

УДК 528.72

ДЕЯКІ ЗАГАЛЬНІ ПРИНЦИПИ ТРИВИМІРНОГО ВІДТВОРЕННЯ ПЕМ-ЗОБРАЖЕНЬ

В. Мельник, О. Рудик

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

Ключові слова: електронна мікроскопія, опуклі множини, дискретне перетворення Фур'є, гомоморфні функції.

Постановка наукової проблеми та її значення

Електронна мікроскопія просвічувального типу дає змогу здійснювати дослідження на мікронному та субмікронному рівнях. Але через доволі сильні й принципово неусувні сферичні аберації величина апертури електронного мікроскопа надзвичайно мала, а глибина фокуса при цьому велика і часто перевищує товщину об'єкта. Тому ефект ПЕМ-зображення завжди являє собою проекцію тривимірної структури на площину. В цьому і полягає одна з основних складностей у дослідженні просторової організації мікроструктур за допомогою електронного мікроскопа [1, 2]. Відповідно зрозумілий науковий інтерес до розроблення методів коректного кількісного відновлення тривимірної структури за її електронно-мікроскопічним зображенням [3]. Відтворення третього виміру проводиться за набором проекцій, отриманих під різними кутами.

Задача об'ємної реконструкції в ПЕМ відповідає в математичному аспекті відтворенню втраченого третього виміру за набором проекцій. Проекції можуть бути отримані під різними кутами до осі проектування. За наявності в об'єкті певних типів симетрії одне зображення структури містить інформацію про різні ракурси, так що єдине ПЕМ-зображення еквівалентне набору проекцій, що є також додатковим фактором, який ускладнює 3D-реконструкції [1, 4].

Аналіз останніх наукових досліджень, які стосуються вирішення цієї проблеми

Одним з можливих методів для відновлення тривимірної організації субмікронних структур може бути метод подвійного перетворення Фур'є, який запропонували Клуґ і де Розьє [5, 6]. Ідея методу зводиться до того, що перетворення Фур'є електронно-мікроскопічного зображення представляє проекцію тривимірної структури на опуклі множини [2, 8]. Для ефективного застосування фур'є-синтезу електронно-мікроскопічних зображень просвічувального типу необхідно використовувати різні методи поліпшення якості зображення на етапі попереднього оброблення. В цьому плані перспективними є застосування гомоморфних функцій алгоритму Гершберга [9].

Виклад основного матеріалу

1. Принципи опуклих множин в електронній мікроскопії

Незалежно від конкретного рішення загальної схеми електронно-мікроскопічного вимірювання можна подати в формі:

$$\varepsilon = A \cdot f + v, \quad (1)$$

де $\varepsilon \in R^N$ – реєструвальний сигнал; $A \in R^M \rightarrow R^N$ – лінійний оператор, $f \in R^M$ – моделювальний сигнал (параметри) від об'єкта; $v \in R^M$ – шум, що моделює похибки процесу [3].

Для розв'язання (1) скористаємося теорією опуклих множин, що моделює ідеальний проекційний процес [7]. Визначення замкнутої опуклої множини і пов'язаного з нею проекційного оператора такі [9, 10].

1. Будь-яка множина S в гільбертовому просторі H називається опуклою тоді і тільки тоді, якщо з $\bar{x}_1, \bar{x}_2 \in S$ випливає, що $\beta \bar{x}_1 + (1 - \beta) \bar{x}_2 \in S \forall \beta \in [0, 1]$.

2. Відомо, якщо X – замкнута опукла множина в H , що має єдиний елемент з мінімальною нормою і для будь-якого $y \in H$ існує єдиний елемент $x \in X$, що називається проекцією Y на X такою, що $\min \|x - y\| = \|x - Px\|$, де $P: H \rightarrow C$ – проекційний оператор x і є ортогональною проекцією Y на X .

Припустимо, що проекційний оператор P знаходиться ітеративно і ми маємо m ітерацій опуклого типу, в результаті чого і визначаються закриті опуклі множини $C_i, i = 1, 2, \dots, m$. Тоді $f \in C_0 = \Omega_{i=1} C_i$. Сукупності обмежених множин $C_i, i = 1, 2, \dots, m$ і проекційним операторам P_i відповідає послідовність

$$\{\hat{f}_n\}: \hat{f}_n = P_m P_{m-1} \dots P_1 \hat{f}_{n-1}. \quad (2)$$

Геометричну інтерпретацію механізму ітерацій для двох обмежених множин C_1 і C_2 у випадку двовимірного евклідового простору наведено на рис. 1.

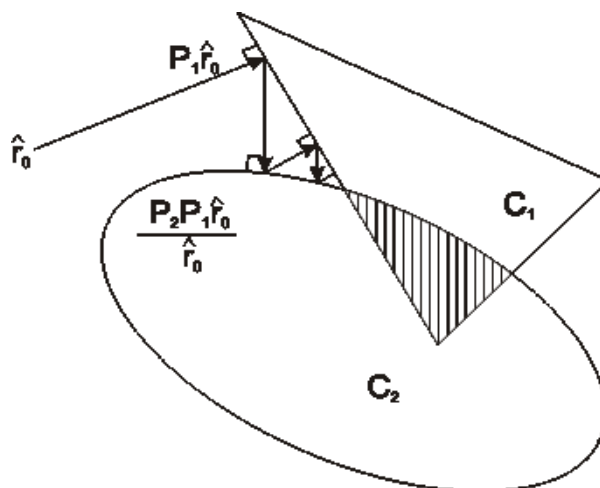


Рис. 1. Геометрична інтерпретація ітераційної редукції двох опуклих множин C_1 і C_2

Тут оператори P_1 і P_2 відповідають проєкційним операторам, а значення \hat{f}_0 відображає довільний “початок” алгоритму $\hat{f}_n = P_2 P_1 \hat{f}_{n-1}$. Це формальний виклад методу проєкцій на опуклу множину, коли рішення знаходять як елемент перетину обмежених опуклих множин. При цьому апіорі передбачалося, що проєкційні оператори отримано на базі основного визначення рівняння (1). Практично в електронній мікроскопії оператори P визначаються по-різному. Іноді це обмеження варіації залишків, коли різниця асоціюється з оцінкою \hat{f} , що визначається як $r(\hat{f}) = g - D\hat{f}$. Це еквівалентно тому, що $\|r(\hat{f})\| = \|v\|$. Останнього можна досягти, обмежившись оцінкою члена множини

$$C_b = \{y \in R^N : \|g - Dy\|^2 \leq a^2\}. \quad (3)$$

Границя a^2 визначається як $a^2 = cE\{\|r(f)\|^2\} = cE\{\|v\|^2\}$, де $E\{\cdot\}$ – математичне очікування і $c > 0$ визначається впевненістю, з якою звичайний елемент зображення є членом множини. Припускаючи гауссівський розподіл, тобто $v(i) \sim n(0, \sigma_v^2)$, маємо $a^2 = N\sigma_v^2 + 2\sqrt{2N}\sigma_v^2$. З цими припущеннями проєкція $P_b \bar{X}$ довільного вектора \bar{X} на (0) визначається як

$$P_b \bar{X} = Z = X + (D^f D + \alpha I)^{-1} D^f (g - D\bar{X}), \quad (4)$$

де множник Лагранжа α взятий для досягнення граничної умови $\|r(Z)\|^2 = a^2$. Розглянута схема не залежить від фізичних умов формування зображення, є узагальнювальною і такою, що застосовується до аналізу будь-яких електронно-мікроскопічних зображень.

2. Попередня корекція ПЕМ-зображень

Розглянемо із загальних позицій окремі етапи цифрової обробки електронно-мікроскопічних зображень. Електронно-мікроскопічні зображення, зокрема просвічувального типу, отримані в реальних експериментах, часто бувають низького контрасту і з великим адитивним шумом. Тому попереднє покращення якості електронно-мікроскопічних зображень такого типу дуже важливе.

Для розв’язання цієї задачі пропонується використовувати гомоморфне оброблення [6, 9, 11]. Ідея гомоморфного оброблення – у зведенні нелінійної задачі до лінійної за допомогою будь-яких перетворень. У цьому випадку завдання поділу, перемноження сигналів зводиться до процедури логарифмування складного сигналу. Від отриманого результату віднімають логарифм фону, тим самим виділяється логарифм контрастного сигналу.

Для серії електронно-мікроскопічних зображень, отриманих під різними кутами, пропонуємо такий алгоритм гомоморфної обробки [13].

1. Спочатку підвищуємо контраст зображення. Контраст масштабуємо в межах від 10 до 245 за формулою:

$$I'_{ij} = \frac{(I_{ij} - I_{\min}) \cdot (I'_{\max} - I'_{\min})}{I_{\max} - I_{\min}} + I'_{\min}, \quad (5)$$

де I'_{ij} – елемент нової матриці зображення, I_{ij} – елемент матриці вихідного зображення, I_{\min} – мінімум серед елементів матриці вихідного зображення, I_{\max} – максимум серед елементів матриці вихідного зображення, I'_{\min} – задана оператором нижня межа значення елементів нової матриці зображення, I'_{\max} – задана оператором верхня межа значення елементів нової матриці зображення.

2. Аналогічним способом контраст напівтонового зображення масштабується в межах від 15 до 240 за формулою (5).

3. Виконується логарифмування отриманого напівтонового зображення [12]:

$$\begin{aligned} I'_j(x, y) &= \lg(b(x, y) \cos(2\pi f_0(x \cos \alpha_j + y \sin \alpha_j) + \varphi(x, y))) = \\ &= \lg(b(x, y)) + \lg(\cos(2\pi f_0(x \cos \alpha_j + y \sin \alpha_j) + \varphi(x, y))); \\ I'_0(x, y) &= \lg(b_0(x, y)). \end{aligned} \quad (6)$$

4. Отримане напівтонове зображення множать на коефіцієнт i , який експериментально підбирають з розрахунку

$$\lg(b(x, y)) = i \cdot \lg(b_0(x, y)). \quad (7)$$

5. Із зображення віднімаємо напівтонове зображення.

$$\begin{aligned} I''_j(x, y) &= I'_j(x, y) - i \cdot I'_0(x, y) = \lg(b(x, y)) + \\ &+ \lg(\cos(2\pi f_0(x \cos \alpha_j + y \sin \alpha_j) + \varphi(x, y))) - i \cdot \lg(b_0(x, y)) = \\ &= \lg(\cos(2\pi f_0(x \cos \alpha_j + y \sin \alpha_j) + \varphi(x, y))). \end{aligned} \quad (8)$$

6. Зображення $I''_j(x, y)$ множиться на коефіцієнт i .

7. Над отриманим зображенням виконується потенціювання:

$$\begin{aligned} I'''_j(x, y) &= \exp(I''_j(x, y)) = \\ &= \cos(2\pi f_0(x \cos \alpha_j + y \sin \alpha_j) + \varphi(x, y)). \end{aligned} \quad (9)$$

8. Контраст зображення $I'''_j(x, y)$ масштабується в межах від 0 до 255 за формулою (5).

Отримане в результаті виконаних операцій зображення суттєво покращене зображенням для j -го ракурсу (нахилу).

3. Особливості застосування фур'є-синтезу для тривимірного відтворення електронно-мікроскопічних зображень

Припустимо, що мікрорельєф подається у просторово-частотній області дискретним перетворенням Фур'є (ДПФ) [3, 15], коли z визначається як сума ряду гармонік k , наприклад, для одновимірного випадку у вигляді:

$$Z_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} G_n W^{n,k}, \quad (10)$$

де $W^{n,k} = e^{\frac{2\pi i}{N}nk}$, G_n – амплітуда n -ї гармоніки.

У такій постановці оптимальним є ітераційне рішення, зокрема із застосуванням алгоритму Гершберга [4, 12].

Цей метод важливий насамперед своїми особливостями:

1) для доведення ітераційного рівняння можна використовувати відомі властивості шуканого рішення, тобто апріорну інформацію на кожному етапі ітераційної процедури;

2) немає необхідності у визначенні оберненого оператора спотворень, тобто в процедурі відновлення використовують той оператор, який спотворив зображення;

3) під час реалізації цього методу можлива робота в інтерактивному режимі, що дає змогу практично вирішити питання про прийнятний ступінь наближення k -го ітераційного розв'язку до шуканого.

Ітераційний метод особливо потрібний для розв'язання задач 3D-відтворення й відновлення низькоконтрастних зображень. За наявності апріорної інформації про зображення для повнішого заповнення спектральної площини частотними компонентами спектра доцільно використовувати ітераційну схему Гершберга, детально відпрацьовану для обробки рентгенівських зображень. Ітераційний алгоритм Гершберга рекомендується використовувати, якщо кількість проєкційних даних недостатня для застосування класичних методів. Повніше алгоритм Гершберга викладений в роботах [12–14].

Висновки

Окреслено загалом основні питання коректного тривимірного відтворення електронно-мікроскопічних зображень просвічувального типу. Попередня корекція ПЕМ із застосуванням гомоморфних функцій і посиданням у процедурах Фур'є-синтезу, ДПФ і обчислюваної схеми алгоритму Гершберга – перспективний напрям, що дає змогу підвищити ефективність і точність тривимірного відтворення ПЕМ-зображень, особливо низькоконтрастних.

Література

1. Куникий А. С. Трехмерная реконструкция биологических объектов // Голография и обработка информации; под ред. проф. Гуревича С. Б. – Л.: Наука, 1976. – С. 89–96.
2. Бейтс Р. Восстановление и реконструкция изображений / Р. Бейтс, М. Мак-Доннель. – М.: Мир, 1989. – 334 с.
3. Мельник В. М. Кількісна стереомікрофрактографія / В. М. Мельник, А. В. Шостак. – РВВ “Вежа” ВНУ імені Лесі Українки. – Луцьк, 2010. – 457 с.
4. Вишняков Г. Итерационный метод улучшения качества реконструкции трехмерной поверхности / Г. Вишняков, Г. Левин, К. Сухоруков // Оптика и спектроскопия. – 2005. – Т. 99. – Вып. 4. – С. 43–51.
5. De Rosier D. I., Klug A. Reconstruction of three dimensional structures from electron micrographs // Nature, 1998. – № 5124. – P. 130–143.
6. Дюков В. Растровая оптическая микроскопия / В. Дюков, Ю. Кудеяров. – М.: Наука. – 1992. – 207 с.
7. Sezan M. I., Tekalp A. M. Adaptive Image Restoration with Artifact Suppression using the Theory of Convex Projections // IEEE Transactions on Acoustics speech, and signal processing. – 1990. – V. 38. – № 1. – P. 181–185.
8. Рокафеллар Р. Т. Выпуклый анализ / Р. Т. Рокафеллар. – М.: Мир, 1964. – 468 с.

9. Никифоров А. Ф. Основы теории специальных функций / А. Ф. Никифоров, В. В. Уваров. – М.: Наука, 1974. – 303 с.
10. Вишняков Г. Восстановление томограмм при ограниченном числе проеций. Итерационные методы / Г. Вишняков, Г. Гильман, Г. Левин. // Оптика и спектроскопия. – 1985. – Т. 58. – № 2. – С. 403–413.
11. Васильев В. Компьютерная обработка сигналов / В. Васильев, И. Гуров. – Дюссельдорф, Киев, Москва, Санкт-Петербург, 1998. – 237 с.
12. Сухоруков К. А. О точности восстановления трехмерных поверхностей методом Фурье-синтеза / К. А. Сухоруков. // Измерительная техника. – 2005. – № 5. – С. 17–21.
13. Vishnyakov G. N., Levin G. G., Lashchilov K. E., Sukhorukov K. A. Fourier-synthesis profilometry // The IASTED International Conference on signal and image processing. – 2005.
14. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1973. – 681 с.
15. Гудмен Дж. Введение в Фурье-оптику / Дж. Гудмен. – М.: Мир, 1970. – 364 с.

Деякі загальні принципи тривимірного відтворення ПЕМ-зображень

В. Мельник, О. Рудик

Розглянуто основні принципи застосування в електронній мікроскопії типу просвічувальної електронної мікроскопії (ПЕМ) теорії опуклих множин. Пропонується застосовувати для поліпшення якості ПЕМ-зображень на стадії попереднього оброблення математичний апарат гомоморфних функцій. Розглянуто питання інтеграції дискретного перетворення Фур'є та обчислюваної схеми алгоритму Гершберга в задачах 3D-реконструкції ПЕМ-зображень.

Некоторые общие принципы трехмерного воспроизведения ПЭМ-изображений

В. Мельник, А. Рудык

Рассмотрены основные принципы применения в электронной микроскопии типа просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) теории выпуклых множеств. Предлагается применять для повышения качества ПЭМ-изображений на стадии предварительной обработки математический аппарат гомоморфных функций. Рассмотрены вопросы интеграции дискретного преобразования Фурье и вычислительной схемы алгоритма Гершберга в задачах 3D-реконструкции ПЭМ-изображений.

Some general principles of three-dimensional reproduction of TEM-images

V. Melnyk, A. Rudyk

The basic principles for use in electron microscopy, transmission electron-type electron microscopy (TEM), the theory of convex sets is considered. It is proposed to use to improve the quality TEM images in the pretreatment step mathematical tool of homomorphic functions. The problems of integration of the discrete Fourier transform and computational scheme of Gerchberg's algorithm in 3D-reconstruction of the TEM images is reviewed.