

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

КОМПЬЮТЕРНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ ТОМОГРАФИЯ: СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ УПРАВЛЯЕМОГО И ВЕЙВЛЕТ-ФИЛЬТРОВ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ

© 2024 г. В. И. Бондаренко^{1,*}, С. Ш. Рехвиашвили², Ф. Н. Чуховский^{1,2}

¹Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии
и фотоники НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, Россия

²Институт прикладной математики и автоматизации — филиал Федерального научного центра
“Кабардино-Балкарский научный центр РАН”, Нальчик, Россия

*E-mail: bondarenko.v@crys.ras.ru

Поступила в редакцию 11.05.2024 г.

После доработки 19.06.2024 г.

Принята к публикации 24.06.2024 г.

Проведена цифровая обработка рентгеновских проекционных 2D-изображений точечного дефекта кулоновского типа в кристалле Si(111), регистрируемых детектором на фоне статистического гауссовского шума, с использованием управляемого фильтра и вейвлет-фильтра с функцией Добеши 4-го порядка. Эффективность фильтрации 2D-изображений определяется путем расчета усредненных по всем точкам относительных квадратичных отклонений интенсивностей фильтрованного и эталонного (незашумленного) 2D-изображений. Сравнение рассчитанных величин среднеквадратичных относительных отклонений интенсивностей показывает, что рассматриваемые методы работают достаточно хорошо и могут эффективно использоваться на практике для шумовой обработки рентгеновских дифракционных изображений, используемых для 3D-реконструкции наноразмерных дефектов кристаллических структур.

DOI: 10.31857/S0023476124050012, EDN: ZEGNEP

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время метод рентгеновской дифракционной микротомографии предоставляет уникальную возможность для компьютерной метрологии наноразмерных дефектов кристаллических структур, выводя эти исследования на новый уровень создания на их основе полупроводниковых приборов микроэлектроники с новыми электронными и оптическими свойствами [1–4]. Концептуально (например, [3, 4]) компьютерная рентгеновская дифракционная 3D-микротомография наряду с рентгеновской 3D-пихографией является прямым методом решения обратной задачи декодирования отдельных дефектов кристаллических материалов. В частности, она представляет собой компьютерное восстановление функции упругого поля смещения атомов в кристаллах по набору рентгеновских проекционных изображений в плоскости, перпендикулярной дифрагированной волне после ее прохождения через образец. Отметим, что качество 3D-реконструкции дефектов кристаллической структуры определяется параметром FOM (Figure-Of-Merit) и зависит от уровня зашумления записанных детектором изображений,

которые накапливаются в процессе их сбора при вращении образца вокруг оси вдоль вектора дифракции $\mathbf{h}$, а затем используются в компьютерной рентгеновской 3D-микротомографии [4].

Известны и широко применяются различные методы шумовой фильтрации 2D-изображений [5–10]. На практике выбор алгоритма шумовой фильтрации связан и обусловлен характерными особенностями эталонного 2D-изображения и его шумовой составляющей, а также лимитируется мощностью доступных вычислительных средств.

В данной работе анализируется проблема снижения уровня шумовой составляющей на примере изображений точечного дефекта кулоновского типа в кристалле Si(111) применительно к области их прямого контраста (классификация механизмов формирования рентгеновских дифракционных изображений (топограм), разработанная A. Authier). Соответственно, вектор дифракции $\mathbf{h} = [220]$, падающая волна — линейное σ -поляризованное $\text{MoK}_{\alpha 1}$ -излучение, $\sigma = 1$, длина экстинкции $\Lambda = 36.287$ мкм, угол Брэгга $\theta_B = 10.65^\circ$. Детали компьютерного моделирования изображений приведены в [4].

Характерная особенность изображений наноразмерных дефектов заключается в том, что в области их прямого контраста имеют место резкие изменения интенсивности на близких, порядка нескольких пикселей, расстояниях от центра изображения [4]. То есть шумовая фильтрация таких изображений требует разработки и применения методов с достаточно высоким пространственным разрешением [5–10].

В данной работе проведен сравнительный анализ применения методов фильтрации гауссовой шумовой составляющей 2D-изображений на примере точечного дефекта кулоновского типа в области его прямого контраста методами управляемого фильтра и вейвлет-преобразования изображений. Было подготовлено эталонное проекционное изображение, полученное на основе расчетного изображения указанного точечного дефекта. Зашумленное изображение получено из эталонного путем добавления к нему 3%-ного аддитивного гауссовского шума с нулевым средним значением.

Ниже приведены результаты исследования снижения шумовой составляющей на примере проекционных 2D-изображений в области их прямого контраста [4]. При этом необходимо обеспечить восстановление важных наноразмерных деталей, расположенных в непосредственной близости друг от друга. Шумовая фильтрация проекционных изображений проведена для двух случаев, изображений 32×32 пикселя и вырезанного из него изображения 16×16 пикселей.

В качестве меры уровня шумовой составляющей изображений в работе использовали параметр

$$\text{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum \frac{(f_{ij} - I_{ij})^2}{I_{ij}^2}}, \quad (1)$$

где I_{ij} и f_{ij} – величины яркости (интенсивности) эталонного и выбранного для сравнения с ним рабочего изображения в пикселе, стоящем на пересечении i -строки и j -столбца; сумма берется по всем N пикселям обоих изображений.

УПРАВЛЯЕМЫЙ ФИЛЬТР

Управляемый фильтр [11] использует для вычисления интенсивности в точках фильтрованного изображения не только исходное, но и дополнительное опорное изображение такого же размера. В зависимости от поставленной задачи описываются различные подходы к формированию опорного изображения, основанные на дополнительной априорной информации об объектах исследования [11–21]. Без потери общности полученных результатов в настоящей работе в качестве опорного использовано само зашумленное изображение.

К положительным качествам управляемого фильтра можно отнести его способность сглаживать изображения при сохранении границ объектов без создания артефактов. Применяемая в работе концепция фильтрации доказала свою эффективность в разнообразных приложениях компьютерного зрения, таких как удаление бликов от вспышки, сглаживание деталей, увеличение разрешения изображений и т.п. [12, 13].

Подробное описание управляемого фильтра дано в [11]. Пусть R_{ij} , f_{ij} и g_{ij} – значения интенсивностей опорного, зашумленного и фильтрованного изображений в $\{ij\}$ -пикселе соответственно.

Представим интенсивность фильтрованного изображения в $\{ij\}$ -пикселе в виде линейной функции интенсивности опорного изображения R_{ij} , определенной в квадратном окне Ω_k , содержащем $\{ij\}$ -пиксель,

$$g_{ij} = \alpha_k R_{ij} + \beta_k, \quad (2)$$

где целый индекс k нумерует все содержащие указанный пиксель окна Ω_k заданного размера p .

Коэффициенты α_k и β_k целевой функции $E(\alpha_k, \beta_k)$:

$$E(\alpha_k, \beta_k) = \sum_{\{ij\} \in \Omega_k} \left[(g_{ij} - f_{ij})^2 + \varepsilon \alpha_k^2 \right], \quad (3)$$

$$g_{ij} = \alpha_k R_{ij} + \beta_k,$$

внутри квадратного окна Ω_k определяются в процессе ее минимизации, $E(\alpha_k, \beta_k) = \min$, обеспечивая наилучшее приближение интенсивности зашумленного изображения f_{ij} интенсивностью фильтрованного изображения g_{ij} (2); ε – параметр регуляризации, введенный для предотвращения получения необоснованно больших значений коэффициента α_k .

Стандартная линейная регрессия дает следующие решения для коэффициентов α_k и β_k :

$$\alpha_k = \frac{\frac{1}{|\Omega|} \sum_{ij \in \Omega_k} R_{ij} f_{ij} - \mu_k \bar{f}_k}{\sigma_k^2 + \varepsilon}, \quad (4)$$

$$\beta_k = \bar{f}_k - \alpha_k \mu_k,$$

где μ_k и σ_k – среднее значение и дисперсия интенсивности опорного изображения в окне Ω_k ; $|\Omega_k| = (2p + 1)^2$ – количество пикселей в окне Ω_k ; $\bar{f}_k = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{ij \in \Omega_k} f_{ij}$ – среднее значение интенсивности зашумленного изображения в окне Ω_k .

Поскольку значения g_{ij} различаются для различных окон, включающих в себя $\{ij\}$ -пиксель, значение интенсивности фильтрованного изображения

в этой точке определяют как среднее по всем таким окнам Ω_k :

$$g_{ij} = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{k:(ij) \in \Omega_k} (\alpha_k R_{ij} + \beta_k) = \bar{\alpha}_{ij} R_{ij} + \bar{\beta}_{ij}, \quad (5)$$

$$\bar{\alpha}_{ij} = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{m \in \Omega_{ij}} \alpha_m, \quad \bar{\beta}_{ij} = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{m \in \Omega_{ij}} \beta_m.$$

В соответствии с формулами (4) и (5) параметрами управляемого фильтра являются величины ρ и ε . Согласно (4), если дисперсия интенсивности в пределах окна много больше ε , расчетное значение g_{ij} по формуле (5) будет мало отличаться от f_{ij} . В противном случае это значение будет равно среднему значению интенсивности f_{ij} в окне.

Отметим, что в литературе существует большое количество модифицированных алгоритмов на основе концепции управляемого фильтра. Как правило, изменения направлены на отказ от линейной зависимости (2) (например, [14, 15]) или изменение определения целевой функции (3) [16, 17], а также на локальную адаптацию параметра регуляризации [18, 19]. Еще одним направлением развития теории управляемого фильтра является отказ от использования внешнего опорного изображения. При таком подходе опорное изображение вычисляется на основе зашумленного изображения [20, 21].

В практических расчетах на выбор значений параметров управляемого фильтра существенное влияние оказывают приведенные выше особенности зашумленного изображения. Так, для

минимизации влияния соседних пикселей на изображение дефекта выбрано минимально возможное значение параметра $\rho = 1$. Хорошей оценкой величины параметра регуляризации ε может служить значение средней дисперсии $\bar{\sigma}$ зашумленного изображения, в качестве которого принимается среднее значение дисперсий, рассчитанных для окон с $\rho = 1$ с центрами в каждом пикселе изображения. Для изображений 32×32 и 16×16 пикселей величина $\bar{\sigma}$ составила 0.2 и 0.3 соответственно. Эти значения использованы в качестве начальных при определении оптимальной величины параметра регуляризации. Для $\rho = 1$ в качестве оптимальной величины параметра регуляризации ε принимали значение, приводящее к минимальному значению RMS (1) в окрестности 12×10 пикселей вокруг дефекта. Минимальные значения были достигнуты при значениях параметра ε , равных 0.4 и 0.5 для изображений 32×32 и 16×16 пикселей соответственно (табл. 1, 2).

ВЕЙВЛЕТ-ФИЛЬТРАЦИЯ

Для обработки зашумленных рентгеновских проекционных изображений применяли подход, который ранее был реализован для анализа изображений с атомным разрешением в сканирующем зондовом микроскопе [22, 23]. Исторически он основан на интегральном вейвлет-преобразовании, которое переводит “временную” функцию сигнала в “частотно-временную”. Преобразование заключается в том, что анализируемая функция сигнала $f(x)$ описывается через уединенную волну (солитон) посредством ее сдвига и масштабирования.

Таблица 1. Значения RMS для изображения 32×32

Фильтрация	Полное изображение	Область вблизи дефекта, 12×10 пикселей
зашумленное изображение	0.00744	0.00694
вейвлет-фильтр	0.00221	0.00127
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.2$	0.00465	0.00473
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.3$	0.00378	0.00417
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.4$	0.00336	0.00410
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.5$	0.00318	0.00435

Примечание. Вейвлет-фильтр, параметр $\Delta = 0.75$ и управляемый фильтр, параметр $\rho = 1$; ε – параметр регуляризации.

Таблица 2. Значения RMS для изображения 16×16

Фильтрации	Полное изображение	Область вблизи дефекта, 12×10 пикселей
зашумленное изображение	0.00912	0.00880
вейвлет-фильтр	0.00482	0.00633
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.3$	0.00520	0.00515
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.4$	0.00453	0.00464
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.5$	0.00424	0.00454
управл. фильтр, $\varepsilon = 0.6$	0.00421	0.00476

Примечание. Вейвлет-фильтр, параметр $\Delta = 0.8$ и управляемый фильтр, параметр $\rho = 1$; ε – параметр регуляризации.

Согласно [24] вейвлет-преобразование сигнала $f(x)$ записывается в следующем виде:

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \psi^* \left(\frac{x-b}{a} \right) dx, \quad (6)$$

$$f(x) = \frac{1}{C_\psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(a, b) \psi \left(\frac{x-b}{a} \right) \frac{db da}{a^2}, \quad (7)$$

$$0 < C_\psi = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\psi}(\omega)|^2 \frac{d\omega}{\omega} < \infty, \quad (8)$$

где $\psi(t)$ – вейвлет-функция (или просто “вейвлет”), $t = (x-b)/a$, a и b – параметры, задающие масштабирование и сдвиг для покрытия анализируемой функции $f(x)$ вейвлетом, $W(a, b)$ – определяет спектр, C_ψ – коэффициент нормировки, $\hat{\psi}(\omega)$ – фурье-образ функции $\psi(t)$. Функция $\psi(t)$ является ортонормированной базисной функцией в пространстве $L^2(R)$ и с этой функцией существует обратное преобразование (7).

Главное отличие вейвлет-преобразования (6) от фурье-преобразования заключается в том, что оно проводится по двум переменным a и b , обеспечивая более корректное описание сложных в своем поведении неперiodических функций. В (6) и (7) подразумевается, что базис преобразования обладает свойством самоподобия (масштабирование и сдвиг вейвлета не меняют его форму), что применимо для анализа фрактальных функций. В данном случае это свойство приобретает особую ценность, поскольку анализируемые рентгеновские изображения искажены гауссовским шумом с фрактальной структурой и показателем Херста $H = 1/2$.

В теории вейвлет-преобразования [24] имеет место аналог теоремы Парсерваля, а именно полная энергия сигнала может быть выражена следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^2(x) dx = \frac{1}{C_\psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W^2(a, b) \frac{dad b}{a^2}.$$

Отсюда следует, что плотность энергии анализируемого сигнала $E_W(a, b) = W^2(a, b)$. Данные свойства позволяют решать задачу о подавлении шума путем редактирования спектра. Таким образом, коэффициенты преобразования предлагается вычислять по формуле

$$\tilde{W}(a, b) = W(a, b) \theta(|W(a, b)| - \Delta), \quad (9)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0, \end{cases}$$

где $\theta(x)$ – функция Хевисайда, Δ – уровень подавления шума. После замены $W(a, b)$ на $\tilde{W}(a, b)$ в (7) и обратного преобразования с новыми

коэффициентами получается сглаженная функция $\tilde{f}(x)$.

Для описания пиксельных изображений требуется перейти к дискретному преобразованию, которое получается из (6) и (7) в результате замены интегрирования на суммирование. Для строки или столбца имеем:

$$f[m] = \sum_{j \in Z} \sum_{k \in Z} W_{j,k} \psi_{j,k}[m], \quad (10)$$

$$\psi_{j,k}[m] = 2^{-j/2} \psi[2^{-j}m - k], \quad (11)$$

$$W_{j,k} = \sum_m f[m] \psi_{j,k}[m], \quad (12)$$

где переменные $a = 2^j$ и $b = ka$ задают масштабирование и сдвиг, m – номер пикселя. Функция $f[m]$ определяет интенсивность пикселя с номером m . Как и в случае непрерывного преобразования, новые коэффициенты $\tilde{W}_{j,k}$ для фильтрованной функции $\tilde{f}$ получаются с учетом (9).

Вейвлет-функция может быть выбрана как в аналитическом, так и в численном виде. Среди аналитических функций наиболее часто используются WAVE, MHAT, Morlet и Paul; дискретные функции – это прежде всего ортогональные вейвлеты Добеши и LMB [24, 25]. Отметим, что дискретные вейвлеты имеют компактный носитель, что гарантирует их ортогональность. Вейвлеты данного типа строятся рекурсивно по точкам и не выражаются через элементарные функции. Алгоритм дискретного преобразования основан на представлении выражения (10) в виде аппроксимирующей и детализирующей составляющих с их последующим дроблением, задающим уровень декомпозиции сигнала. Нулевым уровнем считается сам сигнал. Число уровней декомпозиции зависит от длины сигнала: $L = \ln(N)/\ln(2) - 1$, где N – длина сигнала в отсчетах (пикселях). По мере перехода от одного уровня к другому точность описания сигнала снижается. Вычисления по (12) на всех уровнях позволяют получить полный спектр сигнала. Прореживание данного спектра с помощью (9) решает задачу фильтрации дискретного сигнала.

Вычисления проводили по следующей схеме:

- преобразование исходного зашумленного изображения в одномерный сигнал;
- фильтрация полученного одномерного сигнала по (9)–(12) и быстрому рекурсивному алгоритму [24, с. 298];
- расчет относительного среднеквадратического отклонения;
- сборка изображения из отфильтрованного одномерного сигнала.

Несмотря на то что схема по реализации является простейшей, она позволяет изучить принципиальные возможности вейвлет-преобразования

применительно к обработке сигналов/изображений в компьютерной дифракционной томографии. Относительное среднеквадратическое отклонение для полного изображения рассчитывали по формуле (1). Оптимальное значение уровня подавления шума Δ выбирали так, чтобы функция $RMS(\Delta)$ (формула (1)) имела минимальное значение.

На рис. 1, 2 представлены результаты вычислительного эксперимента. Число уровней декомпозиции L для изображений размером 32×32 и 16×16 равно 9 и 7. Найденные графически минимальные значения RMS составляют 0.00221 и 0.00482 при $\Delta = 0.75$ и $\Delta = 0.8$ для изображений размером 32×32 и 16×16 соответственно (табл. 1 и 2). Фильтрованные изображения размером 32×32 и 16×16 содержат приблизительно 2 и 4% ненулевых коэффициентов преобразования от их общего числа. Определение Δ по минимальному значению RMS позволяет после фильтрации сохранить только такие значимые коэффициенты преобразования зашумленного сигнала, которые совпадают с соответствующими коэффициентами эталонного сигнала и вместе с этим превышают средний уровень шума.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ приведенных в табл. 1 и 2 значений RMS , полученных с помощью вейвлет- и управляемого фильтров, показывает, что применение обоих

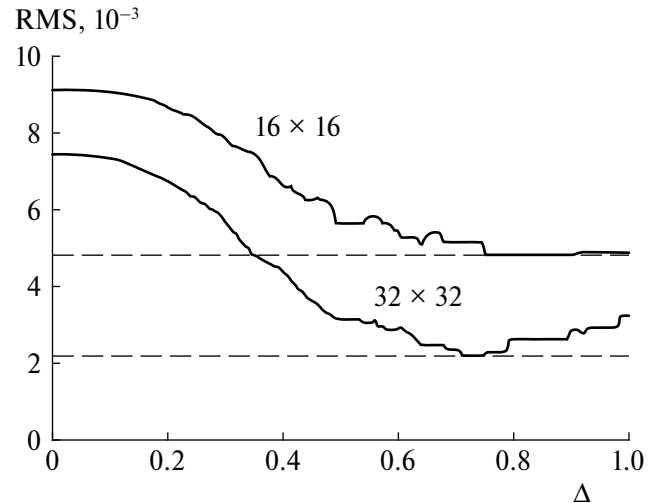


Рис. 1. Зависимость RMS от параметра подавления шума Δ для изображений 16×16 и 32×32 .

алгоритмов шумовой фильтрации позволило существенно приблизить фильтрованные изображения к эталонному.

Для изображения размером 32×32 пикселя (табл. 1) при применении вейвлет-фильтрации минимальное значение показателя RMS было достигнуто при значении параметра Δ , равном 0.75. При этом RMS для полного изображения равно 0.00221, а для области вблизи дефекта — 0.00127.

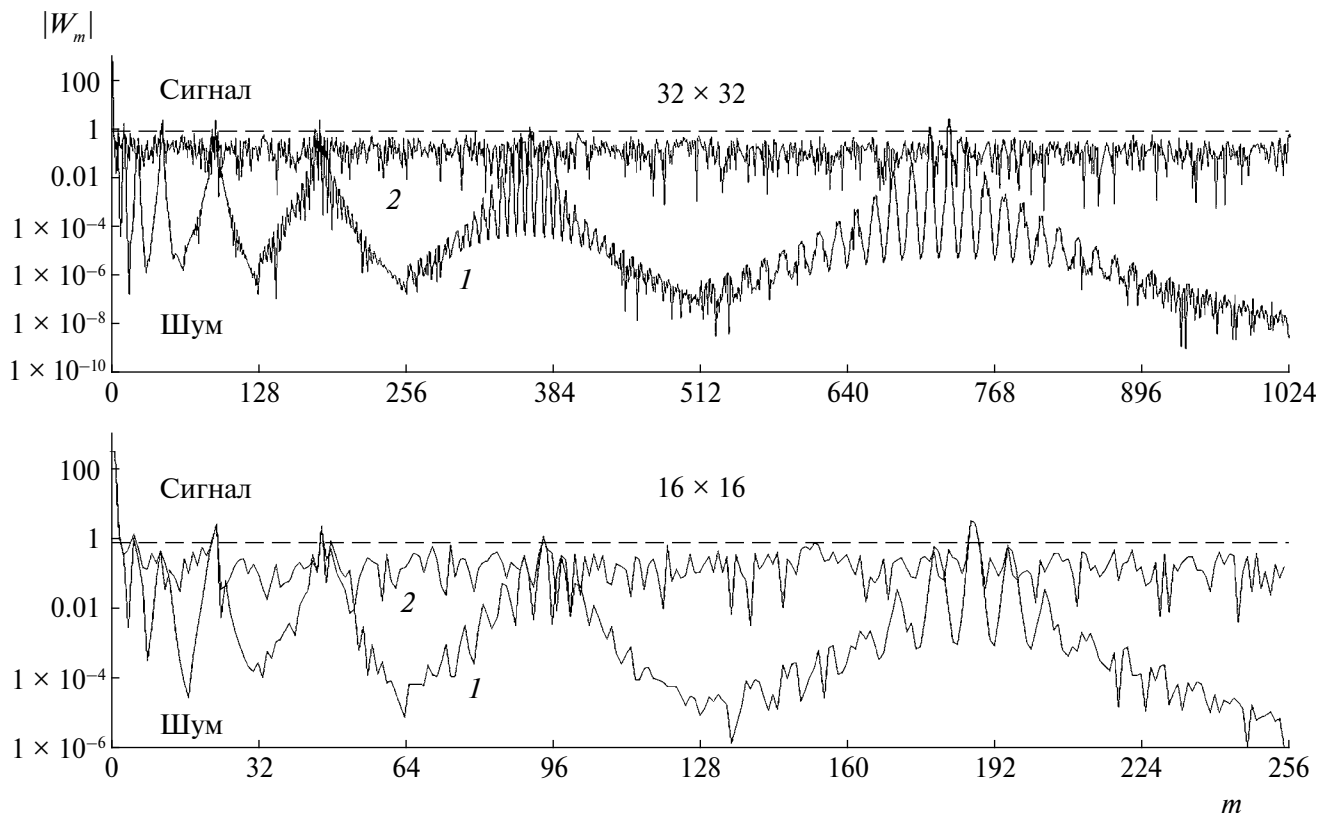


Рис. 2. Спектры коэффициентов вейвлет-преобразования изображений: 1 — эталонные, 2 — зашумленные. Пунктирными линиями отмечены уровни подавления шума.

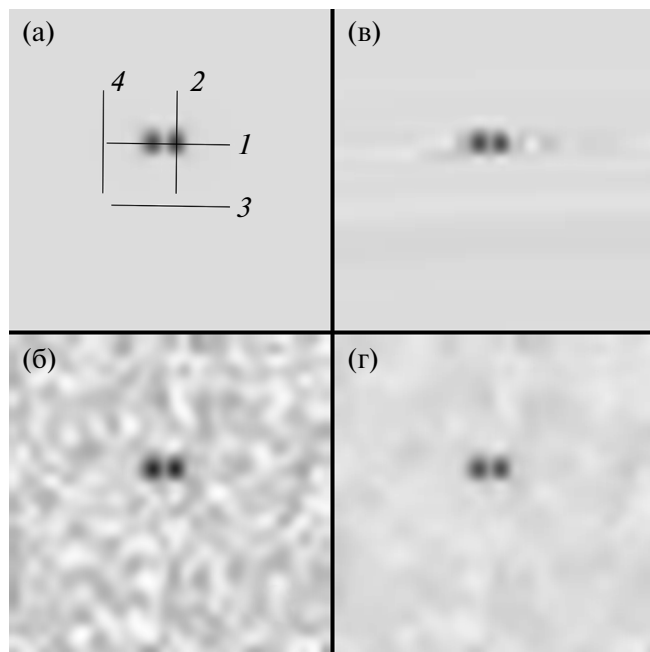


Рис. 3. Изображения 32×32 : эталонное (а), зашумленное (б), вейвлет-фильтр, параметр $\Delta = 0.75$ (в), управляемый фильтр, параметры $\rho = 1$, $\varepsilon = 0.4$ (г).

Таким образом, качество шумовой фильтрации в области вблизи дефекта оказалось лучше, чем для полного изображения.

Лучшее качество фильтрации управляемым фильтром в случае изображения размером 32×32 пикселя (табл. 1) было достигнуто при значении параметра ε , равном 0.4. Соответственно, показатели RMS для полного изображения и в области вблизи дефекта составили 0.00336 и 0.00410. Значение параметра $\varepsilon = 0.4$ выбрано в качестве оптимального, поскольку при нем достигается минимум RMS в окрестности вблизи дефекта, в то время как RMS, отвечающее всему изображению, продолжает уменьшаться с ростом параметра регуляризации ε . Интересно, что в отличие от вейвлет-фильтра качество фильтрации управляемым фильтром в окрестности вблизи дефекта оказывается несколько хуже, чем для полного изображения (табл. 1). При этом в случае применения вейвлет-фильтра имеет место лучшее качество фильтрации как полного изображения, так и изображения в окрестности вблизи дефекта.

Для сравнения величины отклонений от эталонного изображения для зашумленного изображения составили 0.00744 по всему изображению и 0.00694 для окрестности дефекта.

На рис. 3 показаны эталонное и зашумленное изображения размером 32×32 пикселя в сравнении с результатами фильтрации с помощью вейвлет и управляемого фильтры.

Сравнение результатов фильтрации показывает, что управляемый фильтр равномерно уменьшает шум на всей площади изображения, в то время как

одномерное вейвлет-преобразование эффективно удаляет следы шума, но оставляет артефакты (“слабые тени”), вытянутые вдоль горизонтального направления. По-видимому, причиной этого явления является применение одномерного вейвлет-преобразования (10) к 2D-изображению, вытянутому в одну строку длиной 32×32 пикселей.

На рис. 4 показаны соответствующие профили (сечения) эталонного, зашумленного и фильтрованного изображений. Рисунки 4а, 4б показывают профили, построенные вдоль отрезков, обозначенных цифрами 1, 2 на рис. 3а. Сравнение представленных кривых позволяет заключить, что в области вблизи дефекта результаты применения обоих фильтров практически совпадают. Рисунки 4в, 4г относятся к периферии изображения, где эталонное изображение имеет постоянную интенсивность. На рис. 4в показаны профили, взятые вдоль горизонтального направления, расположенного под дефектом (линия 3 на рис. 3а). Из рис. 4в видно, что кривые интенсивности, полученные в результате применения вейвлет-преобразования, практически повторяют поведение соответствующих профилей эталонного изображения, в то время как профили интенсивностей, полученные в результате применения управляемого фильтра, повторяют поведение соответствующих профилей зашумленного изображения с несколько меньшей амплитудой характерных изменений.

Интересно, что похожее поведение демонстрируют профили изображения, полученные в результате применения управляемого фильтра, показанные на рис. 4г. Они построены вдоль вертикального отрезка, обозначенного цифрой 3 на рис. 3а. Отметим, что “вертикальные” профили интенсивности изображения, полученные в результате применения вейвлет-преобразования, показывают поведение, отличное от соответствующих профилей эталонного или зашумленного изображений. Как отмечалось выше, такое поведение (артефакт) обусловлено применением одномерного вейвлет-преобразования. Согласно [26, с. 111] подобные артефакты можно устранить, применяя вейвлет-преобразование последовательно к строкам и столбцам изображения.

Результаты применения вейвлет- и управляемого фильтров к изображению размером 16×16 пикселей приведены в табл. 2. В результате обработки этого изображения с помощью вейвлет-фильтра минимальное значение RMS было достигнуто при значении параметра $\Delta = 0.8$ и составило 0.00482 для полного изображения и 0.00633 для окрестности дефекта. В случае управляемого фильтра эти величины RMS равны 0.00424 и 0.00454 соответственно при значении параметра регуляризации $\varepsilon = 0.5$. Подобно случаю изображения 32×32 пикселя при данном параметре $\varepsilon = 0.5$ значения RMS = 0.00424 и 0.00454 относятся к области 12×10 пикселей вблизи дефекта.

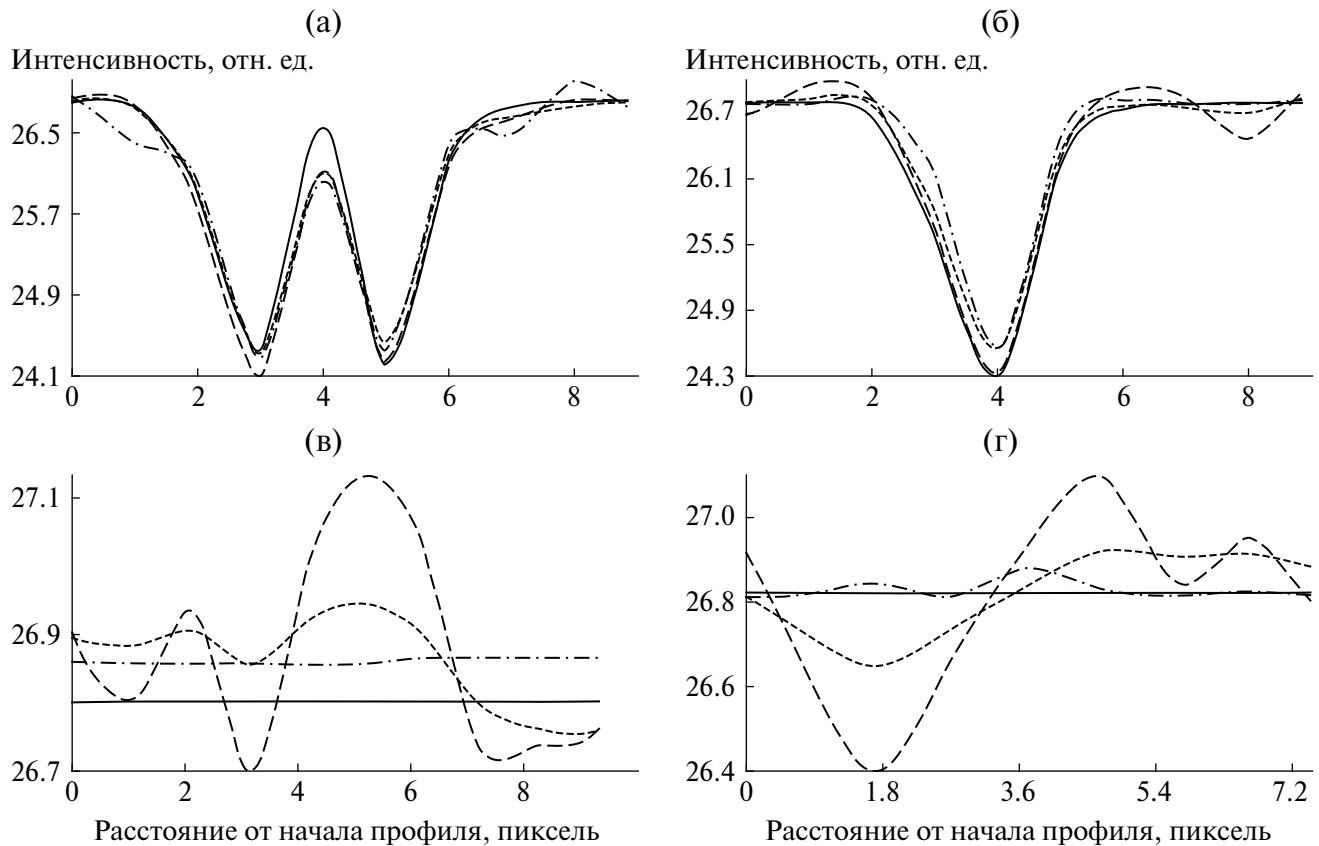


Рис. 4. Изображения 32×32 . Профили интенсивности (а)–(г) вдоль отрезков, обозначенных на рис. За цифрами 1–4 соответственно. Сплошная линия – эталонное, штриховая – зашумленное, штрихпунктирная – вейвлет-фильтрации, точечная – управляемый фильтр.

Для области 12×10 пикселей вблизи дефекта результат применения управляемого фильтра по сравнению с вейвлет-фильтром несколько лучше (табл. 2), в то время как качество фильтрации полного изображения практически одинаково. Расчетные RMS составили 0.00912 для полного изображения и 0.00880 для области вблизи дефекта. Согласно результатам вычислительных вейвлет-экспериментов (табл. 1, 2) повышение ранга анализируемого изображения от значения 16 к 32 приводит к улучшению показателя RMS.

Таким образом, при увеличении общего числа ($N \times N$)-пикселей зашумленных изображений показатель RMS их вейвлет-фильтрации будет улучшаться.

На рис. 5 показаны изображения 16×16 пикселей. Для снижения уровня шумовой составляющей были применены вейвлет- и управляемый фильтры соответственно (рис. 3).

Аналогично тому, как это было в случае изображения 32×32 пикселей, рассчитанные профили интенсивностей показаны на рис. 6.

Анализ профилей, представленных на рис. 6, показывает, что в области вблизи дефекта результаты фильтрации с помощью обоих фильтров

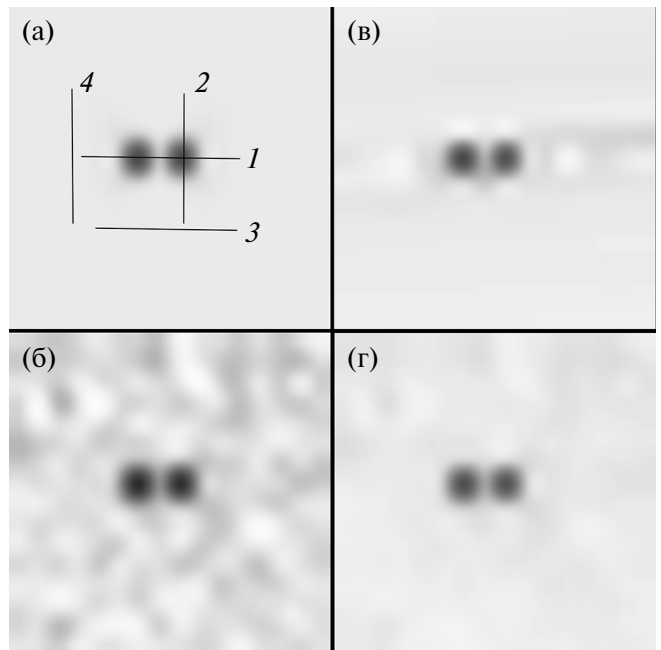


Рис. 5. Изображения 16×16 : эталонное (а), зашумленное (б), вейвлет-фильтр, параметр $\Delta = 0.8$ (в), управляемый фильтр, параметры $\rho = 1$, $\varepsilon = 0.5$ (г).

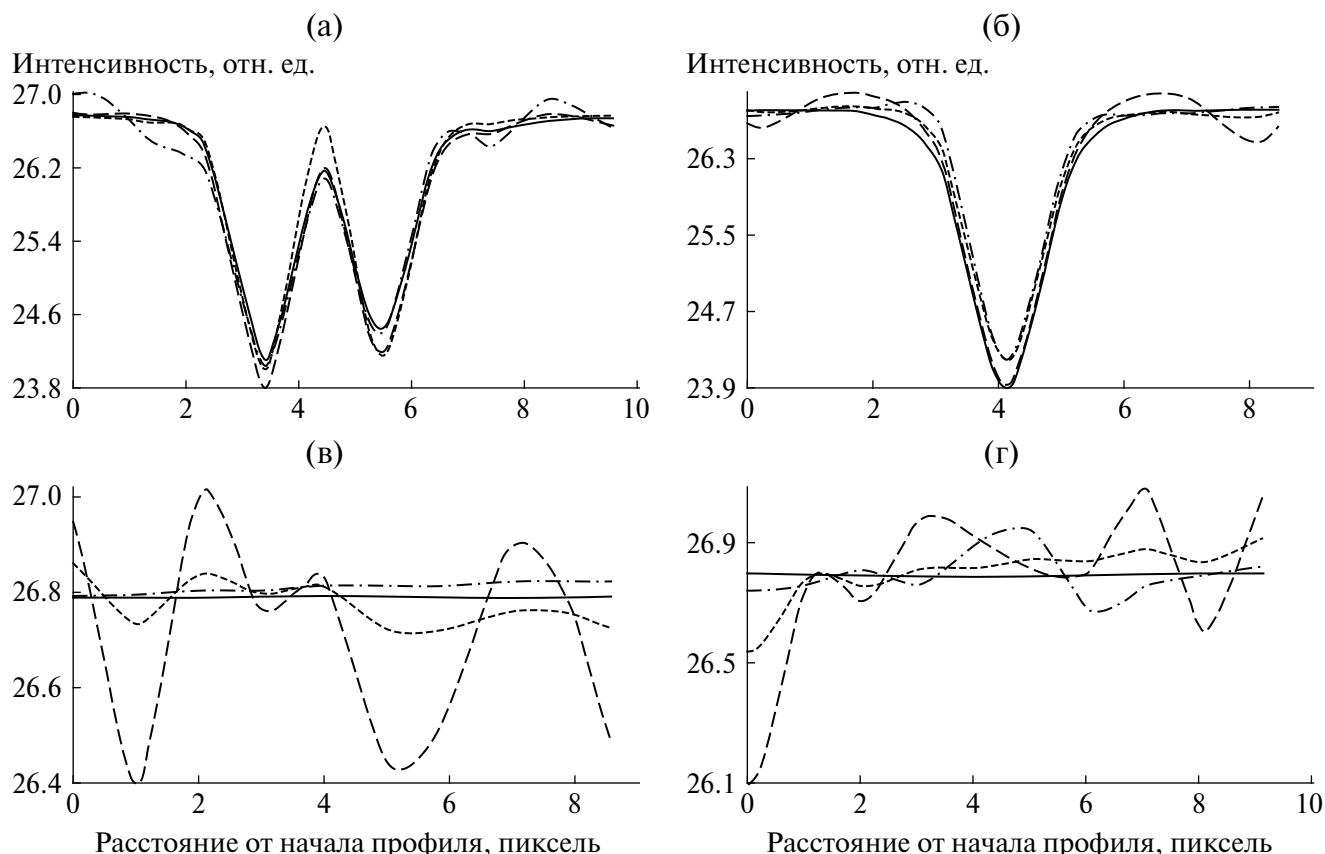


Рис. 6. Изображения 16×16 . Профили интенсивности (а)–(г) вдоль отрезков, обозначенных на рис. 5 цифрами 1–4 соответственно. Сплошная линия – эталонное, штриховая – зашумленное, штрихпунктирная – вейвлет-фильтрации, точечная – управляемый фильтр.

практически совпадают. В периферийных областях изображения результаты фильтрации различаются. Поведение профилей интенсивностей, полученных с помощью управляемого фильтра, в значительной степени повторяет поведение профилей интенсивностей зашумленного изображения в этих областях с меньшей амплитудой колебаний. Зависимость профилей интенсивностей, полученных с помощью вейвлет-фильтра, в горизонтальном и вертикальном направлениях заметно отличаются друг от друга. В случае “горизонтальных” профилей интенсивностей они близки к соответствующим профилям эталонного изображения, в то время как во втором случае поведение профилей интенсивности по крайней мере визуально не связано ни с одним из двух профилей эталонного и зашумленного изображения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен сравнительный анализ применения методов управляемого фильтра и вейвлет-преобразования, имеющих своей целью снижение уровня гауссовского шума на рентгеновских проекционных изображениях внедренного в кристалл Si(111) точечного дефекта кулоновского типа. Всесторонние вычислительные эксперименты показывают, что данные методы работают с приемлемой точностью и могут использоваться на практике для

шумовой обработки дифракционных 2D-изображений в рентгеновской дифракционной микротомографии кристаллических структур. Отметим, что применение вейвлет-фильтра к зашумленным изображениям приводит к появлению “теней” в области прямого контраста точечного дефекта, в то время как применение управляемого фильтра – к некоторым флуктуациям интенсивности вдали от области прямого контраста точечного дефекта.

Проведенное в работе сравнение шумовой фильтрации с помощью управляемого, формулы (2)–(5), и вейвлет-, формулы (9)–(12), алгоритмов дает основание заключить, что оба фильтра работают в равной степени эффективно. То есть анализ применения алгоритмов вейвлет-фильтрации и управляемого фильтра позволяет уже сейчас определить возможные направления и пути их модификации с целью дальнейшего улучшения качества шумовой фильтрации рентгеновских дифракционных 2D-изображений для компьютерной 3D-реконструкции наноразмерных дефектов кристаллических структур.

Работа проведена в рамках выполнения работ по Государственному заданию НИЦ “Курчатовский институт” и Института прикладной математики и автоматизации – филиал Федерального научного центра “Кабардино-Балкарский научный центр РАН”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Asadchikov V., Buzmakov A., Chukhovskii F. et al. // J. Appl. Cryst.* 2018. V. 51. P. 1616.
<https://doi.org/10.1107/S160057671801419X>
2. *Danilewsky A.N., Wittge J., Croell A. et al. // J. Cryst. Growth.* 2011. V. 318. P. 1157.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2010.10.199>
3. *Danilewsky A., Helfen L., Hamann E., Baumbach T. // Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119. P. 215504.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.215504>
4. *Chukhovskii F.N., Konarev P.V., Volkov V.V. // Acta Cryst. A.* 2020. V. 76. P. 16.
<https://doi.org/10.1107/S2053273320000145>
5. *Бондаренко В.И., Конарев П.В., Чуховский Ф.Н. // Кристаллография.* 2020. Т. 65. № 6. С. 845.
<https://doi.org/10.31857/S0023476120060090>
6. *Chukhovskii F.N., Konarev P.V., Volkov V.V. // Crystals.* 2023. V. 13. P. 561.
<https://doi.org/10.3390/cryst13040561>
7. *Yang W., Hong J.-Y., Kim J.-Y. et al. // Sensors.* 2020. V. 20. P. 3063.
<https://doi.org/10.3390/s20113063>
8. *Hendriksen A.A., Bühner M., Leone L. et al. // Sci. Rep.* 2021. V. 11. P. 11895.
<https://doi.org/10.1038/s41598-021-91084-8>
9. *Liu N., Schumacher T. // Sensors.* 2020. V. 20. P. 1423.
<https://doi.org/10.3390/s20051423>
10. *Hamming R.W. Numerical Methods for Scientists and Engineers.* Dover Publications, 2012. 752 p.
11. *He K., Sun J., Tang X. // IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell.* 2013. V. 35. № 6. P. 1397.
<https://doi.org/10.1109/TPAMI.2012.213>
12. *Karumuri R., Kumari S.A. // IEEE2nd International Conference on Communication and Electronics Systems (ICCES),* 2017. p. 545.
<https://doi.org/10.1109/CESYS.2017.8321137>
13. *Li Z., Zheng J., Zhu Z. et al. // IEEE Trans. Image Process.* 2015. V. 24. P. 120.
<https://doi.org/10.1109/TIP.2014.2371234>
14. *Caraffa L., Tarel J.P., Charbonnier P. // IEEE Trans. Image Process.* 2015. V. 24. № 4. P. 1199.
<https://doi.org/10.1109/TIP.2015.2389617>
15. *Ham B., Cho M., Ponce J. // IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 2018. V. 40. № 1. P. 192.
<https://doi.org/10.1109/TPAMI.2017.2669034>
16. *Sun Z., Han B., Li J. et al. // IEEE Trans. Image Process.* 2020. V. 29. P. 500.
<https://doi.org/10.1109/TIP.2019.2928631>
17. *Pham C.C., Ha S.V.U., Jeon J.W. // Pacific-Rim Symp. on Image and Video Technology, Gwangju, Republic of Korea.* 2011. P. 323.
https://doi.org/10.1007/978-3-642-25367-6_29
18. *Pham C.C., Jeon J.W. // 19th IEEE Int. Conf. on Image Processing.* Orlando, FL, USA. 2012. P. 993.
<https://doi.org/10.1109/icip.2012.6467522>
19. *Tsai C.L., Tu W.C., Chien S.Y. // IEEE Int. Conf. on Image Processing (ICIP), Québec City, Québec, Canada.* 2015. P. 43.
<https://doi.org/10.1109/ICIP.2015.7350756>
20. *Zhang Y.Q., Ding Y., Liu J. // IET Image Process.* 2013. V. 7. № 3. P. 270.
<https://doi.org/10.1049/iet-ipr.2012.0351>
21. *Shujin Zhu, Zekuan Yu // IET Image Process.* 2020. V. 14. № 11. P. 2561.
<https://doi.org/10.1049/iet-ipr.2019.1471>
22. *Рехвиашвили С.Ш. // Письма в ЖТФ.* 2002. Т. 28. № 6. С. 46.
23. *Потанов А.А., Рехвиашвили С.Ш. // ЖТФ.* 2018. Т. 88. № 6. С. 803.
<https://doi.org/10.21883/JTF.2018.06.46008.2159>
24. *Mallat S. A Wavelet Tour of Signal Processing. The Sparse Way.* 3rd Edition. Academic Press, 2008. 832 p.
25. *Дремин И.М., Иванов О.В., Нечитайло В.А. // Успехи физ. наук.* 2001. Т. 171. № 5. С. 465.
<https://doi.org/10.3367/UFNr.0171.200105a.0465>
26. *Welstead S. Fractal and Wavelet Image Compression Techniques.* SPIE Publications, 1999. 254 p.

COMPUTER DIFFRACTION TOMOGRAPHY: A COMPARATIVE ANALYSIS OF THE USE OF CONTROLLED AND WAVELET FILTERS FOR IMAGE PROCESSING

© 2024 V. I. Bondarenko^{a,*}, S. S. Rekhviashvili^b, F. N. Chukhovskii^{a,b}

^a*Shubnikov Institute of Crystallography of Kurchatov Complex of Crystallography
and Photonics of NRC "Kurchatov Institute", 119333 Moscow, Russia*

^b*Institute of Applied Mathematics and Automation KBSC RAS, 360000 Nalchik, Russia*

*e-mail: bondarenko.v@crys.ras.ru

Abstract. The paper provides digital processing of 2D X-ray projection images of a Coulomb-type point defect in a Si(111) crystal recorded by a detector against the background of statistical Gaussian noise. A managed filter and a wavelet filter with a 4th-order Daubechies function are used. The efficiency of filtering 2D images is determined by calculating the relative quadratic deviations of the intensities of filtered and reference (noiseless) 2D images averaged over all points. A comparison of the calculated values of the relative deviations of the intensities shows that the considered methods work quite well and both, in principle, can be effectively used in practice for noise processing of X-ray diffraction images used for 3D reconstruction of nanoscale defects of crystal structures.