

# 卒業論文要旨

## 機械学習を活用した STM 像中の鉛クラスター識別技術の高精度化

### Improving Lead Cluster Detection in STM Images with Machine Learning

システム工学群

極限ナノプロセス研究室 1250077 近藤 壮一郎

#### 1. 研究背景と目的

近年、ナノテクノロジー分野の進展に伴い、ナノスケール材料評価技術も発展してきた。中でも、走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy: STM)<sup>(1)</sup>は、表面構造を原子スケールで実空間イメージングできることから、ナノ構造解析の基盤ツールとして、材料科学や半導体技術の分野で重要な役割を担っている。一方、STMの観察対象は、試料表面の局所領域に限定されるため、観察された局所構造の頻度や分布を統計的に解析し試料全体の特性を把握するには、大量のSTM像を取得し、それらを個別に解析する必要がある。この作業を人が行うと、膨大な時間と労力を要するだけでなく、個人の主観が解析解釈に影響する可能性がある。

これらの課題解決に向けて、我々は、深層学習を活用し、大量のSTM画像に含まれる特定の構造を効率的かつ正確に検出・識別する技術を開発してきた。その結果、シリコン基板上に吸着した鉛クラスターを原子レベルでサイズ識別しながら自動検出することに成功している。しかし、その検出精度は不十分であり、学習データセットの質的改善や、機械学習アルゴリズムの改良が求められる。そこで本研究では、このようなSTM画像の自動解析精度の向上を目的として、機械学習アルゴリズムにおける損失関数の最適化を試みた。

#### 2. 研究方法

図1に機械学習の検出対象として選定した、Si(111)-(7×7)表面に付着した鉛クラスターのSTM像<sup>(2)</sup>を示す。データセットに含まれる鉛クラスターは、そのサイズ(構成原子数)に応じて $Pb_n$ ( $n = 1 \sim 6$ )に分類した。ただし、 $Pb_5$ ,  $Pb_6$ は、深層学習に必要なデータ数を満たさなかったため、本研究の対象から除外した。機械学習のアルゴリズムにはYOLOv5<sup>(3)</sup>を使用した。図2に、YOLOにおける学習スキームの概要を示す。実験では、STM画像80枚を用意し、それを学習用データ40枚、検証用データ22枚、テスト用データ18枚に分割した。

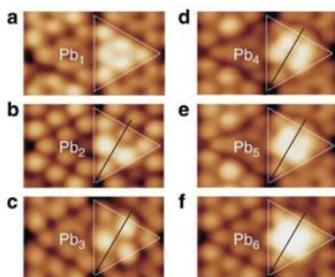


Fig. 1 STM images of Pb clusters on Si(111)-(7×7) surface classified by size. Panels (a) to (f) correspond to  $Pb_1$ ,  $Pb_2$ ,  $Pb_3$ ,  $Pb_4$ ,  $Pb_5$ , and  $Pb_6$ , respectively<sup>(2)</sup>.

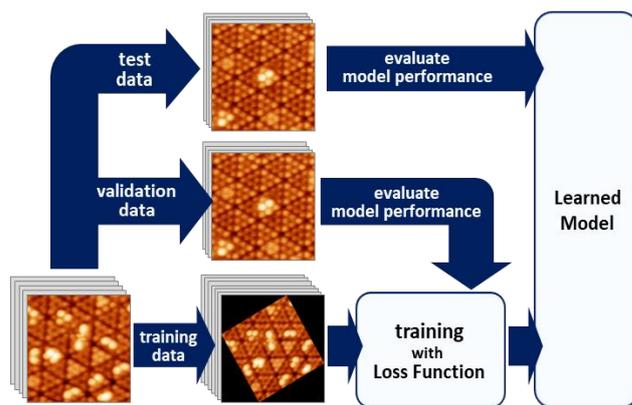


Fig. 2 Workflow of the machine learning model training process.

また学習済モデルの汎化性能を向上させる目的で、学習用データには画像変換を用いたデータ拡張を施した<sup>(4)</sup>。

YOLOv5の損失関数には、Binary Cross-Entropy (BCE)関数が標準搭載されている<sup>(5)</sup>。BCEは、汎用性と計算の容易さから広く利用されているが、クラス不均衡問題や、難易度ばらつき問題に直面する場合がある。そこで本研究では、最適な損失関数の特定を目的に、BCEに加えて、難易度の高いサンプルに焦点をあてて学習を強化できるFocal Loss (FL)関数<sup>(6)</sup>、正例と負例の不均衡を緩和する特徴をもつAsymmetric Loss (ASL)関数<sup>(7)</sup>、さらにクラスの分布に基づきバランスを取る特徴をもつClass Balanced Loss (CBL)関数<sup>(8)</sup>も適用し、これらのSTMデータ解析に対する有効性を検討した。

各損失関数を用いて学習させたモデルの精度評価には、適合率、再現率、およびmAP50を用いた。適合率は、検出された対象のうち、正しく検出された割合を表す指標であり、誤検出の少なさを評価できる。一方、再現率は、検出すべき対象のうち、正しく検出された割合を示す指標であり、未検出の少なさを評価できる。また、mAP50は、適合率と再現率のバランスを統合的に評価する指標であり、IoU (Intersection over Union)が0.50以上の場合の検出精度を示す。

#### 3. 結果

##### 3.1 BCE関数で構築した学習済みモデルのSTM画像認識

図3に、BCE関数を用いて学習させたモデルにテスト用データを入力した際の出力例を示す。入力したSTM画像内には、 $Pb_1$ ,  $Pb_2$ 、また識別不可能な欠陥が含まれている。一方、出力画像では、入力画像内に含まれる各構造が検出され、その結果がラベルに表示されている。しかし、一部の鉛クラスター(図中の $Pb_3$ )が未検出である事例や、空格子欠陥が $Pb_1$ と誤検出される事例も確認された。以上の識別を複数枚の画像

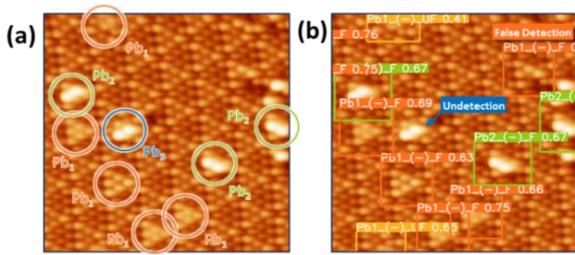


Fig. 3 Detection results of Pb clusters in STM images using BCE loss function. (a) Input STM image and (b) output image showing detected Pb clusters with classification and confidence scores.

に対して行い、適合率，再現率，mAP50を統計的に評価した結果，それぞれ0.66，0.60，0.705と評価された。

### 3.2 各種損失関数で構築した学習済モデルの精度

表1に，3.2節で述べたBCE関数に加えて，FL関数，ASL関数およびBCL関数を用いて構築したモデルで精度評価を行った結果をまとめる。結果から，ASL関数とCBL関数は他の損失関数と比較して高い再現率とmAP50を達成していることが確認された。特にASL関数は再現率で最も高い値(0.81)を記録し，検出漏れを最小限に抑える点で優れていた。また，適合率はCBL関数が最も高い値(0.711)を記録し，全体的に最もバランスの取れた性能を示した。一方，Focal Loss関数は再現率とmAP50が他の損失関数と比べて低い値にとどまり，全体的な性能は他の手法に劣る結果となった。また，CB-FLモデルは，適合率が0.745を記録し，FLモデルからの改善が確認されたが，再現率とmAP50はBCEより劣り，それぞれ0.629，0.724にとどまった。最後に，CB-ASLモデルは適合率(0.751)と再現率(0.817)の両方で最も高い値を記録した。また，mAP50においても0.816と，すべての損失関数の中で最良の結果を達成した。

## 4. 考察

本研究では，各種損失関数のモデル性能に対する影響を確認した。ASL関数とCBL関数は他の損失関数と比較して高い性能を示した。特にASLの再現率は0.81と最も高い値を記録し，検出対象を幅広く正確に捉える点で優れていることが明らかとなった。一方，CBL関数は適合率(0.711)とmAP50(0.777)の両方で高スコアを達成し，バランスの取れた性能を発揮した。これらの結果から，ASL関数は未検出を最小化したいタスク，およびCBL関数は誤検出と未検出の双方を抑制したいタスクに適していると考えられる。

一方，FL関数は他の損失関数と比較して全体的に低い性能を示した。特に再現率が0.473と最低値を示し，稀少クラスの検出が不十分であることが確認された。FL関数は難しいサンプルに焦点を当てる特性を持つが，その結果として簡単なサンプルや頻出クラスの学習が十分に行われなかった可能性がある。

BCE関数は適合率(0.66)と再現率(0.60)で一定の水準を維持しているが，mAP50(0.705)はASL関数やCBL関数に劣ることが確認された。この結果は，BCE関数がクラス不均衡問題に十分な対応がなされなかったことに由来すると考えられる。

CB-FLモデルでは，適合率がFLモデルよりも改善し0.745を記録した。しかし，再現率やmAP50はBCEの値を超えず，

Table 1 Comparison of Various Models.

	Precision	Recall	mAP50
BCEモデル	0.660	0.600	0.705
FLモデル	0.647	0.473	0.577
ASLモデル	0.654	0.81	0.778
CBLモデル	0.711	0.766	0.777
CB-FLモデル	0.745	0.629	0.724
CB-ASLモデル	0.751	0.817	0.816

それぞれ0.629，0.724にとどまった。最後に，CB-ASLモデルは適合率(0.751)および再現率(0.817)の両方で最も高い値を記録した。また，mAP50も0.816を記録し，今回採用した損失関数の中で最良の結果を記録した。以上の結果から，ASL関数とCBL関数はSTM画像解析タスクにおいて有効な損失関数であると考えられる。特に，クラス不均衡が存在する状況で，それぞれの損失関数が性能向上に寄与することが期待される。一方，FL関数については，タスク特性に応じたハイパーパラメータの調整や適用方法の改善が今後の課題となる。

## 5. 結論

本研究では，機械学習アルゴリズムにおける各種損失関数の最適化による，STMデータ解析の高精度化を目的とした。BCE，FL，ASL，CBLに加え，クラスバランスを考慮したCB-FLおよびCB-ASLの損失関数を用いたモデル性能を比較した結果，ASL関数とCBL関数が特に優れた検出精度を示し，それらのSTM画像解析に対する有効性が確認された。

また，CB-FLは適合率がFLよりも向上したものの，再現率やmAP50ではBCEを超えず，クラスバランス補正のみではFLの課題を完全に克服できないことが示された。一方，CB-ASLは適合率と再現率の両方で最高の性能を記録し，mAP50においても最良の結果を達成したことから，STM画像解析において非常に有望な手法であることが示唆された。

今後は，さらに複雑なSTMデータへの対応や，特徴抽出層の変更を含むモデル構造の改良を検討し，機械学習による物体検出精度のさらなる向上を目指す。これにより，STMを「局所的な高解像度情報」と「広範囲の統計情報」の双方を取得可能な顕微鏡として発展させることが期待される。

## 文献

- (1) G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, "Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy", *Physical Review Letters*, Vol. 49, No. 1 (1982), pp. 57-61.
- (2) 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*, Vol. 6, No. 6231 (2015), pp. 1-7.
- (3) G. Jocher, ultralytics/yolov5, GitHub Repository, <https://github.com/ultralytics/yolov5> (2025.1.20).
- (4) 高橋龍吉, 稲見栄一. 「機械学習によるInP表面STM画像認識の汎化性能向上化」日本機械学会2023年度年次大会.
- (5) R. Khanam and M. Hussain, "What Is YOLOv5: A Deep Look into the Internal Features of the Popular Object Detector", arXiv, No. 2407.20892 (2024).
- (6) T.-Y. Lin, P. Goyal, R. Girshick, K. He, and P. Dollár, "Focal Loss for Dense Object Detection", *IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, Vol. XX, No. XX (2017), pp. 2999-3007.
- (7) E. Baruch, T. Ridnik, N. Zamir, A. Noy, I. Friedman, M. Protter, and L. Zelnik-Manor, "Asymmetric Loss For Multi-Label Classification", *IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV)* (2021), pp. 82-91.
- (8) Y. Cui, M. Jia, T.-Y. Lin, Y. Song, and S. Belongie, "Class-Balanced Loss Based on Effective Number of Samples", *IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, (2019), pp. 9260-9268.