STM 像を計 91 枚用意した。YOLOv3 の学習には、画像中での検出対象の位置情報が必要になる。この位置情報と検出対象のクラスをアノテーションデータという。本研究では、labelImg⁽⁴⁾というソフトウェアを用いてアノテーションデータを作成した。用意した画像と作成したアノテーションデータを用いてデータセットを作成し、学習を行った。

3. 実験・結果

3.1 鉛ナノクラスターの識別

はじめに、深層学習により SPM 画像の学習・検出が可能かを検討するために、鉛ナノクラスターを「Pb cluster」のクラスとして一括で識別可能かを検証した。実験では、まず用意した画像から 20 枚を抽出して作成したデータセットで学習を行った。学習後、未知の画像について検出を行い、その精度を評価したところ、適合率と再現率はそれぞれ 67%と

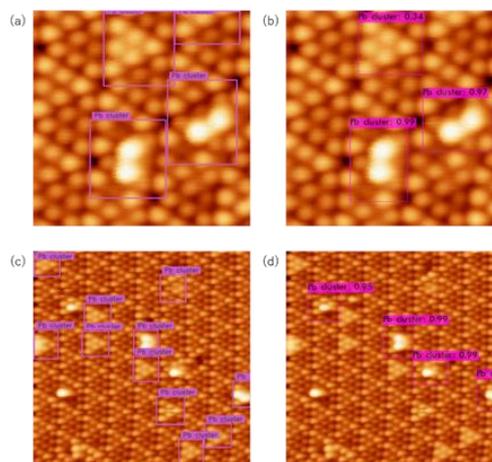


Fig. 1 Example of annotation data and detection results.

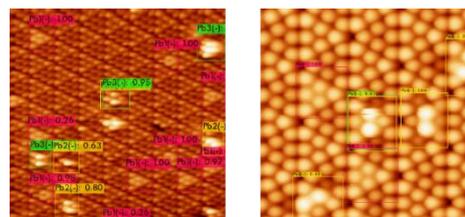


Fig. 2 Example of detection result.

31%, 平均適合率は 30%となった。全体的な検出精度は十分ではないものの、個々の検出画像の精度には、図 1 に示すようなばらつきが確認された。図 1 の(a), (c)はアノテーションデータから bounding box を描画したもの、(b), (d)は検出結果の出力画像である。図 1 上段のように鉛ナノクラスターが拡大表示された画像は精度良く検出できたのに対し、下段のように、縮小表示された鉛ナノクラスターは十分な精度で検出できない傾向が確認された。この理由には、学習用データが視野の狭い画像に偏っていたためだと考えられる。この結果は、深層学習によって SPM 画像中の局所構造を検出することは可能だが、学習用データセットの種類には注意が必要であること示している。

3.2 鉛ナノクラスターのサイズ別識別

次に、鉛ナノクラスターをサイズ別に識別しながら検出可能かを検証した。実験では、データセットの量・学習回数と検出精度との相関を調べた。データセットとして、用意した画像から 20 枚、30 枚、50 枚、70 枚を無作為に抽出した。各データセットは、ばらつきを考慮して 2 セットを作成した。作成したデータセットで学習を行った学習済みモデルで、テスト用画像を検出させた。

図 2 に得られた学習済みモデルによる検出結果の一部を示す。検出に用いた学習済みモデルは 70 枚のデータセットの一方であるデータセット 70_1 である。図 2 から、鉛ナノ

クラスターを概ね検出できていることが確認できる。しかし、ひとつの鉛ナノクラスターの重複検出や誤検出、およびサイズの誤識別が散見される。

表 1 に各データセットの評価指標の値を示す。結果より、20 枚から 70 枚の範囲では学習用データの枚数の増加に対応して検出精度が向上する傾向は見られなかった。

図 3 は、画像枚数 70 枚のデータセットにおいて、学習回数 1000 エポックごとの適合率と再現率の推移を示す。適合率と再現率は、4000 エポック付近まででは、学習の進行とともに向上するが、5000 エポック以降ではほとんど変化しないことが確認された。

図 4 にデータセット 70_1 についての、各クラスの平均適合率の推移を示す。こちらも、図 3 と同様に 4000 エポック付近まで検出精度が向上し、それ以降ではあまり変化しない傾向が確認できた。

3.3 実験結果の考察

実験では、各データセットにおいて、適合率が再現率より低いことが確認された。この結果は、鉛ナノクラスターでないものを鉛ナノクラスターであると誤検出している、もしくはサイズの誤識別が発生していることを示唆する。サイズの誤識別についてはデータセット内のクラスの偏りを軽減することで解決可能だと考えられる。また、クラスの偏りを軽減するためにデータセットを拡充することで誤検出についても解決可能だと考えられる。

表 1 で示した結果からは、画像枚数 20 枚から 70 枚の範囲では学習用データ数と検出精度の間に相関は確認されなかった。ただし、画像枚数によって検出精度が頭打ちとなるまでの学習回数に相違がみられると推測される。

図 3 および図 4 に示した結果から、画像枚数 70 枚のデータセットにおいては 4000~5000 エポック程度の学習は必要だが、それ以上の学習は過剰であると推測される。これについても、画像枚数 70 枚以外のデータセットについて学習回数 1000 エポックごとの評価を行い確認する必要があると考える。

図 5 にデータセットに含まれる各クラスの数と、そのクラスの平均適合率の関係を示す。図 5 から、各クラス数と平均適合率の間の相関関係が確認できる。図 4 で確認された各クラス間での検出精度の相違は、このようなデータセット内での各クラスの偏りによるものだと考えられる。

Table 1 Evaluation index value of detection for each data set

data set	Precision	Recall	mAP
20_1	0.68	0.94	0.45
20_2	0.76	0.84	0.66
30_1	0.49	0.75	0.40
30_2	0.50	0.58	0.36
50_1	0.71	0.88	0.48
50_2	0.66	0.70	0.50
70_1	0.51	0.54	0.53
70_2	0.60	0.74	0.51

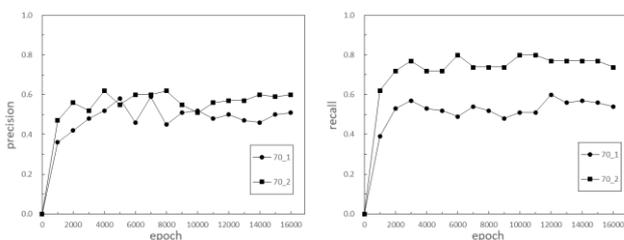


Fig. 3 The change in evaluation index value of detection with the training process. (Left: Precision, Right: Recall)

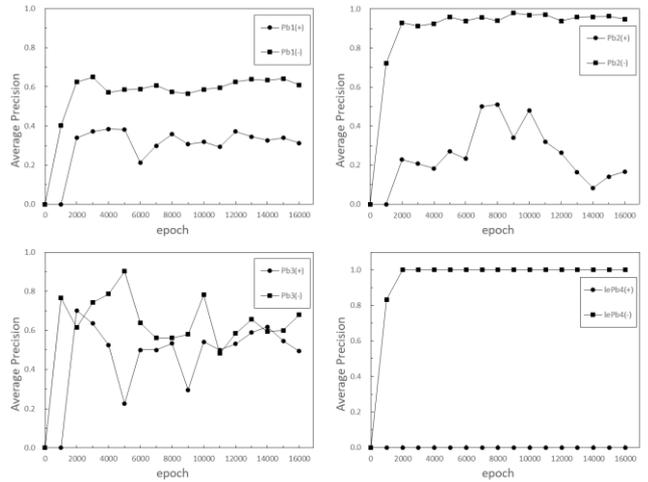


Fig. 4 The change in Average Precision with the training process of dataset 70_1.

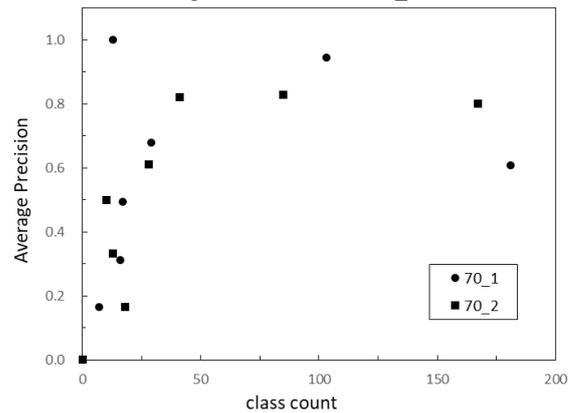


Fig. 5 Numbers of classes included in the datasets and Average Precision of the class.

4. 結論

本研究では、機械学習を用いた SPM データの解析法を確立することを目的として、鉛ナノクラスターの検出を行い、その検出精度を評価した。

まず、SPM データの学習・検出が可能かを検討するため、まず鉛ナノクラスターを単一クラスで識別した。その結果、学習用データの種類には注意を要するが、SPM 画像内の局所構造の検出が可能であることを示した。

次に、鉛ナノクラスターをサイズ別に識別可能かを検証するため、データセットの量と学習回数、検出精度の相関を調べる実験を行った。この結果、各データセットにおいて適合率が再現率より低いこと、画像枚数 70 枚のデータセットでは精度の向上は 4000 エポック付近で頭打ちとなること、各クラス間での検出精度に相違が生じていることを確認した。

今後の課題として、学習に用いるデータ数の拡充により、誤検出や誤識別、クラス間の検出精度差を解決することや、学習用データ数と学習回数、検出精度の相関をさらに明らかにするための解析作業などが挙げられる。

文献

- (1) B. P. Brown, L. Picco, M. J. Miles, and C. F. Faul, "Opportunities in High-Speed Atomic Force Microscopy," *Small*, 9, pp.3201-3211 (2013).
- (2) J. Redmon, and A. Farhadi, "YOLOv3: An Incremental Improvement," arXiv:1804.02767, (2018).
- (3) E. Inami, I. Hamada, K. Ueda, M. Abe, S. Morita, and Y. Sugimoto, "Room-temperature-concerted switch made of a binary atom cluster," *Nature Communications* 6, 6231 (2015).
- (4) Tzutalin. LabelImg. Git code (2015).

<https://github.com/tzutalin/labelImg>.