

頒布先：文部科学記者会、科学記者会、大阪科学・大学記者クラブ、兵庫県政記者クラブ、中播磨県民センター記者クラブ、西播磨県民局記者クラブ、熊本県内報道機関、PR TIMES

報道解禁：2026年6月12日（金曜日）17時00分（日本時間）

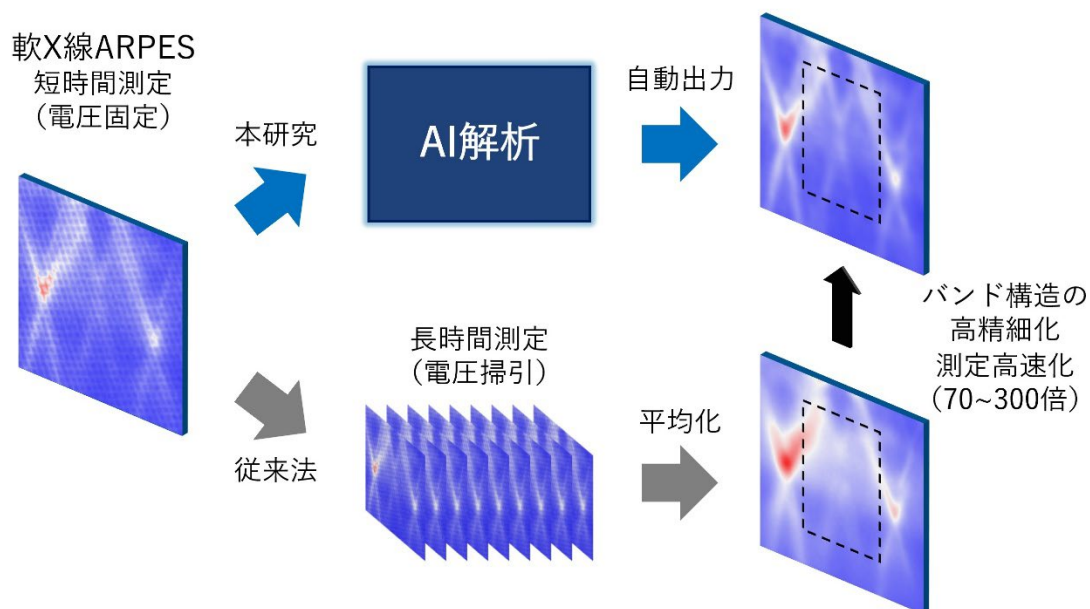
2026年6月11日
 公益財団法人高輝度光科学研究センター
 国立大学法人電気通信大学
 国立大学法人熊本大学
 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）

事前学習不要で短時間測定データから電子状態を可視化する AI 解析法を開発

～SPRING-8 の軟 X 線 ARPES で実証、先端科学計測の課題克服～

発表のポイント

- ・放射光などの先端科学計測では、大量の学習データ取得が難しく、AI 解析の導入が課題となっていた。
- ・本研究では、事前に学習データを用意する必要のない AI 解析法を開発し、短時間で測定した 1 枚の軟 X 線 ARPES 画像から、電子のバンド構造を明瞭に可視化できることを実証した。
- ・本成果は、未知現象を対象とする先端科学計測において、正解データを事前に用意できないという課題を克服しうる新たな AI 解析基盤技術として期待される。



軟 X 線 ARPES への AI 解析適用の概念図。

【概要】

公益財団法人高輝度光科学研究センター（JASRI）の横山優一研究員、山神光平研究員、電気通信大学の住谷祐太氏（研究当時：博士前期課程学生）、庄野逸教授、熊本大学の水牧仁一朗教授らの研究グループは、事前学習データを用いず、短時間の科学計測データから信号成分を推定する人工知能（AI）による解析法を開発しました。

本手法は、深層ニューラルネットワークの構造そのものが持つ性質である深層事前分布（Deep Prior）^{*1}を利用します。ネットワークの学習は、まず試料本来の信号パターンを再現し、その後、測定装置などに由来する周期的なノイズ（アーティファクト）やランダムノイズまで再現する方向へ進みます。適切なタイミングで学習を止めることで、不要なノイズ・アーティファクト成分を抑制し、信号成分を抽出できます。

研究グループは、この AI 解析法を大型放射光施設 SPring-8^{*2} BL25SU の軟 X 線角度分解光電子分光（ARPES）に適用し、ランダムノイズと格子状アーティファクトを含む短時間の測定データからでも、バンド構造を明瞭に可視化できることを示しました。さらに、学習を止めるタイミングを自動決定する仕組みを導入し、客観性と再現性を備えた AI 解析法として確立しました。

本成果は、放射光や中性子などの先端科学計測において、AI for Science を実験現場へ導入するための新たな解析基盤技術として発展が期待されます。

今回の研究成果は、英国物理学会が発行する国際科学雑誌『Machine Learning: Science and Technology』に 6 月 12 日に掲載されます。

【研究の背景】

近年、深層学習は自然言語処理や画像解析で大きな成果を上げています。しかし、最先端の AI モデルの多くは大量の学習データを前提としており、あらかじめ正解が分からない未知現象の解明を目指す先端科学計測には、そのまま導入しにくいという課題があります。中でも、放射光や中性子などの大型研究施設を用いた実験では、一つ一つの測定にかかるコストが高く、AI の訓練に十分な規模のデータセットを準備することは容易ではありません。

角度分解光電子分光（ARPES）は、物質中の電子のエネルギーと運動量の関係であるバンド構造を直接調べる強力な手法です。特に放射光軟 X 線を用いる ARPES は、物質内部の電子状態にも感度を持ち、三次元運動量空間におけるバンド構造を調べる上で有用です。一方で、信号対雑音比（S/N）が低くなりやすく、短時間で高品質なバンド構造画像を得ることは困難です。また、光電子分析器の電圧を固定して効率よく測定する Fixed モードでは、試料本来の電子状態とは無関係な格子状アーティファクトが測定画像に現れます。

ランダムノイズに加えて、このような格子状アーティファクトを抑制しながら、試料本来の電子状態に由来するバンド構造を可視化することが、ARPES における重要な課題でした。

【研究内容と成果】

AI 解析法の開発

研究グループは、この課題を克服するため、事前に学習データを用意する必要がない AI 解析法を開発しました。本手法では、解析したい 1 枚の測定画像に対して、画像ごとに小規模な深層ニューラルネットワークを最適化します (図 1)。深層ニューラルネットワークは、ランダムなノイズよりも、画像中の特徴的な構造や繰り返し現れるパターンを学習しやすい性質を持ちます。この性質は、画像に含まれる本来の構造を優先的に再現する事前分布として働き、深層事前分布 (Deep Prior) と呼ばれます。

Deep Prior を利用することで、Fixed モードによる短時間測定画像に含まれるランダムノイズと格子状アーティファクトを分離し、試料由来の信号成分を抽出できます。本手法の鍵となるのは、AI の学習を適切なタイミングで自動停止させる仕組みです。学習を進めすぎると、AI は不要なノイズやアーティファクトまで忠実に再現してしまいます。そこで、AI 出力画像と測定画像との平均二乗誤差の変化と、格子状アーティファクトの強度を組み合わせることで、ノイズの影響を抑えながら、アーティファクトを再現し始める前の最適な停止タイミングを自動的に決定するアルゴリズムを構築しました。これにより、従来の Deep Prior に基づく手法では困難だった、複雑なアーティファクトの抑制と信号成分の抽出を両立できるようになりました。

SPring-8 の軟 X 線 ARPES 実験データで実証

本研究では、大型放射光施設 SPring-8 BL25SU で取得された、重い電子系物質として知られる CeRu_2Si_2 の軟 X 線 ARPES 実験データを用いて、開発した AI 解析法の有効性を検証しました。対象とした Fixed モードの測定データには、試料の電子状態に由来する信号成分に加え、光ショットノイズなどのランダムノイズと、測定装置の金属メッシュによる格子状アーティファクトが含まれています。

40 秒および 10 秒の短時間測定データに本手法を適用したところ、格子状アーティファクトとランダムノイズを分離し、バンド構造情報を抽出することに成功しました (図 2)。アーティファクトの影響を測定装置側で平均化する Swept モードの標準的なデータ (測定時間 2880 秒) と比較した結果、本手法によってバンド構造の主要な特徴をより鮮明に可視化できることが明らかになりました。さらに、ARPES 画像から切り出した運動量分散スペクトルで定量評価を行いました。40 秒測定データに AI 解析法を適用した場合、従来の Swept モードでは重なり合っていたピーク構造の分離が可能となり、約 70 倍高速な測定条件でも、バンド構造の情報をより詳細に取り出せることを示しました。一方、10 秒測定データでは、残留ノイズによるスペクトル形状の歪みが見られるものの、定性的なバンド構造の把握であれば、300 倍近くもの高速化が可能になることを示しました (図 3)。

【今後の展開】

本成果により、SPring-8 の軟 X 線 ARPES において、短い測定時間でバンド構造を可視化できるようになり、測定時間の短縮や放射光 X 線による試料損傷の低減を通じて、実験効率の向上につながります。また、今回開発した AI 解析法は、約 20 秒で解析可能です。そのため、測定時間が 20 秒以上であれば一連の測定と同時並行でリアルタイム AI 解析が可能であり、従来の測定時間 (数分～数十分) との差がそのまま測定の効率化に直結します。機能性材料や量子物質などの先端材料研究では、物質中の電子状態を高精度かつ効率よく調べるのが重要であり、本研究で示した計測・解析プロセスの大幅な効率化は、

将来的な材料開発やデバイス研究を支える基盤技術につながります。

今後は、スピン分解 ARPES や時間分解 ARPES など、S/N が低くなりやすい電子状態計測への応用展開を目指しています。さらに、X線コンピュータ断層撮影、X線散乱、中性子散乱などの先端科学計測分野でも、Deep Prior の応用可能性を探っていきます。各計測手法には固有のノイズやアーティファクトが存在するため、対象データに応じた検証は必要になりますが、先端科学計測におけるデータ不足を克服しうる AI 解析基盤技術として発展が期待されます。

【研究支援】

本研究は、JST 戦略的創造研究推進事業 さきがけ (JPMJPR25JA) および JSPS 科研費 若手研究 (JP25K17944) の助成を受けて行われました。

【論文情報】

題名 : Deep prior-based denoising for state-of-the-art scientific imaging and metrology

日本語訳 : 先端科学計測のための深層事前分布に基づくノイズ・アーティファクト除去法

著者 : Yuichi Yokoyama, Kohei Yamagami, Yuta Sumiya, Hayaru Shouno, and Masaichiro Mizumaki

ジャーナル名 : Machine Learning: Science and Technology

DOI : 10.1088/2632-2153/ae67cf

【参考情報】

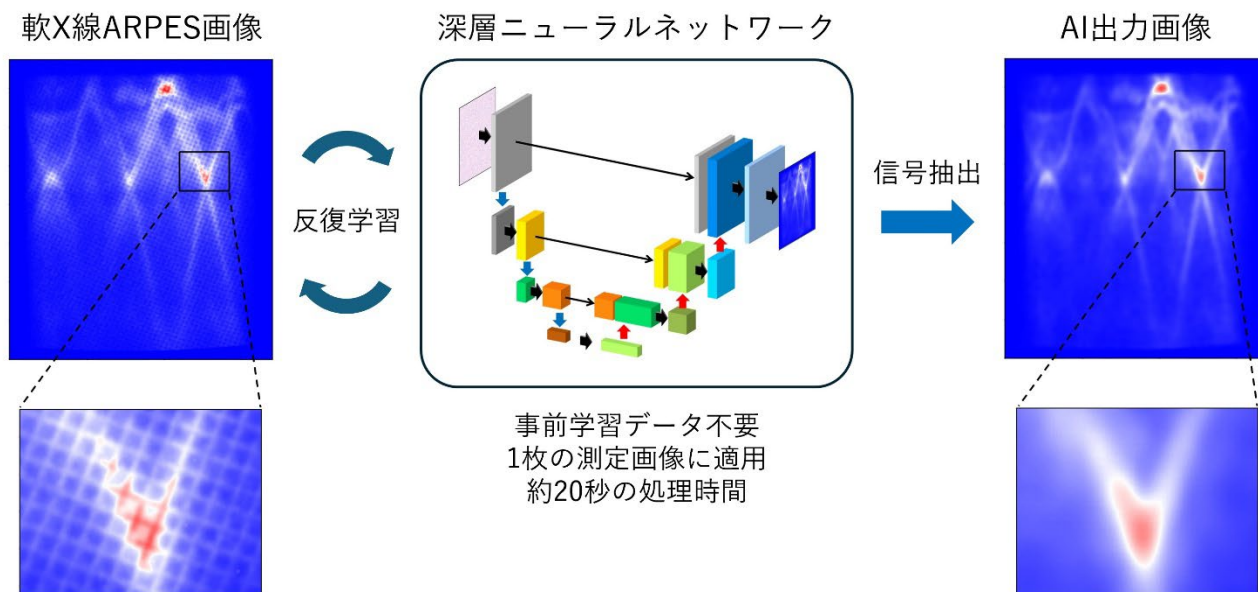


図 1. 開発した AI 解析法 の概念図。事前学習データを用いず、1 枚の短時間測定データに対して繰り返し学習を行うことで、ノイズ・アーティファクト成分を分離し、信号成分を抽出できる。約 20 秒で解析が完了するため、測定と並行したリアルタイム AI 解析にも応用が期待される。

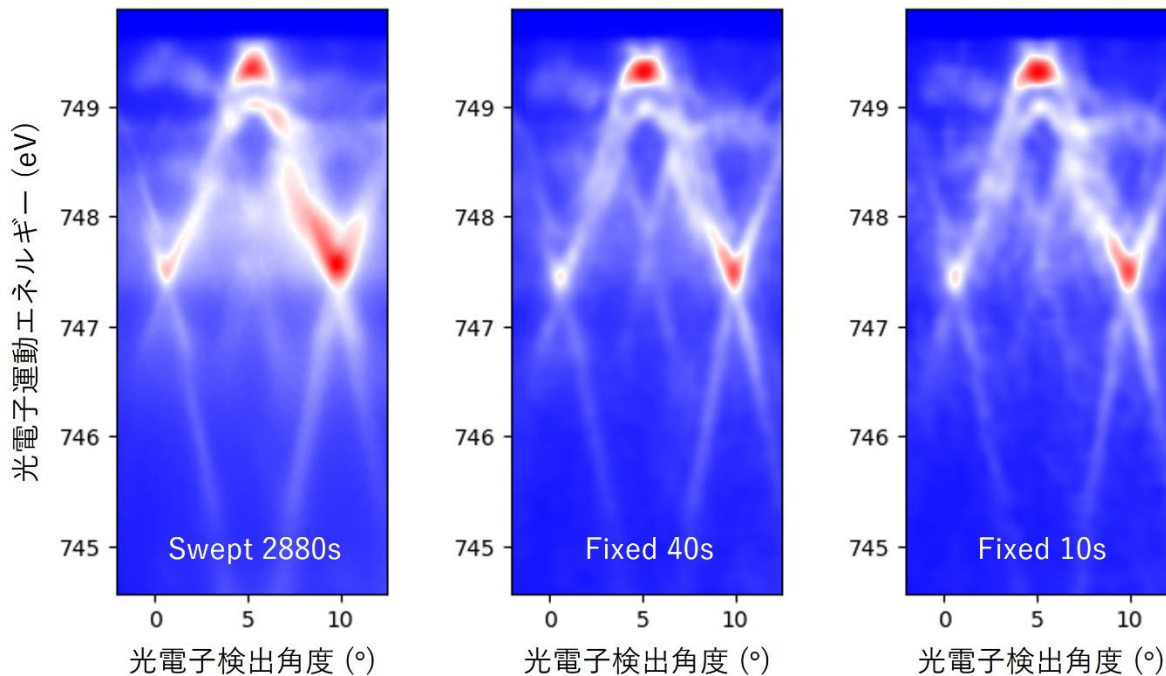


図 2. 左から、従来の測定データ (Swept モードで 2880 秒測定) と Fixed モードの短時間測定データ (40 秒測定、10 秒測定) に AI 解析法を適用した画像。画像の中心付近にある主要な X 字型バンド構造に注目すると、従来の測定データではバンド構造がぼやけているが、AI 解析法では明瞭に可視化できている。

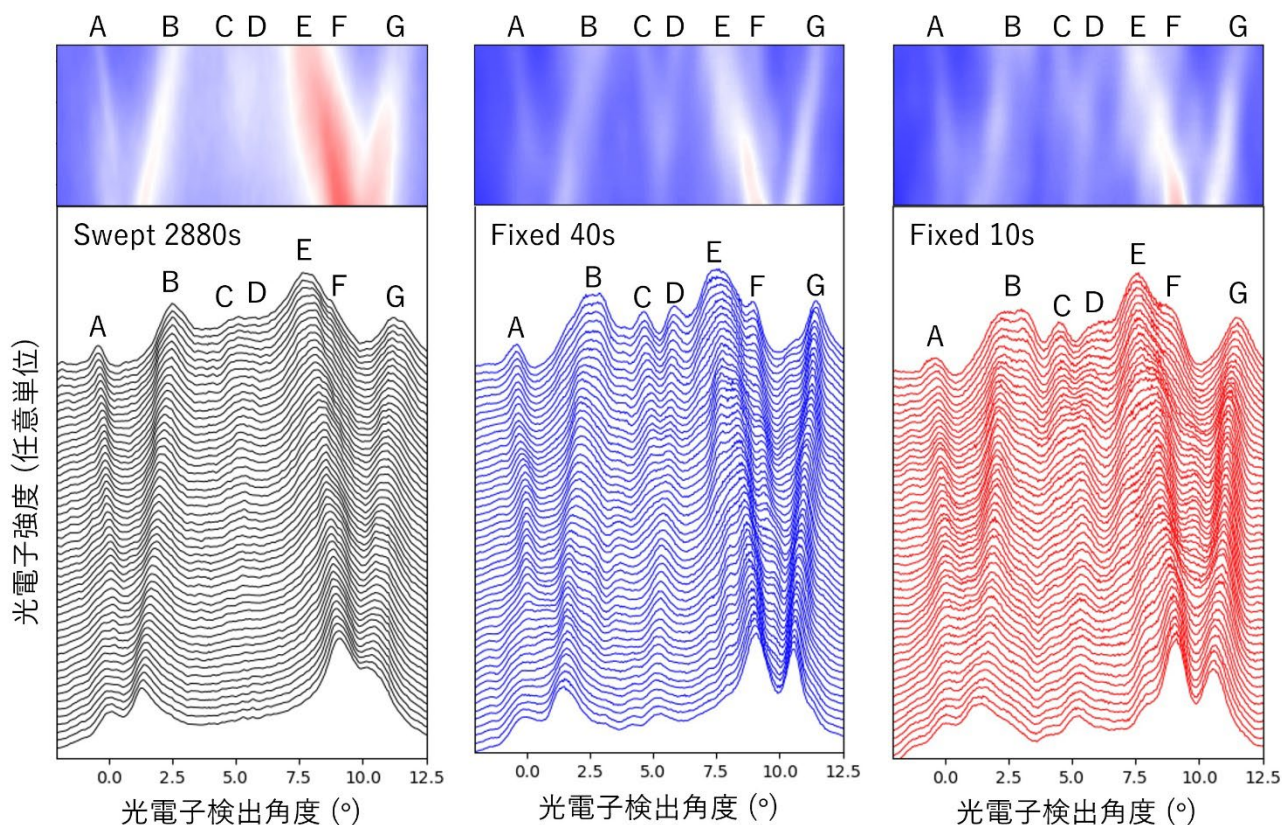


図3. 左から、Sweptモード（測定時間2880秒）およびFixedモード（測定時間40秒、10秒をAI解析）の主要なバンド構造付近を拡大したARPES画像（上）と、そこから切り出した運動量分散スペクトル（下）。スペクトルには、AからGで示した特徴的なピーク構造が現れている。このうち、CとDの構造（ARPES画像中のX字型バンド構造に対応）について、従来のSweptモード測定データではピーク同士が重なり合って不明瞭だが、本手法では明確に分離できている。10秒測定データには残留ノイズによるスペクトル形状の歪みが見られるものの、40秒測定データでは、定量的なバンド構造解析に必要なピークを明瞭に識別できる。

【用語解説】

※1. 深層事前分布（Deep Prior）

深層ニューラルネットワークの構造そのものが持つ性質で、ランダムノイズよりも画像中の構造を優先的に表現する傾向を指します。大量の画像データを事前学習して得られる知識ではなく、ネットワーク構造そのものに由来する点が特徴です。

※2. 大型放射光施設 SPring-8

理化学研究所が所有する兵庫県の播磨科学公園都市にある世界最高性能の放射光を生み出す大型放射光施設で、利用者支援などはJASRIが行っています。SPring-8(スプリングエイト)の名前はSuper Photon ring-8 GeVに由来。SPring-8では、放射光を用いてナノテクノロジー、バイオテクノロジーや産業利用まで幅広い研究が行われています。

《問い合わせ先》

(発表者)

横山 優一 (ヨコヤマ ユウイチ)

公益財団法人高輝度光科学研究センター 産学総合支援室 研究員

住所：兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

TEL：050-3496-8904 (内線：63498) FAX：0791-58-0830

E-mail：y.yokoyama@spring8.or.jp

(報道に関すること)

(SPring-8 / SACLA に関すること)

公益財団法人高輝度光科学研究センター利用推進部 普及情報課

TEL：0791-58-2785 / 050-3502-3763

E-mail：kouhou@spring8.or.jp

国立大学法人電気通信大学 総務部総務企画課広報係

TEL：042-443-5019

E-mail：kouhou-k@office.uec.ac.jp

国立大学法人熊本大学 総務部総務課広報戦略室

TEL：096-342-3271

E-mail：sos-koho@jimmu.kumamoto-u.ac.jp

国立研究開発法人科学技術振興機構 広報課

TEL：03-5214-8404

E-mail：jstkoho@jst.go.jp

(JST 事業に関すること)

国立研究開発法人科学技術振興機構 戦略研究推進部 ICT グループ

櫻間 宣行 (サクラマ ノリユキ)

TEL：03-3512-3526

E-mail：presto@jst.go.jp