

SPM データ解析に向けた汎用的機械学習手法の開発

Highly versatile machine learning methods for reliable and accurate analysis of SPM data

知能機械工学コース

極限ナノプロセス研究室 1275017 高橋 龍吉

1. 緒言

走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscope: STM)⁽¹⁾や原子間力顕微鏡(Atomic Force Microscope: AFM)⁽²⁾に代表される走査型プローブ顕微鏡(Scanning Probe Microscope: SPM)は、材料表面を原子スケールで観察する手法として広く利用されている。しかし、SPM で得られる構造が材料固有の特徴なのか、または一部の特異的な特徴なのかを判断するには、大量の SPM 画像を解析する必要があり、膨大な労力を要する。この課題を解決するために、我々は機械学習を活用したデータの自動処理・解析手法の開発を進めてきた。先行研究⁽⁴⁾では、InP(110)表面の STM 画像に含まれる空格子欠陥の自動認識に成功しているが、その精度には課題があり、実用化にはさらなる改良が必要である。そこで本研究では、機械学習を用いた SPM 像解析の精度向上に取り組むとともに、本手法の汎用性の検証を目的で、生体分子の AFM 像を用いた分子種の自動認識を試みた。

2. 研究手法

2.1 機械学習の流れ

本研究では、物体検出アルゴリズムとして YOLOv5⁽³⁾を用いた。学習では、まず SPM 画像(生データ)を訓練データ、検証データ、テストデータに分割した。訓練データは、生データに画像処理とアノテーションを施した後、学習に利用した。検証データは、学習時のパラメータ変化の確認に用いた。またテストデータは構築したモデルの精度検証に用いた。認識精度の評価には、再現率、適合率、F 値を使用した。

2.2 InP(110)-(1×1)の STM 像を対象とした学習

学習対象である InP(110)表面上の空格子欠陥は図 1(a, b)に示すように、一原子が局所的に抜けた mono vacancy(V_m), 複数の原子が原子鎖上で一次的に抜けた vacancy string(V_s), 原子鎖を跨ぎ、二次元的に抜けた vacancy island(V_i)に分類される。先行研究⁽⁴⁾では、検出精度(5 割)の向上とデータ拡張の有用性の検証が課題として残されていた。そこで、本研究では新たな訓練データ作成手法として、クラス割合均一化と Bounding Box(BB)拡張を導入した。データ拡張では、100 枚の生データに対し、アスペクト比変換、回転変形、せん断変形、平行移動、反転の画像変形を施し、データ数を 10 倍から 40 倍に増加させた。クラス割合均一化では、訓練データ内の各クラスの比率の均一化した。BB 拡張では、アノテーション時に対象を囲む最小の矩形領域を、空格子の最隣接原子を含む最小の矩形領域まで拡張した。

2.3 PZ 分子の AFM 像を対象とした学習

検出対象の Photozipper(PZ)分子は、光依存的に単量体(PZm)と二量体(PZd)を形成する⁽⁵⁾。AFM では、PZm と PZd は輝点として画像化され(図 1(c)), それらはサイズ解析により区別できる。一方、AFM 像には拡散分子(Dif)や識別不能な分子(Unk)も含まれている。特に、Unk は学習が困難なため、

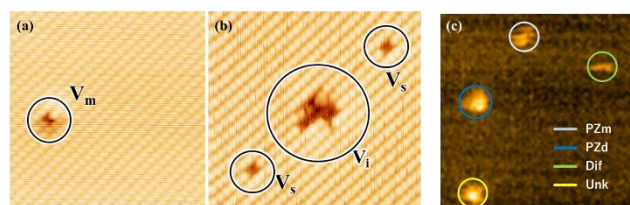


Fig. 1 Machine learning Target. (a) A monovacancy (V_m), (b) two vacancy strings (V_s) and a vacancy island (V_i). (c) AFM image of PZ molecules, with region annotated as PZm, PZd, Dif, and Unk.

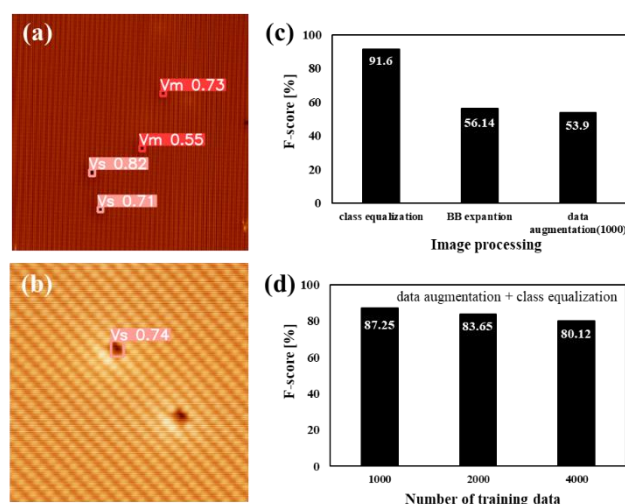


Fig. 2 Recognition results and model accuracy evaluation. (a) Misclassification of V_m as V_s (b) Failure to detect V_s. (c, d) F-score analysis across models, showing the highest F-score with class equalization and minimal impact of data augmentation on accuracy.

本研究ではこれを除外した画像 20 枚を訓練データとした。

学習では、これら訓練データに 2.2 節のデータ拡張に加え、クローン処理、トリミング、リサイズ、ノーマライズおよび自動ラベリングを適用した。クローン処理では、学習不可能な UnK および Dif をマスク処理で除去した。トリミングでは、訓練データ内の PZ 分子を個別に抽出し訓練データとした。リサイズは画像サイズ 200px×200px から 1000px×1000px へ拡大した。ノーマライズでは、異なるスケールのピクセル分解能を統一した。自動ラベリングではプログラムによる一貫したアノテーションを施した。

3. 結果

3.1 STM 像を対象とした学習結果

図 2 に STM 像の認識結果とモデルの精度評価の結果を示す。認識された空格子はラベル付き BB で囲まれているが、

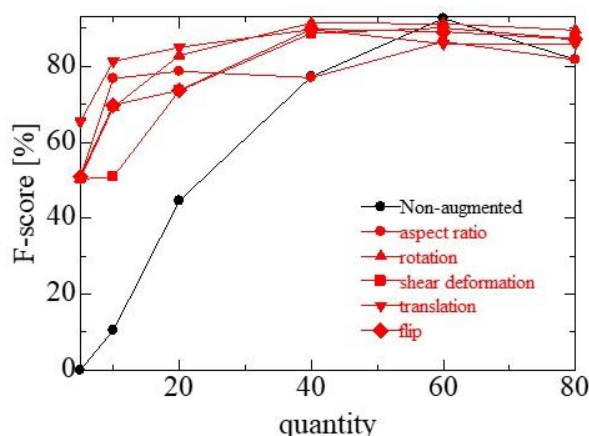


Fig. 3 Validation of data augmentation. Data augmentation improves accuracy overall, with its impact becoming more pronounced as the amount of raw data decreases

一部に誤認識が確認された。一方、図 2(c)の精度評価では、データ拡張やBB 拡張による精度向上は確認されなかったものの、クラス割合均一化により F 値が 91.6%まで向上した。また図 2(d)からは、データ拡張の倍率が上がるにつれて精度が低下する傾向が確認された。

図 3 は、データ拡張により 100 枚に増やした場合と、生データ 80 枚、60 枚、40 枚、20 枚、10 枚、5 枚で学習した場合の F 値を比較したものである。データ拡張なしではデータ数の減少とともに精度も低下したが、データ拡張を施すことで F 値が改善された。この結果から、データ拡張が有効であること、さらに今回の学習では 20 枚の画像でも十分な精度 (80%) が得られることが確認された。

3.2 AFM 像を対象とした学習結果

図 4 に、PZ 分子の認識結果とモデルの評価を示す。目視では判別が難しい PZ 分子を認識できているが、一部に誤認識も確認された。各画像処理を適用したモデルについて、PZm と PZd のみを検出対象とした場合と、Dif も含めた場合の F 値を比較した。評価の結果、クローン処理を施したモデルが F 値 77.77%と最高値を記録したが、その他の処理では精度向上は確認されなかった。一方、クローン処理と自動ラベリングを併用することで F 値が 81.68%まで向上した。一方、Dif を検出対象に含めた場合、精度の向上は確認されなかった。

4. 考察

4.1 STM 像の自動認識に対する考察

クラス割合均一化を施したモデルでは、精度が大幅に向上した。一方、クラス割合が不均一なモデルでは、割合の多い Vs に対して過学習が生じたと考えられる。均一化によりこの過学習が抑制され、精度向上につながったと考えられる。

4.2 AFM 像の自動認識に対する考察

クローン処理を施したモデルの精度が大幅に向上した要因として、学習不能な UnK の除去と Dif 除去によるクラス割合均一化の効果が考えられる。一方、自動ラベリングを適用したモデルで Dif を含めた際に精度の向上しなかった理由

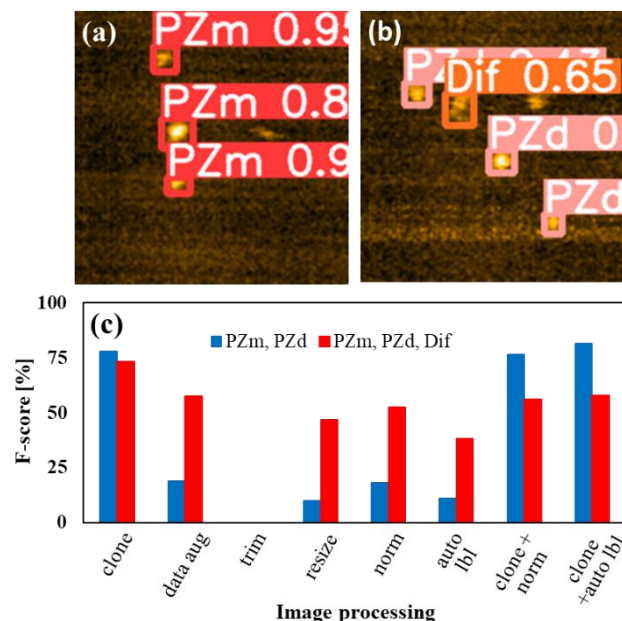


Fig. 4 Recognition results and model accuracy for AFM images. (a, b) Typical detection results of PZ molecules. (c) Histogram showing the impact of image processing techniques, including cloning, data augmentation (data aug), normalization (norm), and auto-labeling (auto lbl). Combining cloning with auto-labeling achieved the highest accuracy.

として、プログラム上の物体認識条件の影響が考えられる。拡散分子である Dif では、物体認識の閾値を満たすピクセル群が隣接しない場合があるため、正確なアノテーションが難しく、効果的に学習できなかったと考えられる。

5. 結論

本研究では、高精度な検出を可能にする機械学習条件の最適化を行い、さらに本技術の汎用性を生体分子を対象とし AFM 像で検証した。InP(110)表面上の空格子欠陥を対象とした学習では、クラス割合均一化が最も効果的であり、データ拡張の有効性も実証された。一方、PZ 分子を対象とした学習では、クローン処理と自動ラベリングが精度向上に寄与することが確認された。今後は、自動ラベリングの物体認識条件を改善することで、より高精度な検証モデル構築が期待される。

文献

- (1) G. Binnig, and H. Rohrer, Surf. Sci. **126**, 236 (1983).
- (2) G. Binnig, C. F. Quate and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett. **56**, 930 (1986).
- (3) G. Jocher, "ultralytics/yolov5." GitHub, 26 Jan. 2023, <https://github.com/ultralytics/yolov5>.
- (4) 高橋龍吉「機械学習を用いた InP 表面 STM 像の自動解析」学士論文, 高知工科大学(2022).
- (5) A. Tsuji, H. Yamashita, O. Hisatomi, M. Abe, Sci. Rep. **12**, 12903 (2022).