

Л.В. АНТОНОВ, А.А. ОРЛОВ

**Комплексный анализ направлений исследований в области обработки наномасштабных изображений**

УДК 004.942

Муромский институт  
(филиал) ФГБОУ ВПО  
«Владимирский  
государственный  
университет имени  
А.Г. и Н.Г. Столетовых»

*Работа поддержана грантом РФФИ № 11-07-97515*

*В работе рассматриваются основные современные направления исследований обработки наномасштабных снимков высокой степени детализации. Приведены примеры и описания алгоритмов, позволяющих решать задачи определения физических, химических, геометрических и структурных параметров наноматериалов; а также представлены результаты исследовательских работ, показывающих актуальность дальнейшего развития и совершенствования компьютерных методов обработки наномасштабных снимков.*

*The main current directions of research in nanoscale images processing a high degree of detail showed in the paper. Examples and descriptions of algorithms for determining the physical, chemical, geometrical and structural parameters of nanomaterials discussed in the article. The results of research works showing the importance of the development and improvement of computer processing methods for nanoscale images processing presented in the paper.*

В настоящее время исследователи все больше и больше углубляются в мир нанотехнологий. Проблемы исследования структуры веществ, выявление различных дефектов в них постепенно переходят из мира изображений микро расстояний и размеров в

мир, где оперируют единицами наномасштаба. Целью настоящей работы является комплексный анализ наиболее важных направлений и компьютерных методов исследований в области обработки наномасштабных изображений различных материалов. Для достижения поставленной цели будем проводить анализ научных трудов, где решаются различные задачи обработки наномасштабных снимков.

На сегодняшний момент обработка изображений выделилось практически в отдельную отрасль со своими специфическими целями и задачами. Обработка наномасштабных снимков обусловлена, в первую очередь необходимостью в получении данных о физических и химических свойствах вещества. Спектр решаемых задач по обработке снимков наноструктуры весьма обширен и включает в себя такие направления, как определение геометрических показателей наночастиц или кластеров частиц; классификация и кластеризация объектов наномасштабных снимков; определение статистических характеристик и соотношений в исследуемом объекте; создание компьютерных моделей исследуемого вещества, с помощью восстановления трехмерных моделей с двухмерных снимков. Перечисленные направления являются приоритетными. Для решения поставленных задач, порой необходимо решать и множество промежуточных проблем, связанных с отсутствием алгоритмической базы для обработки подобного рода изображений. Но если приведенные проблемы будут преодолены, то откроются безграничные перспективы, позволяющие решать различный спектр технических, химических, микробиологических, геологических, металловедческих задач. Отдельно хотелось бы выделить перспективу развития прогнозирования при точном получении статистических характеристик с наномасштабных снимков, например, на основе полученных данных о вещественном составе объекта и распределении этих веществ по всему объему объекта можно спрогнозировать ситуации, в которых данная структура вещества будет неустойчива, а следовательно разрушена [1-6].

Известно, что максимальная разрешающая способность биологической системы зрения человека –  $10^{-4}$  м. С помощью обычного оптического микроскопа человек может рассмотреть объекты размером  $10^{-7}$  м. Но технологии за последнее время шагнули далеко

вперед и за счет мощности некоторых современных микроскопических систем удалось добиться невероятной степени детализации  $10^9$ - $10^{10}$  м. Таким образом, максимальная разрешающая способность современной аппаратуры -  $10^{-10}$  или 1 Å (Ангстрем), что приблизительно равно радиусу орбиты электрона в невозбужденном атоме водорода.

В работах [1-6] показано, что существует несколько методов получения наномасштабных изображений, основанных на атомно-силовой микроскопии, туннельной электронной микроскопии, сканирующей туннельной микроскопии. Корпораций создания и поставки подобного специфического оборудования в мире немного, каждая из них разрабатывает собственное программное обеспечение для управления микроскопом и обработки полученных снимков. Проблема заключается в том, что программное обеспечение не может быть доработано и модернизировано, как код закрыт и не может быть дополнен. Следовательно, для добавления собственной функции анализа изображения встает проблема создания собственных комплексных пакетов обработки изображений.

Заметим, что важнейшей задачей обработки подобного рода изображений является подавление шума. Так как изображение максимально сильно детализировано, то при рассмотрении под одним слоем атомов может проступать другой, что существенно затруднит анализ. Такого рода шум называется сосредоточенным по всему спектру (он имеет собственную частоту и период) и не носит случайный характер. Классические методы подавления шума на изображениях здесь не применимы, что создает предпосылку создания алгоритмов для сведения на нет упорядоченного шума на наномасштабных изображениях.

Существует несколько способов анализа структуры вещества, такие как, метод рентгеноспектрального анализа, метод рентгенофлуоресцентного анализа и рентгеноструктурный анализ. Данные способы дорогостоящи и итоговые данные – результат сложных и непрямых ручных измерений и вычислений. Также эти алгоритмы дают максимально точный результат о структуре объекта, только в случае, если исследуемое вещество находится в чистом виде, без примесей, что в природе практически не реально. В случаях, когда необходимо выяснить структуру реальных веществ, методы обра-

ботки изображений вполне могут конкурировать с алгоритмами методов, в основе которых лежит процесс пропускания через вещество рентгеновских лучей. К сожалению, обработка наномасштабных изображений с целью выявления их состава и вида кристаллической решетки – направление новое и количество научных исследований, а также трудов и публикаций невелико, но первоначальные данные говорят, что определение этих параметров структуры вещества методом компьютерной обработки более эффективно и экономично [2], чем способы, предложенные в работе [1].

Одно из наиболее перспективных направлений развития сферы обработки наномасштабных изображений является определение типа кристаллической решетки исследуемого вещества. Метод предложенный в работе [2] предполагает, что имея снимок вещества, представляющий собой проекцию решетки на двумерную плоскость, можно выполнить построение компьютерной модели структуры вещества, с помощью сложных вычислений, основываясь на признаках базовых решеток Бравэ. Бравэ описал 14 типов кристаллических решеток, а также их геометрические свойства и значения некоторых параметров. Беря за основу эти данные, путем восстановления трехмерной математической модели из проекции можно установить тип решетки конкретного, исследуемого вещества. Данный цифровой алгоритм полностью реализован.

Представленный в работе [3] цифровой алгоритм позволяет рассчитать статистические характеристики исследуемых материалов посредством обработки больших выборок изображений, полученных с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ-изображения) пленок блок-сополимеров. Предпосылкой создания алгоритма стала довольно существенная разница результатов при анализе характеристик различными методиками расчета. В работе представлены результаты обработки наномасштабного изображения триблок-сополимера полистирол-полиметакрилат-полистирола. На изображении последовательно выполнялись операции выравнивания общего рельефа. Затем использовался метод фазовых разделений снимка для выделения доменных частей (Рис. 1) [3].

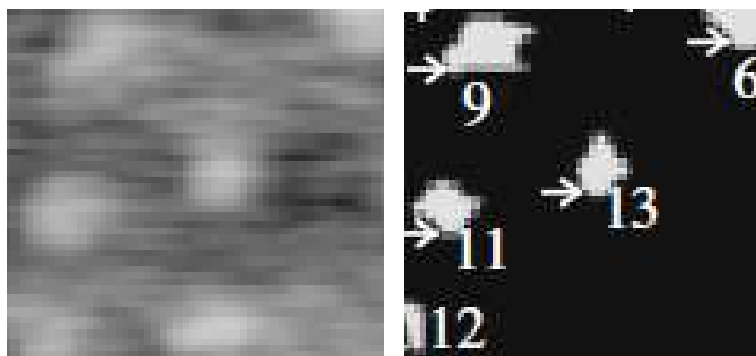


Рис. 1. Исходное наномасштабное изображение, полученное на атомно-силовом микроскопе; результат, полученный при использовании метода фазового разделения снимка [3]

В работе [3] в качестве объекта диагностического исследования рассматривалась ламеллярная структура вещества, которая была получена из анализа кластеров, выделенных на этапе использования фазового разделения. Здесь с помощью преобразования Фурье смогли получить линию гармоник с периодом 45 нм. Таким образом, представленный алгоритм, может рассчитать статистические характеристики исследуемого вещества и представить ее в виде графика ламеллярной структуры.

Одним из наиболее важных направлений обработки наномасштабных изображений является определение размеров частиц на поверхности материала, а также возможность автоматического разделения и распознавания слипшихся частиц, как автономных объектов. Данная проблематика подробно изложена в [4]. На реальной поверхности нано-объекты зачастую располагаются не по одному, а близко друг к другу, иногда даже соприкасаясь, в дополнение к этому поверхность, на которой они базируются с высокой степенью вероятности неровная. В таких условиях определить размер конкретной частицы достаточно тяжело. Обычно подобную проблему решают с помощью применения порогового метода, когда задается некоторая константа, при сравнении с которой какой-либо из характеристик объекта принимается решение о том, является ли объект шумом или нет. Такой метод применим в случае с идеализированным изображением, где поверхность ровная, а объекты расположены по одному. Но данный алгоритм даст в высшей степени неточный результат в случае, когда поверхность неровная, а объекты расположены рядом. В этой ситуации часть полноценных частиц,

расположенных в низинах, может быть причислена к шуму и отсечена от дальнейшего анализа.

Из-за неприменимости порогового метода в [4] показывается необходимость создания специального алгоритма для обработки наномасштабных снимков, который включает в себя несколько стадий. На первом этапе производится выравнивания поверхности. Для этого изображение разбивается на одинаковые квадраты, в которых вычисляются минимумы. Далее с помощью интерполирования и вычитания полученных величин из основного массива квадратов получаем выровненную поверхность.

На втором этапе выделяются группы объектов на поверхности, в качестве фильтра используется Лаплас-преобразование функции Гауса. Затем происходит окончательное разделение объектов и обработка каждого, как автономного.

В качестве результатов эксперимента в [4] приводится гистограмма, характеризующая общую картину размеров объектов на поверхности.

В работе [4] представлены результаты эксперимента по определению размеров наночастиц на неровной поверхности. Исходное распределение размеров частиц при генерации изображения представлено в гистограмме (Рис. 2).

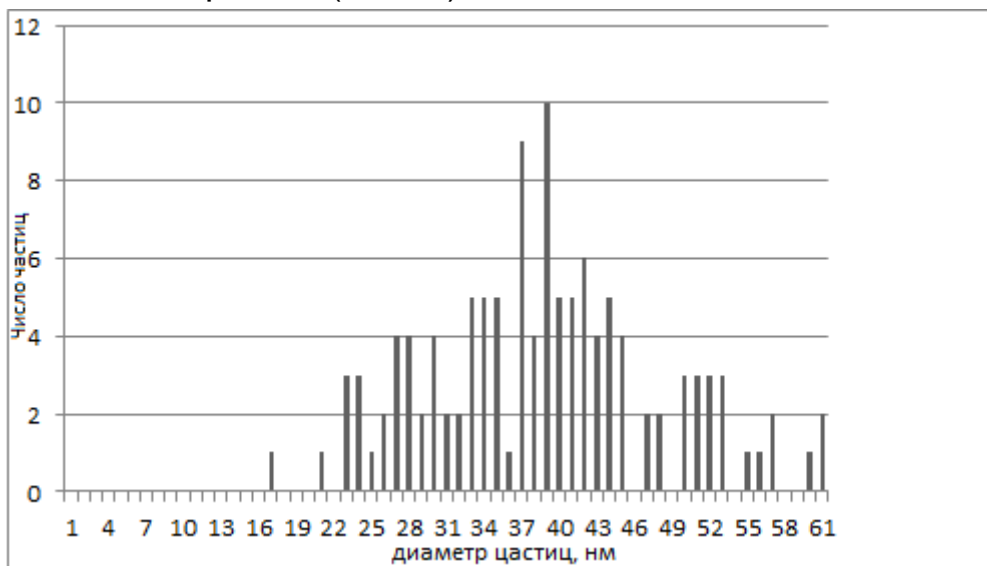


Рис. 2. Начальное распределение по размерам отдельно лежащих сферических наночастиц на неровной поверхности [4]

Результаты обработки изображения алгоритмом, разработанный в работе [4], приведены в гистограмме (Рис. 3). Из графика вид-

но, что результаты обработки дают график распределения размеров практически идентичный исходному.

Здесь же рассматриваются результаты использования порогового метода при решении задачи определения размеров наночастиц на неровной поверхности. Из гистограммы (Рис. 4) видно, что в сравнении с начальным распределением размеров, предложенным при генерации, пороговый метод дает неточный результат, который не отражает реальной картины размерного распределения частиц на поверхности.

Рис. 4 наглядно доказывает насколько неэффективен пороговый метод, активно применяемый при обработке микроскопических изображений, но дающий в высшей степени неточный результат на уровне наномасштабных изображений. В результате, в работе [4] реализован цифровой метод обработки наномасштабных изображений, который значительным образом усложнен из-за отсутствия возможности применения порогового метода.

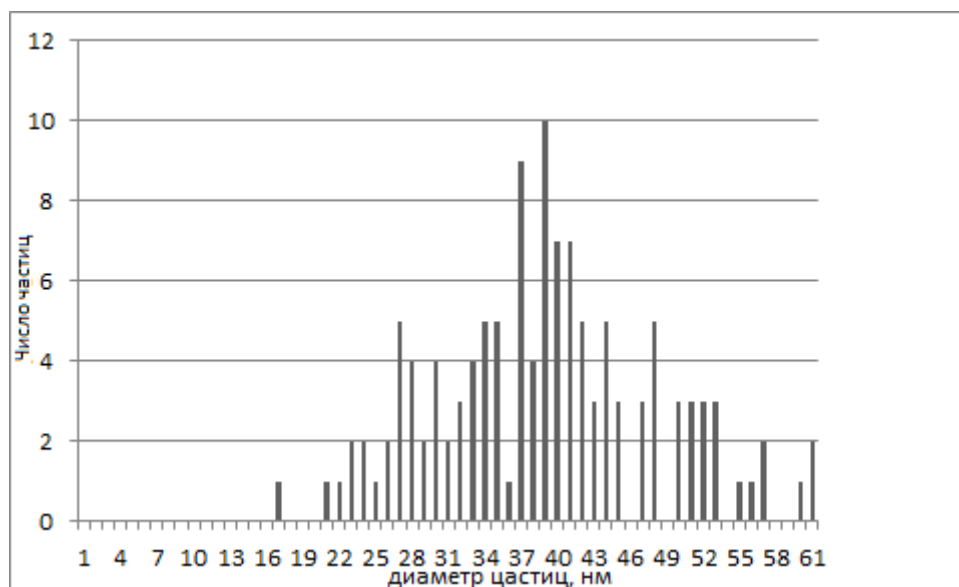


Рис. 3. Распределение по размерам, полученное в результате использования алгоритма из работы [4]

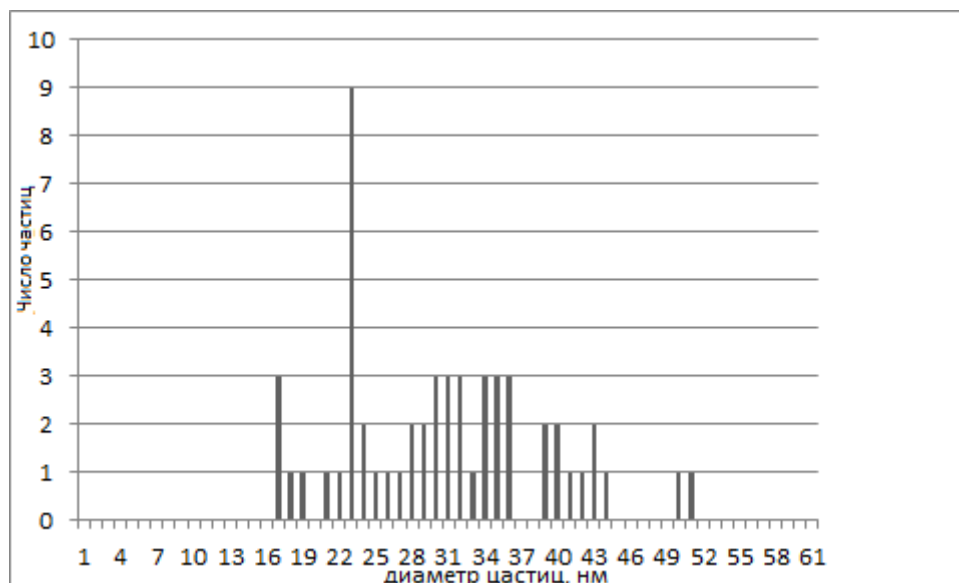


Рис. 4. Распределение по размерам, полученное в результате использования порогового метода [4]

В работах [5, 7-10] авторами рассматривается проблематика выделения контуров объектов в ситуации сильной размытости или нечеткости снимков наноструктур. На основе вычисления градиента яркости и подчеркивания границ был разработан алгоритм предварительной обработки снимка наноструктуры.

Актуальность исследования процентного содержания веществ в исследуемом объекте обсуждается в [6]. В примере, приведенном в этой работе, рассматривается анализ содержания примесей и распределения веществ по всему объекту (наполненной резине). Используемые снимки сделаны на атомно-силовом микроскопе с высокой степенью детализации. В ходе эксперимента автор столкнулся с проблемой отсутствия эффективного алгоритма обработки изображения подобного масштаба и пришел к выводу, что необходимо создание новых специальных методов обработки наномасштабных снимков. В работе показана необходимость подобного рода исследований, так как если некоторые вещества не распределены по всему объекту наполненной резины равномерно, то это может вызвать деформацию или разрушения объекта, что в условиях производства может привести к непоправимым последствиям. Данный метод в работе [6] полностью описан, но фактически, большая часть действий, расчётов и анализа выполняется вручную.



На основе проведенного анализа в настоящей работе построена таблица, описывающая взаимосвязь диагностических задач и методов компьютерной обработки.

Таблица 1

**Комплексный анализ задач и компьютерных методов диагностики наноструктуры по ее снимкам**

Задачи анализа наноструктуры	Тип оборудования микроскопической съемки	Масштаб изображения	Используемые методы и алгоритмы	Проблемные ситуации, возникающие при анализе наноструктуры
1	2	3	4	5
Исследование структуры твердого вещества, с целью обнаружения в исследуемом объекте элементы от бериллия (Be) до урана (U)	Атомно-силовой микроскоп, туннельный микроскоп, оптический микроскоп	От 10x10 до 1000x1000 нм.	-	Ручная обработка значительно затягивает процесс исследования
Анализ кристаллических решеток, определяющий структуру кристалла (зависимость расположения материальных частиц (атомов, ионов, молекул))	Атомно-силовой микроскоп, туннельный микроскоп, оптический микроскоп	От 0,1x0,1 до 10x10 нм.	Алгоритм восстановления трехмерной модели из снимка-проекции, включающий распознавание объектов на поверхности [2]	Высокая сложность реализации, алгоритма, сложное пространство признаков, возможно возникновение проблем NP-сложности
Обработка наномасштабных снимков сверхтонких материалов (пленок поли-	Атомно-силовой микроскоп	От 1000x1000 до 50000x50000 нм.	Алгоритм анализа доменной структуры, включающий обработку	Рельеф пленок блок-сополимеров, получаемый на АСМ-изображении,

1	2	3	4	5
меров) для выделения кластеров на снимке и их геометрических характеристик			Фурье спектра изображения, фазовое разделение снимка, выделение доменных частей (кластеров) [3]	несет в себе деформации фаз при одинаковом силовом воздействии иглы на пленки в процессе сканирования
Определение размеров наночастиц на исследуемой поверхности	Атомно-силовой микроскоп	От 100x100 нм. до 1x1 мкм.	Алгоритм выравнивания поверхности с использованием функций интерполяции и сегментации и распознавания объектов [4]	Невозможность применения пороговой функции, что делает алгоритм значительно сложнее
Определение процентного содержания веществ в исследуемом объекте	Атомно-силовой микроскоп, туннельный микроскоп, оптический микроскоп	От 100x100 до 600x600 нм.	Алгоритмы кластеризации анализа наномасштабных снимков.	Ручное выполнение большинства расчётных и аналитических действий

Проведя анализ рассмотренных направлений в области исследований, связанных с обработкой наномасштабных изображений, можно сделать итоговый вывод для каждого из них.

Исследование структуры вещества позволяют осуществлять множество методов, начиная с методов, базирующихся на пропускании рентгеновских лучей через вещество, и заканчивая атомно-электронной бомбардировкой. Но все эти способы дают в итоге снимок спектра вещества, а непосредственная работа с этим снимком (математическая обработка и анализ) выполняется вручную, что в значительной степени замедляет исследовательский процесс. Создание алгоритма, позволяющего на основе анализа спектрального изображения определить структуру вещества, также является одним из направлений достойного более пристального внимания.

Анализ кристаллических решеток – алгоритм полностью реализован и подробно изложен в работе [2], но имеет высокую сложность реализации. Из-за трудности геометрического соотнесения признаков, представленных в решетках Бравэ, с двумерной проекцией (нано-снимком вещества) могут возникнуть проблемы NP-сложности. Оптимизация метода и реализация более простой математической модели могут дать существенный прирост скорости обработки, хотя не исключено, что это каким-то образом негативно отразится на качестве исследований.

Алгоритм обработки нано-снимков сверхтонких материалов был рассмотрен в [3] и полностью реализован, как математически, так и программно. Сложность здесь состоит не в обработке нано-снимков, а в создании программного обеспечения иного рода. Принцип атомно-силовой микроскопии состоит во взаимодействии исследуемого вещества с иглой микроскопа. При исследовании прочных или твердых веществ сверхчувствительная игла повторяет неровности на поверхности объекта, никак не изменяя его внутреннюю структуру; в результате получаем наномасштабное изображение. Что касается применения атомно-силовой микроскопии исследования сверхтонких веществ, то игла может деформировать сам исследуемый объект, что ведет, как к порче исследуемого образца, так и к потере контрастности и качества изображения в целом. Рассчитать параметры давления иглы микроскопа на поверхность во время ее движения – задача архисложная, так как требует сложных математических расчетов и изменения программного обеспечения микроскопа, что зачастую невозможно. Проанализировав проблемную ситуацию, был сделан вывод, что для улучшения качества изображения необходимо использовать метод предварительной обработки нано-снимков, представленный в статье [5]. Авторы предлагают повышать четкость контуров объектов на изображении за счет вычисления градиента яркости и подчеркивания границ. Применение этой методики в процессе обработки нано-снимков сверхтонких веществ дает широкие перспективы для дальнейшего развития данной области. Стоит отметить, что использование метода, описанного в работе [5], может позволить атомно-силовым микроскопам исследовать не только твердые и сверхтонкие тела, но и субстанции близкие к жидкому состоянию.

Определение процентного содержания веществ в исследуемом объекте процесс сложный и во многом зависит от структуры вещества, его физических и химических свойств. Алгоритм, приведенный в работе [6], в основном, опирается на ручные расчеты и анализ данных. Программная реализация математической модели позволит сделать процесс обработки изображения в разы быстрее.

Особое значение имеет задача подавления шума на наномасштабных снимках для их дальнейшего достоверного анализа. Подавление шума на снимках наноструктур: метод на данный момент фактически не реализован, а применение способов микроскопической обработки в данном случае неуместно и даст неверный результат. Задача подавления упорядоченного шума – перспективное направление в области предварительной и промежуточной обработки наномасштабных снимков, которое позволит проводить эксперименты с большей точностью и высокой скоростью.

Ряд направлений, рассмотренных выше, являются наиболее активно развивающимися на данный момент в сфере обработки наномасштабных снимков. В статье были приведены примеры, когда методы, успешно применяющиеся на более крупномасштабных изображениях, не применимы к нано-снимкам, что является предпосылкой для создания новых специфичных только для данной области алгоритмов, а также рассмотрен спектр проблем, с которыми сталкивается современная отрасль обработки наномасштабных снимков. Практически каждая проблема порождает новое направление исследований, актуальное только для этой области знаний. Проведя комплексный анализ, были выявлены новые направления для нахождения ответа на ряд промежуточных, но нерешенных проблем, которые сейчас достаточно актуальны.

Таким образом, в настоящей работе проведен комплексный обзор направлений обработки наномасштабных изображений. Представленные здесь исследования позволили сформировать представление об актуальности разработки новых методов для решения задач в данной области.

## Литература

1. *Сойфер В.А., Куприянов А.В.* Анализ и распознавание наномасштабных изображений: традиционные подходы и новые постановки задач. // Компьютерная оптика – 2011, т.35, №2. С.136-143

2. *Куприянов А.В.* Анализ текстур и определение типа кристаллической решетки на наномасштабных изображениях // Компьютерная оптика – 2011, т.35. №2. С.151-157

3. *Меньшиков Е.А., Большакова А.В., Виноградова О.И., Яминский И.В.* Методы анализа АСМ-изображений тонких пленок блок-сополимеров // Физико-химия поверхности и защита материалов – 2009, т.45. №1. С.1-4

4. *Чукланов А.П., Бородин П.А., Зиганшина С.А., Бухараев А.А.* Алгоритм для анализа АСМ-изображений поверхностей со сложной морфологией // Учебные записки Казанского государственного Университета – 2008, т.150. С.220 - 227

5. *Орлов А.А., Антонов Л.В.* Метод предварительной обработки изображений микро- и наноструктур // Алгоритмы, методы и системы обработки данных – 2011, №3

6. *Морозов И.А.* Анализ микроструктуры наполненной резины при атомно-силовой микроскопии // Механика композиционных материалов и конструкций – 2009. №1. С. 83

7. *Орлов А.А., Ерин А.М.* Алгоритм контурного обнаружения объектов на полутонных изображениях // Алгоритмы, методы и системы обработки данных. - М.: Горячая линия – Телеком, 2002. С.9-14.

8. *Орлов А.А., Канунова Е.Е.* Цифровая обработка текста на изображениях рукописей как линейчатых объектов // Информационные технологии. - 2008, №1. С.57-62

9. *Орлов А.А., Ермаков А.А.* Технология сравнения и идентификации растровых изображений линий // Программные продукты и системы. - 2008, №1. С.68-70.

10. *Садыков С.С., Орлов А.А., Ермаков А.А.* Методика обработки линейчатых образов на дефектоскопических снимках // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. - 2009, №2. С.11-16