

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 16 日現在

機関番号：10103

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24300065

研究課題名(和文) 回折イメージングの基盤的研究～情報と物質のイノベーション～

研究課題名(英文) Fundamental research of diffractive imaging toward innovation of information and material

研究代表者

塩谷 浩之 (SHIOYA, Hiroyuki)

室蘭工業大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：90271642

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,000,000円

研究成果の概要(和文)：結晶ではない物質の構造を回折パターンからその実像を求めるには、計測で失われるフーリエ位相を求める必要がある。本研究では位相問題を制約条件による情報量最小化問題に帰着させ、高効率なアルゴリズムを開発した。具体的には実空間で物質領域を情報クラスタリングで推定するアルゴリズムを新たに開発し、さらにはアルゴリズムを並列アンサンブル化することで、初期値依存やノイズの影響を抑えた位相回復像を得られることを確認した。さらには、回折パターン取得では光源のダイレクトによって回折パターンの高輝度領域の欠損に対する補完法も合わせて提案し、回折イメージングの基盤研究としての総合的な手法開発を行った。

研究成果の概要(英文)：Retrieving the Fourier phase is required to reconstruct the image of a non-crystalline object using its Fourier-intensity measurement. In this research, we present the phase problem as an informatics-based minimization with the diffractive constraints, and newly introduce a highly effective algorithm for the phase retrieval. And an ensemble of phase retrieval is introduced to form the parallel architecture for avoiding the shot noise and initial starts. Moreover, the complement method for the missing direct on the diffraction pattern is introduced, and the overall method is established as the fundamental research in diffractive imaging.

研究分野：情報数理学

キーワード：情報量 フーリエ逆問題 位相問題 画像復元 最適化

1. 研究開始当初の背景

物体からの散乱波の検出では、強度は得られるが位相は失われてしまう。波長が短い波では位相を見出すことができなく、これを位相問題と言っている。この状況を位相は失われていると表現する。この位相を復元できれば、逆フーリエ変換によって物体の実像を求められる。位相の復元の大きな意義がそこにあり、位相の推定を「探し出す」と解釈することで、それを位相回復と呼んでいる。

位相回復のなかで特にフーリエ位相回復については、X線構造解析をはじめ広く光学の分野で重要性はとても高い。参照波を使うホログラフでは条件を優位にして位相を求めている。その対抗馬として登場したのが、実空間像を条件にして解く方法でGSアルゴリズムとよばれている。

80年代に実数性などの弱い条件でも解ける手法をFienupが提案した。その方法は強力で、全てではないがある程度は解ける実感があり、そのまま30年経過している。しかしながら位相回復のアルゴリズムを本質的に決定付ける数理成果は現れなく、数理としては未だ確立されていない。大きな問題点として、適当な条件の場合は収束して位相回復像が得られるが、収束しなく停滞や複数の回復しきれない像が得られることなどがあり、計算で求めた像に対する科学的信頼度の問題に及んでいる。よって、位相回復を妥当に行える要件などが明確になることや、計算ではなく理論的な視点での解析による見通しが強く求められている。

非周期構造の物質に対する回折パターンからの位相回復が、ある意味で計算上で求める範囲で完全なものとなると、物質の構造を調べる顕微法において対物レンズ不要の手法が確立する意味で、物質科学に大きく寄与できることが期待される。

2. 研究の目的

画像処理は多様な目的に適用され、その目的ごとに要素技術が日々進展している。対象の真の姿を求めるイメージングは、探求に直観を与える欠かせない道具である。本研究課題では、情報科学と物質科学の融合研究として、対物レンズを使わない新しい顕微法である回折イメージングを取り上げ、散乱波の計測で失われる位相復元の数理を確立し、電子線の波長分解能に迫る超解像による物質科学への応用研究を行い、回折イメージングの基盤的研究による「情報と物質のイノベーション」を生み出す。

本研究においては、位相回復の数理基盤研究を行うことを主眼とし、それによって回折イメージングがより確実な顕微法となることを目指している。記号などの計算機的なシンボル処理が対象とされている情報学的手

法が、自然科学における物質構造の解析に直接的に関われることで、情報と物質の実質的な共有研究となることも、本研究の目的に含めている。

3. 研究の方法

理論としての位相回復の研究においては、情報量解析を主として用い、理論解析を遂行しながら、高効率なアルゴリズムの開発のための要素研究を行っていく。数値シミュレーションを基本として、対象物質については物理的に妥当な設定を行う。情報数学は理論研究に役立つ道具を提供する分野であり、情報系の数学的基礎を形作る意味で重要である。特に情報理論から生まれた情報量の解析手法が基盤となる。基本的には、実空間における事前と事後の物体関数の2項間情報量と、逆空間における事前物体のフーリエ変換と逆空間拘束条件との2項間情報量を構成し、それらをラグランジェ形式で融合した基本方程式を用いる。その最適化と逐次更新アルゴリズムを解析的に導き、位相回復に求められる要件に適切な更新則を導出する。

実験研究についてもナノスケールの試料の作成と電顕による観察を通じて、回折イメージングのアルゴリズムにおいて必要となる機能や留意すべき要素を見出す作業も含めて相補的に行う。特に電顕などの実験で得られる回折パターンの特性や特質を数値実験に反映するための作業が重要となる。

4. 研究成果

回折イメージングにおいては、実空間条件を用いずには位相回復できない。つまり物体の領域を如何に求めるかが位相回復における大きなカギとなっている。当初の位相回復においては、物体サポートはできるだけ与えないと、アルゴリズムでは位相回復しないとされていたが、値の切り替えなどのアドホックな手法が提案され、その後には実空間における強度値の割合を目途に決める方法が提案されてきた。しかしながら、設定値によって回復の成否があり、回復した像への信頼性が高いとは言えない。そこで我々は位相回復アルゴリズムに対し、実像の領域における強度分布からデータクラスタリングを適用したダイナミックサポート構成法を新たに提案した。現在のところ位相回復法における物体サポート構成法では、強度であらかじめ設定した閾値によるフリッピング法、最大強度からの算出する閾値でガウシアンをかぶせるシュリンクラップ法がある。それに我々の提案するクラスタリングによる動的サポート構成法がある、述べた2つの既存の手法ではパラメータ設定による位相回復の成否があり、設定の複雑さを回避できない。しかしながら、我々の提案手法ではそれをフリーとする方法であり汎用的である。

本研究課題の遂行によって、ある程度の位相回復で、物体領域などの実空間の条件が弱い状況でも解けるまでアルゴリズムを進化させた。検出する回折パターンのサイズは大きくなる傾向にあり、3次元にもなるとフーリエ変換の計算コストは大きな課題となっている。

本研究で優位に導入しているアンサンブル化や並列化を行っているが、フーリエ変換の計算コストの最小化には限りがある。最近では、そのような計算を補助ハードで高速化することができてきており、GPUなどがよく用いられるようになった。最近注目を浴びている人工知能用のアルゴリズムにおいても、GPUの援用法で深層学習などが簡易実装できるようになってきた。計算自体はCPU+GPUによって進歩している。

補助ハードによる高速化も重要であるが、さらにその先にはLSIに集約することが、本来の着地点でありたい。フーリエ変換では多くの桁によるダブル型の実数精度を用いてきたので、回路化においては桁精度に依存することになる。位相回復にはフーリエ変換の精度をどのくらい必要とするかを検証した、その結果、桁精度が落ちてもしっかりな拘束条件、特に実空間拘束条件があれば低精度のフーリエ変換でも位相回復することを確認した。この結果はGPUを超えた回路化とイメージング機器の簡易化の基盤となる。

回折イメージングにおける計算・アルゴリズムの研究は、良質な対物レンズに不可欠である、その一方で実験データへの適用の要件を、観察する対象によって検討する必要がある。そのために白金・銀のナノクラスターなどの試料作製と電顕での試料観察確認を、アルゴリズムの理論研究と並行して実施した。実験データの回折パターンでは超高輝度部においてはデータ欠損があり、位相回復に影響を与えている。これまでの方法では、ビームのダイレクト部については、ガウシアンでフィッティングしながら推定する方法や、アルゴリズムで計算し得られている仮説の像のフーリエ変換の値そのものを使う方法が、現時点で知られている方法である。我々は全く別のアプローチをとる。まずは欠損部分を補う値を複数の初期値から得られる仮説の実像を複数求め、そのフーリエ変換の平均化して適応するアンサンブル欠損補完法を提案している。物理的に妥当な設定で提案した補完法について、その有効性をシミュレーションで確認した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

[1] T. Mitsudome, T. Urayama, K. Yamazaki, Y. Maehara, J. Yamasaki, K. Gohara, Z. Maeno, T. Mizugaki, K.

Jitsukawa, and K. Kaneda: Design of Core-Pd/Shell-Ag Nanocomposite Catalyst for Selective Semihydrogenation of Alkynes, ACS Catalysis (ACS Catal.), 6, pp. 666-670, 2016. 査読有

[2] 長舟和馬, 渡邊真也, 塩谷浩之, フーリエスペクトル特性を考慮した進化型多目的最適化による少数投影CTの再構成, 情報処理学会論文誌, 数理モデル化と応用, 8, 1, pp. 45-61, 2015 査読有

[3] S. Danworaphong, M. Tomoda, Y. Matsumoto, O. Matsuda, T. Ohashi, H. Watanabe, M. Nagayama, K. Gohara, P. H. Otsuka, and O. B. Wright: Three-dimensional imaging of biological cells with picosecond ultrasonics, Appl. Phys. Lett. 106 (16), 163701-5, 2015 査読有

[4] Jun Mao, Uthai Phommasak, Shinya Watanabe and Hiroyuki Shioya, "Detecting Foggy Images and Estimating the Haze Degree Factor," Journal of Computer Science & Systems Biology, Vol. 7(6), pp. 226-228, 2014

[5] Jun Mao and Hiroyuki Shioya, "A Refinement of Extracting Approximate Symmetry Planes Based on Least Square," Journal of Computer and Communications, 2, pp. 188-195, 2014, 査読有

[6] Uthai Phommasak, Daisuke Kitakoshi, Jun Mao, Hiroyuki Shioya, "A Policy-Improving System for Adaptability to Dynamic Environments Using Mixture Probability and Clustering Distribution," Journal of Computer and Communications, 2, pp. 210-219, 2014, 査読有

[7] S. Hattanda, H. Shioya, Y. Maehara, and K. Gohara, "K-means clustering for support construction in diffractive imaging," J. Opt. Soc. Am. A, 31(3), pp. 470-474, 2014 査読有

[8] 得地博之, 石見洋祐, 塩谷浩之, 前田純治, 複雑な背景をもつカラー文書画像からの文字抽出, 電子情報通信学会論文誌 D, 98, 12, pp. 3094-3097, 2013 査読有

[9] Uthai Phommasak, Daisuke Kitakoshi, and Hiroyuki Shioya, "An Adaptation

System in Unknown Environments Using a Mixture Probability Model and Clustering Distributions,” Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics, 16, 6, 733-740, 2012, 査読有

〔学会発表〕(11件)

- [1] 市橋克哉, 山本大稀, 塩谷浩之, 前原洋祐, 郷原一寿, アンサンブル欠損補完による位相回復, 新学術領域研究「3D 活性サイト科学 第三回成果報告会, P44, 愛知県名古屋市, 会場 名古屋工大, 2016年3月.
- [2] 山本大稀, 市橋克哉, 塩谷浩之, 広林茂樹, 郷原一寿, 位相回復像群による球殻構造の内部解析, 電子情報通信学会 画像工学研究会, IE2015-105, 北海道札幌市, 会場 北海道大学, 2016年2月.
- [3] Kamimura, T. Dobashi, Y. Maehara, R. Kitaura, H. Shinohara, and K.Gohara: 20 kV Diffractive Imaging of Graphene by using SEM-Based Dedicated Microscope, M & M 2015 (Microscopy & Microanalysis Meeting 2015), (Portland, Oregon, USA)(2015)
- [4] K. Yamazaki, Y. Maehara, and K. Gohara, “ TEM analysis of Moire patterns originating from two monolayer graphenes grown on the front and back sides of a copper substrate used in CVD ”, 2015 MRS Fall Meeting, Boston (The Materials Research Society (MRS) Fall Meeting), U.S.A. (2015)
- [5] 市橋克哉, 山本大稀, 塩谷浩之, 広林茂樹, 郷原一寿, “ 位相回復像群による球殻構造の中心推定, 電子情報通信学会 画像工学研究会, IE2015-80, 熊本県熊本市, 会場 崇城大学, 2015年11月.
- [6] Wisan Dhammatorn, Daiki Yamamoto, Katsuya Ichihashi, and Hiroyuki Shioya, “ Image reconstruction in computed tomography using a hybrid method of ART, FBP and iterative FT “ 平成 27 年度電気・情報関係学会北海道支部連合大会, 140, 北海道北見市, 会場 北見工大, 2015年11月.
- [7] 関沢 麻菜美, 塩谷 浩之, 岸上 順一, “ 距離写像学習ネットワークにおける極大ノイズの回避学習に関する検討”, 平成 27 年度電気・情報関係学会北海道支部連合大会, 講演番号 163, 北海道北

見市, 会場 北見工大, 2015年11月.

- [8] 山本大稀, 市橋克哉, 塩谷浩之, 広林茂樹, 郷原一寿, 逐次平均による位相回復法に関する検討, 平成 27 年度電気・情報関係学会北海道支部連合大会, 139, 北海道北見市, 会場 北見工大, 2015年11月.
- [9] 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 郷原一寿, 欠損領域を含むフーリエ強度からのアンサンブル位相回復, 電子情報通信学会 画像工学研究会, IE2014-56, 鹿児島県鹿児島市, 会場 鹿児島大学, 2014年11月.
- [10] 市橋克哉, 塩谷浩之, 前原洋祐, 郷原一寿, “欠損領域を含むフーリエ強度からの位相回復における動的サポート構成法の比較検討”, 電子情報通信学会 画像工学研究会, IE2014-72, 北海道札幌市, 会場 北海道大学 2015年2月.
- [11] 井澤太郎, 前原洋祐, 塩谷浩之, 郷原一寿, “桁制限型フーリエ変換による位相回復に関する検討”, 平成 25 年度電気・情報関係学会北海道支部連合大会, 講演番号 169, 北海道室蘭市, 会場 室蘭工業大学, 2013年10月

〔図書〕(計1件)

郷原一寿:「回折イメージング」, マイクロビームアナリシス・ハンドブック, pp.140-141, (株)オーム社(2014)

6. 研究組織

(1)研究代表者

塩谷浩之 (SHIOYA, Hiroyuki)
室蘭工業大学・工学研究科・教授
研究者番号: 90271642

(2)研究分担者

渡邊真也 (WATANABE, Shinya)
室蘭工業大学・工学研究科・准教授
研究者番号: 30388136

郷原一寿 (GOHARA, Kazutoshi)
北海道大学・工学研究院・教授
研究者番号: 40153746

前田純治 (MAEDA, Junji)
室蘭工業大学・工学研究科・教授
研究者番号: 00002311
平成 24~26 年度

(3)連携研究者

該当無