

研究課題名 物性測定における『熟練』と機械学習の統合的アプローチ

研究者氏名 | 中島 千尋、JSTさきがけ専任研究員、東北大学大学院情報科学研究科研究員

(H29-H32年度)



研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)

研究の概要

HAADF-STEM電子顕微鏡による金原子ナノクラスターの観測に圧縮センシングを導入し、3次元の原子配置の再構成に取り組んだ。電子顕微鏡による複数の撮像を利用した3次元構造の再構成は近年研究され始めた課題であるが、現在の電子顕微鏡はCT的な利用法を想定して作られておらず、多方向からの観測には大きな手間がかかる。また電子線照射の繰り返しによる観測フィールドのコンタミネーションならびに観測試料そのものの劣化を伴うため、多数の観測データを得ることは実験原理的にも難しい。そこに少数の撮像からの高精度再構成が可能なアルゴリズムの導入により上記の汚染や劣化の軽減をはかり、2万原子程度のクラスターに対して再構成を行った。

再構成結果を吟味する過程で、結果の信頼性を評価する手法を開発する必要があった。圧縮センシングの結果は点推定のため、そのままではエラーバーを伴わない。そこで、観測データからのリサンプリングにより多数の再構成結果を生成し、その統計的性質(主に分散)から再構成の正否を判別する手法の開発に着手し、その手がかりとなる振る舞いを見出した。

研究の成果

圧縮センシングと結合成分解析を用いて3枚の撮像から図1に示した3次元原子配置を得た。変数の総数は125073、観測データの総数は14672、得られた配置の原子の総数は24571個。全原子配置の像を得るとともに、隣接する格子点における原子配置の解析から、触媒活性が高いと見られる原子を抜き出した(図2参照)。

また、構造を伴うデータの圧縮センシングに対して誤差の評価、ならびに再構成の正誤判定を行う手法の開発に着手した。要素数2929、うち原子の占有数599の人工データの再構成に対して、リサンプリングにより得られる分散等を計算した。結果、全観測データ量に依存して、再構成された信号の変数別の分散の振る舞いに図3のような定性的な違いが見出された。

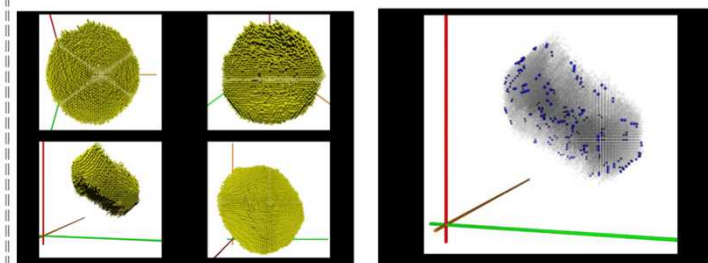


図1

図2

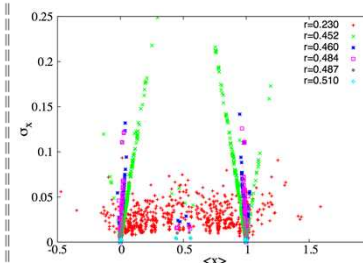


図3

参考文献・リンク

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。