

卒業論文要旨

機械学習を用いた InP 表面 STM 像の自動解析

システム工学群

極限ナノプロセス研究室 1230089 高橋 龍吉

1 緒言

微細加工技術の進展に伴い、微視レベルでの材料評価の重要性が高まる中、走査トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy: STM)⁽¹⁾は、原子分解能で材料表面の局所構造・物性等を検出できる顕微鏡として広く用いられている。しかし、1枚のSTM像には、あくまで表面の局所領域に限定された情報しか含まれていない。そのため、他の分光計測のように、STMで材料全般の統計情報を取得するには、大量のSTM像を個別に解析する必要がある。本研究では、この課題を機械学習により解決することを目指している。機械学習を活用すると、STM像内の特定の構造を自動認識させることができる。これを応用すると大量のデータを効率的に解析可能であり、STMを「局所領域の詳細な情報と統計情報の双方を同時に検出可能な顕微鏡」として発展させることができる。

機械学習では、自動認識を高い精度で行うために、予め大量のデータ(画像)を用いて繰り返し学習を行う必要がある。しかしながら、STMで得られる一般的な画像の数は限られているため、それが高精度な自動認識を困難にする原因となっている。そこで本研究では、機械学習で一般に用いられるデータ拡張法をSTM画像に対して適用し、自動検出の高精度を試みた。

2 研究方法

2.1 機械学習の検出対象

機械学習の検出対象には InP(110)-(1×1)表面のSTM像(図1)を選定した。図1に示すように、超高真空中で適切な処理を施した InP(110)-(1×1)表面には、一次元原子鎖上で原子が局所的に抜けた空格子(vacancy)が形成される。vacancyはその形態に応じて、1つのP原子が抜けた mono vacancy (V_m)、P, In原子が原子鎖上で一次的に抜けた vacancy string (V_s)、P, In原子が原子鎖を跨いで二次元的に抜けた vacancy island (V_i)、に区分される⁽²⁾。本研究では機械学習により、これら3形態の空格子の自動識別を試みた。

2.2 機械学習アルゴリズムおよび学習データの拡張方法

物体検出アルゴリズムにはYOLOv5(You Only Look Once: YOLO)^(3,4)を用いた。データ拡張では、100枚のSTM像に対して、アスペクト比変換、回転、せん断変形、平行移動、反

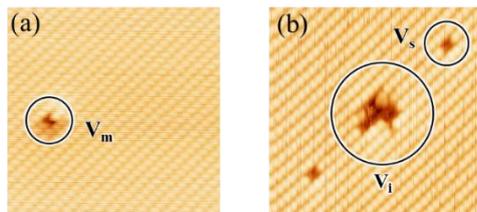


Fig.1 STM images of InP(110)-(1×1) surfaces. (a) includes one monovacancy (labeled V_m), and (b) includes two vacancy strings (labeled V_s) and one vacancy island (V_i), respectively.

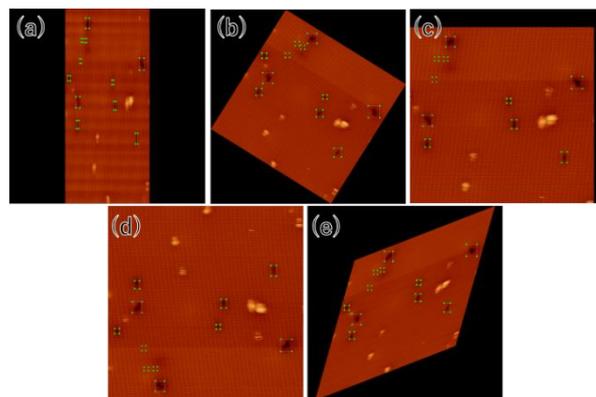


Fig.2 Examples of STM images conversions for data augmentation. (a) aspect ratio conversion. (b) rotation. (c) translation. (d) flip. (e) shear deformation. Each rectangular area indicates bounding box.

転等の画像変換を施して学習用画像の水増し処理を行った。効果的なデータ拡張条件を探るため、画像変換の変数は系統的に変化させて、複数の学習用データセットを作成した。

一方、YOLOの学習用データでは、検出対象を矩形領域(バウンディングボックス)で囲み、情報が注釈する。そこで、データ拡張では、これらバウンディングボックスの座標も各画像変換に応じて適切に変形させるようにした。

2.3 学習済モデルの精度評価

各学習用データセットで学習させたモデルの検出精度は、代表的な指標である適合率と再現率を用いて検証した。適合率は実際に検出された対象をどれほどの割合で正しく検出しているかを表す指標、一方、再現率は、検出すべき対象をどれほどの割合で正しく検出しているかを表す。

3 結果

3.1 データ拡張プログラムの動作検証

図2は、作成したデータ拡張プログラムを用いて、STM像に対して(a)アスペクト比変換、(b)回転、(c)平行移動、(d)反転、(e)せん断変形を施した結果を示している。図から、画像変換に伴い、バウンディングボックスの座標も適切に変換されていることが確認できる。また、画像変換の変数をランダムに変化させて、オリジナルの学習用データセットの量を(100枚)を任意の倍数に増やせることも確認し、本データ拡張プログラムが正常に動作することを検証した。

3.2 データ拡張に伴う検出精度の変化

アスペクト比変換、回転、平行移動、反転、せん断の画像変換により10倍に拡張したデータセットを用いて学習を行った。図3は各学習済モデルを用いて、 V_m を5つ含むSTM画像を対象に自動検出を行った結果[(a)アスペクト比変換、(b)回転、(c)平行移動、(d)反転、(e)せん断変形]を示している。



Fig. 3 Typical examples showing automatic detections of three types of vacancies on InP(110)-(1x1) surfaces, using models trained by augmented data set. (a) aspect ratio conversion. (b) rotation. (c) translation. (d) flip. (e) shear deformation. V_m , V_s , and V_i indicate monovacancy, vacancy string and vacancy island, respectively.

Table.1 Accuracy of automatic vacancy detections by six types of trained models

	Recall %	Precision %
original(100sheets)	53.9	50.7
aspect ratio(1000sheets)	35.4	35.1
rotation(1000sheets)	57.2	45.2
translation(1000sheets)	59.4	54.3
flip (1000sheets)	53.1	54.2
shear deformation(1000sheets)	53.9	53.9

図中の各バウンディングボックスに記載された数値は、クラス分類とバウンディングボックスの信頼度を表している。アスペクト比変換によるデータ拡張では V_m が検出されなかった。せん断変形によるデータ拡張では4つの V_m の検出に成功した。また、回転によるデータ拡張では、1つの V_m のみ検出に成功した。一方、平行移動と反転によるデータ拡張では全ての V_m に対して検出に成功していることが確認された。これら検出の精度を定量的に評価するために、図3と同様の検出を複数の異なる検証用画像に対して行い、再現率と適合率を統計的に評価した(表1)。表より、平行移動によるデータ拡張では再現率、適合率の向上が確認できる。しかしながら、回転によるデータ拡張では、再現率が僅かに向上したものの、適合率は減少する結果となった。また、反転、せん断によるデータ拡張では、拡張無しモデルと比較し、再現率、適合率は同程度であった。さらに、アスペクト比変換に関しては、再現率、適合率がともに低下することが確認された。図4(b)(c)のグラフは、(b)オリジナルデータセット、および(c)アスペクト比変換による拡張データを用いた際の検証用のデータに対する損失(validation/objectness : val/obj_loss)を学習回数に対してプロットした結果を示している。図から、拡張データを用いた際、val/obj_loss が学習回数と共に増大していることが確認できる。この結果は過学習が起きていることを示している。

4 考察

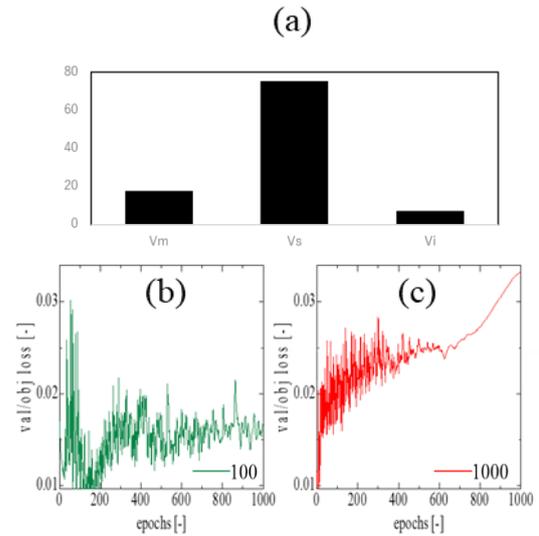


Fig.4 (a) Probability distribution of monovacancy (V_m), vacancy string (V_s), and vacancy island (V_i) included in the original dataset. (b, c) validation/objectness loss (val/obj_loss) during training processes by using original dataset, (b), and augmented dataset (aspect ratio conversion), (c).

本研究では、学習用データの拡張を行った結果、表1に示すように、平行移動によるデータ拡張では検出精度が僅かに向上したものの、アスペクト比変換や回転、反転、せん断によるデータ拡張では、検出精度は同程度または低下した。これら結果の要因には、第一にオリジナルの学習用データセットに含まれる V_m , V_s , V_i の割合が関係すると考えられる。図4(a)のヒストグラムは、オリジナル画像に含まれる各形態の vacancy の割合を示している。図からオリジナル学習用データセットに含まれる vacancy は V_s が大半であり、 V_m , V_i の量は僅かであることが確認できる。このような分布に偏りがあるデータで学習させた結果、多数のクラスに対する感度が高くなり、過学習が起きたと考えられる。

第二に、画像変換時の変数が不適切であった可能性が考えられる。極端な変換変数の下では、現実離れたデータが生成される。質の悪い訓練データを大量に学習させると、学習モデルが質の悪いデータにフィットしてしまい、実際の対象に対する検出精度が低下すると考えられる。

第三に、学習回数の不適切な設定が考えられる。本実験では学習回数を1000回と固定している。図4から、アスペクト比によるデータ拡張を用いた学習は、600回付近で val/obj_loss が増加し始め、過学習が生じた。したがって、過学習を防ぐには、学習回数を val/obj_loss が増加しないように設定する必要がある。

以上の考察から、データ拡張により検出精度を効果的に向上させるためには、均一なクラスの割合を持つ学習用データセットを用意し、画像変換の変数と学習回数を適切に設定する必要があると結論できる。

5 結論

本研究では、InP(110)表面に形成される各種 vacancy を機械学習により自動認識させることを目的として、データ拡張により生成させた学習用データセットを用いた検出精度の向上を試みた。その結果、画像に平行移動変換を施して拡張した学習用データセットでは検出精度が僅かに向上したものの、他のデータセットでは学習モデルの精度は同程度もしくは低下することが明らかとなった。この結果は、オリジ

ナル画像に含まれる各種 vacancy の割合が不均一であったこと、また、画像変換の変数や設定した学習回数が不適切であったことが原因だと結論した。今後、これら問題は、クラス割合と画像変換変数、学習回数を見直しにより解決できると期待される。

文献

- (1) G. Binnig, and H. Rohrer, Surf. Sci. 126, 236-244 (1983).
- (2) J. Tsuruta, E. Inami, J. Kanasaki, and K. Tanimura, Surf. Sci. 626, 49-52 (2014).
- (3) G. Jocher, ultralytics/yolov5, GitHub repository, <https://github.com/ultralytics/yolov5>, 2023.1.26.
- (4) J. Redmon, S. Divvala, R. Grishick, A. Farhadi, You Only Look Once: Unified, Real-Time Object Detection, Cornell University archive at: <https://arxiv.org/abs/1506.02640>, 2023.1.26.