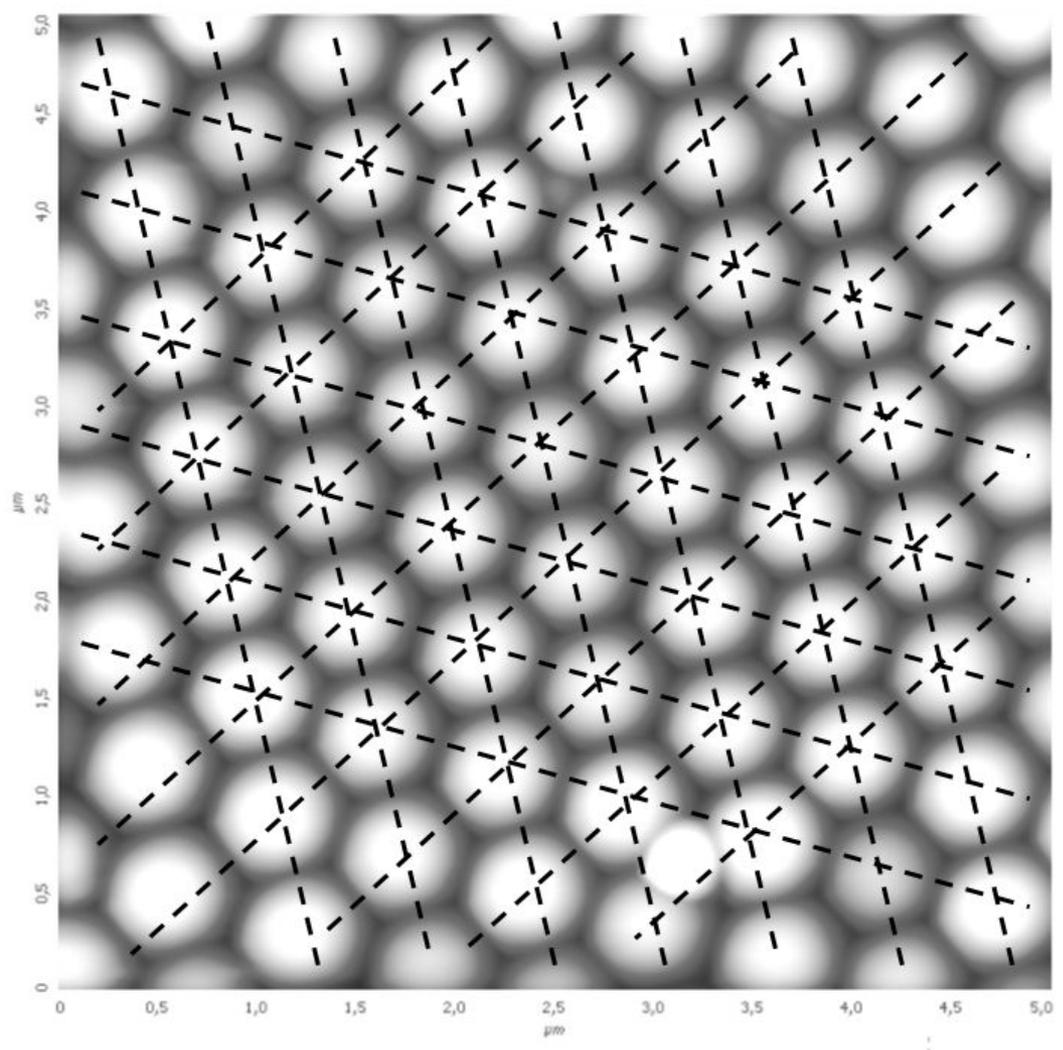


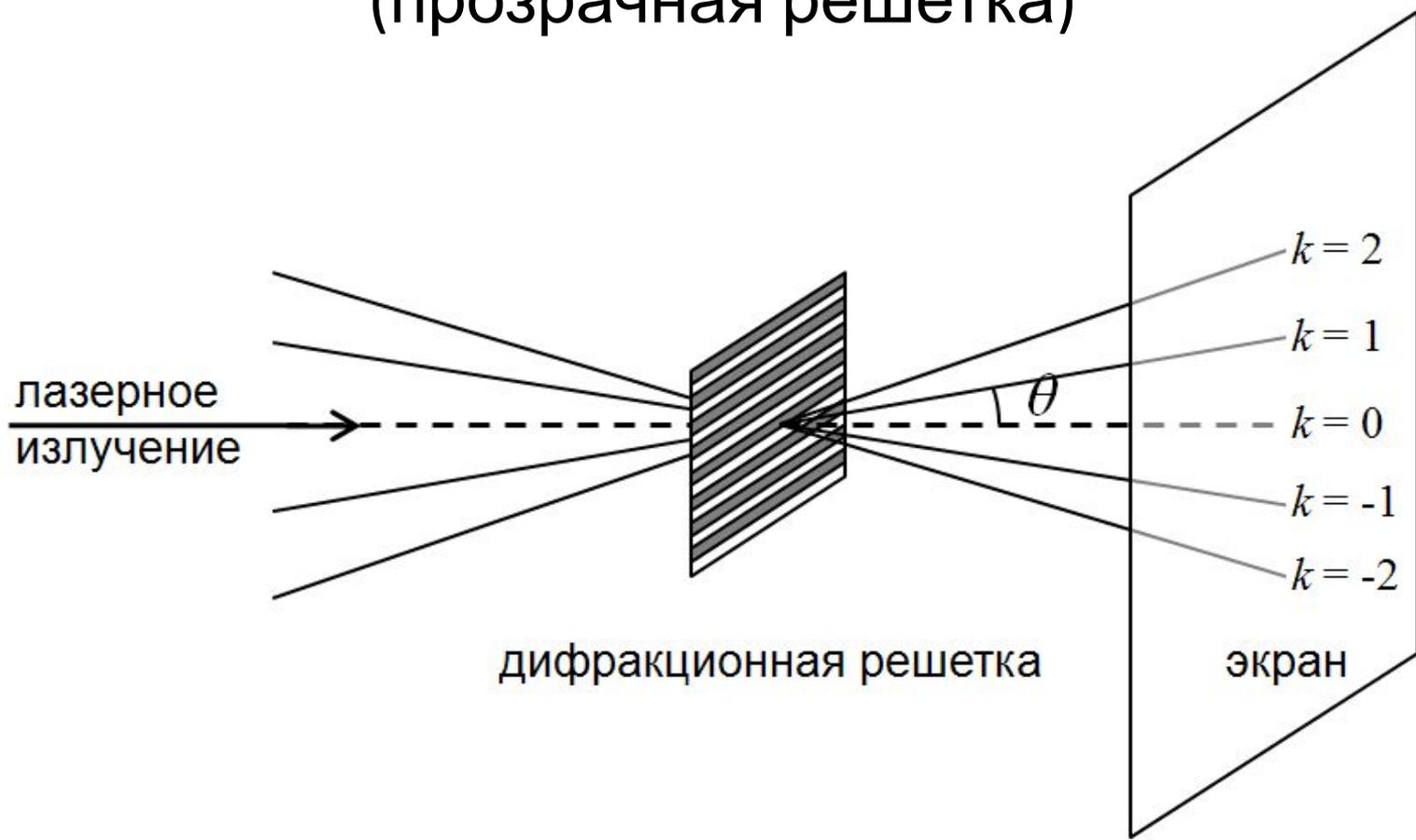


# Лазерная дифракция на фотонных кристаллах





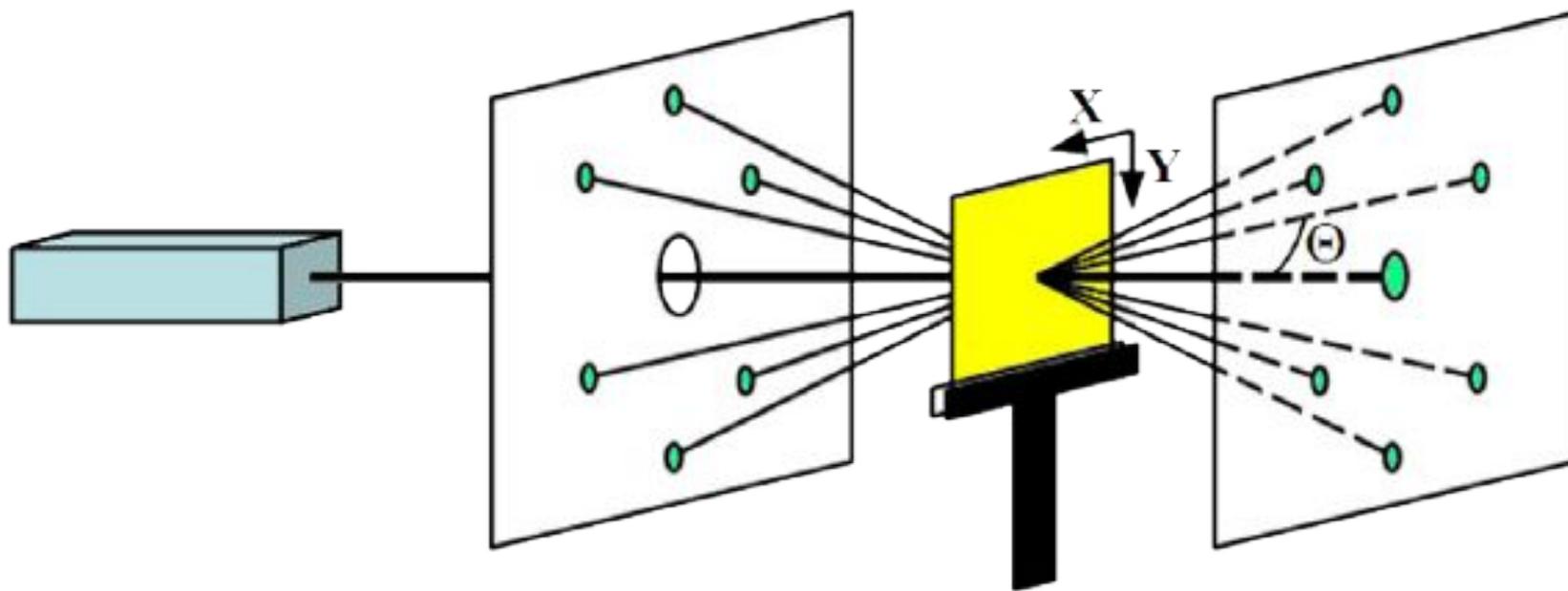
# Дифракция лазерного излучения на одномерной дифракционной решетке (прозрачная решетка)





$$d [\sin \theta + \sin \Theta] = k \lambda$$

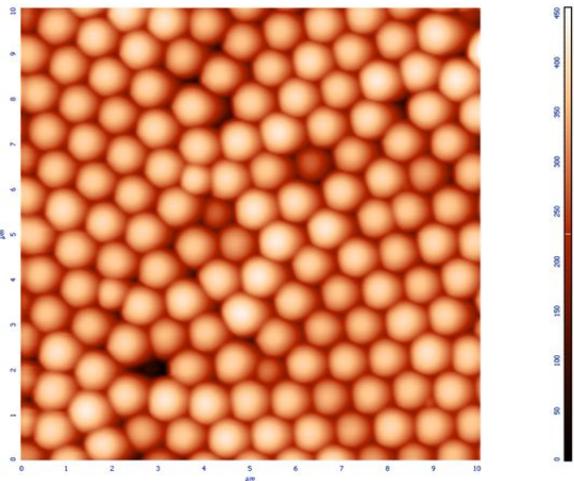
$$d = a \frac{\sqrt{3}}{2}$$



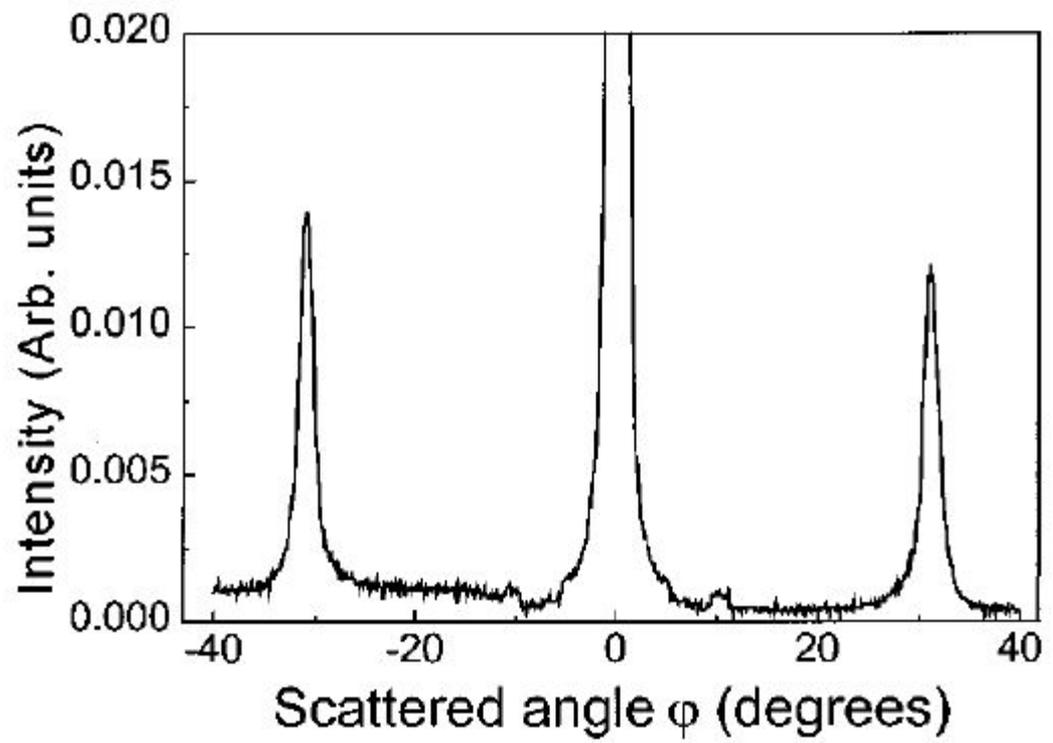
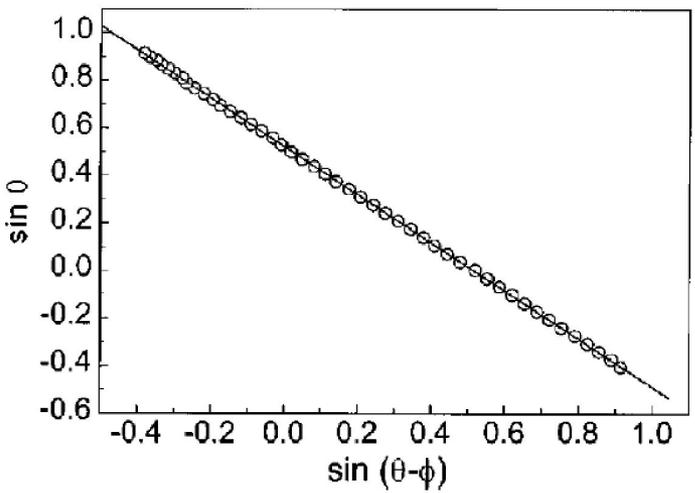
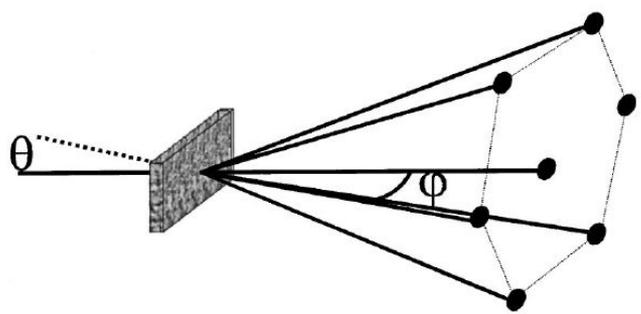
$$d \sin \Theta = k \lambda$$



## Измерение периода ФК дифракционным методом

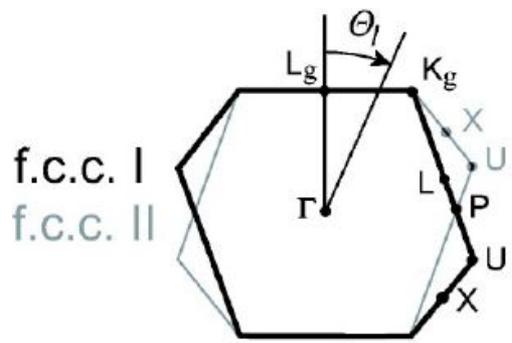
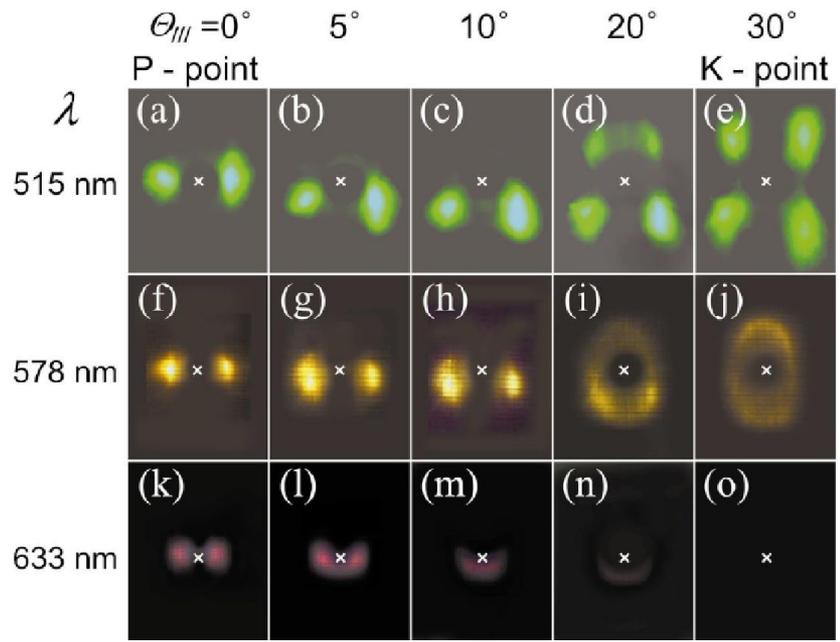
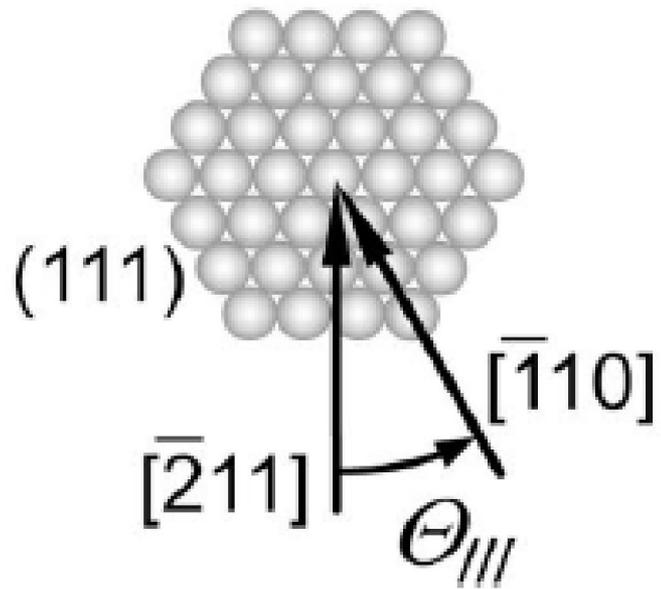


Длина волны лазера 532 нм. Период  $d = 728 \pm 40$  нм, средний диаметр частиц  $D = 841 \pm 46$  нм (согласно АСМ,  $D = 850 \pm 40$  нм)



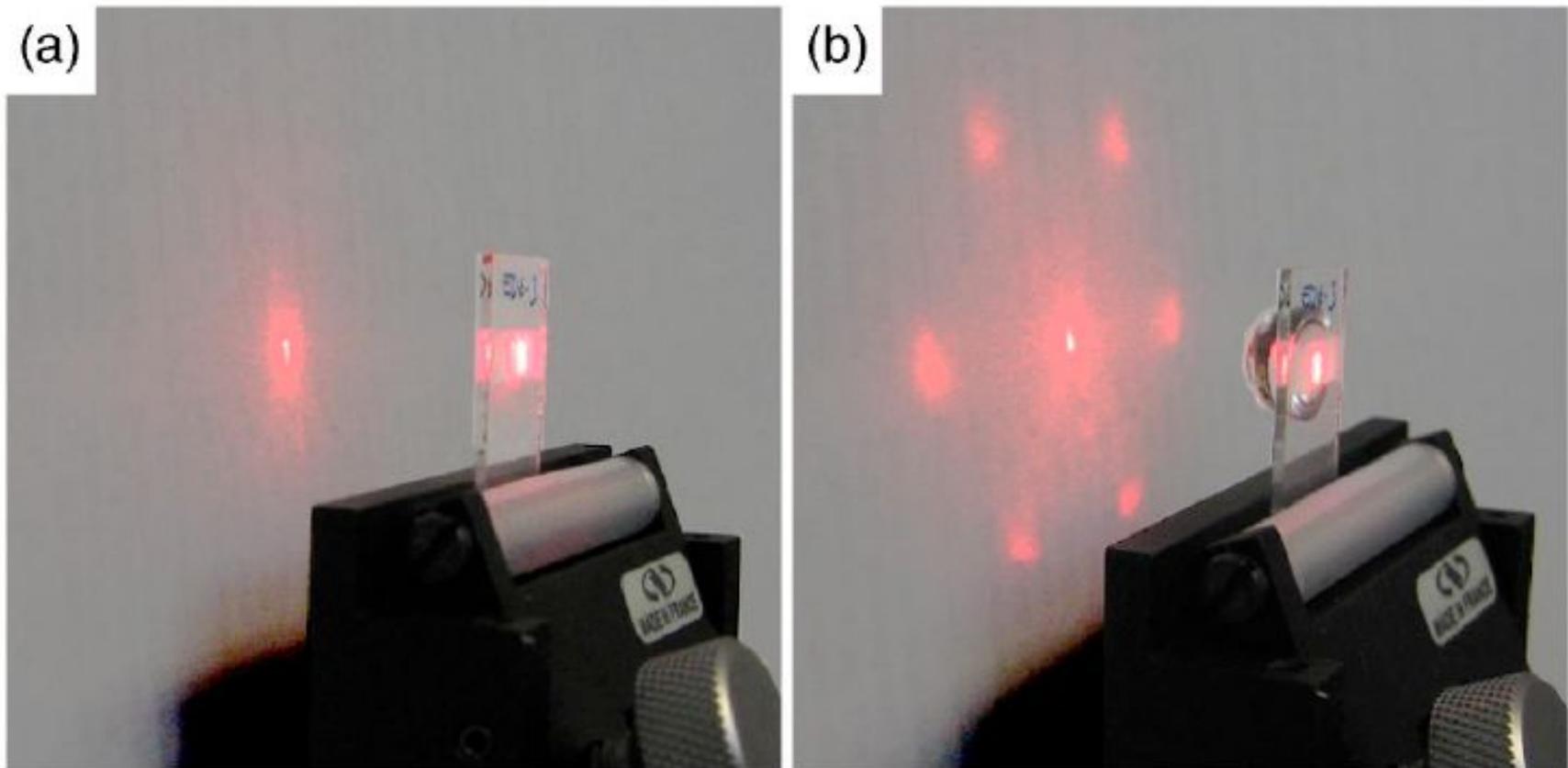
Phys. Rev. E, **61**, 2929 (2000)



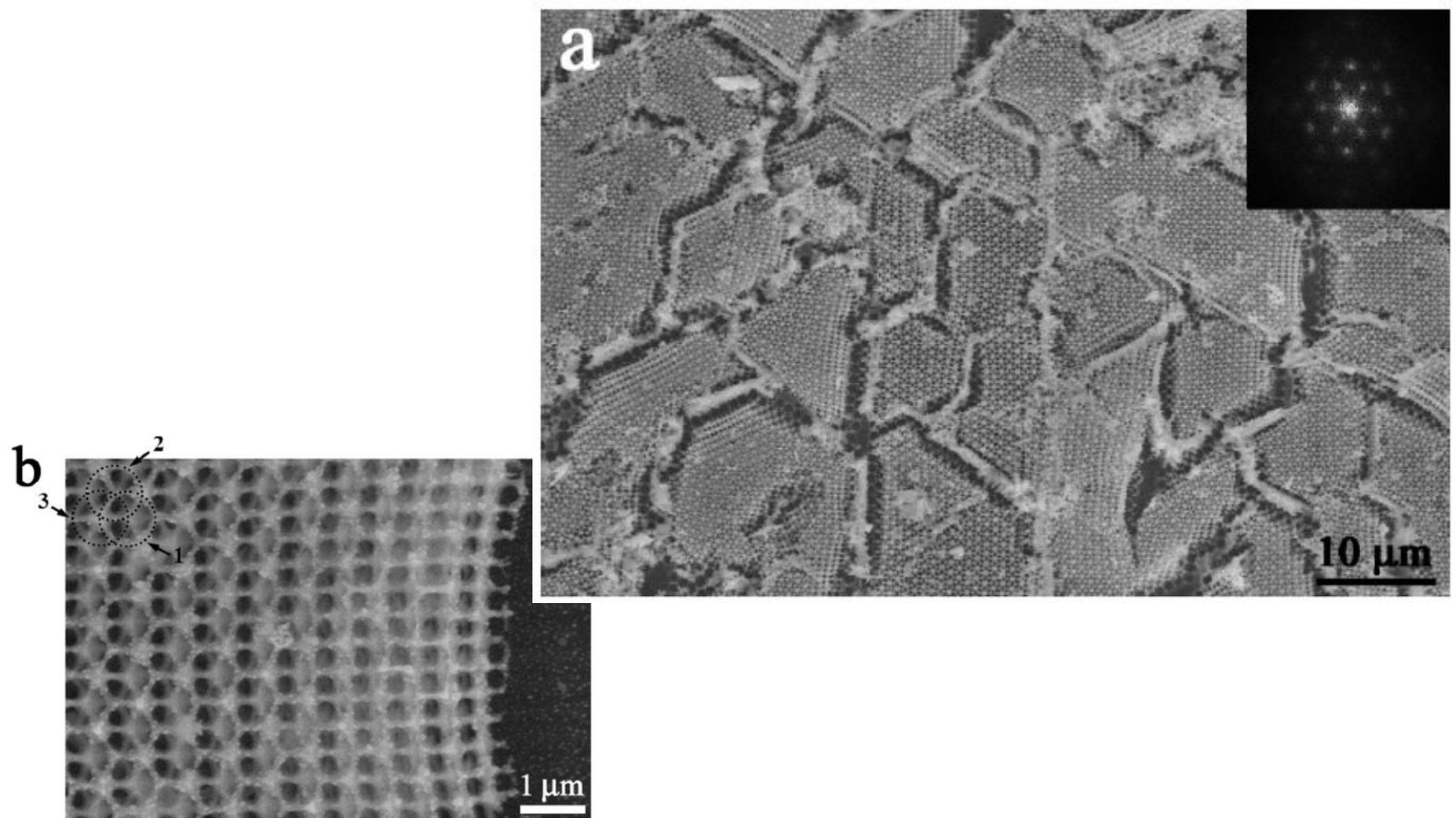


f.c.c. I – ABCABCABC  
 f.c.c. II – ACBACBACB

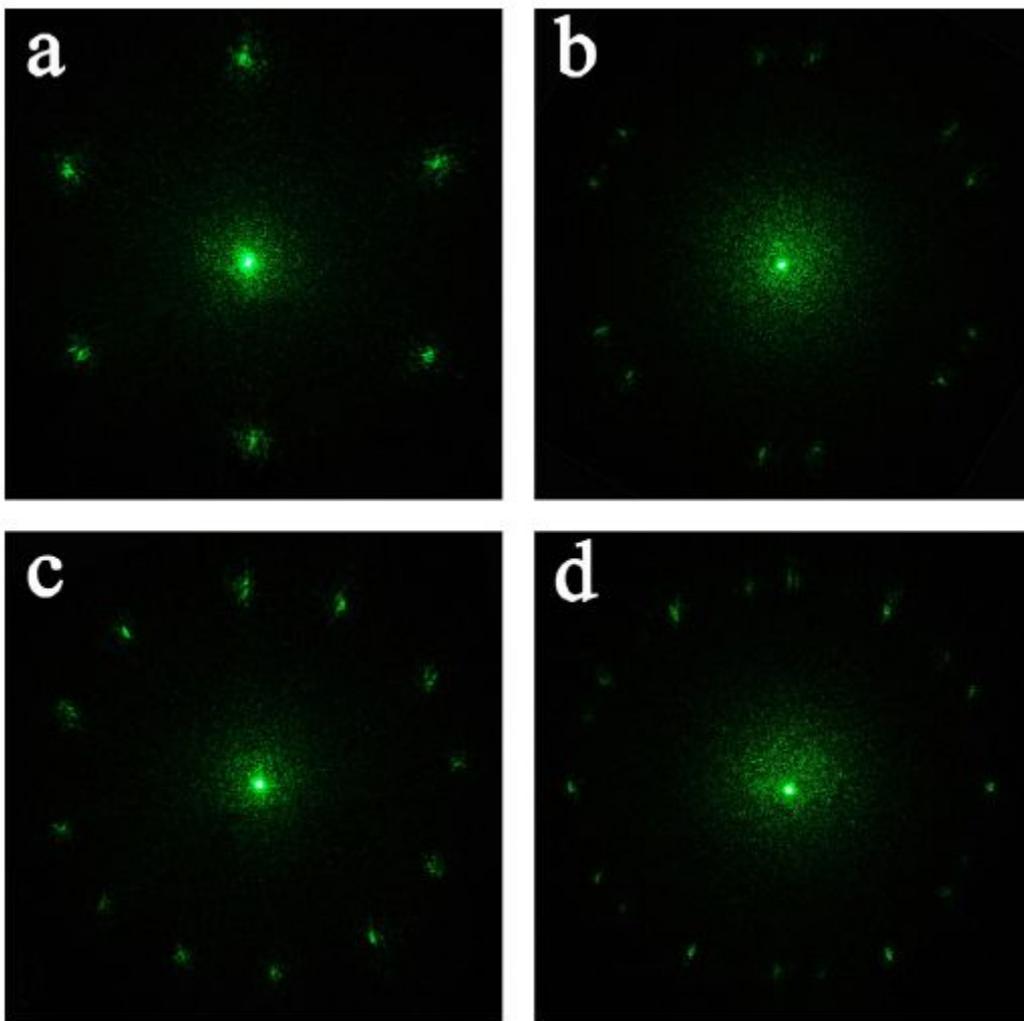
Phys. Rev. B, **70**, 113104



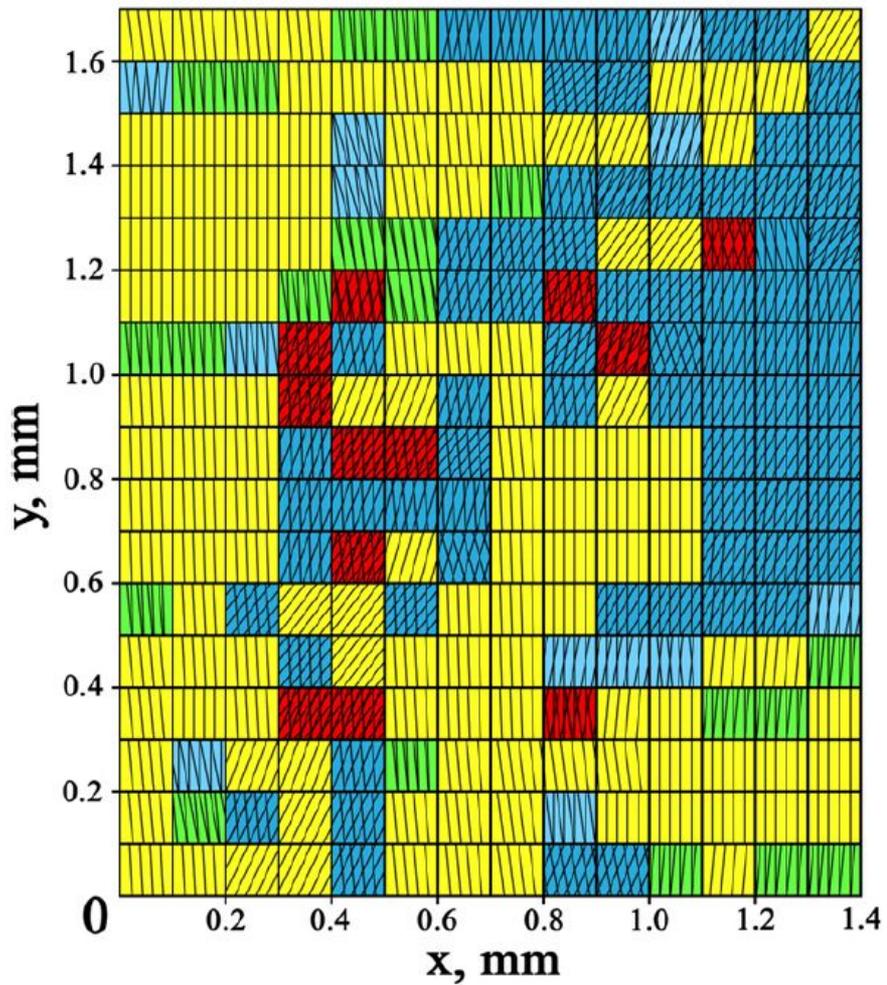
Phys. Rev. B, **71**, 195112



Phys. Lett. A, **366**, 516



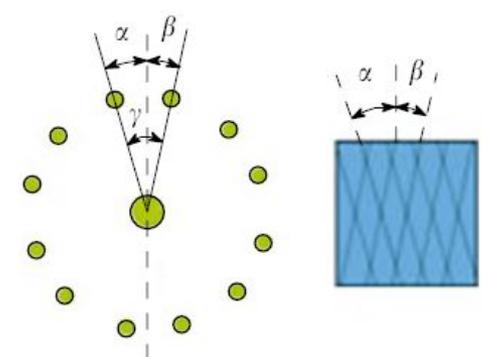
Phys. Lett. A, **366**, 516



Цвет ячеек

-  Один домен
-  Два домена  $\gamma \leq 5^\circ$
-   $5^\circ < \gamma \leq 10^\circ$
-   $\gamma > 10^\circ$
-  Три домена

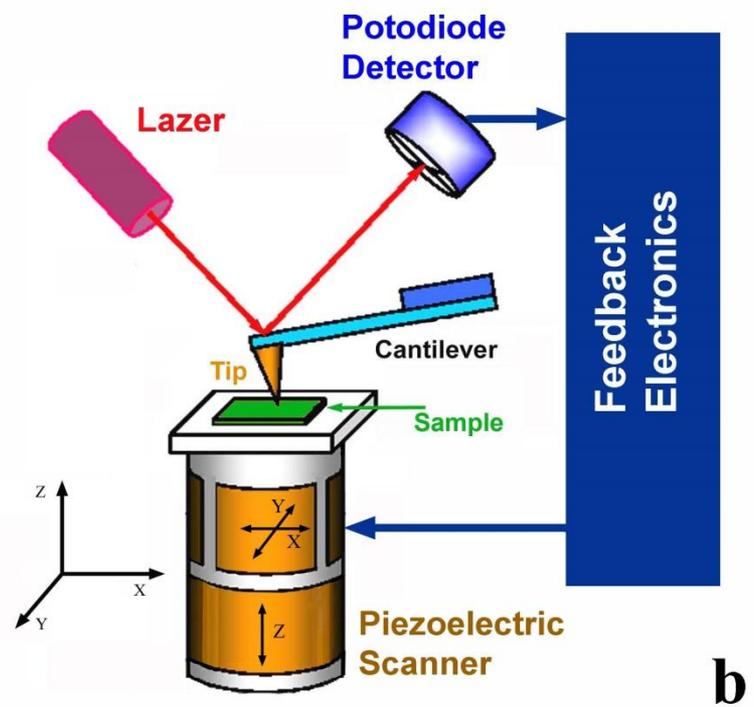
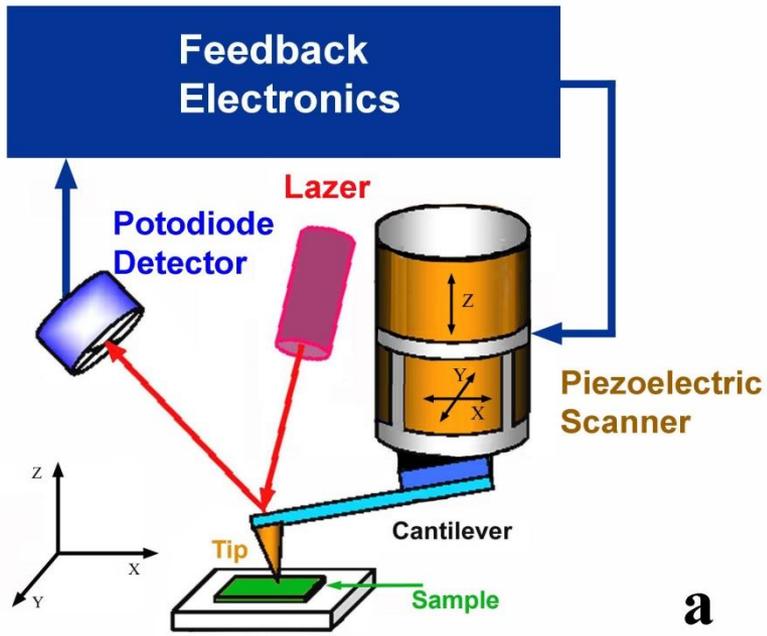
Наклон линий



Phys. Lett. A, **366**, 516

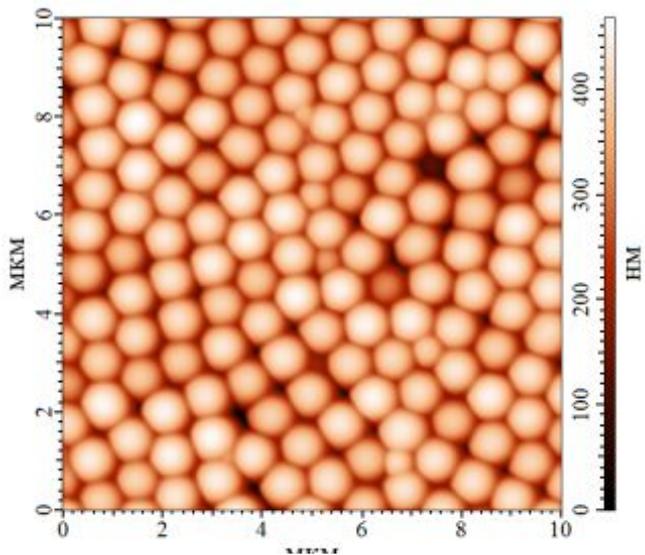


# АСМ фотонных кристаллов

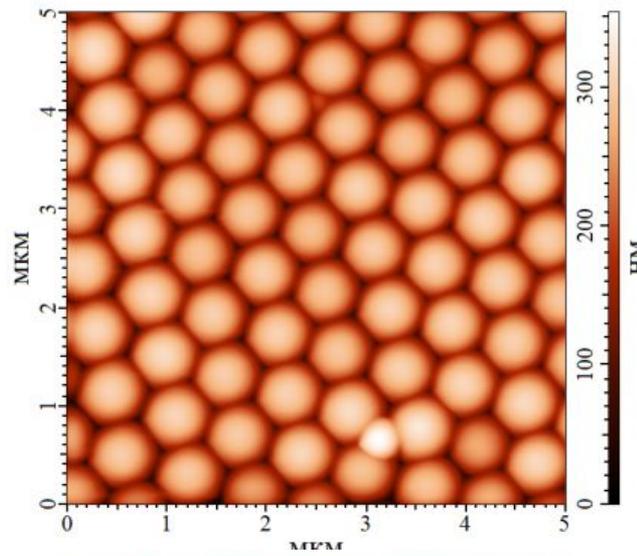




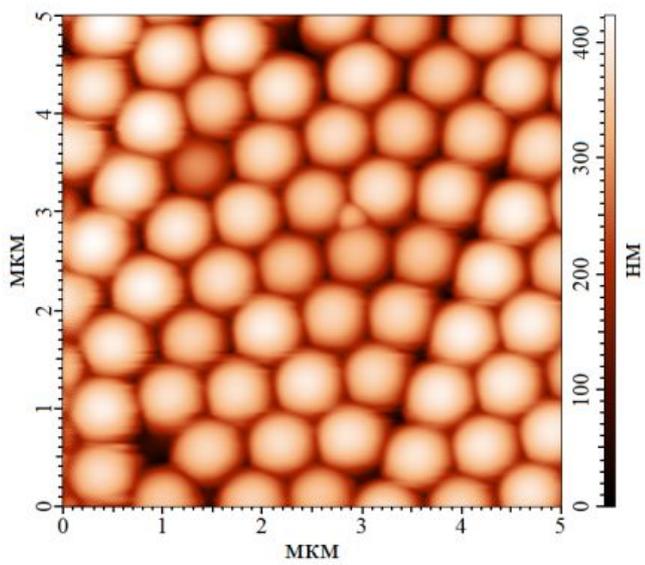
860±50 HM



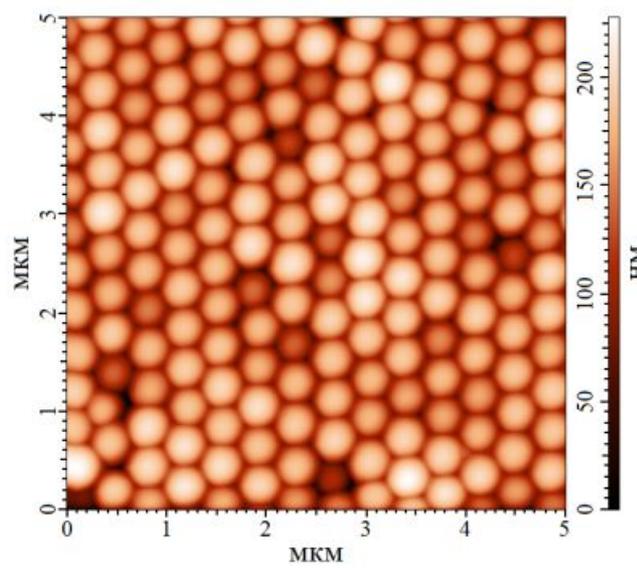
512±32 HM

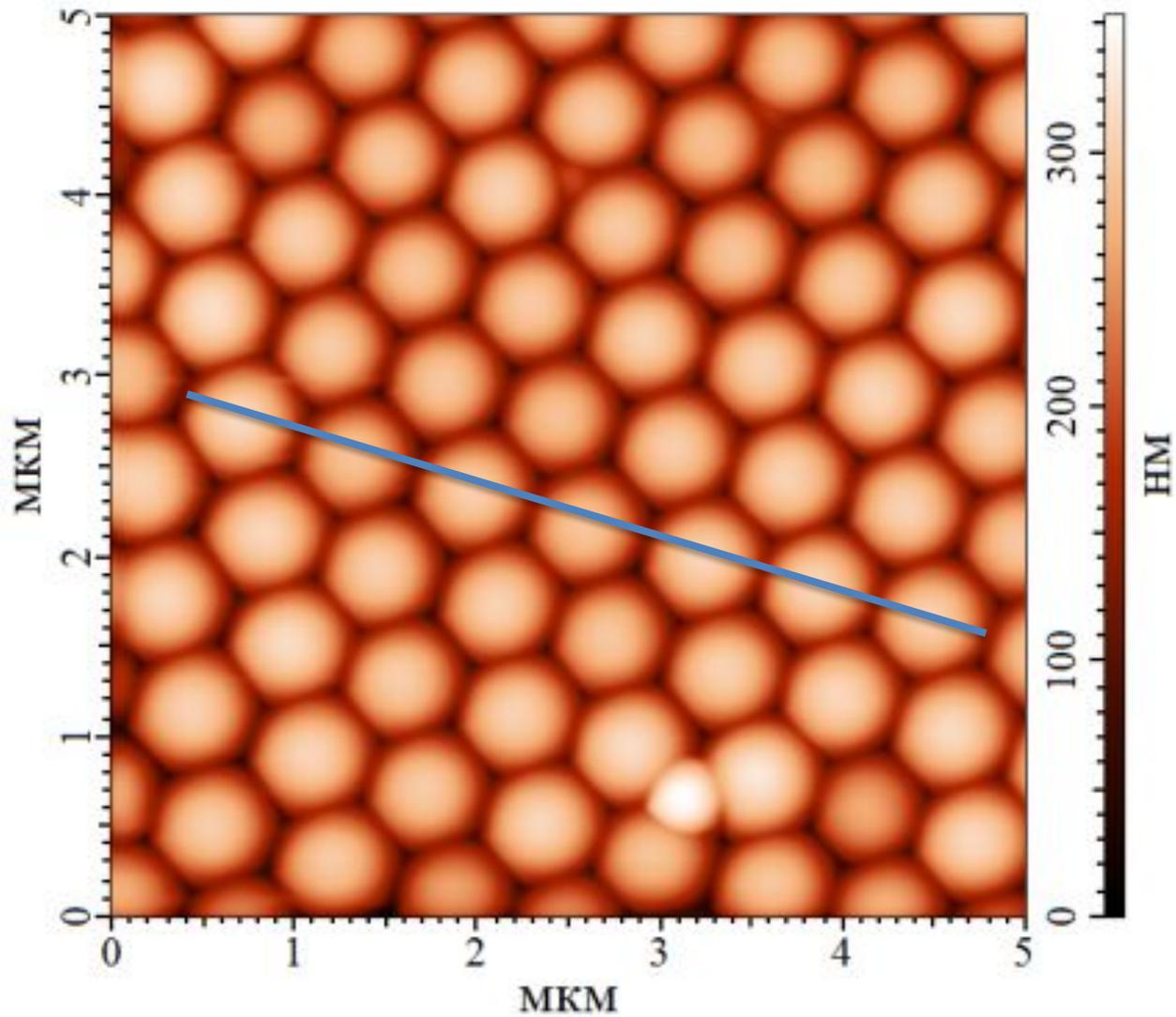


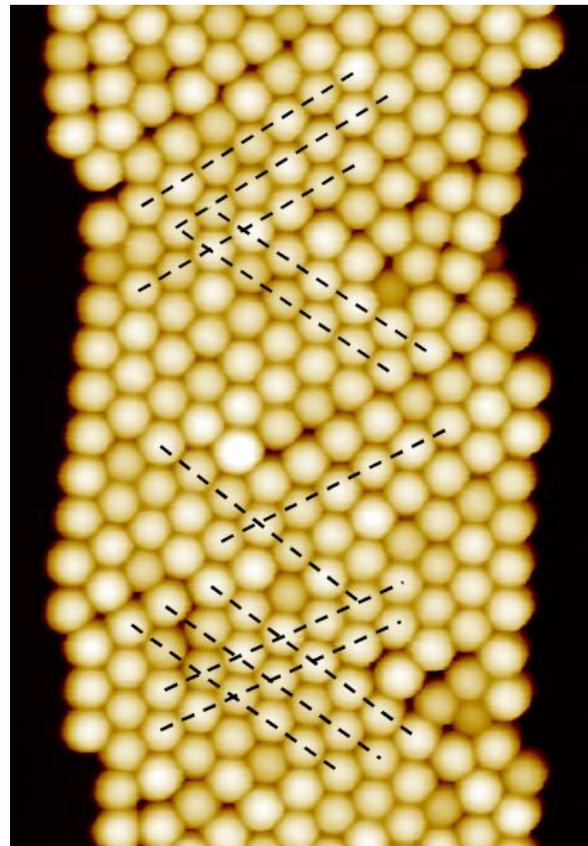
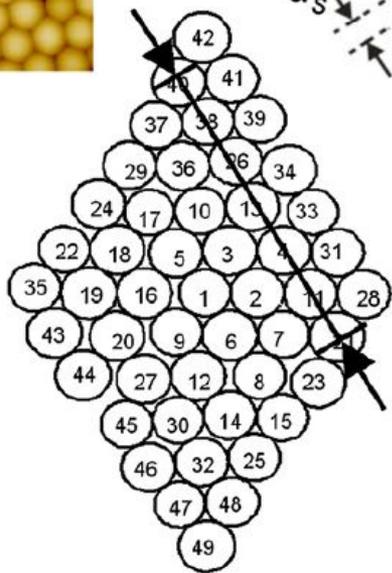
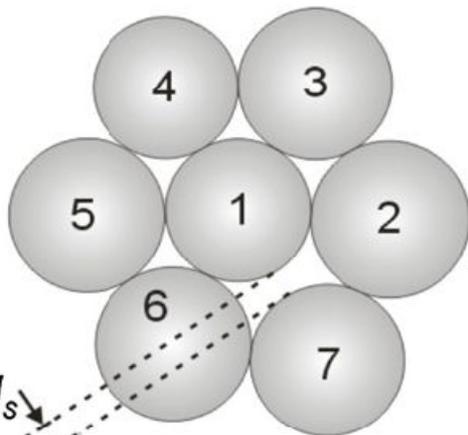
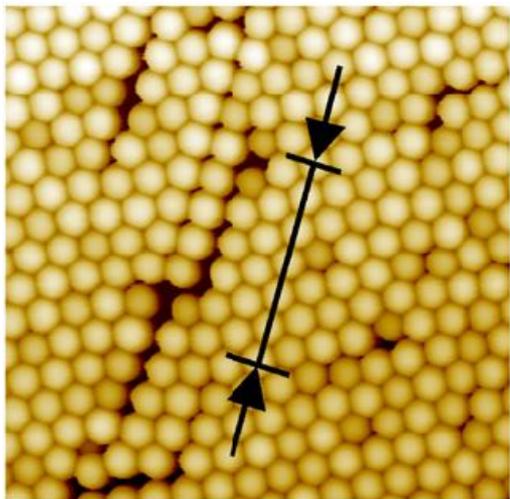
595±45 HM



346±16 HM

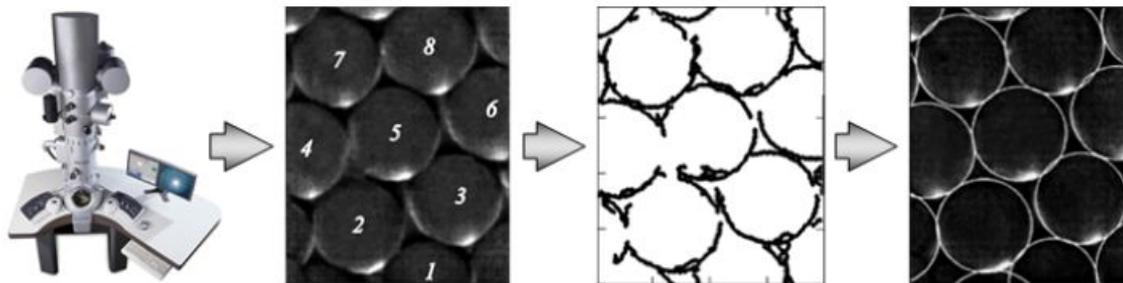








# Алгоритм, основанный на поиске границ и преобразовании Хафа (Hough Transform)



Исходное изображение



Определение границ объектов



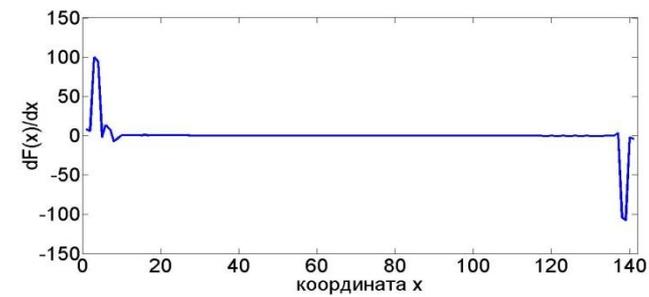
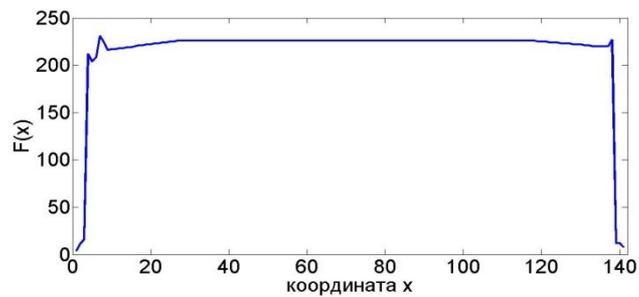
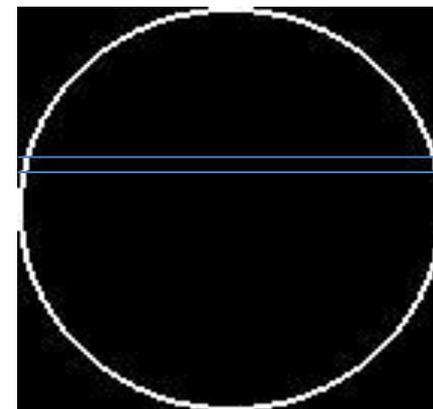
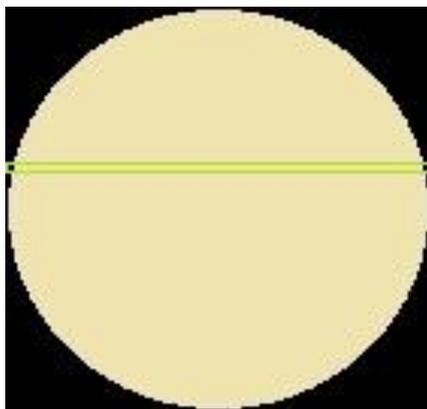
Поиск окружностей



Определение центров



Определение радиусов



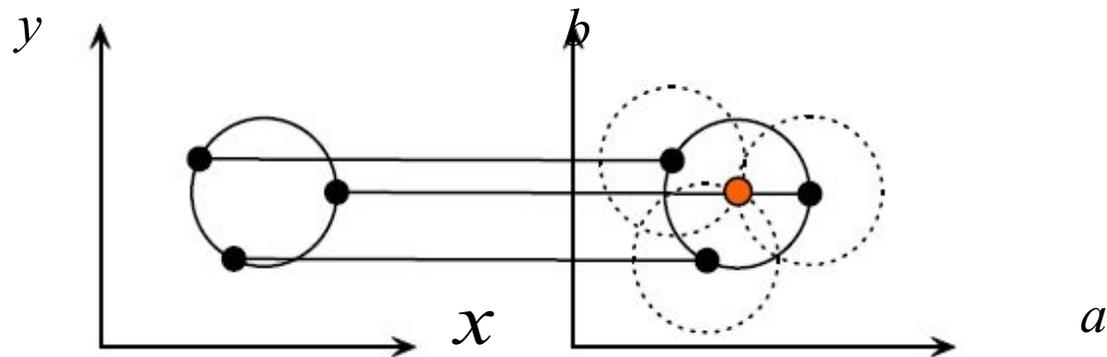


Обобщенное преобразование Хафа – поиск на изображении фигур различных геометрических форм и размеров.

Наша задача – поиск окружностей с неизвестными центрами и радиусами

$$(x-a)^2 + (y-b)^2 = R^2$$

R  
фиксирован



Пространство  $(x, y)$

Пространство  $(a, b)$

$$(x_i - a)^2 + (y_i - b)^2 = R_{fix}^2$$

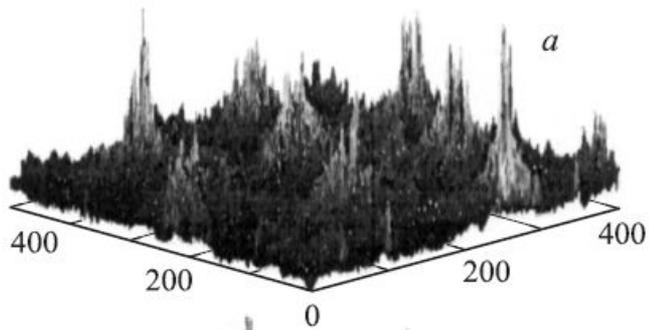
$$(a_i - x)^2 + (b_i - y)^2 = R_{fix}^2$$



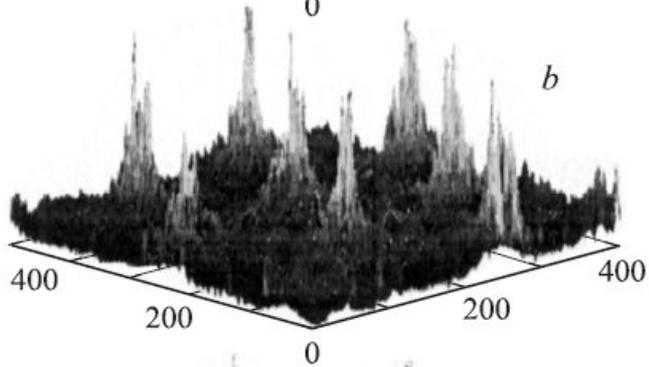
Точки окружностей в  $(x, y)$  – центры окружностей в  $(a, b)$ , и наоборот



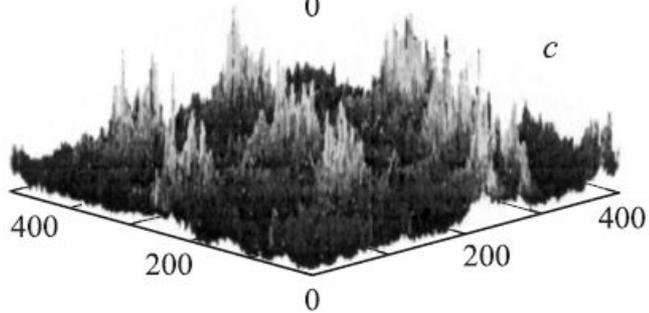
$$(x-a)^2 + (y-b)^2 = R^2$$



$$R = 75$$



$$R = 88$$

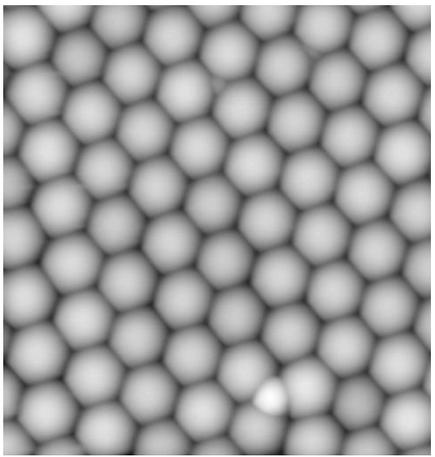


$$R = 99$$

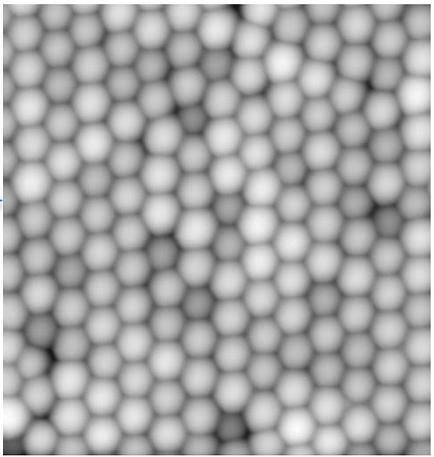
**ΦΤΤ 50 (2008) 1230**



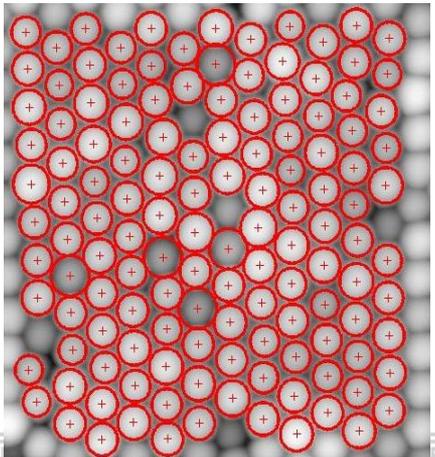
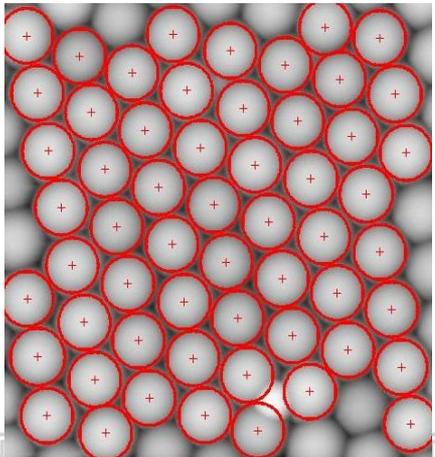
Этанол: 100 (мл)  
Вода: 10 (мл)  
Аммиак: 11,3 (мл)  
ТЭОС: 4,6 (мл)

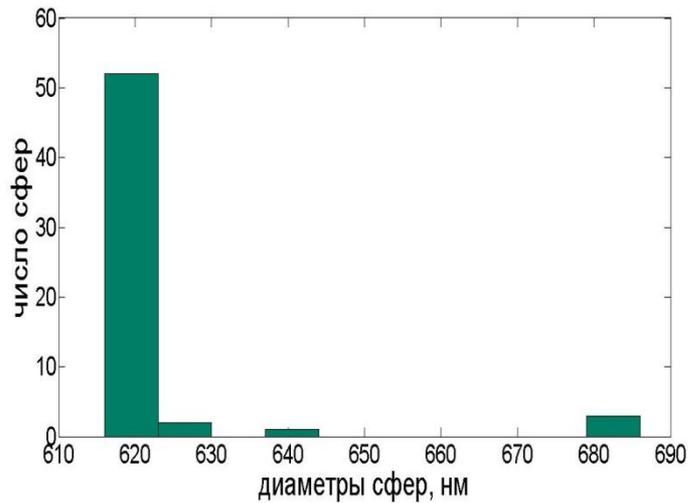


Этанол: 100 (мл)  
Вода: 20 (мл)  
Аммиак: 11,3 (мл)  
ТЭОС: 4,6 (мл)



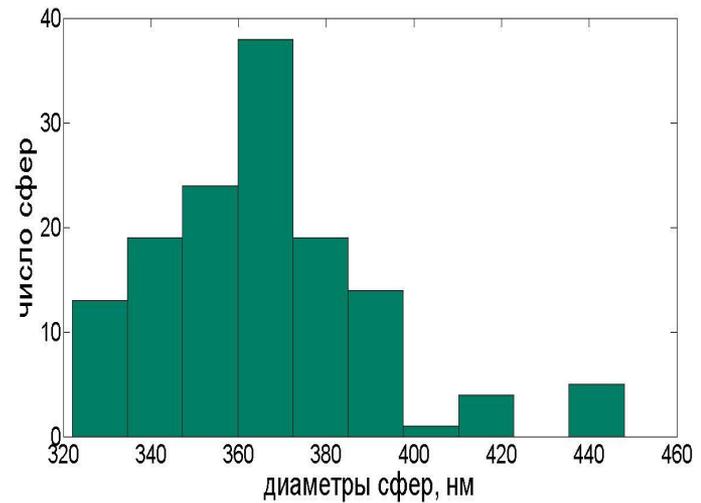
### Определение окружностей





Гистограмма разброса по  
размерам для первого ФК

Среднее значение диаметра =  
 $619.8 \pm 2$  нм  
Разброс диаметров по  
полуширине = 6 %

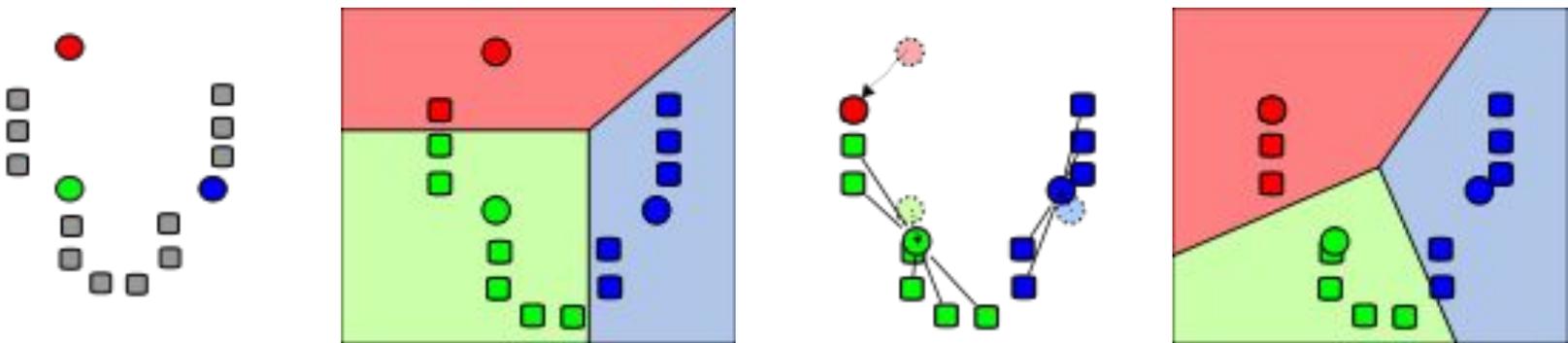


Гистограмма разброса по  
размерам для второго ФК

Среднее значение диаметра =  
 $363.5 \pm 2.4$  нм  
Разброс диаметров по  
полуширине = 18 %

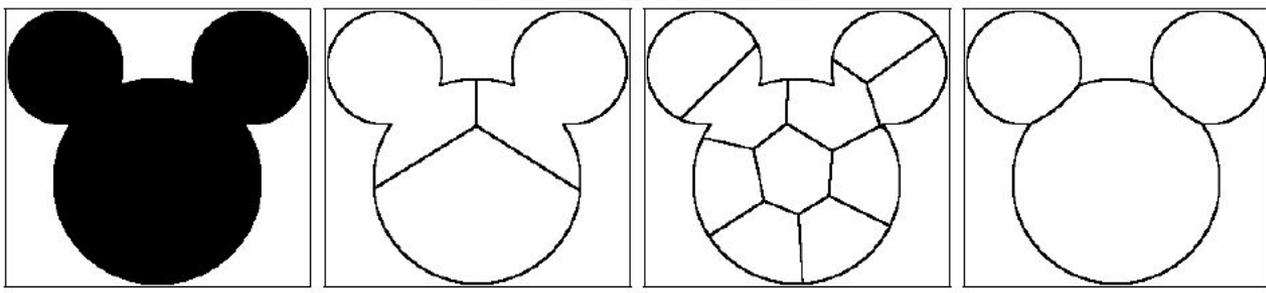
# Методы кластеризации: метод k-средних

$$V = \sum_{i=1}^k \sum_{x_j \in S_i} (x_j - \mu_i)^2$$

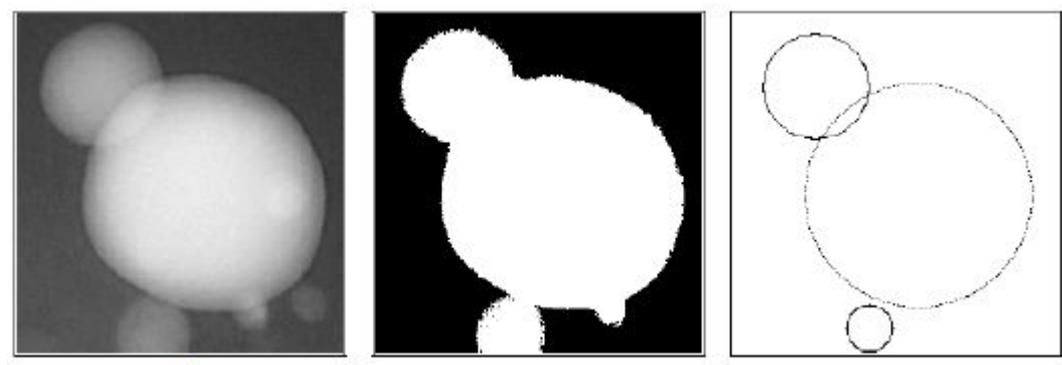




# Методы кластеризации: метод перекрестной энтропии для круговых объектов



(a) Mouse-like set. (b) k-means with  $k = 3$ . (c) k-means with  $k = 10$ . (d) Spherical CEC.

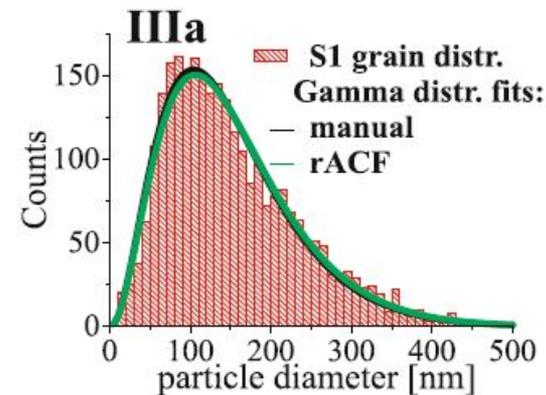
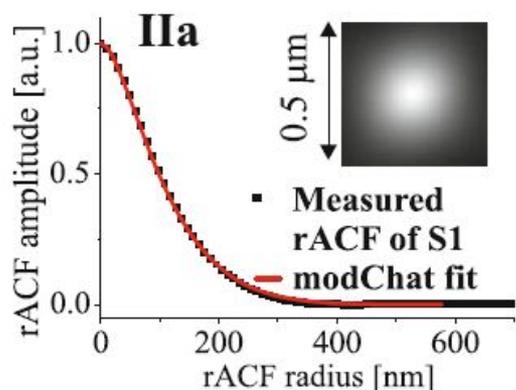
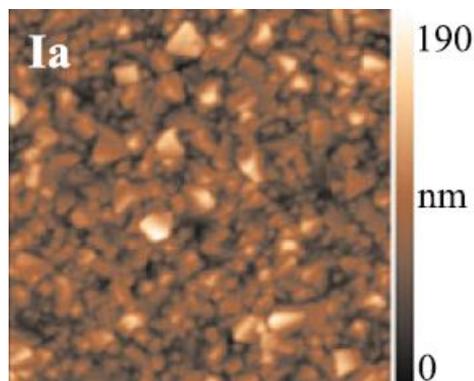


<http://arxiv.org/pdf/1210.5594.pdf>



# Алгоритм, основанный на анализе автокорреляционной функции

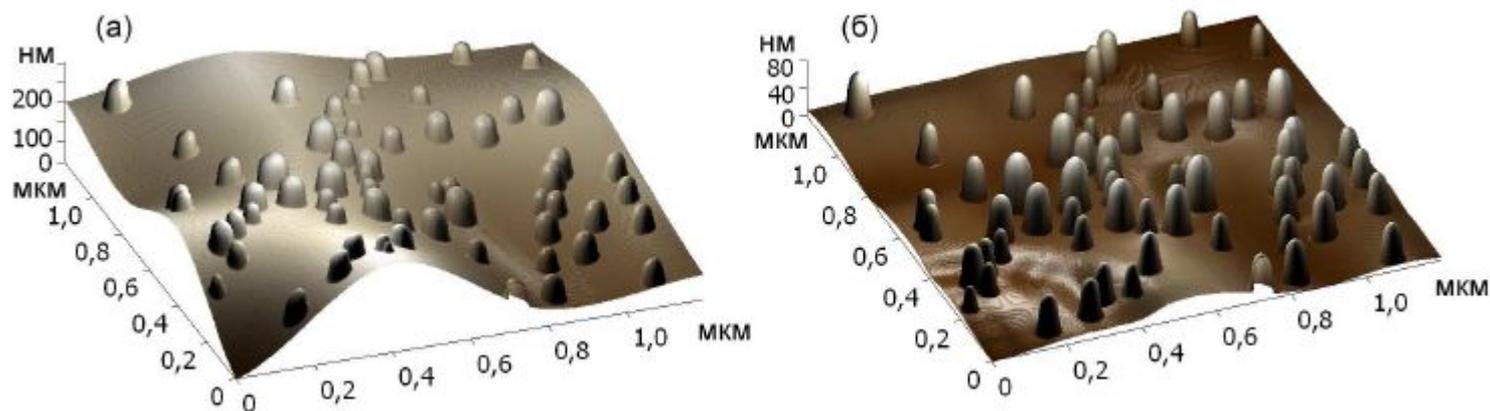
$$G(\Delta x, \Delta y) = \langle h(x, y) \cdot h(x + \Delta x, y + \Delta y) \rangle$$
$$= \frac{1}{S} \int_0^S h(x, y) \cdot h(x + \Delta x, y + \Delta y) dx dy$$





# Сегментация изображений с помощью алгоритма «водораздела»

## I этап

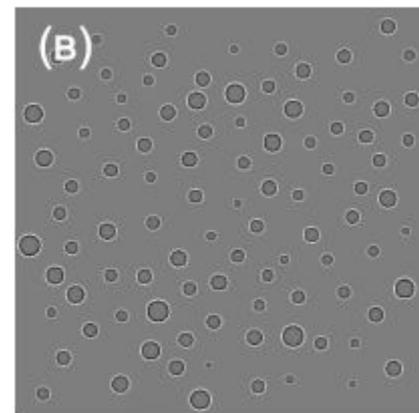
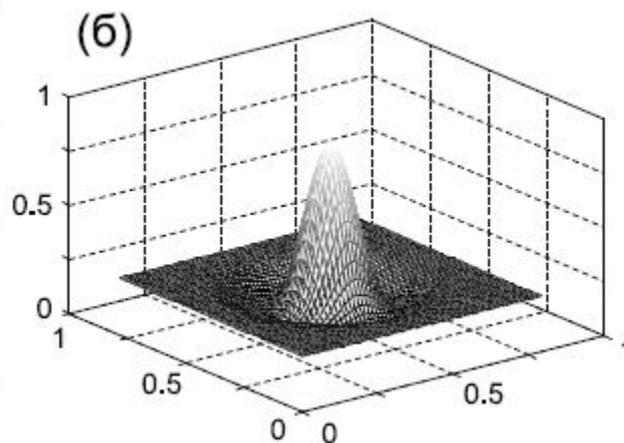
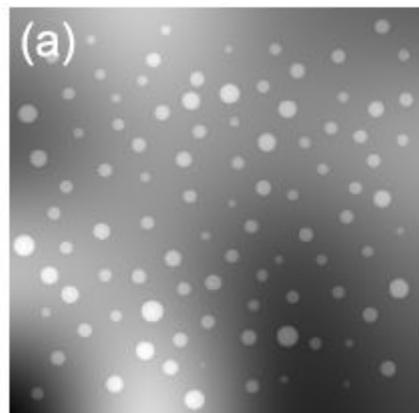


*Surf. Interface Anal.* 2006; **38**: 679–681



# Сегментация изображений с помощью алгоритма «водораздела»

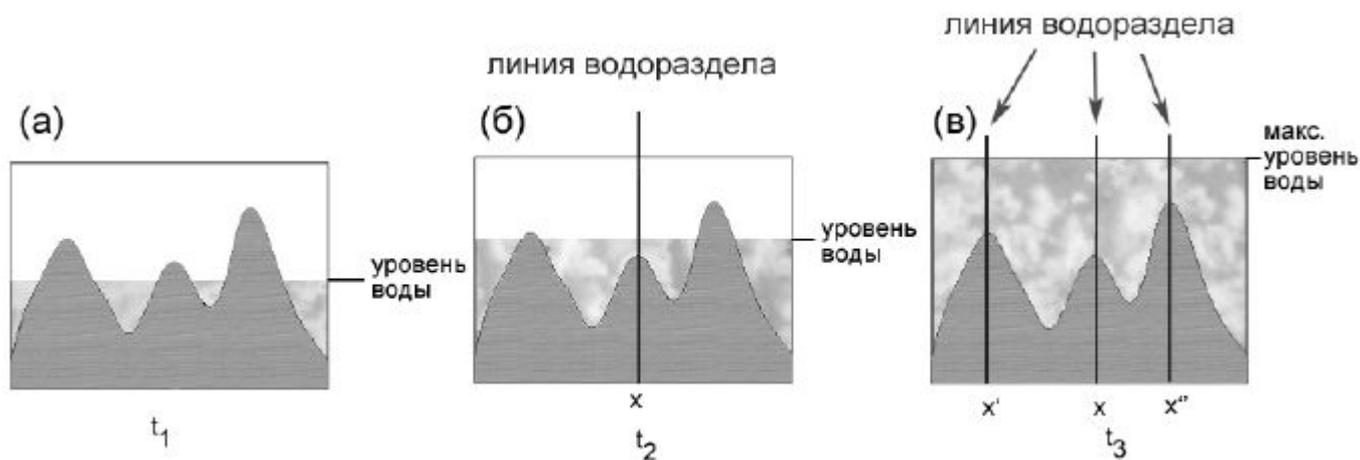
## II этап





# Сегментация изображений с помощью алгоритма «водораздела»

## III этап





# Определение частиц с помощью аппроксимации эллипсоидами

Эллипсоид – поверхность второго порядка, каноническое уравнение:

$$\frac{X'^2}{a^2} + \frac{Y'^2}{b^2} + \frac{Z'^2}{c^2} = 1$$

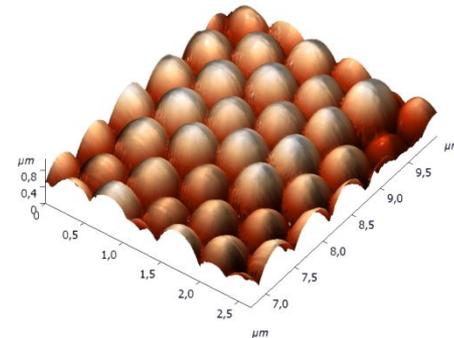
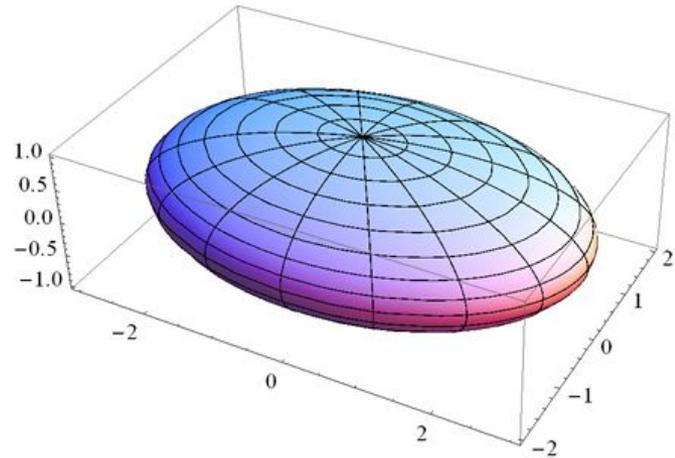
Общее уравнение поверхности второго порядка (в том числе для эллипсоида с произвольной ориентацией в пространстве):

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz + b_1x + b_2y + b_3z + c = 0$$

Задача аппроксимации:

Дано: массивы  $\{x_i\}$ ,  $\{y_i\}$ ,  $\{z_i\}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ )

Найти:  $a_{11}$ ,  $a_{22}$ ,  $a_{33}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{13}$ ,  $a_{23}$ ,  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$ ,  $c$





## Решение задачи аппроксимации

Сведем задачу по аппроксимации поверхностью второго порядка к задаче по **линейной аппроксимации** точек 9-мерного пространства

Положим  $c = 1$ , введем новые обозначения. Уравнение примет следующий вид:

$$A_1X_1 + A_2X_2 + \dots + A_9X_9 + 1 = 0,$$

где

$$A_1 = a_{11}, \quad A_2 = a_{22}, \quad A_3 = a_{33},$$

$$X_1 = x^2, \quad X_2 = y^2, \quad X_3 = z^2,$$

$$A_4 = a_{12}, \quad A_5 = a_{13}, \quad A_6 = a_{23},$$

$$X_4 = 2xy, \quad X_5 = 2xz, \quad X_6 = 2yz,$$

$$A_7 = b_1, \quad A_8 = b_2, \quad A_9 = b_3,$$

$$X_7 = x, \quad X_8 = y, \quad X_9 = z$$

Преобразуем исходные данные  $\{x_i\}$ ,  $\{y_i\}$ ,  $\{z_i\}$  в  $\{X_{1i}\}$ ,  $\{X_{2i}\}$ , ...,  $\{X_{9i}\}$



## Решение задачи аппроксимации

Решаем методом наименьших квадратов, т.е. ищем минимум следующей функции:

$$F(A_1, \dots, A_9) = \sum_{i=1}^N (A_1 X_{1i} + \dots + A_9 X_{9i} + 1)^2$$

Берем производные этой функции по всем параметрам  $A_j$ , приравниваем их нулю, получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{aligned} A_1 \sum X_{1i}^2 + A_2 \sum X_{2i} X_{1i} + \dots + A_9 \sum X_{9i} X_{1i} &= -\sum X_{1i} \\ A_1 \sum X_{1i} X_{2i} + A_2 \sum X_{2i}^2 + \dots + A_9 \sum X_{9i} X_{2i} &= -\sum X_{2i} \\ &\dots \\ A_1 \sum X_{1i} X_{9i} + A_2 \sum X_{2i} X_{9i} + \dots + A_9 \sum X_{9i}^2 &= -\sum X_{9i} \end{aligned}$$

Решая ее, находим  $A_1, \dots, A_9$ , откуда определяем  $a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{12}, a_{13}, a_{23}, b_1, b_2, b_3$

В итоге нам стало известно уравнение поверхности, которая аппроксимирует исходный массив точек:

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz + b_1x + b_2y + b_3z + 1 = 0$$



## Получение параметров эллипсоида

Остается привести уравнение поверхности второго порядка к каноническому виду.

Переходим в новую систему координат, в которой уравнение второго порядка примет вид:

$$\lambda_1 X'^2 + \lambda_2 Y'^2 + \lambda_3 Z'^2 + b'_1 X' + b'_2 Y' + b'_3 Z' + 1 = 0,$$

которое может быть приведено к уравнению эллипсоида путем выделения полных квадратов:

$$\frac{(X' - X'_0)^2}{a^2} + \frac{(Y' - Y'_0)^2}{b^2} + \frac{(Z' - Z'_0)^2}{c^2} = 1$$

Матрица перехода в новую систему координат состоит из векторов нового базиса, которые **показывают направления осей эллипсоида в пространстве**:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{1x} & e_{2x} & e_{3x} \\ e_{1y} & e_{2y} & e_{3y} \\ e_{1z} & e_{2z} & e_{3z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{bmatrix}$$

Замечание: вместо эллипсоида могут получиться другие поверхности второго порядка



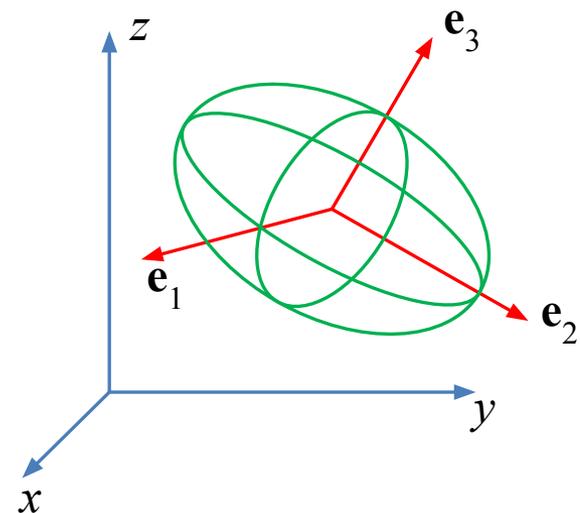
## Получение параметров эллипсоида

Итог:

Было дано: массив точек  $\{x_i\}$ ,  $\{y_i\}$ ,  $\{z_i\}$

В результате аппроксимации получили:

- Три полуоси  $a$ ,  $b$ ,  $c$
- Координаты центра  $x_0$ ,  $y_0$ ,  $z_0$
- Ориентацию эллипсоида в пространстве, т.е. векторы  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$ , которые показывают направления осей



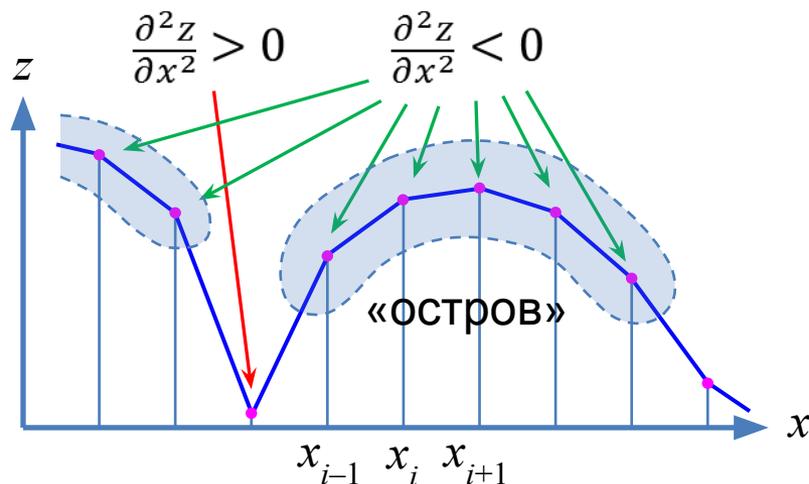
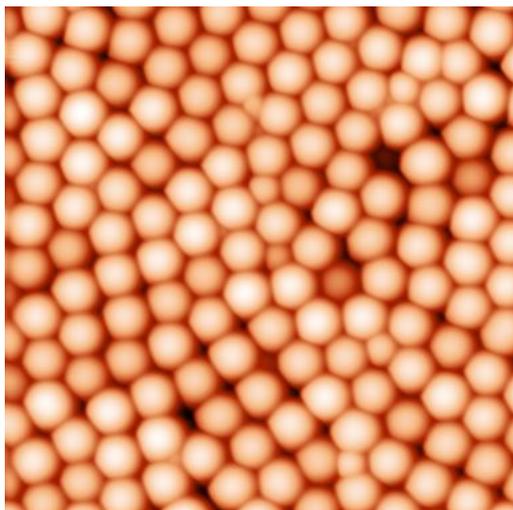
### Преимущества:

- Не требуется задания начальных параметров, в отличие от приближенных методов поиска минимума функции
- Вычисление происходит без итераций, т.е. за один проход → высокая скорость
- Единственность решения



## Выделение частиц из АСМ-изображения

Перед аппроксимацией требуется из всего изображения выделить группы точек («острова»), соответствующие отдельным частицам, затем применить аппроксимацию для каждой группы



Решение: брать из исходного массива только те точки  $x, y, z$ , для которых  $\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} < 0$  и  $\frac{\partial^2 z}{\partial y^2} < 0$  (условие выпуклости). Так как вместо непрерывного случая имеем дискретный набор данных,

то:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \approx z_{i+1,j} - 2z_{i,j} + z_{i-1,j} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} \approx z_{i,j+1} - 2z_{i,j} + z_{i,j-1}$$



## Алгоритм определения параметров частиц по АСМ-изображениям

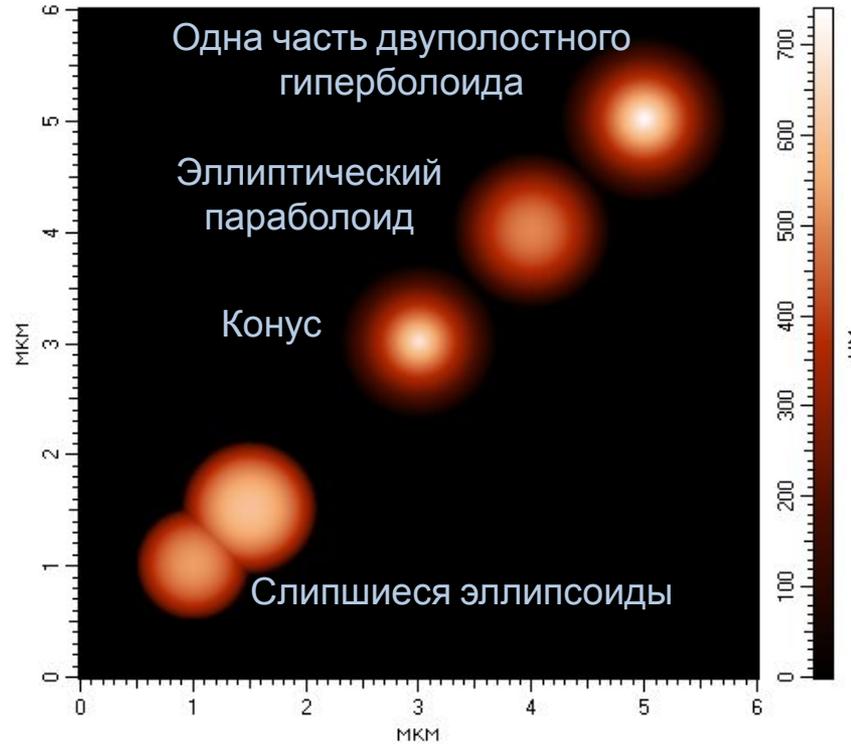
Решение задачи осуществляется по следующей схеме:

1. Получение исходного АСМ-изображения микро- или наночастиц (в виде массива)
2. Разбиение изображения на отдельные «острова»
3. Аппроксимация каждого «острова» поверхностью второго порядка
4. Приведение поверхности второго порядка к каноническому виду
5. Если получился эллипсоид, вывод его параметров

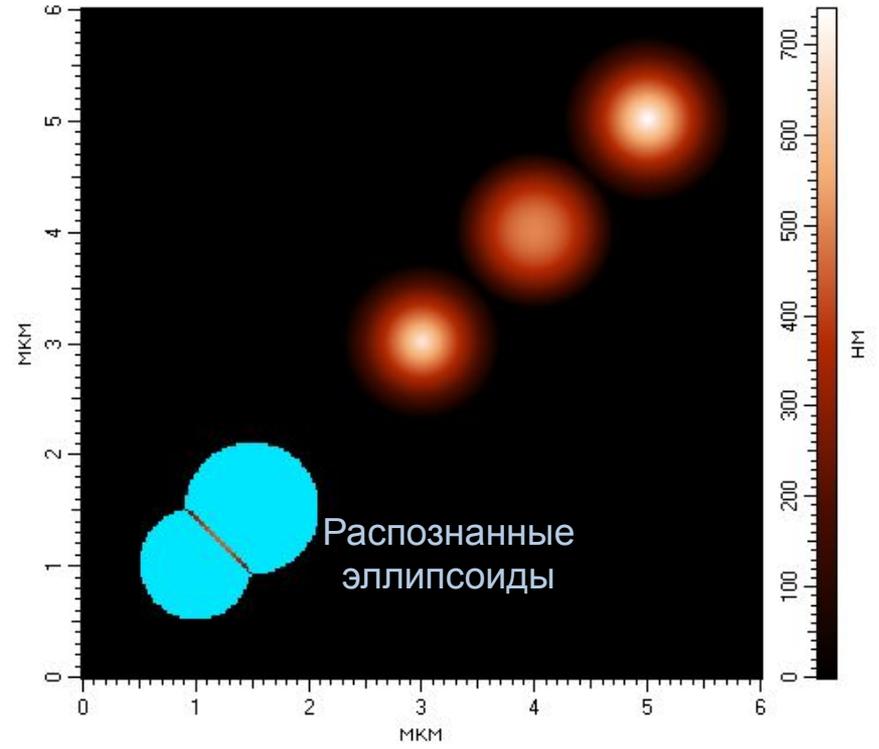


# Проверка алгоритма на смоделированных изображениях

Смоделированное изображение 1



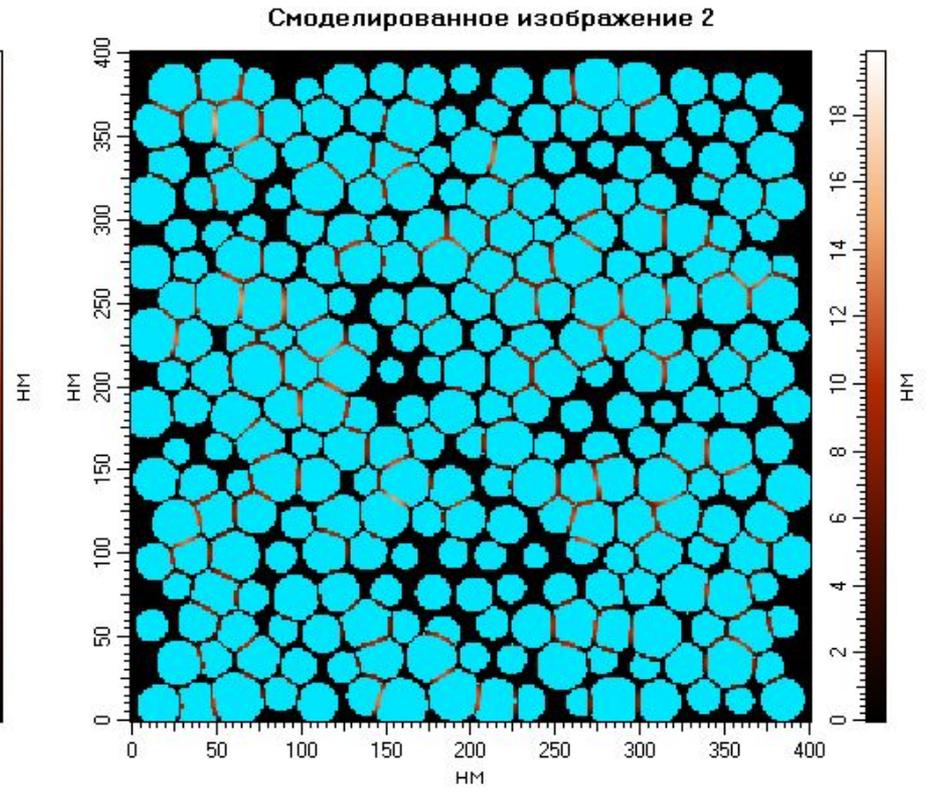
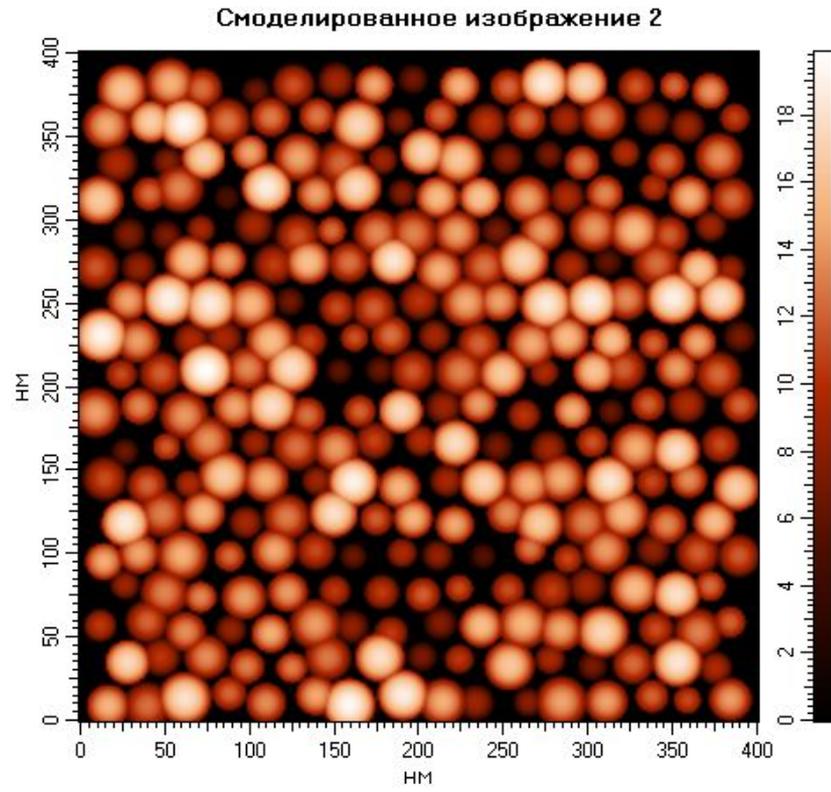
Смоделированное изображение 1



- Голубым цветом выделены те точки, для которых:
1. Выполняется условие выпуклости
  2. Аппроксимация дала именно форму эллипсоида



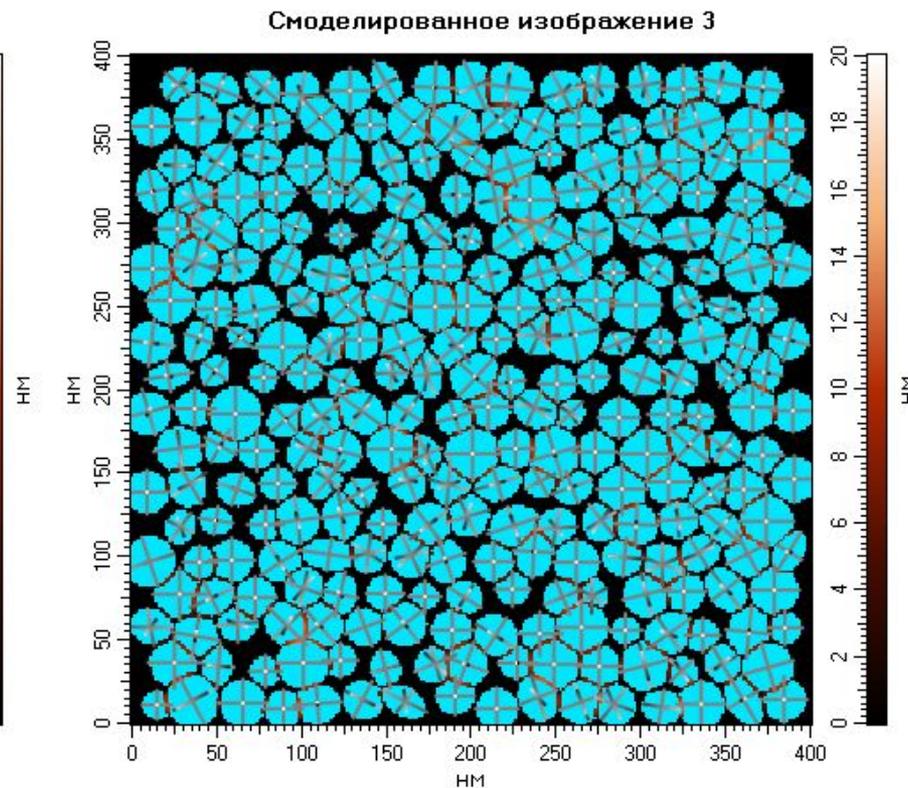
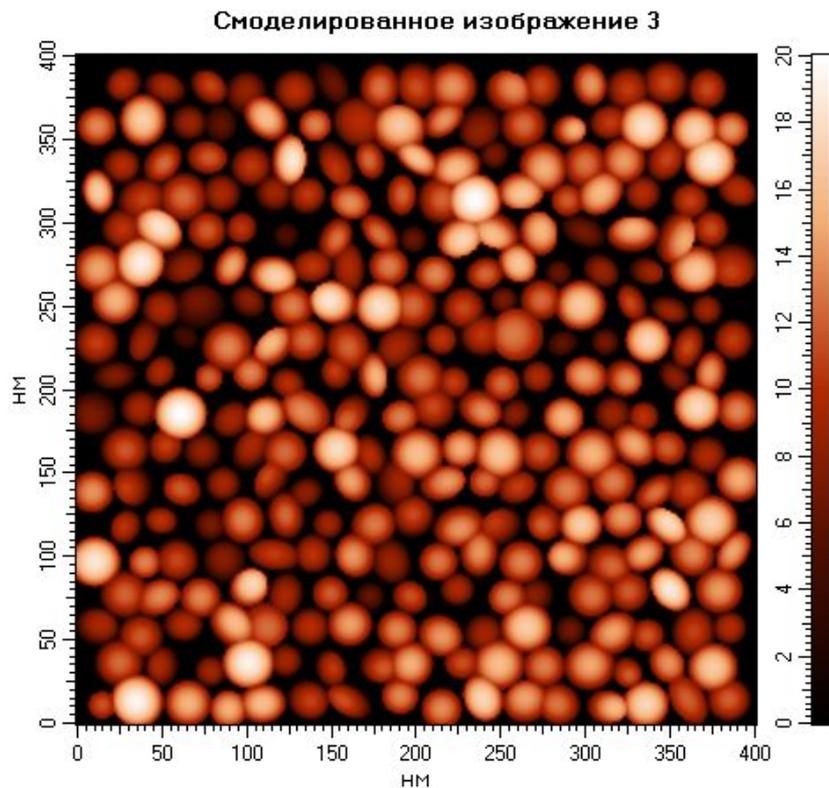
# Проверка алгоритма на смоделированных изображениях



В этой модели только сферы  
Максимальное расхождение измеренных параметров частиц от заданных в модели – в восьмом знаке после запятой (т.е.  $\approx 10^{-8}$  нм)



## Проверка алгоритма на смоделированных изображениях

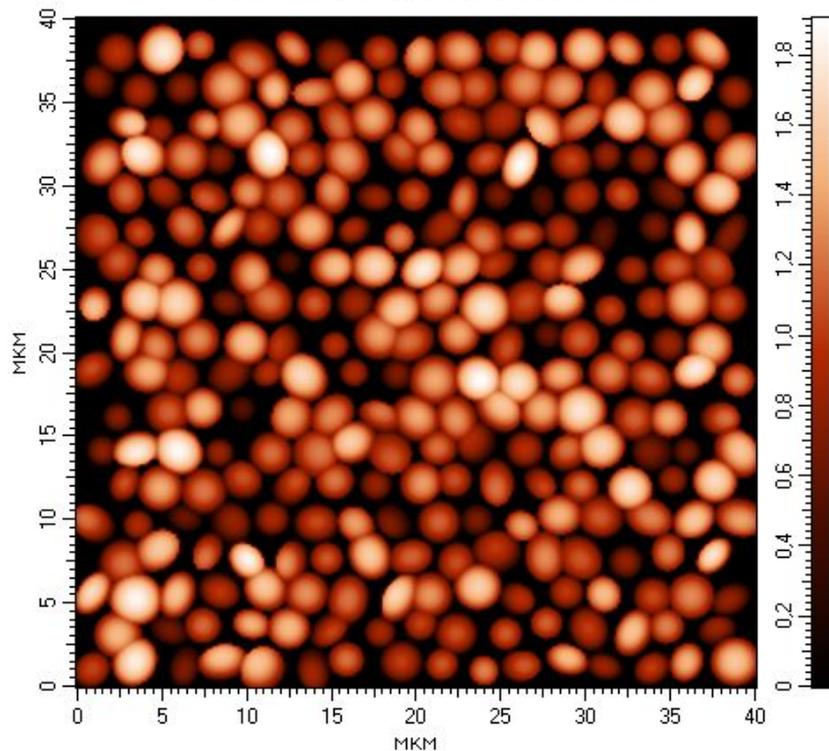


В этой модели присутствуют эллипсоиды, в том числе сферы и сфероиды  
Показаны ориентации осей эллипсоидов  
Точность определения параметров такая же высокая

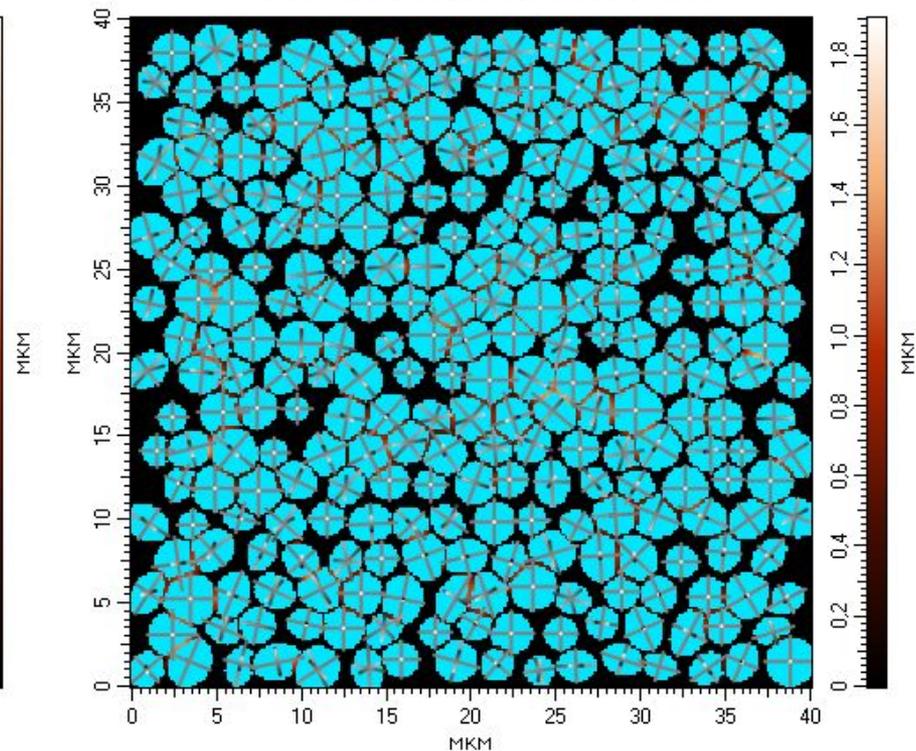


## Проверка алгоритма на смоделированных изображениях

Смоделированное изображение 4



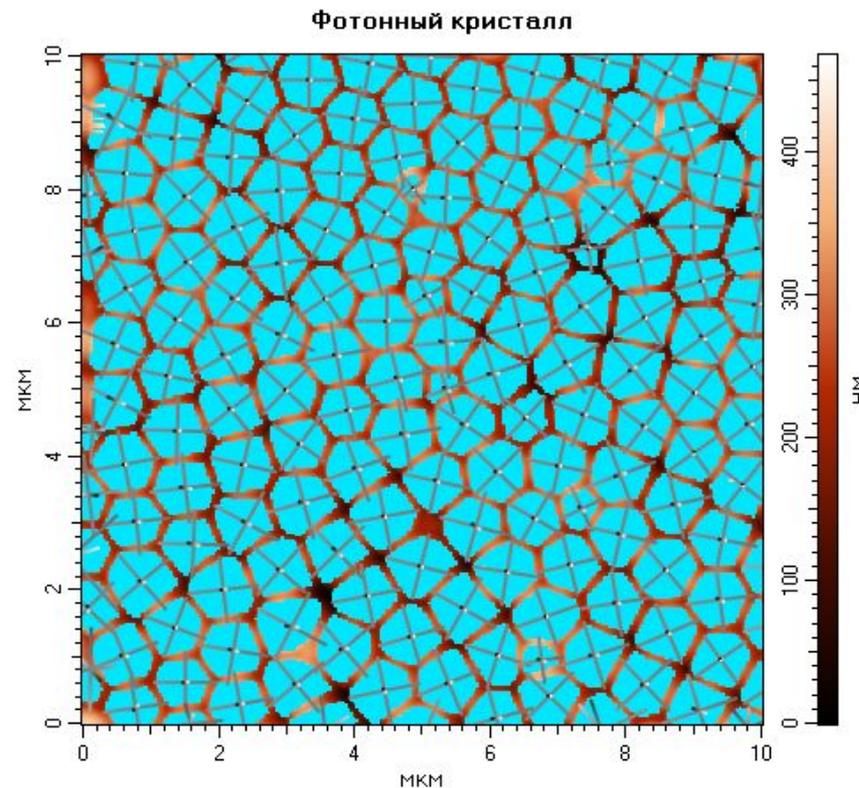
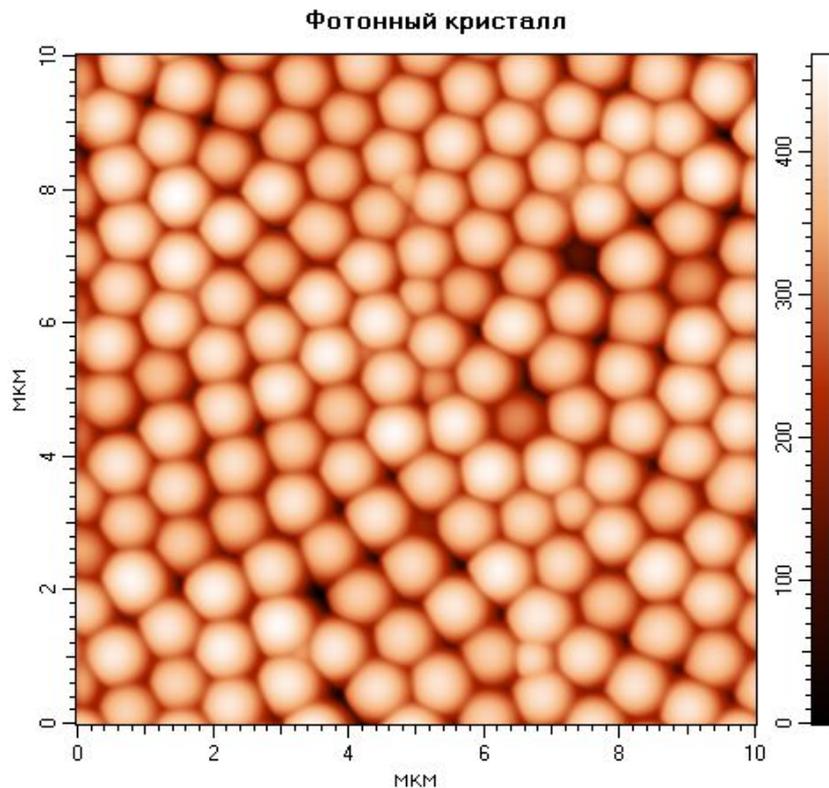
Смоделированное изображение 4



В этой модели средние размеры увеличены в 100 раз  
Показаны ориентации осей эллипсоидов  
Точность определения параметров такая же высокая



# Проверка алгоритма на изображении фотонного кристалла

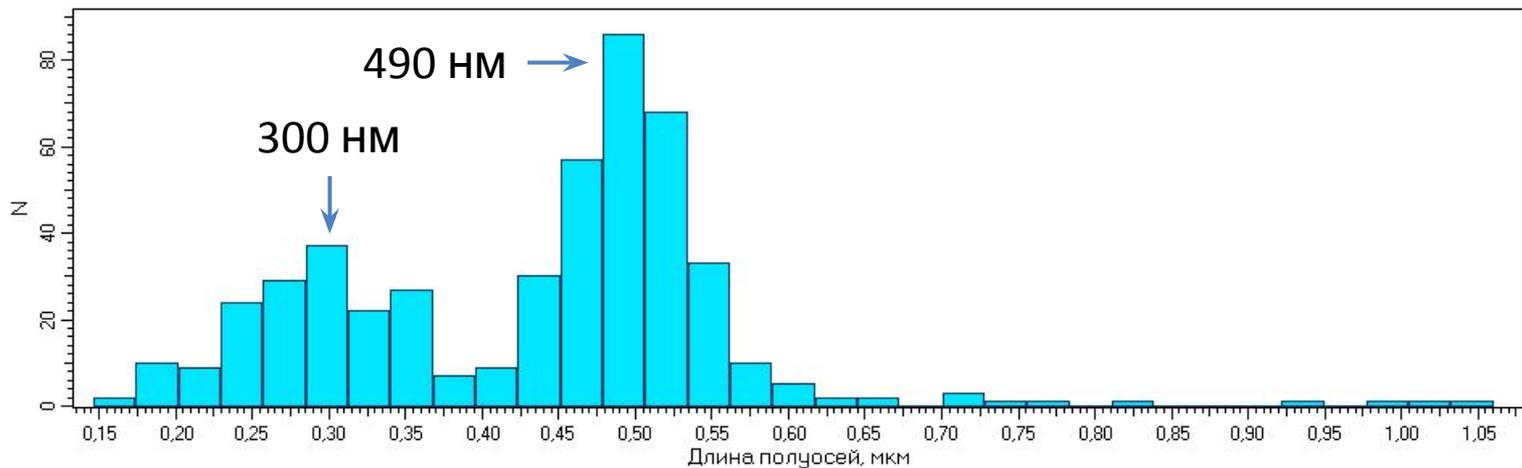


Исследование поверхности проводилось с использованием атомно-силового микроскопа Ntegra Prima фирмы NT-MDT

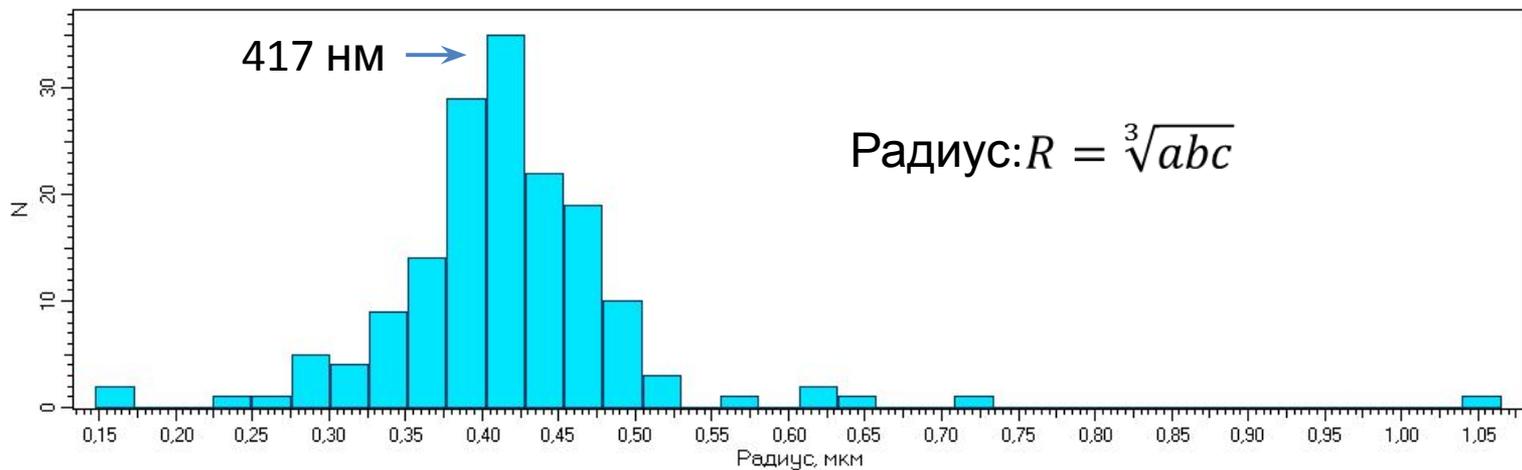


# Распределение частиц по размерам

Распределение полуосей



Распределение радиуса





# Влияние шумов на работу алгоритма

На АСМ-изображениях часто присутствуют шумы, в том числе белый шум

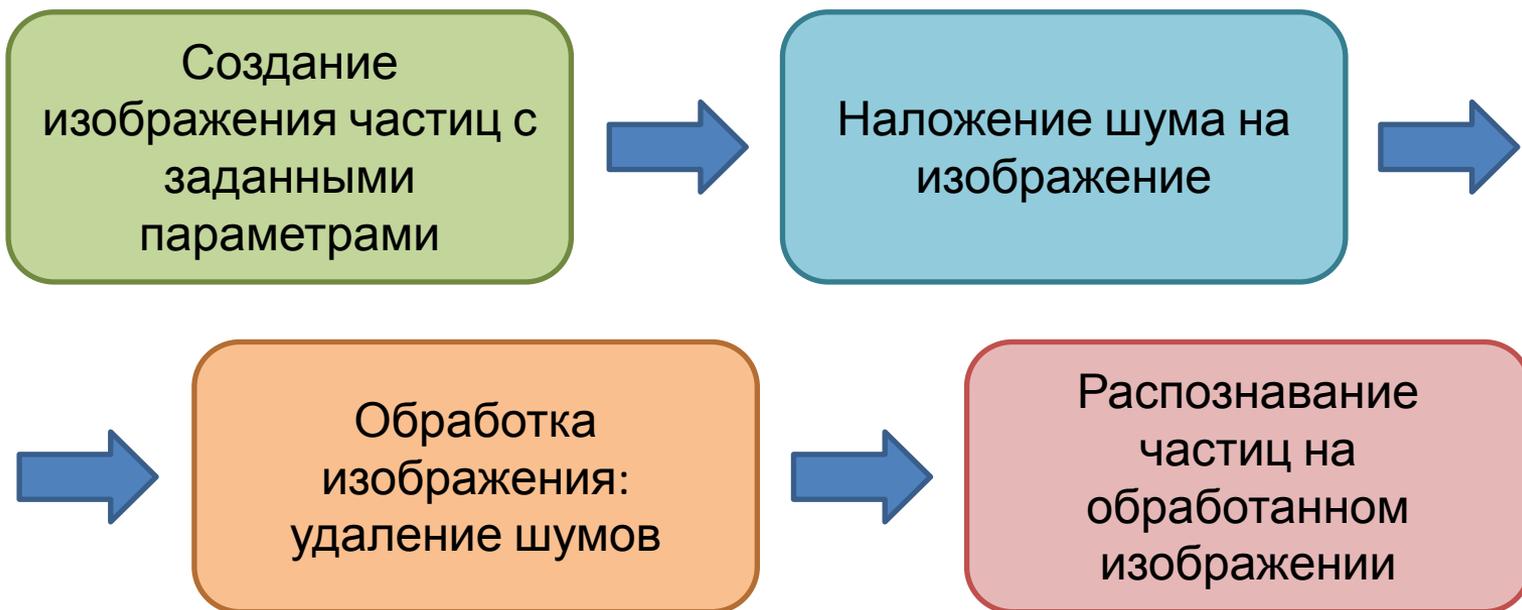
- Исследуется влияние белого шума на результативность алгоритма
- Вводится оценочный параметр, характеризующий эффективность работы алгоритма
- Используются некоторые методы фильтрации шумов



## Влияние шумов на работу алгоритма

Есть алгоритм распознавания частиц и определения их размеров по АСМ-изображениям.

Требуется проверить эффективность алгоритма на искаженных, зашумленных, обработанных изображениях.



После удаления шумов изображение остается искаженным и отличается от исходного



## ПРОБЛЕМА

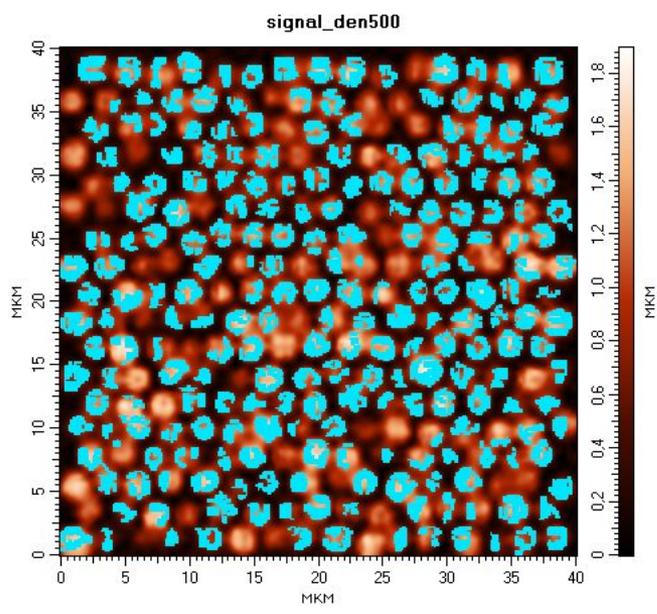
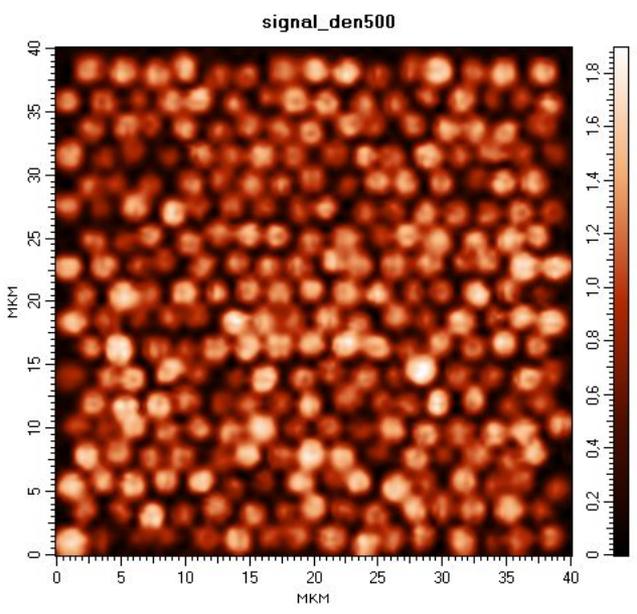
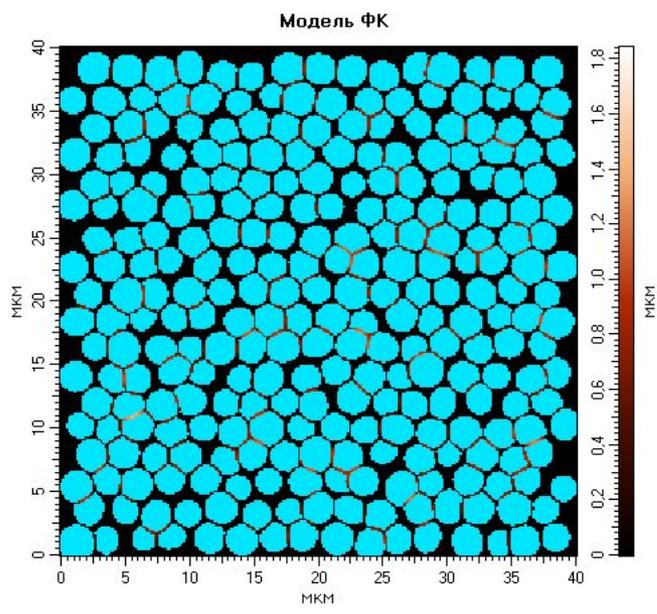
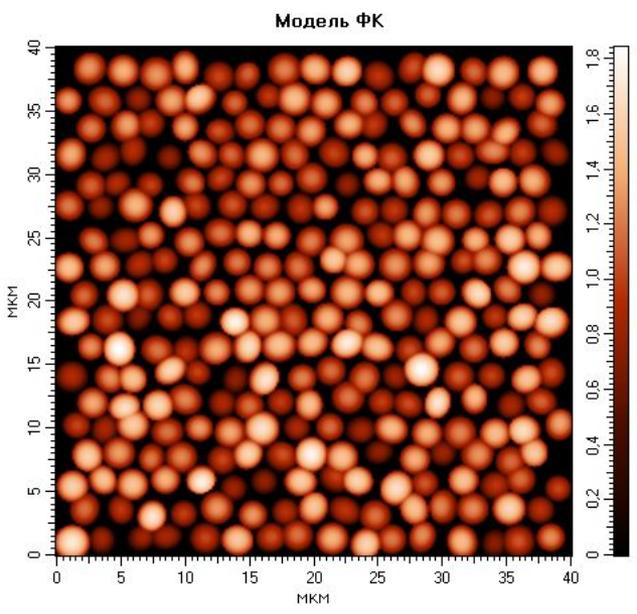
Как сравнивать набор параметров частиц (координаты центров, длины полуосей, ориентация в пространстве) на входе этой схемы с набором параметров на выходе?

- Количество частиц до и после обработки может не совпадать
- Некоторые частицы могут быть не распознаны или неправильно распознаны
- Некоторые частицы могут быть распознаны как две или три частицы
- Могут появиться лишние частицы там где их не должно быть

**Требуется как-то вводить/вычислять степень соответствия между исходным набором параметров и выходным набором**

Например, после добавления такого-то шума и удаления его таким-то методом, параметры распознанных частиц на 98% соответствуют заданным вначале

А после добавления другого шума и его удаления другим методом, такие же частицы были распознаны на 75%



Как сравнивать эти результаты?



## Степень соответствия

Степень соответствия – параметр, показывающий насколько полученный набор параметров эллипсоидов близок к исходному набору

Простой пример – один эллипсоид:

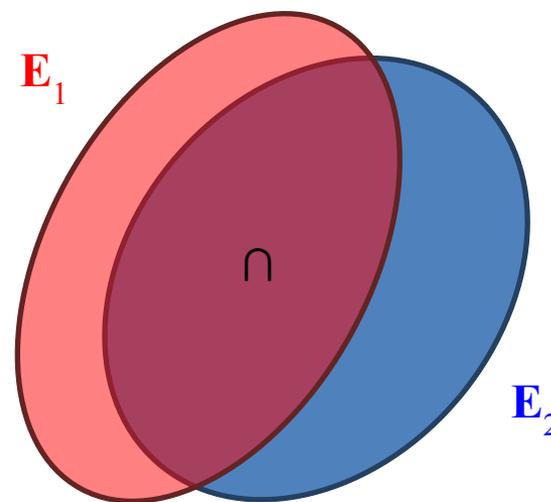
$E_1$  – первоначальный,

$E_2$  – измененный при обработке

Степень

соответствия:

$$C = \frac{V_{\cap}}{V_1 + V_2 - V_{\cap}}$$



$V_1$  – объем начального эллипсоида,  $V_2$  – объем конечного эллипсоида,  $V_{\cap}$  – объем пересечения эллипсоидов

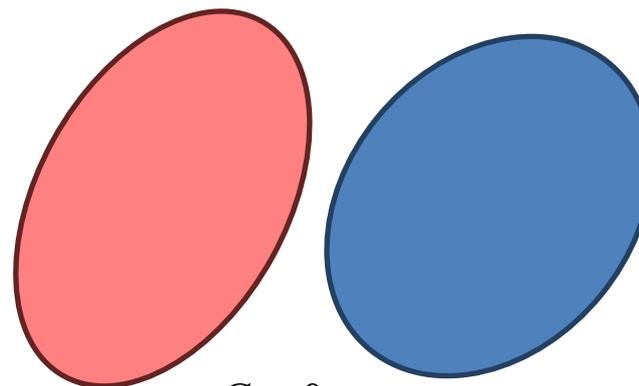


## Степень соответствия

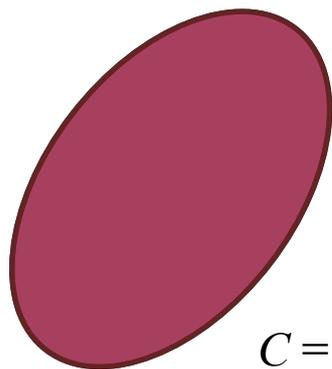
Степень

соответствия:

$$C = \frac{V_n}{V_1 + V_2 - V_n}$$



$C = 0$



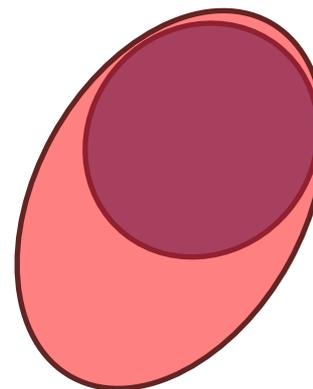
$C = 100\%$

$C = 50\%$

при

$$V_1 = 2V_2,$$

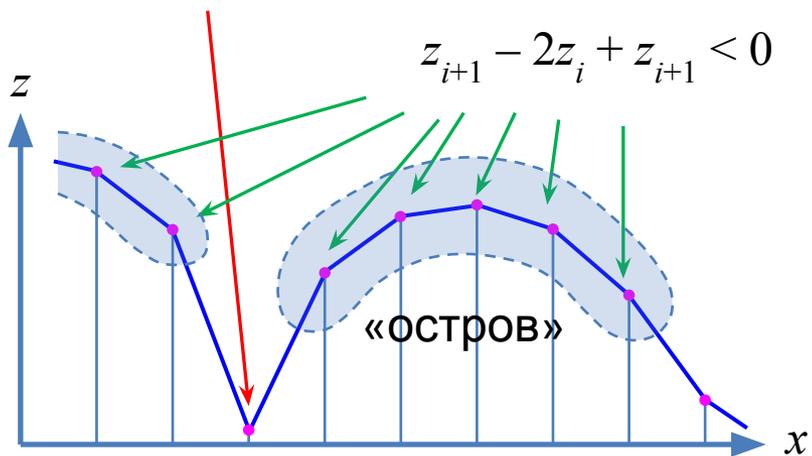
$$V_n = V_2$$



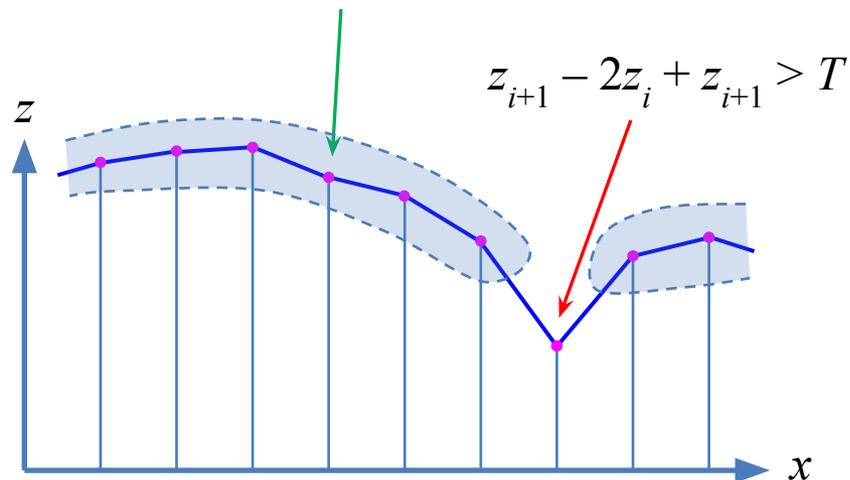


## Сглаживание шума на этапе сегментации

$$z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1} > 0$$



$$0 < z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1} < T$$



Вместо условия  
 $z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1} < 0$

используем:

$$z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1} < T$$

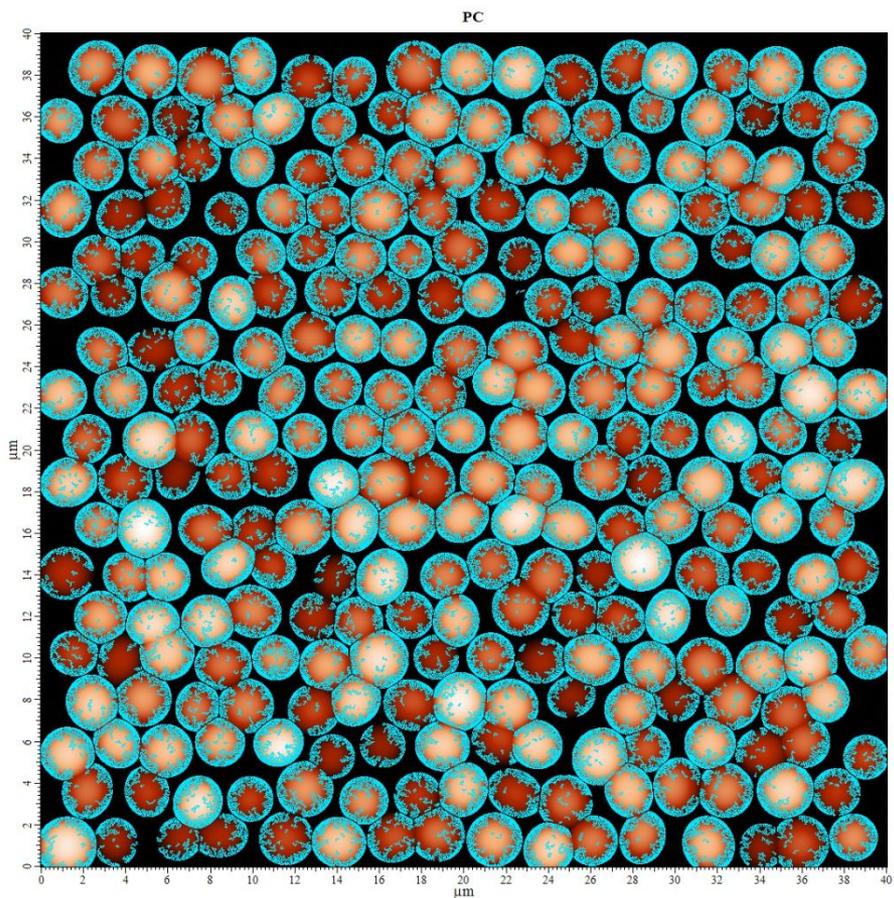
Таким образом, ввели пороговое значение  $T$  для производной 2-го порядка (выпуклость/вогнутость)

Раньше брали только те точки, в которых график **выпуклый вверх**, а теперь берем и те, в которых график **выпуклый вниз, с небольшой кривизной**

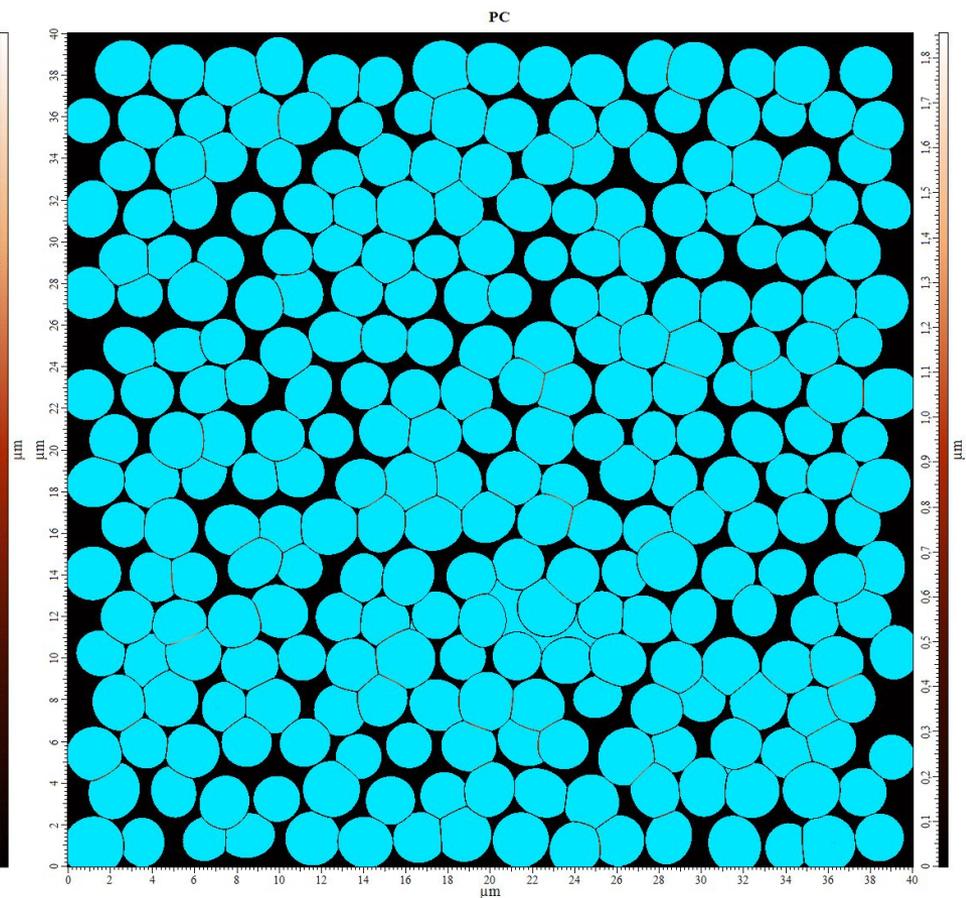


# Сглаживание шума на этапе сегментации

На модель наложен шум 1%



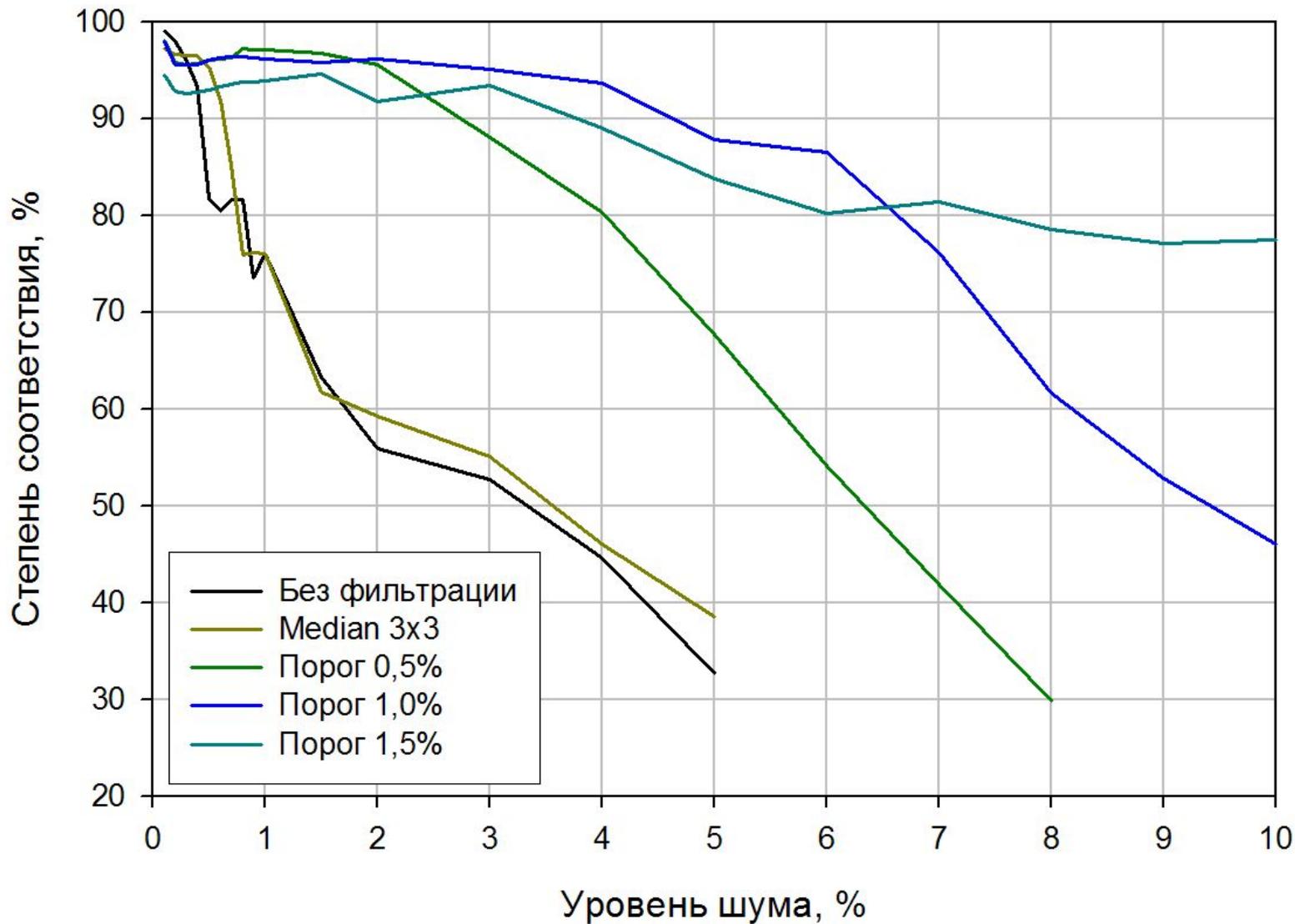
Без сглаживания



Со сглаживанием (порог  
выпуклости  $T = 1\%$ )

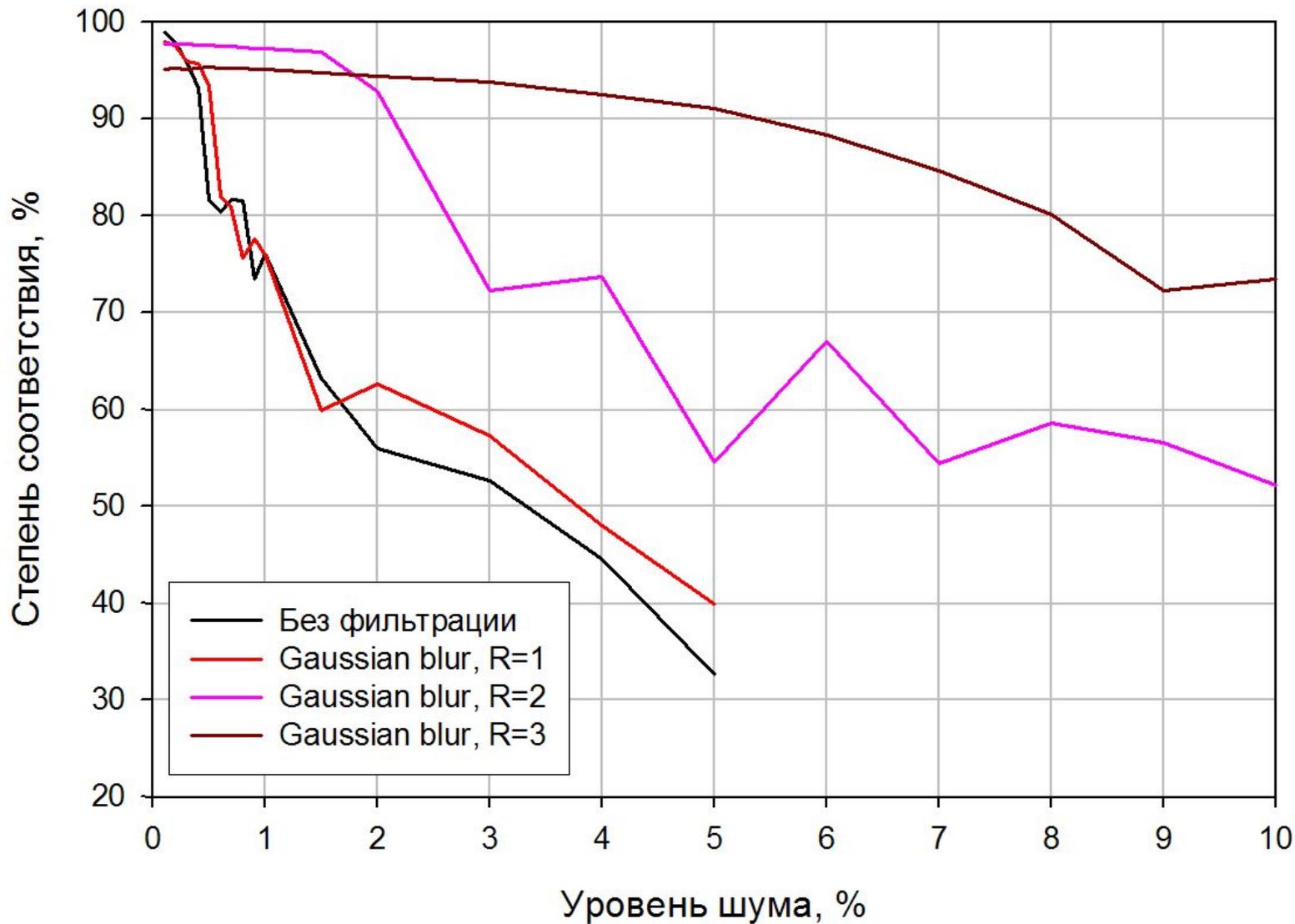


## Результат сглаживания шумов



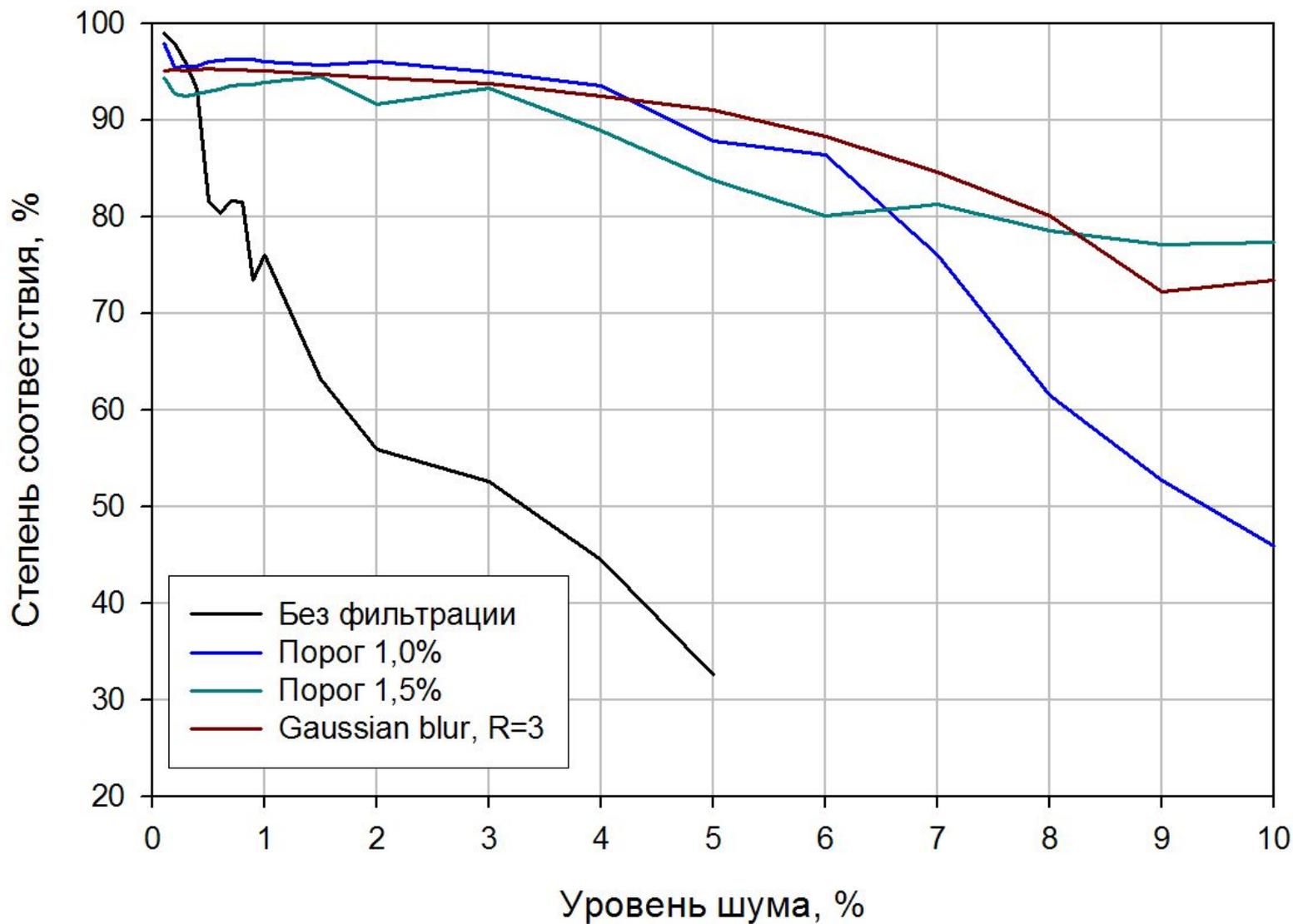


## Результат сглаживания шумов



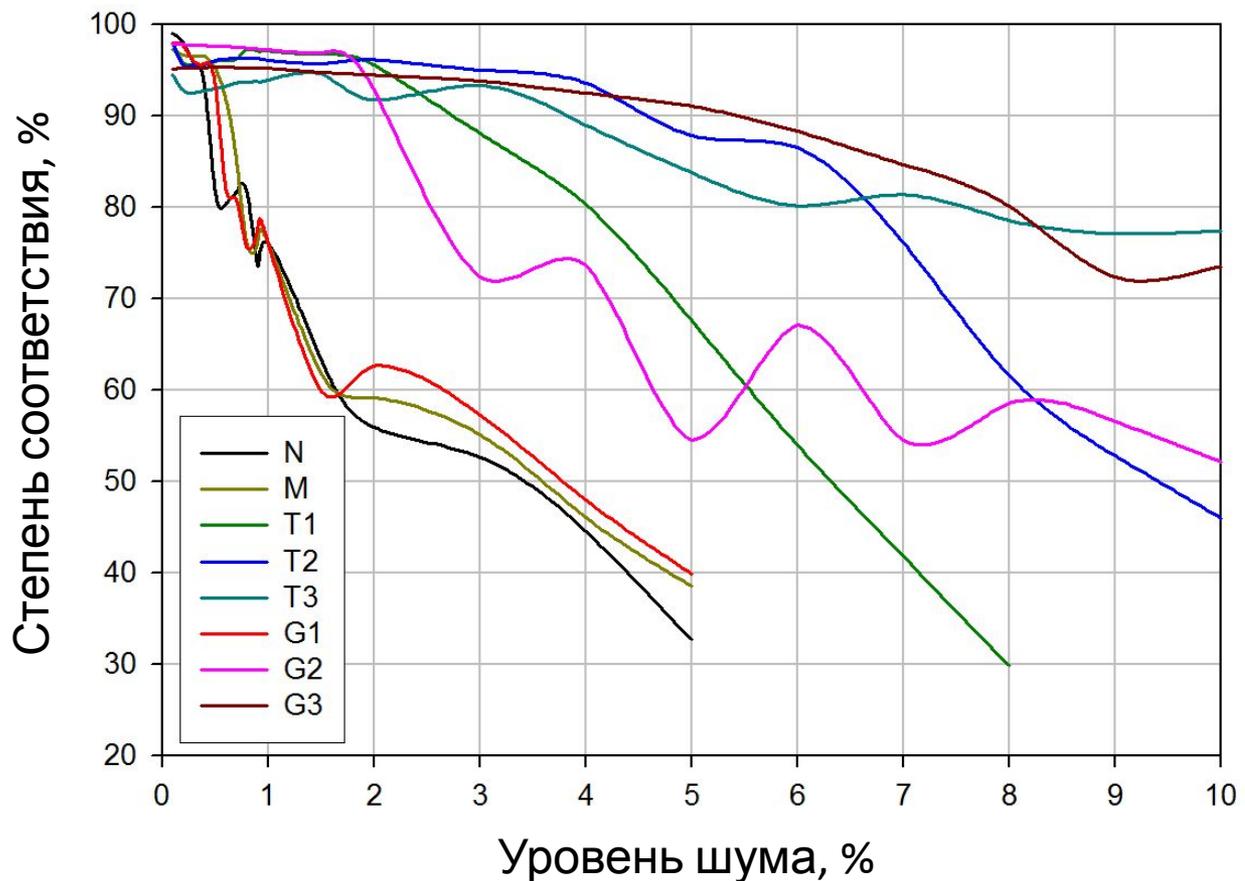


## Результат сглаживания шумов





## Результат сглаживания шумов



N – без шумоподавления;  
M – Медианная фильтрация с окном 3x3;  
T1, T2, T3 – Сегментация с порогами  $T = 0.5\%$ ,  $1.0\%$  и  $1.5\%$  соответственно;  
G1, G2, G3 – Гауссовый фильтр со стандартными отклонениями  $\sigma = 1, 2$  и  $3$  соответственно