

令和元年6月27日現在

機関番号：10103

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K00222

研究課題名(和文) 複素物体の回折イメージングに関する基盤研究

研究課題名(英文) Fundamental research of complex diffractive imaging

研究代表者

塩谷 浩之 (Shioya, Hiroyuki)

室蘭工業大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：90271642

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：失われた位相を回復して実像を復元する手法を回折イメージングという。複素物体のイメージングが可能となると観察できる対象は広がる。複素位相回復で物体領域を事前に与えない手法を確立するためには、物体領域を求める必要がある。物体領域推定問題を実空間における領域の分類問題に帰着し、データクラスタリング手法を適用した。さらに実空間における基盤的な拘束条件を同時に適用することで、複素物体の回折パターンからの位相回復のための手法開発に進展を与えた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

計測によって強度は得られるが位相は失われることを位相問題という。周期性のある対象はその位相を経ずに対象の構造が得られるが、非周期であれば位相を回復する手段が必要となる。位相問題の設定で、対象が複素である問題は数学的にも難しい部類の問題である。そのような問題に対して、物体領域を得る方法の開発のために、物理系の領域ではなく、情報科学による手法で対応して研究を進めた。自然科学の研究に、最近のデータサイエンスやAIなどの情報学研究を役立てられた事例であり、情報の他分野における利活用の事例の一つとなった。

研究成果の概要(英文)：The diffractive imaging is to reconstruct the lost phase information in measuring the intensity data. The imaging method is widely used by establishing the complex phase retrieval. The object support is required for the retrieval, and such the region is given as the constraint. The problem of estimating the support is represented by the data clustering procedure to divide the object domain into the object and non-object regions. Using the fundamental constraints of the object domain for phase retrieval, the complex diffractive imaging is established by the optimal data clustering for the object domain.

研究分野：情報数理工学

キーワード：回折イメージング フーリエ逆問題 複素位相回復 クラスタリング

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

結晶のような規則性のある構造は、その周期性をフーリエ空間上で利用することで分かる。しかしながら、世の中の物質のほとんどは非結晶構造であり、顕微鏡など対物レンズによって顕微鏡により実像が得られる。回折イメージングはそのような非結晶な構造を持つ対象の回折パターン、すなわち実像のフーリエ強度から検出器では得られない位相を計算によって求め、同時に対象の実像も得る手法である。対象が実数物体であるときは計算手法も整ってきっていたが、複素の場合は実空間における物体領域などの制約条件が必須である。複素位相回復によるイメージングは、対象試料の磁場や電場など機能性材料でナノレベルの観察などが深く関係することから、今後有用となる観察手法の一つである。

2. 研究の目的

複素位相回復は、対象が実数物体の場合とは異なり、実空間で強い制約条件を必要とする。実際はナノ以下の物質観察で物体の境界領域を既知とすることはできない。複素位相回復は位相問題では難度の高い問題である。複素位相回復のための基礎とアルゴリズムについて、実位相回復の手法を基礎にして構築する。

3. 研究の方法

対象が実数物体のときの回折イメージングでは、物体領域をアルゴリズムで構成するいくつかの手法が提案されている。本課題の研究代表者および分担者が開発したクラスタリングを使った物体領域構成法を軸に、複素物体でも構成できるように改良する。様々な条件を考慮してノイズや欠損などを導入しながら、数値実験・シミュレーションで実用性のある複素位相回復の手法を構成する。位相回復におけるサポート構成では、シュリンクラップと呼ばれる方法がよく用いられる。逆空間拘束条件を適用したフーリエ強度と事前仮説の実像のフーリエ変換で得られるフーリエ位相を組み合わせた関数を用意する。その逆フーリエ変換は実空間上の関数となり、実空間の各ピクセルにおける振幅値の最大値を基準として、ガウス分布に基づいて物体サポートとサポート外領域を分ける。

クラスタリングによる方法では、各ピクセルの振幅値の集まりをデータ集合とみなして、それを2つのクラスに分割する。分割されたクラス集合の振幅の平均値の大小で、物体サポートであるかサポート外であるかを判定する。複素位相回復では、位相回復の過程の難易度が実数の場合よりも高いこともあり、事前のデータを分割するか、もしくは他のプライヤを導入することが必要となる。複素位相回復で全ての領域で位相が変化していることはなく、位相が比較的フラットな領域がある。そのような実空間制約条件を加えることで、クラスタリングを用いて複素物体の位相回復できるような調整を行う。調整法は多岐にわたるので、各種の調整法を対象や実験によって設定の必要性がある。全体として、各種実験を行った設定などを参考に有効なシミュレーション結果につなげる。

4. 研究成果

複素位相回復の手法構築には物体領域を如何に正確に推定するかが、回復像を得るカギとなる。実数の位相回復、つまり対象物体が位相を持たない場合、物体サポートは求めることも可能であるが、複素物体の場合はサポートが少しでも違っているだけで位相回復が難しくなる。その様子を図1に例を示す。振幅と位相を真の像として設定し回折パターンにはポアソンノイズを加える。真より物体領域が狭い(Small support)場合は回復しない。真よりも広いサポート(Wide support)の場合でも適切な回復像は得られない。数ピクセルの違いでも、複素物体では正しく位相回復しない。

物体サポート構成法でよく用いられるシュリンクラップ法では、サポート更新における初期値をある程度の形を事前情報として用いることが多い。本研究で用いるサポート構成法は、クラスタリングを核とした領域判定を行っており、物体領域の判定の境界を動的に変えることから、アルゴリズムにおけるパラメータ調整の必要としない探索である。回折イメージングは実像を直接観察していない顕微法であるので、パラメータ依存性のない手法であることは、得られる像の信頼性につながる意味で重要となる。

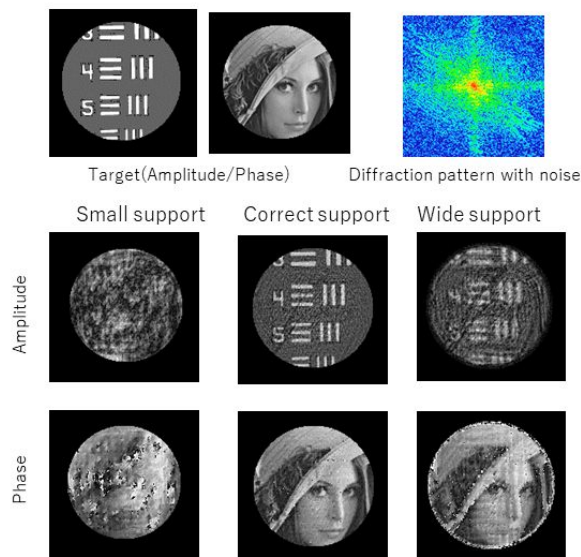


図1: 物体領域の適合・不適合による複素位相回復像

物体領域の判定の境界を動的に変えることから、アルゴリズムにおけるパラメータ調整の必要としない探索である。回折イメージングは実像を直接観察していない顕微法であるので、パラメータ依存性のない手法であることは、得られる像の信頼性につながる意味で重要となる。

本課題である複素位相回復の問題設定で、クラスタリング手法の有効性を検証した。図2 上段に実験設定を示す。回折パターンにはポアソンノイズと中心部のフーリエ強度が高い部分にデータ欠損を設けた。K-means によるクラスタリング手法での複素位相回復の物体領域抽出過程を図の中段に、回復像を下段に示した。複素物体で適切な位相回復することを確認した。この結果は、単一で計測された1枚の回折パターンからの回折イメージにおける複素位相回復に大きく貢献するものである。複素におけるクラスタリングの有効性根拠などは明らかになっていないが、複素位相回復において、少なくともサポートを与えられなくても、実像の復元ができることが確認できた。

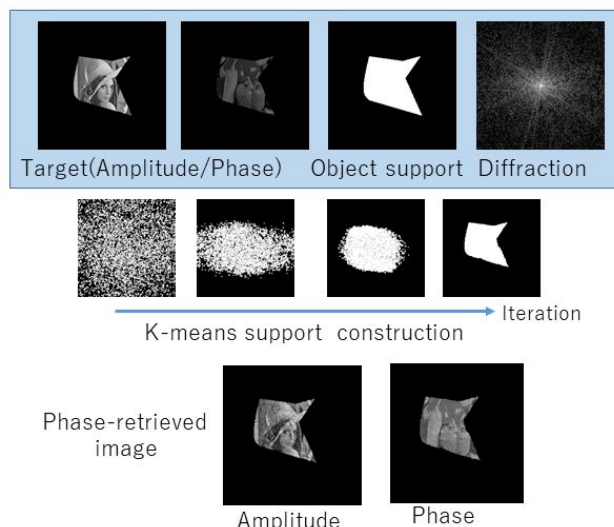


図2：複素位相回復におけるクラスタリング手法による物体領域の抽出と位相回復像

複素位相回復に関係する計測関係の最新の研究では、タイコグラフィがある。対象は同じ複素の位相回復であるが、物体の範囲を示すサポートを強く使う手法である。本研究では一般の複素回復を課題としており、K-means クラスタリングを用いており、計算量も多くないので直接的にタイコグラフィに組み込んで、情報学的データ処理手法の物質科学への応用研究として今後の発展的研究課題となる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計1件)

- [1] Katsuya Ichihashi, Hiroyuki Shioya, Daiki Yamamoto, Yosuke Maehara, Kazutoshi Gohara, "Sequential on-line construction for ensemble phase-retrieved images," Proceedings of International Conference on Biometrics and Kansei Engineering, pp.163-168 (2017)

〔学会発表〕(計10件)

- [2] 市橋 克哉, 野川 翔太, 小澤 怜, 前原 洋祐, 塩谷浩之, 山崎 順, 郷原 一寿, クラスタリングに基づくサポート構成を用いたタイコグラフィ, 日本顕微鏡学会, 第75回学術講演会, 2amG_14-6, 2019年6月18日(名古屋)
- [3] 野川翔太, 市橋克哉, 前原洋祐, 塩谷浩之, 郷原一寿, CNTモデルを用いた回折イメージングにおける動的サポート構成, 第33回 信号処理シンポジウム, 電子情報通信学会, 第33回 信号処理シンポジウム 講演論文集, 2018年11月06日(東京)
- [4] 小澤怜, 林純一, 塩谷浩之, 関根ちひろ, RetinaNetによる鳴り砂の構成物検出に関する検討, 情報処理北海道シンポジウム2018, 情報処理北海道支部, 情報処理北海道シンポジウム2018 予稿集, 2018年10月06日(北見市)
- [5] 野川翔太, 吉田勝宜, 市橋克也, 前原洋祐, 塩谷浩之, 郷原一寿, CNTモデルを用いた3次元回折イメージングにおける動的サポート構成法の検討, 情報処理北海道シンポジウム2018, 情報処理北海道支部, 情報処理北海道シンポジウム2018 予稿集, 2018年10月06日(北見市)
- [6] 澤田拓弥, 塩谷浩之, 非整数次フーリエ変換を用いた複素画像暗号化に関する検討, 情報処理北海道シンポジウム2018, 情報処理北海道支部, 情報処理北海道シンポジウム2018 予稿集, 2018年10月06日(北見市)
- [7] Katsuya Ichihashi, Hiroyuki Shioya, Yosuke Maehara, Jun Yamasaki, and Kazutoshi Gohara, Complement Algorithm for Phase Retrieval by the Fourier Intensity with a Missing Region, The 24th Congress of the International Commission for Optics, P4-36, The Optical Society of America(2017年)(Tokyo)
- [8] 中川翔太, 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 郷原一寿, 逐次型位相回復法による回復像分布の検討, 第32回 信号処理シンポジウム, 電子情報通信学会, : 第32回 信号処理シンポジウム 講演論文集, (頁 115-116), 2017年11月10日(盛岡市)
- [9] 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 山崎順, 郷原一寿, 欠損領域を含むフーリエ強度からのタイコグラフィ法に関する検討, 第32回 信号処理シンポジウム, 電子情報通信学会, 第32回 信号処理シンポジウム 講演論文集, (頁 469-499), 2017年11月09日(盛岡)
- [10] 中川翔太, 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 郷原一寿, 位相回復像による球殻構造の形成法に関する検討, 平成29年度電気・情報関係学会北海道支部連合大会講演論文集, (頁 159), 2017年10月29日(函館市)
- [11] 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 山崎順, 郷原一寿, フーリエ位相回復における欠損パターン補完法, 2017年電子情報通信学会総合大会, 電子情報通信学会, 2017年電子情報通信学会総合大会予稿集, (頁 43-43), 2017年03月22日(名古屋)

〔図書〕(計2件)

- [1] H. Daimon, T. Matsushima, F. Matsui, K. Hayashi, W. Voegeli, Y. Wakabayashi, K. Gohara, H. Shioya, J. Yamasaki, H. Sekiguchi, Y. C. Sasaki, Y. Morikawa, Y. Takano, N. Kobayashi, H. Ishii, K. Hirose, T. Fukushima, D. Oka, Y. Kubozono, H. Goto, H. Yamada, H. Sekiguchi, ``3D Local Structure and Functional Design of Materials,`` Maruzen Publishing, World Scientific, Diffractive Imaging, Total 209pages(2019)
- [2] 大門寛, 佐々木裕次, 石井宏幸, 岡大地, 久保園芳博, 郷原一寿, 小林伸彦, 佐々木裕次, 塩谷浩之, 大門寛, 鷹野優, 林好一, 広瀬賢二, 福村知昭, 松井文彦, 松下智裕, 森川良忠, 山崎順, 山田容子, 若林裕助, ``機能構造科学入門 ~3D 活性サイトと物質デザイン~,`` 丸善出版, ナノ構造体・1分子イメージング, 位相回復問題(頁166ページ)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年:
国内外の別:

取得状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年:
国内外の別:

〔その他〕

ホームページ等 なし

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名: 郷原 一寿

ローマ字氏名: Gohara Kazutoshi

所属研究機関名: 北海道大学

部局名: 工学研究院

職名: 教授

研究者番号(8桁): 40153746

(2) 研究協力者

なし

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。