

Использование быстрого преобразования Хартли при обработке СТМ-изображений / С.А. Виноградова, А.С. Бердников // Научное приборостроение. — 1991. — Т. 1. — № 2. — С. 87-98.

Показана принципиальная возможность и преимущества использования двумерного дискретного преобразования Хартли вместо обычно применяемого дискретного преобразования Фурье при цифровой обработке СТМ-изображений. Приведены двумерные спектры Фурье и Хартли, а также результаты цифровой фильтрации на основе двумерного преобразования Хартли для СТМ-изображения высокого разрешения поверхности пиролитического графита. Библ. — 12 назв. Ил. — 6.

6. Лифшиц И.М., Слезов В.В. / О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов // ЖЭТФ. — 1958. — Т. 35. — Вып. 2. — С. 479-492.
7. Kashchiev D. // J. Cryst. Growth. — 1977. — V. 40, N 3. — P. 29-46.
8. Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Феноменологический подход. — М.: Наука, 1980. — 88 с.
9. Трофимов В.И., Беленький В.З., Осадченко В.А. / Кинетика вакуумной конденсации по механизму независимого латерального и нормального роста // Поверхность. — 1985. — Т. 27, № 8. — С. 60-68.
10. Maruyama M., Shichiri T. // Jap. J. Appl. Phys. 1. — 1988. — V. 27, N 12. — P. 2205-2208.
11. Kuni F.M. The kinetics of condensation under the dynamical conditions. Препринт № 84 — 178 Е. Киев: ИТФ АН УССР, 1984. — 65 с.
12. Venables J., Price G. // Epitaxial Growth. — 1975. New York: Acad. Press. — 381 p.

Рукопись поступила 11.10.90

С.А. Виноградова, А.С. Бердников
(Институт аналитического приборостроения АН СССР,
Ленинград)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ХАРТЛИ ПРИ ОБРАБОТКЕ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ*

Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) в настоящее время является широко распространенным методом исследования поверхности. Данные СТМ-эксперимента, содержащие информацию о топографии поверхности, распределении локального потенциала на поверхности и других пространственно распределенных характеристиках образца, обычно представляются в виде двухмерных цифровых массивов, называемых СТМ-изображениями.

Одним из этапов анализа СТМ-изображений является цифровая обработка, позволяющая улучшить качество изображений, устранить влияние шумов и искажающих факторов, уточнить характеристики поверхности. При обработке СТМ-изображений могут быть использованы стандартные методы восстановления изображений [1], обычно применяемые в оптике, электронной микроскопии и т.п. В частности, для решения многих задач

* Авторы выражают благодарность А.О. Голубку за полезное обсуждение, Д.Н. Давыдову, В.А. Тимофееву и С.Я. Типисеву за предоставление экспериментальных файлов с СТМ-изображением пиролитического графита.

коррекции изображений и оценки пространственных и шумовых параметров успешно используется спектральный анализ информации и цифровая фильтрация в спектральной области.

Основой большинства алгоритмов цифровой обработки (среди которых — тихоновская регуляризация, линейная фильтрация, нелинейные и итерационные алгоритмы, методы „сверхразрешения“) является вычисление спектрального преобразования сигнала. К алгоритмам вычисления спектрального преобразования при цифровой обработке изображений предъявляются высокие требования как по времени вычислений, так и по затратам оперативной памяти. От скорости вычисления спектрального преобразования в значительной степени зависит применимость того или иного метода (особенно при итерационной и адаптивной обработке, реализуемой в диалоговом режиме). Кроме того, изображения высокого качества представляют собой массивы большой размерности и их спектральные преобразования не всегда могут быть размещены в оперативной памяти компьютера. В таких случаях при вычислении преобразования приходится прибегать к промежуточному обмену с внешним носителем информации (магнитным диском), что существенно увеличивает время вычислений [2].

В настоящее время в подавляющем большинстве случаев, в том числе и при обработке СТМ-изображений [3], в качестве спектрального преобразования применяется дискретное преобразование Фурье (ДПФ):

$$F_{\nu} = \sum_{k=0}^{N-1} f_k \exp\left[-\frac{i2\pi\nu k}{N}\right],$$

где f_k — последовательность дискретных отсчетов функции $f(x)$; $\nu = 0, \dots, N-1$ — номер дискретного отсчета спектра.

Использование ДПФ, по-видимому, объясняется тем, что оно имеет хорошо развитый математический и технический аппарат, в том числе алгоритмы быстрого преобразования Фурье (БПФ) и БПФ-спецпроцессоры. Однако для исследователей, пользующихся неспециализированной компьютерной техникой с ограниченным объемом оперативной памяти, использование ДПФ при цифровой фильтрации изображений часто затрудняется как временем обработки больших двумерных комплексных массивов, так и, главным образом, необходимостью разместить в памяти ЭВМ комплексные массивы спектрального преобразования и фильтра.

Заметим, что преобразование Фурье подразумевает использование комплексной арифметики и, соответственно, работу с комплексными массивами даже в случае вещественных исходных данных. Это существенно необходимо в тех задачах, где требуется учет фазовой информации (например, в задачах восстановления оптических изображений, прошедших через турбулентную среду [1, § 6.5]). В большинстве же других задач, в частности, в задачах обработки изображений электронной микроскопии и СТМ, исходные данные, а следовательно, и импуль-

сные характеристики фильтров являются вещественными. В результате использование комплексного преобразования ДПФ оказывается избыточным (в силу априорной симметричности вещественной части и антисимметричности мнимой части спектра ДПФ). Более рациональным, с точки зрения подобных изображений, представляется использование в качестве спектрального преобразования дискретного преобразования Хартли (ДПХ) [4], которое для набора дискретных действительных данных f_k , $k = 0, \dots, N-1$ определяется выражением

$$H_u = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \operatorname{cas} \left[\frac{2\pi uk}{N} \right],$$

где $u = 0, \dots, N-1$; $\operatorname{cas}(\theta) \equiv \cos \theta + \sin \theta$.

Это преобразование характеризуется следующим:

1) вещественная последовательность в результате преобразования переходит в вещественную (а не комплексную, как в ДПФ) последовательность той же длины;

2) обратное преобразование имеет в точности тот же вид, что и прямое;

3) при необходимости из ДПХ можно получить действительную и мнимую части ДПФ, выделив четную и нечетную составляющие ДПХ;

4) оценку спектральной плотности и цифровую фильтрацию можно производить непосредственно по ДПХ, не вычисляя действительную и мнимую части ДПФ.

Как и для ДПФ, для ДПХ уже предложены быстрые одномерные алгоритмы [5—7] и алгоритмы вычисления быстрого двумерного преобразования [8].

Быстрые алгоритмы одномерного ДПХ строятся по тем же принципам, что и для ДПФ. Исходная последовательность (при N , кратном 2) разбивается на элементарные двухточечные преобразования, которые сочленяются с учетом теорем сдвига и подобия. Как показано в [5], простейшая „бабочка“ БПХ имеет вид

$$[H_u]^m = [H_u]_1^{m-1} + [H_u]_2^{m-1} \operatorname{cas} \left[\frac{2\pi u}{N} \right] + [H_{N-u}]_2^{m-1} \operatorname{sin} \left[\frac{2\pi u}{N} \right],$$

где $u = 0, \dots, N-1$; m — уровень бабочки ДПХ, индексы 1 и 2 соответствуют нечетным и четным членам последовательности предыдущего уровня. В [6] этот алгоритм модифицирован для выполнения операций с замещением. В [7] приведен алгоритм вычисления ДПХ с расщеплением основания, который минимизирован по числу арифметических операций.

Двухмерное дискретное преобразование Хартли действительной функции $f_{k,r}$ определяется [8] следующим образом:

$$H_{u,v} = \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{r=0}^{N-1} f_{k,r} \operatorname{cas} \left[2\pi \left[\frac{uk}{M} + \frac{vr}{N} \right] \right],$$

где $u = 0, \dots, M-1$; $v = 0, \dots, N-1$.

Прямое копирование вычислительной схемы двумерного ДПФ (последовательное применение одномерного ДПФ к строкам и столбцам) невозможно из-за того, что ядро двумерного ДПХ $\text{cas}\left[2\pi\left(\frac{uk}{M} + \frac{vr}{N}\right)\right]$ в отличие от $\exp\left[i2\pi\left(\frac{uk}{M} + \frac{vr}{N}\right)\right]$ не разлагается на множители. Последовательное выполнение одномерных ДПХ строк и столбцов приводит к промежуточному преобразованию

$$T_{u,v} = \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{r=0}^{N-1} f_{k,r} \text{cas}\left[\frac{2\pi uk}{M}\right] \text{cas}\left[\frac{2\pi vr}{N}\right],$$

которое не является двумерным ДПХ (не интерпретируется как наклонная волна подобно двумерному ДПФ). В работе [8] предложен эффективный алгоритм вычисления собственно ДПХ (а также ДПФ) из промежуточного преобразования на основе тригонометрического тождества

$$2\text{cas}(\alpha + \beta) = \text{cas}(\alpha) \text{cas}(\beta) + \text{cas}(\alpha) \text{cas}(-\beta) + \text{cas}(-\alpha) \text{cas}(\beta) - \text{cas}(-\alpha) \text{cas}(-\beta).$$

Для матрицы данных размером $M \times N$ преобразование Хартли представляется в виде комбинации четырех членов, расположенных в вершинах прямоугольника:

$$2T_{u,v} = T_{u,v} + T_{M-u,v} + T_{u,N-v} - T_{M-u,N-v} = A + B + C - D.$$

Эта комбинация эффективно вычисляется с помощью диагонального эксцесса

$$E = \frac{1}{2} [(A + D) - (B + C)]$$

и четырех операций замены. $A \leftarrow A - E$, $B \leftarrow B + E$, $C \leftarrow C + E$, $D \leftarrow D - E$ для всех u в диапазоне от 1 до $(1/2M - 1)$ и v от 1 до $(1/2N - 1)$. Таким образом, дополнительные операции незначительно увеличивают время вычисления двумерного ДПХ по сравнению с выполнением $M + N$ одномерных преобразований.

Вещественную и мнимую составляющие преобразования Фурье можно вычислить как из полученной матрицы ДПХ (посредством суммирования и вычитания той же матрицы, повернутой на 180°), так и непосредственно из промежуточного преобразования $T_{u,v}$ [8].

Рассмотрение схем вычислений для алгоритмов одномерных преобразований БПХ и БПФ показывает, что вычисления по бабочке БПХ вдвое быстрее вычислений по эквивалентной бабочке БПФ при одинаковой степени оптимизации алгоритмов [9]. В целом коэффициент ускорения может быть несколько меньше 2, так как вычисления по бабочке составляют только часть общего объема вычислений наряду с индексацией, перепорядочиванием и пр., а для двумерного БПХ добавляется некоторое количество операций пересчета. Тем не менее, такой, каза-

лось бы, небольшой выигрыш во времени в 1.5—2 раза, составляющий для одномерного преобразования доли секунды, становится заметным уже при однократном вычислении двумерного преобразования, которое требует $2N$ выполнений одномерного преобразования как в ДПХ, так и в ДПФ. Еще более существенным становится временной выигрыш в итерационной обработке, где двумерное преобразование может вычисляться несколько раз в каждом цикле.

Кроме того, вычисление ДПХ и цифровая фильтрация на основе ДПХ требуют вдвое меньше памяти, чем аналогичные процедуры с ДПФ. Это означает, что ДПФ заставляет использовать алгоритмы вычисления с промежуточным обменом с диском при вдвое меньшей размерности преобразования, чем ДПХ.

Таким образом, при том, что дискретное преобразование Хартли в случае вещественных данных несет в точности ту же информацию, что и ДПФ, оно дает выигрыш во времени, требует вдвое меньше памяти и, устраняя избыточность комплексной арифметики, является более удобным и естественным при обработке СТМ-изображений и других изображений, не содержащих фазовой информации.

Цифровая фильтрация подобных изображений предъявляет к используемым фильтрам следующие требования [2]:

- 1) импульсная характеристика фильтра — вещественная;
- 2) передаточная функция фильтра в спектральной области — вещественная (требование „нулевой фазы“, возникающее из-за того, что при фильтрации прямая линия должна оставаться прямой линией);
- 3) сумма опорных областей изображения и импульсной характеристики фильтра не больше размерности спектрального преобразования (условие отсутствия циклической свертки при фильтрации).

Условие 1) при использовании ДПХ выполняется автоматически. Условие 2) выполнено, если частотная функция (спектр Хартли) фильтра симметрична. Проверка выполнения условия 3) для ДПХ реализуется так же, как и для ДПФ [2, § 2.2.3]. Отметим, что в силу требования „нулевой фазы“, цифровая фильтрация с применением ДПХ осуществляется точно так же, как и фильтрация с ДПФ, т.е. непосредственным перемножением спектра изображения и передаточной функции фильтра.

Для иллюстрации на рис. 1—3 приведены результаты вычисления спектрального преобразования и цифровой фильтрации с использованием как ДПХ, так и ДПФ. Сравнение результатов вычислений производилось на примере СТМ-изображений, полученных в сканирующем туннельном микроскопе при атмосферном давлении [10, 11]. Для сравнения выбирались изображения размером 128×128 отсчетов, которые допускают обработку в оперативной памяти как для ДПХ, так и для ДПФ. Сравнение производилось для простейших алгоритмов БПХ и БПФ, поскольку в силу сходства алгоритмов для оптимизации БПХ применимы те же методы, что и для БПФ, а при одинаковой степени сложности коэффициент ускорения практически постоянен и близок к 2.

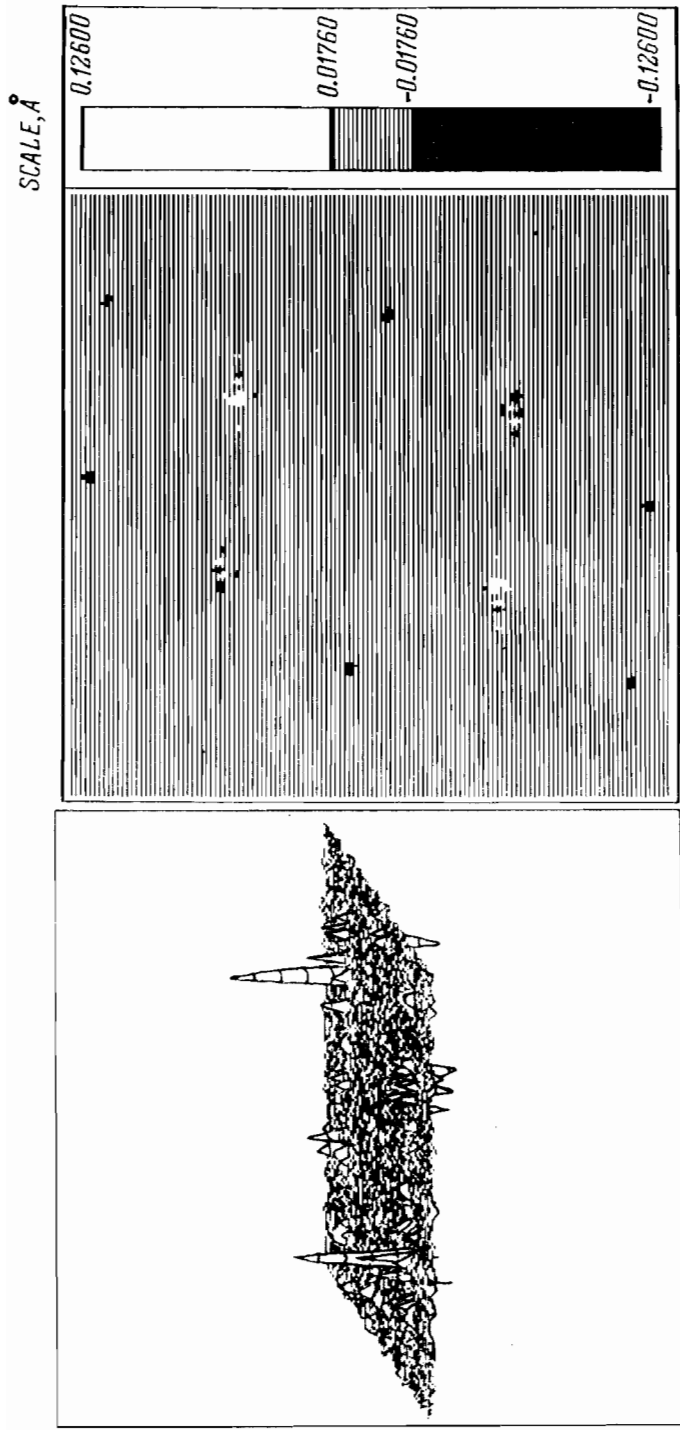


Рис. 1. Фрагмент двумерного дискретного спектра СТМ-изображения поверхности пиро-литического графита с атомным разрешением (вид "сбоку" и вид "сверху"). Действительная составляющая дискретного преобразования Фурье

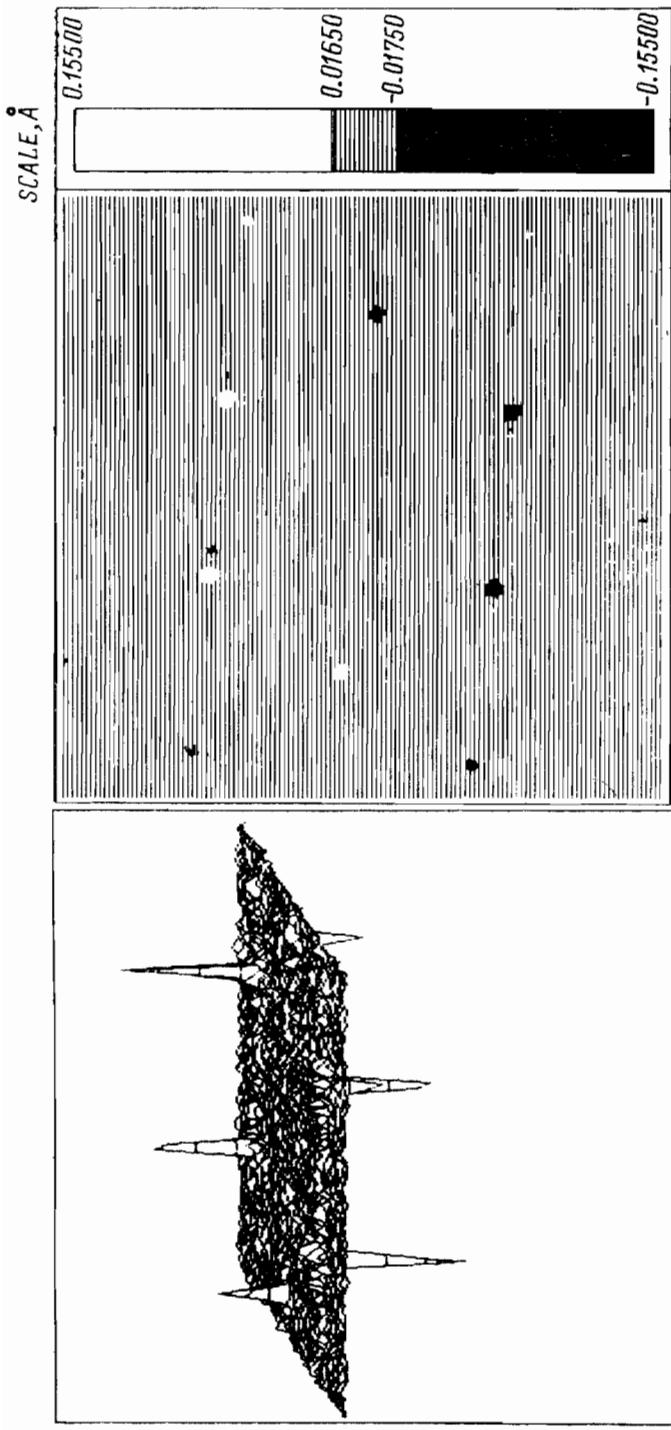


Рис. 2. Фрагмент двумерного дискретного спектра STM-изображения поверхности пироли-
 тического графита с атомным разрешением (вид "сбоку" и вид "сверху"). Минимая соста-
 вляющая дискретного преобразования Фурье

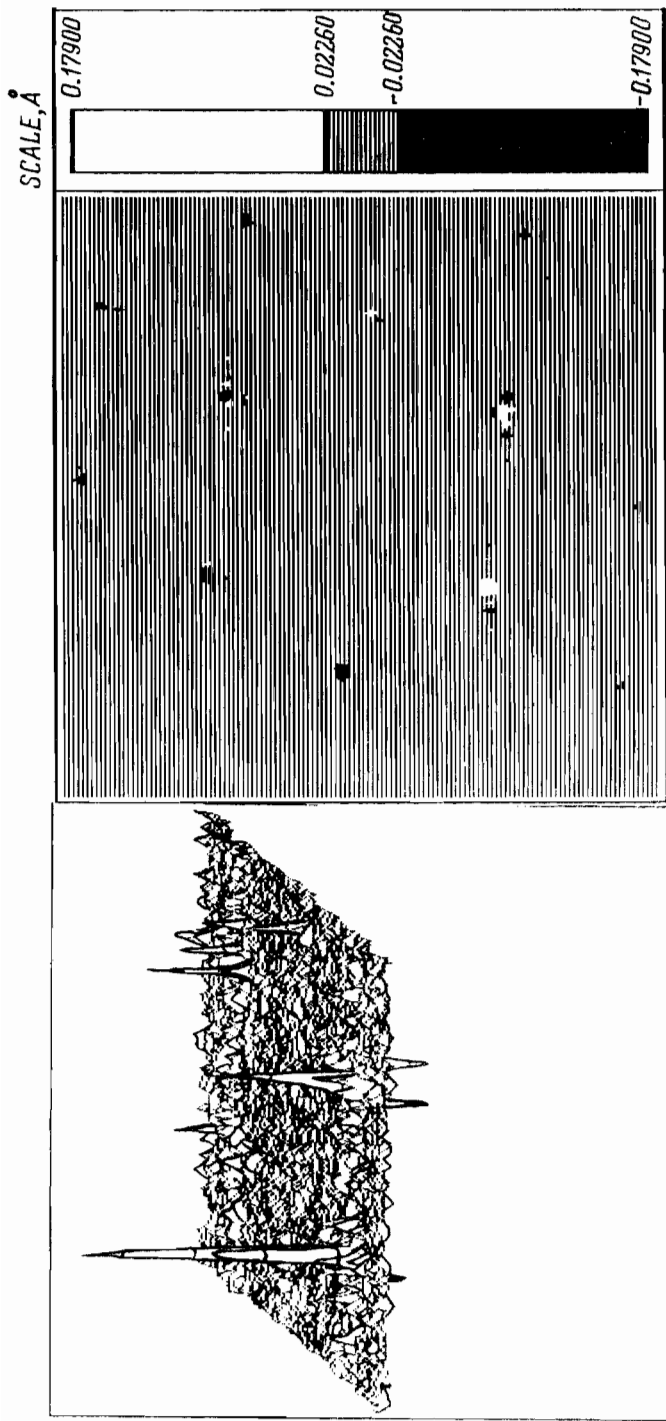


Рис. 3. Фрагмент двумерного дискретного спектра STM-изображения поверхности пироли-
 тического графита с атомным разрешением (вид "сбоку" и вид "сверху"). Дискретное
 преобразование Харли

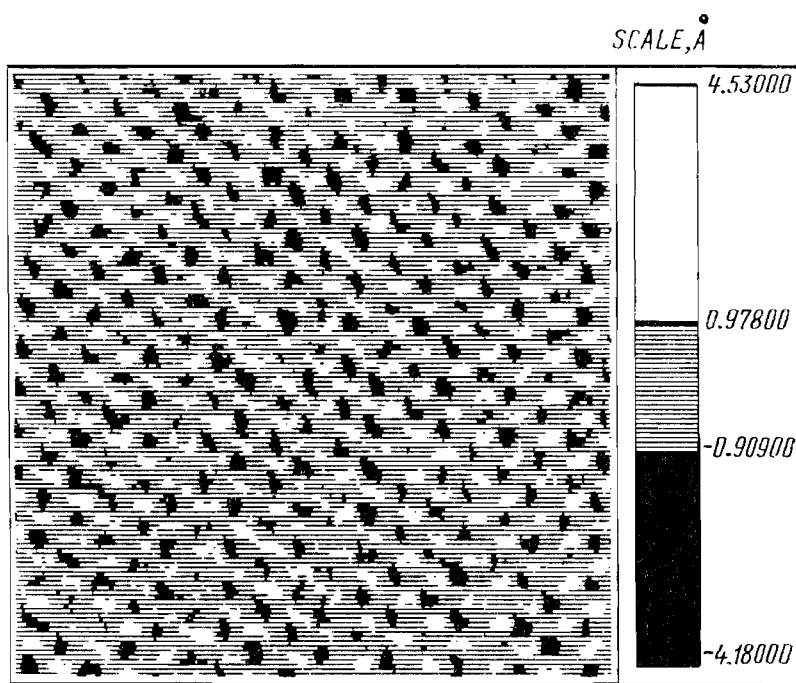


Рис. 4. Исходное СТМ-изображение поверхности пиролитического графита площадью 4×4 нм

Для вычисления одномерного ДПХ использовался алгоритм БПХ с замещением, изложенный в [6]. Двухмерное ДПХ получалось в результате последовательного применения одномерного БПХ к строкам и столбцам с последующим пересчетом полученного результата в двухмерное ДПХ в соответствии с [8].

Вычисление одномерного ДПФ производилось согласно [12], двухмерное ДПФ получалось в результате последовательного применения одномерного БПФ к строкам и столбцам.

Все алгоритмы и управляющая программа реализованы на языке TURBOpascal 4.0. В обоих случаях для экономии времени вычислений использовалась заранее рассчитанная таблица синусов и косинусов. Для наглядности визуального представления информации, а также для того, чтобы избежать осцилляций фазы, до и после преобразования производилась перестановка отсчетов для совмещения нулевого отсчета с центром двумерного массива.

На рис. 1—3 приведены действительная и мнимая части двухмерного дискретного спектра Фурье и двухмерный дискретный спектр Хартли СТМ-изображения поверхности высокоориентированного пиролитического графита площадью 4×4 нм с атомным разрешением (рис. 4). Видно, что характерные особенности спектра воспроизводятся на всех трех изображениях и при этом действительная часть преобразования Фурье строго сим-

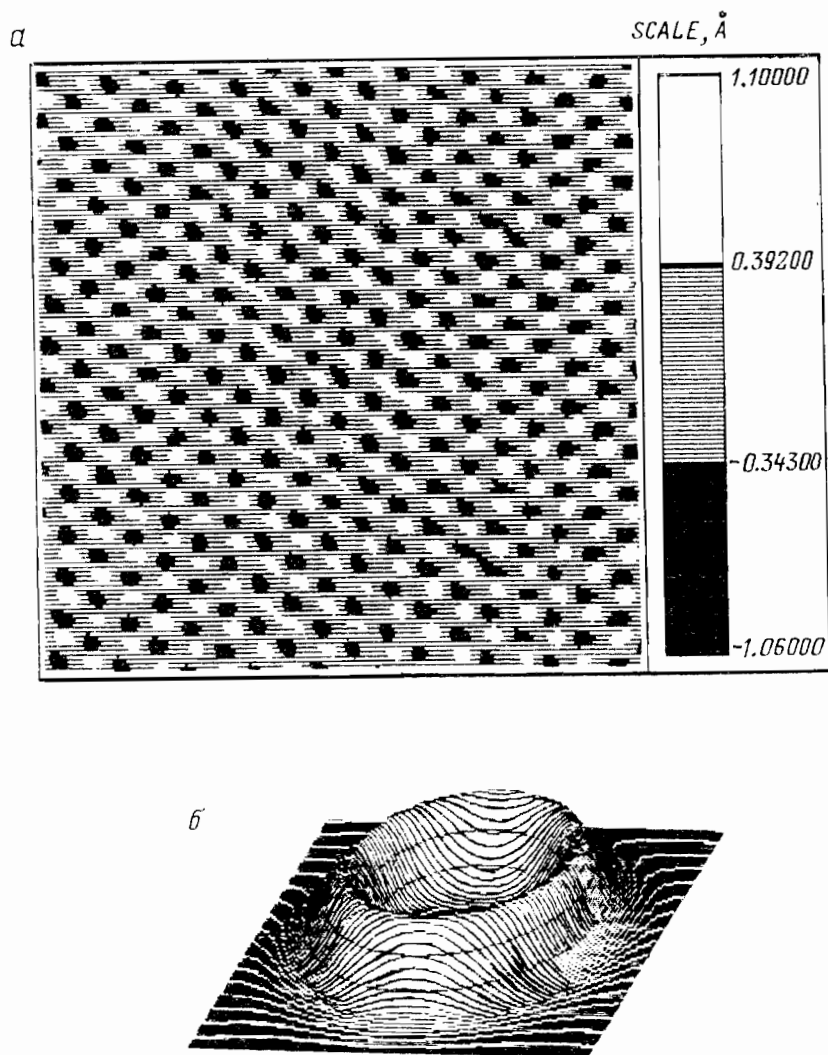


Рис. 5. Результат цифровой фильтрации СТМ-изображения пиро-литического графита с использованием дискретного преобразо- вания Хартли (а) с применением полосового фильтра (б)

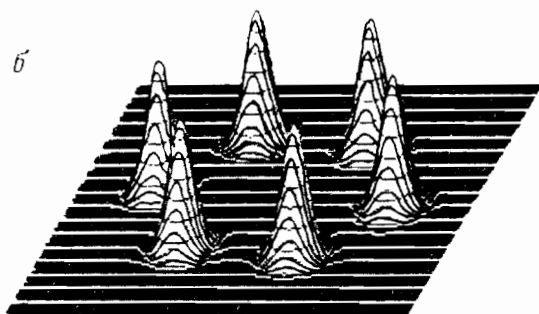
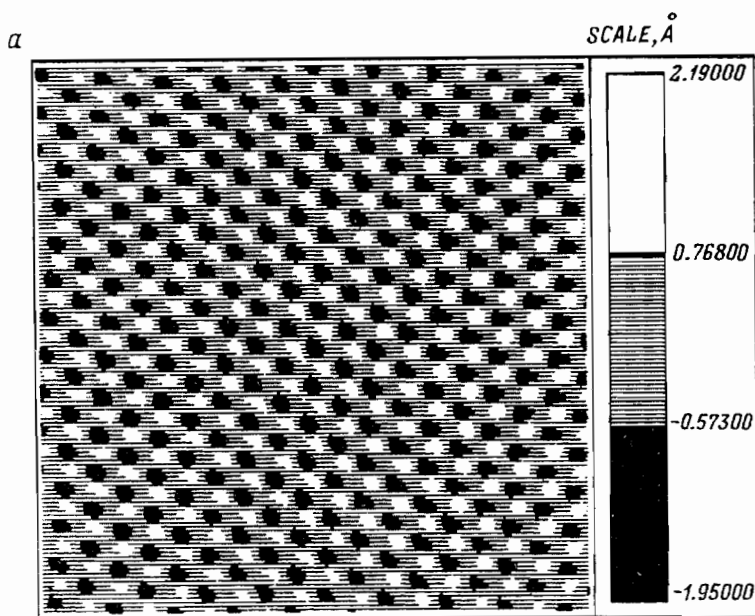


Рис. 6. Результат цифровой фильтрации СТМ-изображения пиро-литического графита с использованием дискретного преобразо-вания Хартли (а) с применением избирательного фильтра (б)

метрична, а мнимая — антисимметрична, т.е. имеет место дублирование спектральной информации при вычислении ДПФ.

На рис. 5 и 6 приведены результаты фильтрации СТМ-изображения графита с использованием ДПХ и соответствующие фильтры. Применение ДПФ дает результаты, совпадающие с изображенными на рис. 5, 6 в пределах ошибки округления. Время, затрачиваемое на вычисление ДПХ 128x128 отсчетов на компьютере IBM PC AT-TURBO, с учетом перестановок составляет 33 с. Это в 1.7 раза меньше, чем время, затрачиваемое на вычисление ДПФ. Выигрыш во времени обусловлен как меньшим числом обращений к памяти, так и меньшим числом выполняемых арифметических операций.

Таким образом, двухмерное БПХ, сохраняя все преимущества БПФ, оказывается более эффективным с точки зрения затрат оперативной памяти и времени вычислений, что может оказаться крайне существенным при обработке СТМ-изображений и решении аналогичных задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Василенко Г.И., Тараторин А.М.* Восстановление изображений. — М.: Радио и связь, 1986.
2. *Даджион Д., Мерсеро Р.* Цифровая обработка многомерных сигналов. — М.: Мир, 1988.
3. *Rosentaler L. etc.* // *J. Vac. Sci. Technol. A.* — 1988. — V. 6. — P. 393-397.
4. *Bracewell R.N.* // *J. Opt. Soc. Amer.* — 1983. — V. 73. — P. 1832-1835.
5. *Брейсуэлл Р.Н.* // *ТИИЭР.* — 1984. — Т. 72. — № 8. — С. 19-27.
6. *Прадо Ж.* // *ТИИЭР.* — 1985. — Т. 73. — № 12. — С. 182-183.
7. *Pei S.C., Wu Y L.* // *Electron Lett.* — 1986. — V. 22. — P. 26-27.
8. *Брейсуэлл Р.Н.* и др. // *ТИИЭР.* — 1986. — Т. 74. — № 9. — С. 128-129.
9. *Болд Г.Э. Дж.* // *ТИИЭР.* — 1985. — Т. 73. — № 12. — С. 184-185.
10. *Голубок А.О., Давыдов Д.Н., Тимофеев В.А., Типисев С.Я.* // *Научное приборостроение: Сб. науч. тр.* — Л.: Наука, 1989. — С. 72-77.
11. *Голубок А.О., Давыдов Д.Н., Нахабцев Д.В.* // *Научное приборостроение: Сб. научн. тр.* — Л.: Наука, 1989. — С. 77-84.
12. *Cooley J.W., Tukey J.W.* // *Mathematics of Computation.* — 1965. — V. 19. — N 90. — P. 297-301.

Рукопись поступила 27.02.90