

オートエンコーダを用いた多結晶電子回折像の解析

王 彦浩

結晶を評価する手法として、結晶に電子線を照射し、得られた電子回折像に描かれている電子回折図形を解析する電子回折法がある。電子回折図形は、回折の観測条件や結晶情報により変化するが、画像のみから結晶情報を人手で正確に判断するのは非常に困難である。したがって、電子回折像をもとに、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。

一般に、結晶情報は、電子回折法をはじめとした回折実験を通じて解析され、計算機を用いた回折パターンシミュレーションが併用されることも多い。これは、様々な結晶情報を数値化した値（構造パラメータ）をシミュレータに入力して画像生成を行い、生成された画像と実際の回折実験で得られた回折像を比較するという手法である。しかしながら、この手法では、構造パラメータを先に仮定する必要があるため、相応の技術と経験が必要である。一方で、本研究では、回折像を入力して構造パラメータの推定を行うこと（上記問題の逆問題）を考える。この場合、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であり、本手法で結晶を同定する際、特別な技術や経験を必要としない。

本研究では、畳み込みオートエンコーダに電子回折像を学習させ、多結晶を構成する単結晶の推定を行う。単結晶の構造パラメータが既知である場合、多結晶を構成する単結晶を推定できれば、多結晶の構造パラメータを導き出すことができる。本研究の解析対象は、2種類の単結晶 TiO_2 （二酸化チタン）から構成されている多結晶 TiO_2 の電子回折像である。多結晶は複数の単結晶で構成されており、無限の組み合わせが考えられる。そのため、従来手法で多結晶の構造パラメータを推定するのは相当の労力と時間を要する。さらに、今回の解析対象は多結晶 TiO_2 のみであるが、実際の場面においては様々な結晶を解析する必要がある。したがって、多結晶の電子回折像をそのまま学習に用いるのは現実的ではない。そこで本研究では、単結晶の電子回折像を学習させることで、多結晶を構成する単結晶を求めることを目的とする。

評価実験では、多結晶 TiO_2 の電子回折像 325,221 枚から 10,000 枚を無作為に抽出し、抽出された多結晶 TiO_2 の特徴表現と単結晶 TiO_2 の 807 枚の特徴表現の類似度の大きさをもとに、本手法の有効性を検証した。なお、特徴表現は、畳み込み層のフィルタサイズ、プーリングサイズ、アップサンプリングサイズの異なる2つの特徴抽出モデルを用いて抽出され、評価実験では両モデルで抽出された特徴表現について検証を行った。その結果、多結晶を構成する単結晶が、本手法により概ね正確に推定できることが分かった。また、畳み込み層のフィルタサイズやプーリングサイズ、アップサンプリングサイズは、推定の精度に大きな影響を及ぼすという知見を得た。

（指導教員 鈴木伸崇）