

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

2016年度採択研究代表者

2019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. 研究成果の概要

本研究は、物質が示す電場・磁場を観測できる電子線ホログラフィーの感度向上を情報科学との融合により達成することを目指す。4 年半にわたる研究期間の前半期に(2019 年 10 月までに)大規模画像取得システムや画像解析・雑音除去に関わる基盤技術を整備し、後半期はこれらの要素技術を物質科学の研究へ展開するという計画を立案した。以下に 2019 年度の成果を要約する。

(1) 電子線ホログラムの自動収集システムの高度化：研究項目 1 に関わる成果

電子波干渉の条件設定に高度な技術を要する電子線ホログラフィーは、データ収集の自動化が本質的に難しい手法である。本研究では、品田グループ・高橋の主導によりホログラムの自動収集システムを初めて構築し、2019 年度に当該成果を論文発表および特許申請した。また本年度は自動収集可能なホログラムの画像数を 10,000 のオーダー(昨年度までは 1,000 画像程度)に拡張し、タンパク質の構造解析に利用されるクライオ電顕に迫るデータ取得機能を電子線ホログラフィーで実現した。

(2) 機械学習を用いた微粒子画像の解析：研究項目 2,3 に関わる研究

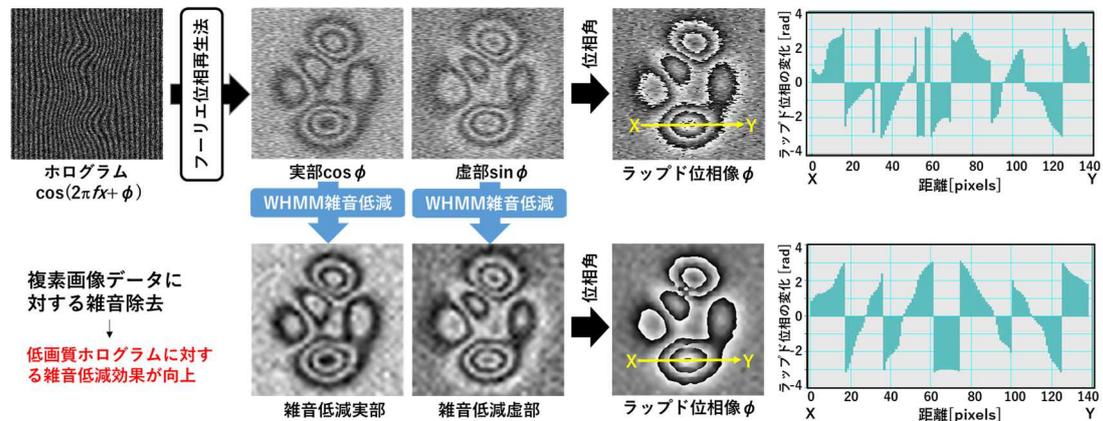
本研究で解析を試みる触媒微粒子はサイズや形状の分散が大きく、形態的特徴に基づく微粒子画像(電子顕微鏡画像)の分類が難しい。所望のサイズ・形状を示す微粒子画像を効率的に注出するために、本研究では機械学習を活用している。本年度は特徴的な”コブ”を持つ Au-Pd 微粒子の画像データを参照し、複数画像の積算平均化(コブの付け根など、材料科学的に重要な部位にフォーカスした解析)を行うために、独自の評価指標に基づく画像解析プロセスの構築を進めた。また、次年度にかけて実施する Pt-TiO₂ 触媒の大規模画像データの収集・解析を見据えて、転移学習による画像認識・分類の効率化を実施した。

(3) ウェーブレット隠れマルコフモデルによるホログラムの雑音除去：研究項目 4 に関わる研究

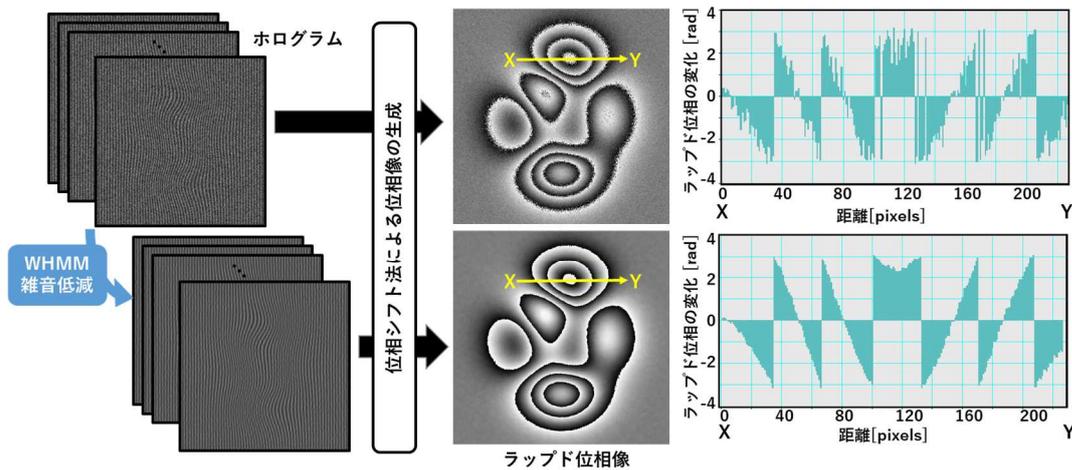
電子線ホログラフィーと情報科学の融合に関する主要課題の一つとして、ウェーブレット隠れマルコフモデル(WHMM)によるホログラムの雑音除去を推進している。“雑音”と“微弱な信号”を適切に区別するための技術構築を目指して、2019 年度末までに基盤技術を整備した。特に本年度は新たな試みとして、(a)ホログラムのフーリエ変換から導いた複素画像データに対する雑音除去、(b)WHMM に適した位相再生手法の選定などを行い、当該手法の実用化を進展させた。WHMM の研究成果は本年度開催の国際シンポジウムで関心を集めたほか、基盤技術に関わる論文発表がなされている。[次ページの図(a)と図(b)に、当該課題の研究成果を示す。]

(4) 物質科学に対する応用展開：研究項目 5,6 に関わる研究

前年度までの研究により、Co-Fe-B 磁性薄膜(平坦な界面を示す多層膜試料)に対して $2\pi/600$ rad という位相解析の世界最高精度を達成した。2019 年度は、界面の構造・形態が複雑な焼結磁石(0.1%Ga 添加 Nd-Fe-B 磁石)に対して $2\pi/210$ rad の精度、即ち CREST 研究開始前と比べて約 3 倍の精度で粒界磁性を評価し、その保磁力機構に対して重要な知見を得た(研究成果は 2020 年 1 月に論文発表)。また本研究のもう一つの重要課題である触媒微粒子についても、日立製作所の 1.2 MV 原子分解能ホログラフィー電顕を用いた実験・解析に着手し、物質科学への応用展開に向けた微粒子周囲の電場を計測できるだけの感度を確認できた。



(a) ホログラムのフーリエ変換から導いた複素画像データに対する雑音除去。



WHMM雑音低減と位相シフト法による位相再生 → 高い位相分解能を維持しつつ雑音によるバラつきを低減

(b) WHMMと位相シフト法による位相バラつきの低減。

【代表的な原著論文】

1. Y. Takahashi, T. Akashi, A. Sato, T. Tanigaki, H. Shinada, and Y. Murakami, “Automated Acquisition of Vast Numbers of Electron Holograms with Atomic-scale Phase Information”, *Microscopy*, vol. 69, 132–139, 2020.
2. Y. Midoh, and K. Nakamae, “Accuracy Improvement of Phase Estimation in Electron Holography using Noise Reduction Methods”, *Microscopy*, vol. 69, 123–131, 2020.
3. Y. Cho, T.T. Sasaki, K. Harada, A. Sato, T. Tamaoka, D. Shindo, T. Ohkubo, K. Hono, and Y. Murakami, “Magnetic Flux Density Measurements from Grain Boundary Phase in 0.1 at% Ga-doped Nd-Fe-B Sintered Magnet”, *Scripta Mater.*, vol. 178, 533–538, 2020.

§ 2. 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

(a) 300 kV 汎用型ホログラフィー電頭の機能整備（2019 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

(a) ホログラム収集・解析に対する手法設計（2019 年度実施項目）

【研究項目 5】電磁場解析に供する試料調製

(a) 微粒子を主体とする化合物試料の調製（2019 年度実施項目）

【研究項目 6】物質科学の重要課題の評価

(a) 物質科学に対する本技術の適用（2019 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（(株)日立製作所研究開発グループ基礎研究センター
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

(b) 1.2 MV 原子分解能ホログラフィー電頭の機能整備（2019 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

(b) AI による画像認識・処理の適用（2019 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

(a) 微粒子を想定した電頭画像認識・分類技術の開発（2019 年度実施項目）

(b) 位相再生像の評価選別技術の開発（2019 年度実施項目）

【研究項目 6】物質科学の重要課題の評価

(a) 物質科学に対する本技術の適用（2019 年度実施項目）

(3) 御堂グループ

① 主たる共同研究者：御堂 義博（大阪大学大学院情報科学研究科 助教）

② 研究項目

【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

(c) 統計数理的技術の適用（2019 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

(b) 位相再生像の評価選別技術の開発（2019 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

(a) ホログラムの雑音低減技術の開発（2019 年度実施項目）

(c) ホログラム解析の汎用ソフトウェアの開発（2019 年度実施項目）