

走査透過型電子顕微鏡データ解析のための機械学習法

Machine Learning for Scanning Transmission Electron Microscope Data Analysis

岐阜大工¹, JST さきがけ, 理研 AIP³ ◯志賀 元紀^{1,2,3}

Gifu Univ.¹, JST PRESTO², RIKEN AIP³, ◯Motoki Shiga^{1,2,3}

E-mail: shiga_m@gifu-u.ac.jp

STEM-EELS などのスペクトルイメージ計測は、試料表面の各点において局所的な成分（元素配置や電子状態）を反映するスペクトルを網羅的に計測する技術である。その計測 1 回で得られるデータ量が膨大であるために、機械学習の技術に基づくデータ解析の自動化が望まれる。ところで、統計的機械学習で優れた解析精度を達成するには、計測で得られるデータの性質や既知の情報に応じたモデルおよびアプローチを適切に選択する必要がある。例えば、スペクトルの形状がある程度分かっている場合には適切な関数モデルによるパラメトリック手法が有効であり、形状が不定かつデータ数が多い場合には関数モデルを仮定しないノンパラメトリックな手法が有効である。本講演では、それぞれのアプローチによる研究例(1)ノンパラメトリック法の 1 つである非負値行列分解によって評価試料の成分の空間強度分布および成分スペクトルを同定する手法、(2) ガウス基底関数に基づき 3D ラマン分光スペクトルの層間の混合信号を分解する手法[2]を紹介する。

スペクトルイメージ計測で得られるデータ量は膨大であるものの、注目領域に含まれる成分数は比較的少ない。そこで、この冗長なデータに潜在する本質的な情報を同定することによって、注目領域中に多く含まれる成分のスペクトルとその空間強度分布を自動的に抽出できる。研究例 1 では、ノンパラメトリックなアプローチである行列分解法を用いた解析法[1]を提案しており、実例を用いて手法を紹介する。

研究例 2 は、3D 共焦点ラマン分光イメージング計測の解析に関するものである。この計測は、評価したい試料の注目領域の表面だけでなく、深さのある複数の層ごとにスペクトルイメージ計測できる。しかしながら、各層に焦点を絞り計測されたスペクトルには隣接する層のスペクトルの成分が含まれているため、計測信号をそのまま解析すると誤った解析結果を導く可能性がある。この問題を解決するために、ガウス基底関数および層間の線形な混合モデルを仮定し、層間の信号の混合を取除き純粋なスペクトルを推定する手法[2]を開発しており、実際の解析例とともに手法を紹介する。

参考文献

[1] Shiga, M., *et al.*, *Ultramicroscopy*, 170, 43-59, 2016.

[2] Wang, H., *et al.*, *Journal of Physical Chemistry C*, 122 (13), , 7187-7193, 2018.