

Table 2. Summary of training conditions and detection performance of the proposed model.

STM : RGB-STM	Precision	Recall	mAP50	mAP50-95
40:0	0.836	0.555	0.736	0.533
40:40	0.744	0.785	0.796	0.601
240:0	0.821	0.641	0.783	0.613
240:40	0.849	0.714	0.837	0.665
240:80	0.81	0.736	0.834	0.643
240:120	0.796	0.666	0.794	0.628
240:160	0.746	0.676	0.771	0.606
240:200	0.717	0.766	0.816	0.634
240:240	0.739	0.79	0.81	0.634

出・識別されている。一方、Pb4 は Pb1 と誤って識別され、未同定の欠陥も Pb3 と誤検出されている。これらの結果は、STM 画像におけるクラス間のコントラスト差や形状差が小さい場合、原子スケール構造の検出・識別が困難であることを示している。

3.2 データ拡張が学習性能に及ぼす影響

3.1 節で示した検出・識別を全テストデータに対して実施し、学習データの処理が検出精度に及ぼす影響を定量的に評価した。各学習条件における検出性能を表 2 に示す。STM 画像の元データのみを用いた条件と、データ拡張後の学習条件 [(STM 画像 : RGB 化 STM 画像)=(40:0), (240:0)] を比較した結果、データ拡張により適合率がわずかに低下した一方で、再現率は約 0.09, mAP50 および mAP50-95 はそれぞれ約 0.05, 0.08 向上した。以上より、データ拡張は誤検出の抑制を維持したまま見逃しを低減し、総合的な検出性能を向上させることが示された。

3.3 RGB 化 STM 画像が学習性能に及ぼす影響

RGB 化 STM 画像が学習結果に及ぼす影響を検証するため、STM 画像を 240 に固定し、RGB 化 STM 画像の割合を変化させた条件を比較した。その結果、(STM 画像:RGB 化 STM 画像)=(240:40)および(240:80)において、適合率、mAP50, mAP50-95 はいずれも最大値を示した。一方、再現率は(240:240)で最大となった。これに対し、RGB 化 STM 画像の割合をさらに増加させた (240:120)では、すべての評価指標で急激な低下が確認された。(240:120)以降では、mAP50 および mAP50-95 はほぼ横ばいであったのに対し、再現率は増加傾向、適合率は減少傾向を示した。

4 考察

4.1 データ拡張が STM 画像の検出性能に及ぼす影響

データ拡張が STM 画像における検出性能に及ぼす影響 (40:0)と(240:0)の比較から、学習データ数の増加は再現率、mAP50 および mAP50-95 の向上に寄与することが示された。再現率の向上は、画像変換により生成された多様な STM 画像を学習に用いることで、検出対象の形状や輝度分布のばらつきに対するモデルの対応力が向上したためと考えられる。また、mAP50 および mAP50-95 の向上は、検出精度に加えて検出位置の精度も改善されたことを示唆する。一方、適合率がわずかに減少した点は、再現率向上に伴い検出候補が増

加した結果、誤検出が増えたことによるトレードオフと解釈できる。以上より、データ拡張は STM 画像における検出対象の多様性をモデルに効果的に学習させ、検出の安定性および総合的な検出性能を向上させる有効な手法であることが示された。

4.2 RGB 化の効果

STM 画像数を 240 に固定し RGB 化 STM 画像の割合を段階的に増加させた場合、RGB 化 STM 画像の割合と各評価指標に単調な相関関係は認められなかった。一方で、(STM 画像 : RGB 化 STM 画像)=(240:40)および(240:80)の条件では、適合率、mAP50 および mAP50-95 が最大値群を示したことから、最適な STM 画像と RGB 化 STM 画像の割合はこれら条件間に存在すると考えられる。この結果は、RGB 化 STM 画像を適切な割合で学習データに含めることで、STM 像に含まれる高さ情報がチャンネルごとに分離された特徴量として学習され、オリジナル STM 画像の特徴表現を補完したためと解釈できる。

一方、RGB 化 STM 画像を過剰に導入した場合には、RGB 化 STM 画像特有のコントラストに学習が偏り、オリジナル STM 画像に対する検出精度の向上には必ずしも寄与しない。また、(240:240)の条件では再現率が最大値を示した一方で、適合率は低下した。この結果は、学習データ数の増加により検出漏れを抑制する方向に学習が進んだ結果、誤検出が増加したことによるトレードオフと解釈できる。以上より、RGB 化 STM 画像の導入は、適切な割合で用いた場合に物体検出性能の向上に有効である一方、過剰な導入は検証データとの分布差を生じさせ、性能向上に直結しないことが示された。

5 結言

本研究では、STM 画像の物体検出高精度化を目的として、データ拡張および RGB 化を用いた前処理手法の有効性を検証した。その結果、これらの手法により検出性能が向上することを確認した。一方で、RGB 化 STM 画像は適切な割合での用いることが重要であり、過剰な導入は必ずしも性能向上には寄与しないことが示された。

文献

- (1) G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy, Phys. Rev. Lett. 49, 57 (1982).
- (2) C. Janiesch, P. Zschech, and K. Heinrich, Machine learning and deep learning, Electron Markets 31, 685 (2021).
- (3) 近藤 壮一郎, “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”, 高知工科大学 学士論文, 2025.
- (4) E. Inami, I. Hamada, K. Ueda, M. Abe, S. Morita, and Y. Sugimoto, Room-temperature-concerted switch made of a binary atom cluster, Nat Commun 6, 6231 (2015).
- (5) D. M. W. Powers, Evaluation: From Precision, Recall and F-Measure to ROC, Informedness, Markedness and Correlation, arXiv:2010.16061.
- (6) M. Everingham, L. Van Gool, C. K. I. Williams, J. Winn, and A. Zisserman, The Pascal Visual Object Classes (VOC) Challenge, Int J Comput Vis 88, 303 (2010).
- (7) T.-Y. Lin, M. Maire, S. Belongie, J. Hays, P. Perona, D. Ramanan, P. Dollár, and C. L. Zitnick, “Microsoft COCO: Common Objects in Context,” Proc. ECCV 2014, pp. 740–755 (2014).