

回折イメージングのための深層学習を援用した反復的位相回復

東京農工大学大学院工学研究院

山田宏樹

タイコグラフィは可視光線、X 線、電子線などのコヒーレントビームを利用して微細構造を撮像する計算イメージング法であり、従来のレンズ光学の限界を超える 10 nm クラスの空間分解能を実現してきた。タイコグラフィでは、空間的に重なり合う領域で複数の回折パターンを収集し、それらから物体の複素透過関数（振幅および位相）を位相回復計算により再構成する。現在では、硬 X 線タイコグラフィによる 10 nm 以下の分解能が達成されており、材料科学や生命科学分野において、構造・化学・磁気・歪みなどの多様な情報を取得するための重要な手法として広く用いられている。さらに、ソフト X 線や Tender X 線領域におけるタイコグラフィの高分解能化も進み、ナノイメージングの可能性が広がっている。

タイコグラフィによる可視化の品質は位相回復計算に大きく依存する。位相回復では、低線量照射や低重複率によるスキャンといった困難な実験条件下でも、安定して高解像度な像を再構成できる能力が求められる。実計測においては、生体試料や放射線に弱い材料に対しては照射量の制限があり、また in situ 観察や分光測定、CT 撮影では高速スキャンが必要とされるため、取得できるデータは必ずしも理想的ではない。このような制約下では、ノイズの多い計測データに対しても高いロバスト性を持つ再構成アルゴリズムが不可欠である。既存のモデルベース型の手法では、ePIE や rPIE、DM、RAAR などが知られており、物理モデルに基づく反復更新により安定的に解を求めることができるのが特徴であるが、多数のパラメータ調整や収束の遅さが問題となる場合がある。一方、近年は深層学習によるデータ駆動型アプローチも登場しており、学習済みのニューラルネットワークによって位相を直接推定する方法が検討されている。しかしこれらは、訓練データと実験データとのギャップによって汎化性能に限界があり、特に異なる測定条件への対応や、プローブ関数の推定を伴う複雑な設定では不安定な結果を生むことがある。

本研究では、モデルベース型アルゴリズムの物理的整合性と、深層学習の表現能力を融合させる新たな枠組みとして、PINE¹⁾ (Ptychographic Iterative algorithm with Neural denoising Engine) を提案する。PINE は、従来の反復法に学習済みのニューラルネットワーク型のノイズ除去器を挿入し、各反復ごとに推定された像を洗練化することで、効率的かつ高精度な収束を実現する。提案手法の特徴は DNN の出力を単なる事後的な補正ではなく、不動点写像とみなした上で、その不動点制約を明示的に最適化問題に組み込んでいる点である。これにより、深層学習による柔軟な表現力を活用しつつ、モデルベースアルゴリズムと整合的な構造を保つことができる。また、実測データが不足する問題に対処するために、Dead leaves モデルに基づく数式駆動型教師あり学習²⁾を導入し、実測データを用いずに現実的なパターンの多様性を含んだノイズ除去器を訓練している。

提案手法の有効性は、合成データと実測データの双方で評価された。SPring-8 のビームライン条件を模したシミュレーションでは、PINE は ePIE や rPIE に比べて、著しく少ない反復回数で高解像度な像を再構成することが確認された。特に低照射および低重複条件において、従来法では破綻するような条件でも、PINE は良好な再構成性能を維持した。また、Siemens スターチャートやトナー粒子の実験データにおいても、従来法がノイズの影響で像の分解能を損なう中、PINE は構造の詳細を保持しつつ安定した像を再構成した。この結果は、PINE が物理モデルとデータ駆動型推論の両立によって、より現実的かつ柔軟な画像再構成を可能にする強力なアプローチであることを示している。

参考文献

- 1) K. Yamada, et al., *J. Appl. Cryst.*, vol. 57, no. 5, pp. 1323–1335, Oct. 2024.
- 2) M. Baradad, et al., in *Proc. Adv. Neural Inf. Process. Sys.*, 2021, pp. 2556–2569.