

多結晶電子回折像の解析におけるデータ科学的手法の推定モデル

A Prediction Model of Data Science Methods for Analysis of Electron Diffraction Images of Polycrystalline Materials

学籍番号：201821619

氏名：鈴木 健太

Suzuki Kenta

結晶を評価する手法の一つに、電子回折法（ED：Electron Diffraction）が存在する。これは、結晶の表面に電子線を照射して「電子回折像（画像）」を得た後、その上に描かれている「電子回折図形（電子回折パターン）」を解析することで、結晶を同定する手法である。回折図形は、回折の観測条件や結晶構造の状態などにより様々に変化するが、それらの情報を人手で正確に判断するのは極めて困難である。故に、回折像から結晶情報を自動（機械）的に推定することができれば、結晶の評価をより容易に行うことが可能になると考えられる。

回折実験の簡易的な手法として、回折パターンシミュレーションが存在する。これは、様々な結晶情報を数値化した「構造パラメータ」と呼ばれる値を入力とし、シミュレータにかけて画像を生成した後、実際の回折実験で得られた回折像と比較するといった手法（順問題）である。しかしながら、この手法では、構造パラメータを先に仮定しなければならないため、相応の技術と経験を要する。一方、本研究では、画像を入力とし、構造パラメータの推定を行うことを考える。すなわち、上記問題の逆問題となっている。入力する画像は、実際の回折実験によって得られたデータ（回折像）であり、特別な技術や経験を必要としない。また、著者の知る限り、同様の推定を行う手法はこれまで提案されていない。

本研究では、提案手法として、深層学習の一種である「畳み込みニューラルネットワーク（以下、CNN）」を採用する。電子回折像を CNN で学習させた後、生成された推定モデルを用いて、構造パラメータの推定を行う。なお、構造パラメータには様々な種類が存在するが、今回の推定対象は「電子線の入射方位（結晶方位）」とする。また、本研究の解析対象である多結晶 TiO_2 電子回折像は、2 タイプの単結晶から構成されているため、二種類の入射方位を有する。そこで、電子回折像から二種類の入射方位を同時に推定する手法のほか、二段階のプロセスで推定する手法も提案する。さらに、予備実験を通して、可能な限り最適な学習方法を定める。

評価実験では、489,500 枚の多結晶 TiO_2 電子回折像を用いて複数の学習データを作成し、各推定モデルの精度を検証した。その結果、（全 1 万枚中）約 8 割のテストデータについては、本手法が有効である可能性を示すことができた。また、一度に学習させるデータ数と画像サイズのバランスが、推定モデルの精度に大きな影響を与えることがわかった。

今後の展望として、推定精度が高いデータと低いデータを分析することにより、推定モデルの効率的な精度改善が期待される。

研究指導教員：鈴木 伸崇

副研究指導教員：若林 啓