

「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の  
開発と応用」

平成 28 年度採択研究代表者

H29 年度  
実績報告書

村上 恭和

九州大学大学院工学研究院

教授

AI と大規模画像処理による電子顕微鏡法の技術革新

## § 1. 研究実施体制

### (1) 村上グループ

① 研究代表者: 村上 恭和 (九州大学 大学院工学研究院、教授)

② 研究項目

【研究項目 1】ホログラム取得の自動化

- ・ 300 kV 汎用型ホログラフィー電顕の機能整備 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 2】単粒子解析の概念に基づく位相情報の積算・平均化

- ・ ホログラム収集・解析に対する手法設計 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 5】電磁場解析に供する試料調製

- ・ 微粒子を主体とする化合物試料の調製 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 6】物質科学の重要課題の評価

- ・ 物質科学に対する本技術の適用 (平成 29 年度実施項目)

### (2) 品田グループ

① 主たる共同研究者: 品田 博之 (日立製作所 研究開発グループ 基礎研究センタ、  
主管研究長)

② 研究項目

【研究項目 1】ホログラム取得の自動化

- ・ 1.2 MV 原子分解能ホログラフィー電顕の機能整備 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 3】AI を駆使した画像データ認識・処理技術の開発

- ・ 微粒子を想定した電顕画像認識・分類技術の開発 (平成 29 年度実施項目)
- ・ 位相再生像の評価選別技術の開発 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 6】物質科学の重要課題の評価

- ・ 物質科学に対する本技術の適用 (平成 29 年度実施項目)

### (3) 中前グループ

① 主たる共同研究者: 中前 幸治 (大阪大学 大学院情報科学研究科、教授)

② 研究項目

【研究項目 3】AI を駆使した画像データ認識・処理技術の開発

- ・ 位相再生像の評価選別技術の開発 (平成 29 年度実施項目)

【研究項目 4】統計数理的技術を用いた位相情報抽出の高度化

- ・ ホログラムの雑音低減技術の開発 (平成 29 年度実施項目)
- ・ ホログラムにおける情報欠損の回復技術の開発 (平成 29 年度実施項目)

## § 2. 研究実施の概要

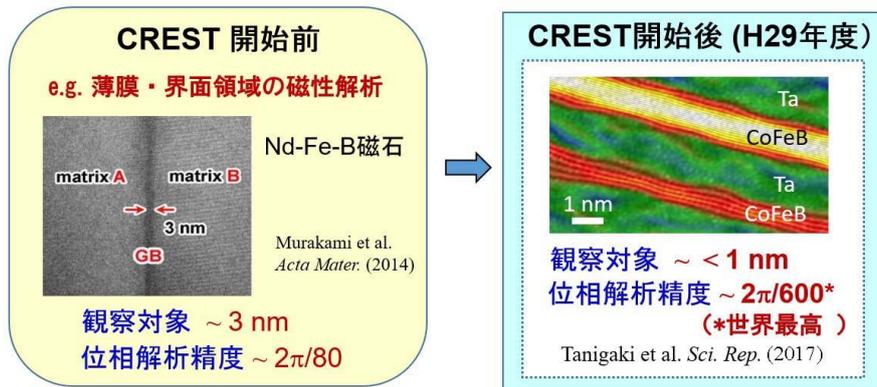
本研究は、最先端の電子顕微鏡技術と情報科学の融合を通して、物質が示す電場・磁場の分布を観測できる“電子線ホログラフィー”の感度を飛躍的に高めることを目的とする。研究対象としては、触媒化学や物性分野で注目される金属・酸化物試料の電位分布、材料工学的に重要な磁性化合物が示す磁束分布の解明等を想定する。目的を達成するための研究戦略として、本研究ではタンパク質の構造解析で成果を収めている単粒子解析の概念(大規模画像データを用いた情報の抽出)を電子線ホログラフィーに導入する。この場合、例えば触媒微粒子は形態やサイズに大きな分散を伴うため、既存の単粒子解析プロトコルを適用することが難しい。そこで本研究では人工知能(AI)の画像認識技術を活用し、従来は敬遠されていた複雑な微細構造を示す試料の解析に取り組む。さらに統計数理的手法による電子線ホログラム(物質の電磁場情報を含む干渉パターン)の像質改善に取り組む、情報科学技術を多面的に駆使した研究を展開する。

研究の実施にあたって、六つの研究項目を設定した。それらは大規模画像データの処理技術を開発する研究項目 1 と 2、情報科学技術の導入を推進する研究項目 3 と 4、新技術を駆使した物質科学の探究を担う研究項目 5 と 6 に対応する。平成 30 年度までに基幹的な技術を完備し、それに続く二年(平成 31・32 年度)で技術の高度化と応用展開を加速するという描像で計画を立案しているが、平成 29 年度の段階で既に幾つかの重要成果が導かれている。

一つ目の成果は位相分解能に関わる世界最高値の達成である:挿入図参照。電子線ホログラフィーの根幹は、物質を透過した電子が示す位相変化の計測にある。本研究では、(例えば物質の電気分極や帯電現象を観測する場合)表面・界面に偏在する電子の数を計数し得る超高感度の実現を目指し、 $2\pi/400$  という位相検出精度の達成を目標に掲げた。品田グループ・谷垣等が主導した研究では、1.2MV 原子分解能ホログラフィー電子顕微鏡を用いた磁性化合物(Co-Fe-B 多層膜)の観測に、本 CREST 研究で整備した大規模画像(電子線ホログラム)の自動位相再生技術や、特徴点の位置合わせ・積算平均化処理のプロセスを導入することで、実に  $2\pi/600$  に達する記録的な位相検出精度を実現した[1]。

二つ目の成果として、中前グループ・御堂等は“ウェーブレット隠れマルコフツリーモデル(WHMT)”を用いた電子線ホログラムの雑音除去に関して、重要な報告を行っている[2]。御堂等は、本研究で利用する電子顕微鏡の雑音特性を評価したうえで、ウェーブレット変換を利用した画像処理の工程で、雑音と微弱な信号を的確に識別するための手法開発に取り組んだ。平成 29 年度は主としてモデル画像(雑音を加えたホログラム)を用いた研究を実施したが、WHMT モデルの適用により、単一のホログラムの位相解析精度を従来に比べて 5 倍以上改善し得ることを示した。観測する試料によっては、積算平均化処理に必要な多数のホログラム画像を収集できないケースもあり、WHMT モデルの利用は実用的にも大いに期待される。

この他にも機械学習の技術を駆使した  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  微粒子の画像分類の成功(品田グループ・浅利等)、複雑な試料形態を示す Ga 添加 Nd-Fe-B 焼結磁石における粒界磁束密度の計測(村上グループ)[3]など、要素技術の開発と、その技術応用に関わる研究を平成 29 年度に実施した。



挿入図) 本研究で達成された位相解析精度の大幅な向上。

—本節における引用—

- [1] Tanigaki et al., *Scientific Reports*, 7 (2017) 16579.
- [2] Mido et al., presented in NANOTS 2017, Osaka, (2017).
- [3] Niitsu et al., *J. Alloys and Compounds*, 752 (2018) 220.