

卒業論文要旨

機械学習を用いた InP(110)-(1×1)表面上の空格子識別

システム工学群

極限ナノプロセス研究室 1220034 大槻 晃帆

1 緒言

物質の微細構造を観察するために、走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscopy:STM)が多くの研究で広く用いられている。STM には試料表面を原子分解能で画像化できる利点があるが、走査範囲に限られるという欠点がある^(1 文献)。そのため、STM 観察で得られる特徴が「試料に固有のもの」なのか「試料局所領域での特異(偶発的)な性質を反映したもの」なのかを判断するには、試料全体を走査することで得た微細構造の情報を統計的に解析する必要がある。そこで本研究では、深層学習(機械学習)を用いて、STM 画像に含まれる構造を自動で識別及び分類するための手法を確立することを目的とした。具体的には、リン化インジウム表面 [InP(110)-(1×1)]の STM 観察内に含まれる原子レベルの欠陥(空格子)を対象に、それらを機械学習により検出したうえで、形態やサイズを識別することに取り組んだ。

2 研究方法

2.1 学習データの準備と学習条件

研究では、画像認識のアルゴリズムとして yolov5 を利用した。yolov5 では、予め検出対象を学習させる事でその対象の特徴を抽出する必要がある^(2 文献)。学習用の画像としては、InP(110)-(1×1)表面の STM 画像をランダムに 140 枚用意した。InP(110)-(1×1)表面に形成される空格子は、その形態に応じて、monovacancy (Vm), vacancy string (Vs), vacancy island (Vi)の 3 つに分類される。研究では、学習前にこれら学習用画像に含まれる各種空格子に対してラベル付けを行った。

学習では、学習回数を 500 回、1000 回、2000 回に設定し

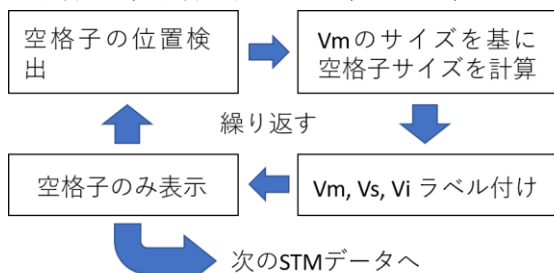


Fig.1 Block diagram of the size identification flow

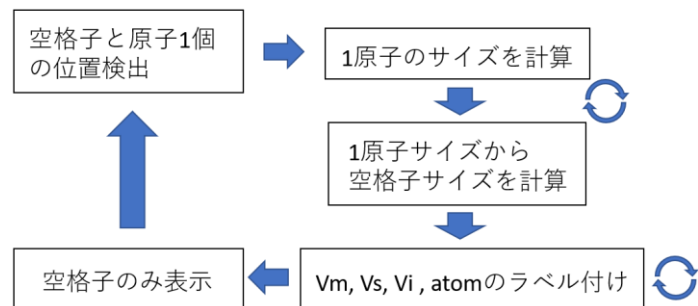


Fig.2 Block diagram of the size identification flow B.

た。学習パラメーターであるパッチサイズは 8, 学習率は 0.01 で一定とした。

2.2 画像処理によるサイズ識別プログラムの作成

研究では、空格子の検出・形態識別とは別に、空格子サイズの識別も同時に行うため、yolov5 における検出プログラムの改良を行った。サイズ識別は 2 種類の方法(サイズ識別 A, サイズ識別 B)を試みた。図 1 にサイズ識別 A の流れをブロックダイアグラムで示す。この方法では、各空格子に対して、空格子内に含まれるピクセル数からサイズの算出を行った。一方、サイズ識別 B(図 2 参照)では、1 原子内に含まれるピクセルの数を基に識別した空格子のサイズを算出した。

2.3 学習効果の評価方法

各条件で学習したモデルを用いて、検証用画像で InP 表面上の空格子を自動検出・認識させた。検出の精度は、機械学習の分野で一般的に用いられる適合率と再現率を用いて評価を行った^(3 文献)。

3 検証結果

3.1 予備検証結果: 空格子の形態識別

予備検証として、yolov5 オリジナルプログラムを用いて、InP(110)-(1×1)表面空格子の形態識別のみを行った。図 3 は、1000 回学習させたモデルを用いて STM 画像を識別させた結果を示している。図から、表面に分布する空格子が検出され、その形態(Vm, Vs, VI)がラベルで表示されていることが確認できる。各空格子の検出精度を統計的に評価した結果、平均再現率が 0.5925, 平均適合率が 0.580 となった。この検出精度は、他の学習回数モデル(500 回学習させたモデルおよび 2000 回学習させたモデル)も含めて最も高いことが明らかと

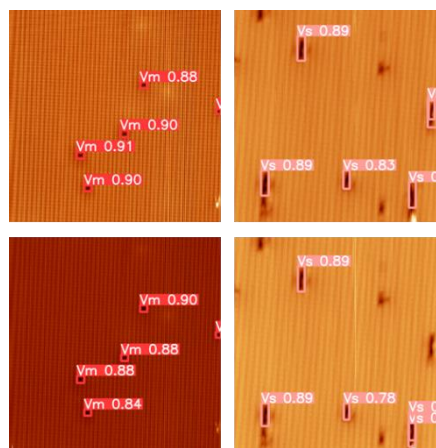


Fig.3 Example of detection and morphology /detect vacancy for 1000 iteration leaning model

なった。

3. 2 空格子の形態・サイズ同時識別の結果

図4に、サイズ識別Aのモデルを用いて、空格子の検出、および形態・サイズ識別を行った結果を示す。図から、各空格子に対して、その形態と合わせてサイズがラベルに表示されていることが確認できる。しかし、図に示すとおり、サイズ識別Aのモデルでは、明らかにサイズが異なる空格子に対しても誤って同じサイズとして表示されていることが確認された。また同一サイズの空格子であっても、観察スケールの異なるSTMデータでは異なるサイズが表示されることも確認された。

一方、図5は、サイズ識別Bのモデルを用いて空格子の検出、および形態・サイズ識別を行った結果を示す。図に示すとおり、サイズ識別Bでは、スケールの異なるSTMデータに対してもサイズの検出が適切に行われ、サイズ識別Aのエラーが改善されることが確認された。

4 検証結果に対する考察

4.1 適切な学習回数について

3.1節で示したように、本研究で用いたプログラムでは、

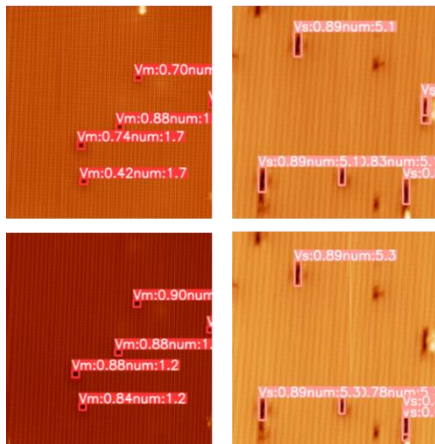


Fig.4 Example of detections and morphology/size identifications of vacancies on In(110)-(1×1) surface, using size identification program A.

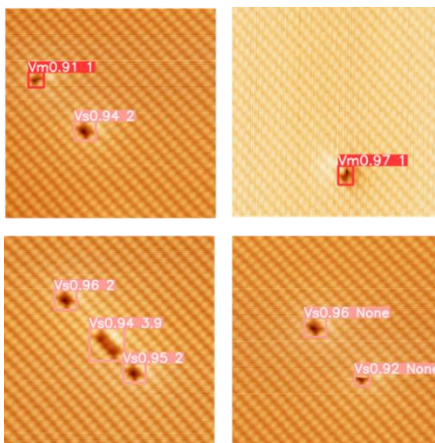


Fig.5 Example of detections and morphology/size identifications of vacancies on In(110)-(1×1) surface, using size identification program B.

1000回学習モデルが他の500回学習モデルや2000回学習モデルよりも検出精度が若干優れていることが確認された。1000回学習モデルが500回学習モデルより優れている結果は、一般的な繰り返し学習の増加に伴う検出精度の向上によるものと考えられる。一方で、2000回モデルが1000回モデルよりも検出精度が低下した結果は、過学習が原因だと推察される。

4. 2 サイズ識別プログラムの検証結果に対する考察

3.2節で示したように、サイズ識別Aのモデルでは、検出された空格子サイズを誤って認識していることが確認された。この結果は、yolov5のオリジナルプログラムに付け加えたコードが空格子ごとに実行されなかったため、画像内で最初に実行された空格子のサイズ認識が、他のすべての空格子にも適用されたためだと推察される。また、同一サイズの空格子が異なるスケールのSTM画像で異なるサイズとして表示されたエラーは、学習モデルに画像のサイズ(倍率)の情報が欠如していたためだと考えられる。このエラーに関しては、新たにSTMデータの倍率情報を入力データとして取り入れることで解決できると期待される。

一方、サイズ識別Bでは、異なるサイズの空格子を適切に識別できていることが確認できた。この結果は、1原子画像のピクセル数を基準としたサイズ識別が有効であることを示している。しかしながら、サイズ識別Bにおいても、サイズ誤計算がいくつか確認された。この問題は、学習により1原子の検出自体の精度を向上させることで解決可能だと期待できる。

5 結論

本研究では、機械学習により、InP(110)-(1×1)表面のSTM観察内に含まれる各空格子の検出、及び形態・サイズ識別を試みた。空格子の検出、および形態の自動識別では、検出精度が最も高い学習回数は1000回付近であり、それ以上の学習回数は過学習になることを明らかにした。一方、空格子のサイズ識別では、1原子画像のピクセル数を基準としたサイズ識別モデルBが有効であることを見出した。一方で、本モデルでは、サイズの識別精度の誤差が顕著な箇所も確認された。今後さらなる精度の向上には空格子の検出・識別と同様に最適な学習を模索することが必要であると考えられる。

文献

- (1) 橋詰富博, 一杉太郎 岩波講座 物理の世界 “走査トンネル顕微鏡技術”, 株式会社岩波書店, 2011
- (2) 物体検出の代表アルゴリズム YOLO シリーズを徹底解説! (AI論文解説), DeepSquare, https://deepsquare.jp/2020/09/yolo/#outline__1_3, 2022.2.10
- (3) Jonathan Hui, "mAP(mean Average Precision)for Object Detection", <https://jonathan-hui.medium.com/map-mean-average-precision-for-object-detection-45c121a31173>, 2022.2.10