

Анализ морфологии наноструктур в шумах

Л. В. Новиков

Институт аналитического приборостроения РАН
Россия, Санкт-Петербург
novik38@mail.ru

В. В. Куркина

Санкт-Петербургский государственный
технологический институт (технический университет)
Россия, Санкт-Петербург
victoria.kurkina@gmail.com

Аннотация. Предложен новый помехоустойчивый алгоритм оценки положения и интенсивности пиков наномасштабных изображений. Метод основан на последовательной обработке изображений по строкам и столбцам с целью обнаружения начала, максимума и конца пиков по производным в трех точках скользящего окна данных. Найденные таким образом координаты точек образуют кластеры пиков, анализируемые далее методом кластерного анализа.

В отличие от традиционных подходов в анализе структуры поверхности, предлагаемый метод не требует предварительной фильтрации шумов. При отношении сигнал/шум до десяти он обеспечивает вероятность обнаружения около единицы.

Ключевые слова: морфология наноструктур; обработка изображений; детектирование пиков; наномасштабные изображения

Одной из задач, решаемых в теории обработки изображений, является получение данных о морфологии поверхности, например, морфологии наноструктур, используемых в различных приложениях от распознавания отпечатков пальцев и диагностики печатных плат [1] до оценки шероховатости поверхности, определения размеров наночастиц и качества биосимуляров в фармацевтической промышленности [2].

Достоверность принимаемых решений по оценке морфологических параметров, в частности наноструктур, зависит от точности оценок этих параметров в условиях сильных шумов и других помех. Настоящая работа посвящена оценке интенсивности и положения пиков изображений, характерных для комплексных исследований с использованием атомной силовой, туннельной или растровой электронной микроскопии.

Традиционный подход в анализе структуры поверхности при наличии шумов основан на предварительной фильтрации шума с использованием тех или иных хорошо известных алгоритмов. Однако эта операция неизбежно ведет к искажению характера поверхности – нарушению формы пиков, уменьшению их интенсивности и, иногда, положения максимумов. В предлагаемом алгоритме не требуется предварительная фильтрация. Он основан на методе поиска начала, максимума и конца пиков по производной в трех точках скользящего окна данных, предложенного в работе [3].

Поиск максимумов изображения нанообъектов выполняется в два этапа. На первом – путем обнаружения экстремумов по строкам и столбцам матрицы данных и формируются кластеры точек в зоне пика. Затем, используя иерархический кластерный анализ, локализуются эти кластеры и определяются их центры, величина и расположение которых принимаются за параметры пиков в изображении.

Изображение, содержащее множество пиков, может быть представлено в виде матрицы Z , элементы которой $z(i, j)$ определяются формулой

$$z(i, j) = \sum_{l=1}^L A_l f_l((i - i_l), (j - j_l)) + \rho(i, j),$$

где A_l – интенсивность; f_l – функция формы; i_l, j_l – положение l -го пика; L – число пиков; $\rho(i, j)$ – аддитивный шум; $i = \overline{1: I}$, $j = \overline{1: J}$.

В настоящей работе для проверки алгоритма используется модель пика, представляющая собой гауссов пик с эллипсоидальной формой сечения горизонтальной плоскостью:

$$f_l(\cdot) = A_l \exp\left\{-\frac{r_l^2}{\mu_l^2}\right\}, \quad (1)$$

где

$$r_l^2 = \left((i - i_l)^2 + (j - j_l)^2 \right) / A_l^2 - \frac{\mu_l^2}{\beta_l^2} \left((i - i_l) \cos \alpha_l - (j - j_l) \sin \alpha_l \right)^2 / A_l^2$$

Здесь $2\mu_l$ – фокальное расстояние и $2\beta_l$ – большая полуось эллипса, $\beta_l > \mu_l$, α_l – угол наклона оси эллипса в плоскости (i, j) , $A_l = \sqrt{\beta_l^2 - \mu_l^2}$

Каждый j -ый столбец матрицы Z образует I -мерный вектор-столбец $Z_j = [z_j(i)]$ с элементами $z_j(i)$. Каждая i -ая строка матрицы Z образует J -мерный вектор-строку $Z_i = [z_i(j)]$ с элементами $z_i(j)$.

Алгоритм обнаружения положения (i, j) и амплитуды A_j пиков изображения производится последовательной обработкой по столбцам и строкам матрицы Z с последующим анализом полученных данных с целью уточнения искомых параметров. При обработке по столбцам Z_j производится поиск перегибов (хребтов) в каждом столбце j матрицы Z . Для этой цели используется подход, подробно изложенный в работе [3] для одномерного случая. Суть предлагаемого алгоритма состоит в следующем.

Сформируем текущую выборку y из $K+1$ отсчетов с центром в точке i вектора Z_j

$$y = [y(k)] = (z_j(i - K/2), \dots, z_j(i), \dots, z_j(i + K/2)),$$

где $k = \overline{1:K}$ и K выбирается всегда четным числом из условия $0.5 \div 0.7$ от ширины пика на половине высоты в отсчетах.

Аппроксимируем отсчеты в окне y полиномом второй степени (параболой) \tilde{y} на сетке $k = (-K/2, \dots, 0, \dots, K/2)$:

$$\tilde{y}(k) = p_1 k^2 + p_2 k + p_3,$$

где p_1, p_2, p_3 – коэффициенты полинома.

Выберем в интервале $[-K/2, K/2]$ три точки t_1, t_0, t_2 , такие, что $t_1 = -\left\lceil \frac{K}{4} \right\rceil, t_0 = 0, t_2 = \left\lceil \frac{K}{4} \right\rceil$, где $\left\lceil \frac{K}{4} \right\rceil$ – целое число большее или равное $\frac{K}{4}$.

Величина первой производной параболы в точках t_1 и t_2 будет равна:

$$d_1 = 2p_1 t_1 + p_2 \quad (2)$$

$$d_2 = 2p_1 t_2 + p_2. \quad (3)$$

Величина второй производной параболы равна $2p_1$.

Величина параболы в точке $k=0$ равна средневзвешенному значению в скользящей выборке исходных данных в точке i :

$$\bar{Z}_j(i) = \tilde{y}(0) = p_3. \quad (4)$$

Используя формулы (2), (3), (4) формируются алгоритмы обнаружения экстремумов изображения: начала, максимумов и минимумов хребтов и пиков.

Обозначим номера строк, в которых обнаружены начала хребтов, как I_{minmax} . При условии обнаружения начала хребтов определяются их максимумы. Обозначим номера строк, в которых обнаружены максимумы хребтов, как I_{max} . Далее, при условии обнаружения максимумов могут быть найдены минимумы и определен признак наложения соседних хребтов. Обозначим номера строк, в которых обнаружены окончания хребтов, как I_{maxmin} .

Сформируем три новые матрицы Z_{minmax}, Z_{max} и Z_{maxmin} , состоящих из всех столбцов матрицы Z и строк с номерами I_{minmax} , т.е. $Z_{minmax} = Z(I_{minmax}, 1:J)$; I_{max} , т.е. $Z_{max} = Z(I_{max}, 1:J)$ и I_{maxmin} , т.е. $Z_{maxmin} = Z(I_{maxmin}, 1:J)$. Выполним анализ матриц Z_{minmax}, Z_{max} и Z_{maxmin} по строкам соответственно I_{minmax}, I_{max} и I_{maxmin} – с использованием алгоритмов (4)-(8) с целью обнаружения номеров столбцов J_{minmax}, J_{max} и J_{maxmin} , в которых обнаружены соответственно начала, максимумы и окончания хребтов. В результате приведенного анализа получаем координаты начала в виде таблицы $[I_{minmax}, J_{minmax}]$, максимумов – $[I_{max}, J_{max}]$ и окончания – $[I_{maxmin}, J_{maxmin}]$ пиков. Координаты начала и окончания пиков образуют таблицу минимумов анализируемой поверхности – $[I_{min}, J_{min}]$.

Амплитуды $\hat{A}(I_{max}, J_{max})$ обнаруженных пиков оцениваются по точке максимума параболы на вершине хребта. Если форма пиков несимметричная, то в окрестности их вершины даже при отсутствии шума обнаруживается несколько максимумов, образующих кластер. Каждый кластер локализуется с помощью известных алгоритмов кластерного анализа. Признаком принадлежности кластеру принимается расстояние между точками, которое должно быть меньше минимального расстояния между пиками анализируемой поверхности, задаваемого по априорным данным. За оценку положения кластера принимается среднее взвешенное значение по каждой координате, а за интенсивность – максимальное значение интенсивности пиков, входящих в кластер.

Проверка эффективности алгоритма производилась по модельному спектру (формула (1)) с добавлением белого шума. Оценивались положение и интенсивность пиков при различных уровнях шума. На рис. 1 показаны исходное а), зашумленное изображение б) и кластеры пиков в) изображения и их вершины, полученные на основе предлагаемого алгоритма. Результаты сравнивались с программой определения экстремумов в изображении – extrema2.m, используемой в разложении по эмпирическим модам (bemd) [4, 5], с предварительной фильтрацией шума на основе мультивейвлетов (таблица).

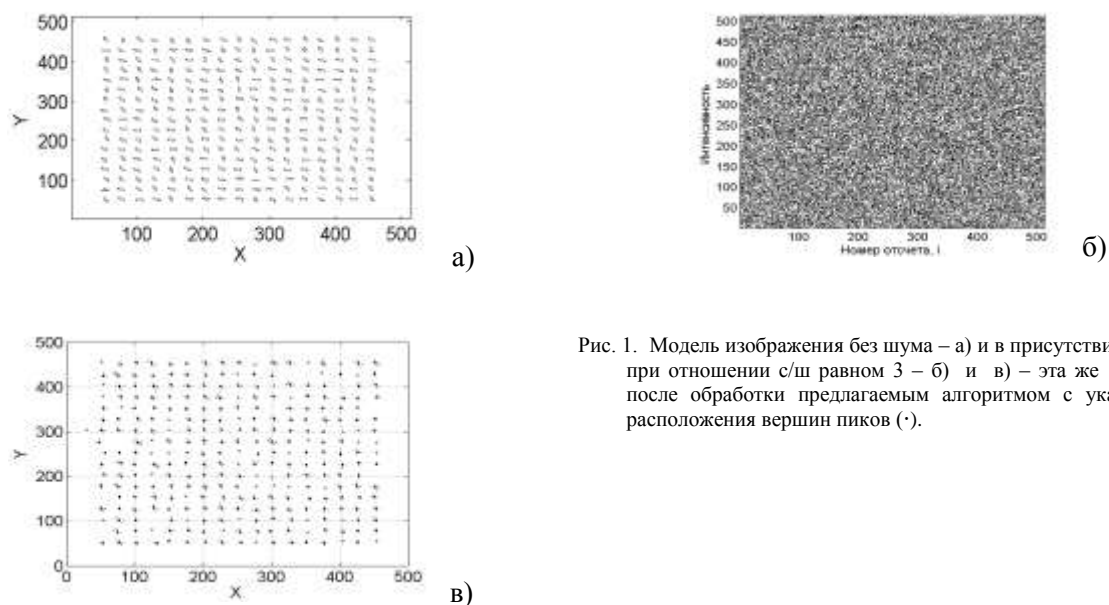


Рис. 1. Модель изображения без шума – а) и в присутствии шума при отношении с/ш равном 3 – б) и в) – эта же модель после обработки предлагаемым алгоритмом с указанием расположения вершин пиков (·).

ТАБЛИЦА I
ВЕРОЯТНОСТИ ПРАВИЛЬНОГО И ЛОЖНОГО ОБНАРУЖЕНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ОТНОШЕНИЯХ СИГНАЛ ШУМ (С/Ш)
ДЛЯ МЕТОДА ПОИСКА ЭКСТРЕМУМОВ, ИЗЛОЖЕННОГО В [4,5] – 1) И ПРЕДЛАГАЕМОГО МЕТОДА – 2).

Отношение с/ш Параметр	3		10		20		100	
	1	2	1	2	1	2	1	2
Вероятность обнаружения	0.907	0.931	0.976	0.999	0.970	1.000	0.986	1.000
Вероятность обнаружения	0.727	0.034	0.028	0.002	0.020	0.000	0.013	0.000

Алгоритм детектирования предложенным методом позволяет повысить достоверность обнаружения пиков, благодаря низкому уровню ошибки оценок и вероятности ложного обнаружения при малых отношениях сигнал/шум. Это позволяет значительно понизить порог чувствительности и расширить диапазон оцениваемых параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Beant Kaur, Sangeet Pal Kaur. Applications of Mathematical Morphology in Image Processing: A Review// International Journal of Electronics & Communication Technology. 2013. V.4, №3. P. 15-17.
- [2] Wieland N. Reichelt, Andreas Kaineder, Markus Brillmann et al. High throughput inclusion body sizing: Nano particle tracking analysis. 2017. Biotechnol. J. №12. P.1-11. (doi 10.1002/biot.201600471)
- [3] Новиков Л.В., Куркина В.В. Детектирование пиков методом дифференцирования в трех точках скользящего окна данных// Математические методы в технике и технологиях. Сборник трудов международной научной конференции. Том 6, Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета. 2017. С. 68-73.
- [4] Weihua Dong, Xian'en Li, Xiangguo Lin and Zhilin Li. A Bidimensional Empirical Mode Decomposition Method for Fusion of Multispectral and Panchromatic Remote Sensing Images//Remote Sens. 2014. V. 6. P. 8446-8467. (www.mdpi.com/journal/remotesensing). <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/?utf8=%E2%9C%93&term=extrema2.m> (дата обращения: 06.06.2018)