

КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАШУМЛЕННЫХ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АППАРАТА НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ

С.И. Липанов, Е.Ю. Шелковников, А.В. Тюриков, П.В. Гуляев, Н.И. Осипов

В статье предложена методика классификации зашумленных СТМ-изображений наночастиц, основанная на алгоритме нечеткой логики Мамдани. Построена база знаний для дискретизированных СТМ-профилограмм. Приведены примеры рассчитанных автоматически функций принадлежности наночастиц.

Ключевые слова: сканирующий туннельный микроскоп, наночастицы, классификация СТМ-профилограмм, нечеткая логика, функции принадлежности.

ВВЕДЕНИЕ

Сканирующая туннельная микроскопия, как интенсивно развивающаяся в настоящее время область исследования поверхности наноматериалов, требует не только создания и внедрения прецизионных аппаратных средств, позволяющих сканирующим туннельным микроскопам (СТМ) достигать атомного разрешения [1–4]. Необходимо отметить, что СТМ-изображения обладают рядом недостатков, связанных с особенностями работы туннельного микроскопа, а также наличием шумов и искажений различной природы. Подобные искажения возникают, в частности, при сканировании неровностей рельефа наночастицы, сравнимых с размерами рабочей части острия измерительной иглы. Эти искажения связаны с тем, что реальное острие иглы в отличие от идеального, взаимодействует с поверхностью наночастицы не одной, а различными его точками. Наличие искажений и помех на СТМ-изображении существенно затрудняет правильное распознавание наночастиц, а программные средства для обработки, интерпретации и классификации СТМ-изображений, способные существенно облегчить труд исследователя, также нуждаются в развитии. Поэтому создание и внедрение автоматизированных программных комплексов, способных решать подобные задачи [5–7], является важной и актуальной задачей. Разработки, связанные с классификацией наночастиц с применением эвристических методов, описаны в [8–11]. Следует отметить, что выбор аппарата нечеткой логики в задаче классификации реальных зашумленных объектов обусловлен, прежде всего, возможностью достаточно гибко и с высокой степенью достоверности реагировать на сходство исследуемых объектов с эталонными образцами, позволяя получать на выходе векторы принадлежностей, описывающие данное сходство.

КЛАССИФИКАЦИЯ СТМ-ПРОФИЛОГРАММ МЕТОДОМ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ С АВТОМАТИЗИРОВАННЫМ ПОСТРОЕНИЕМ ФУНКЦИЙ ПРИНАДЛЕЖНОСТИ

Методика идентификации СТМ-профилограмм с применением нечеткой логики, основанная на применении алгоритма Мамдани, была разработана ранее [10]. Она основана на использовании функций принадлежности (ФП) треугольного вида:

$$\mu(z) = \begin{cases} 1 - \frac{|a-z|}{\beta}, & \text{если } |a-z| \leq \beta; \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1)$$

где a, β – параметры ФП. Входными данными на входе нечеткого классификатора являются результаты дискретизации профилограммы СТМ-изображения z_1, \dots, z_N (рисунок 1).

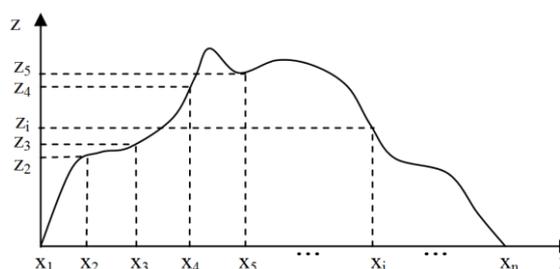


Рисунок 1 – Дискретизация нормализованной СТМ-профилограммы, подлежащей распознаванию

База знаний, применяемая для классификации, содержит выходную переменную ω и имеет следующую, структуру:

Правило №0: если $z_1 = z_1^{m_0}$ и $z_2 = z_2^{m_0}$ и

... и $z_n = z_n^{m_0}$, то $\omega = 0$ (образец есть эталон 0);

Правило №1: если $z_1 = z_1^{m_1}$ и $z_2 = z_2^{m_1}$ и

... и $z_n = z_n^{m_1}$, то $\omega = \omega_{10}$ (образец есть эталон 1);

⋮

КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАШУМЛЕННЫХ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АППАРАТА НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ

Правило №K: если $z_1 = z_1^{m_k}$ и $z_2 = z_2^{m_k}$ и

... и $z_n = z_n^{m_k}$, то $\omega = \omega_{k0}$ (образец есть эталон K).

Суть выходной переменной описывается выражением:

$$\omega_{j0} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (z_i^{m_j} - z_i^{m_0})^2}}{n} \quad (2)$$

и характеризует интегральную «схожесть» профилограммы j -го эталона с профилограммой базисного 0-го. ФП выходной переменной $M^{j0}(\omega)$ используют аналогичную (1) треугольную зависимость.

Пересечение уровней значимости на этапе композиции находится как:

$$\beta^{(j)} = \bigcap_i \mu^{(j)}(z_i), \quad (3)$$

где $\beta^{(j)}$ – итоговый уровень значимости, определяющий степень принадлежности распознаваемой профилограммы виду j . Логический вывод записывается в виде:

$$\tilde{M}^{(j)}(\omega) = \beta^{(j)} \cap M^{(j)}(\omega). \quad (4)$$

Композиция определяется выражением:

$$M_{\Sigma}(\omega) = \bigcup_j \tilde{M}^{(j)}(\omega), \quad (5)$$

где $M_{\Sigma}(\omega)$ – композитная фигура, собранная из усеченных функций принадлежности выходной переменной. Дефазификация достигается при помощи центроидного метода:

$$\omega_y = \frac{\int \omega M_{\Sigma}(\omega) d\omega}{\int M_{\Sigma}(\omega) d\omega}, \quad (6)$$

после которой определяется четкое значение выходной переменной ω_y , позволяющее построить вектор принадлежности $\vec{p}(\omega_y)$ распознаваемого сигнала тому или иному образцу:

$$\vec{p}(\omega_y) = \{M^{(00)}(\omega_y), \dots, M^{(10)}(\omega_y)\}. \quad (7)$$

Параметры ФП входных и выходных переменных могут быть вычислены автоматически с использованием метода градиентного спуска, предложенного в [10].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Задаче классификации профилограмм СТМ-изображений предшествует проблема локализации наночастицы. Используя в качестве входных данных измеренные величины высот в точках поверхности исследуемого образца, можно построить изображение его поверхности, выполнить предварительную обработку

по устранению шумов изображения и локализовать частицу. После нормализации сформированные строки СТМ-изображения выступают в качестве профилей (рисунок 1), пригодных для автоматического распознавания.

Для проверки эффективности предложенной методики классификации наночастиц в качестве эталонов использовались профилограммы частиц меди, никеля и цинка (представленные на рисунках 2 (а–в)), а в качестве данных для образцов были взяты зашумленные профилограммы частиц (показанные на рисунках 2 (г–е)). Равномерная дискретизация профилограмм проводилась по 256 точкам.

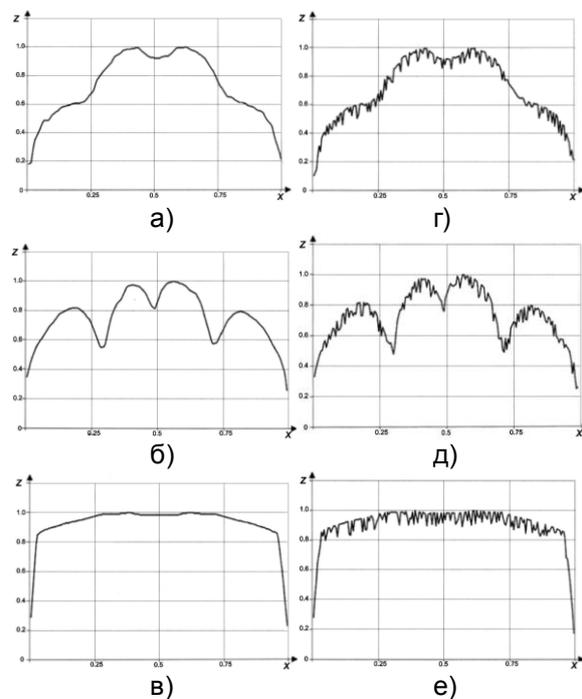


Рисунок 2 – Нормализованные профилограммы эталонов наночастиц меди (а), никеля (б), цинка (в) и соответствующие им зашумленные профилограммы (г–е) исследуемых образцов

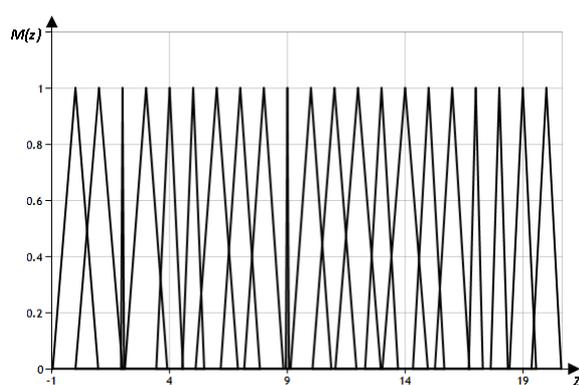
Рисунок 3 описывает результат работы автоматической оптимизации параметров: а – входных переменных (для эталона меди), б – выходных переменных (для всех трех использованных эталонов).

В соответствии с выражением (2) в качестве базового эталона была выбрана профилограмма частицы меди. Композитные фигуры, полученные на этапе композиции (в случае, когда распознаваемым образцом поочередно являлись зашумленные профилограммы меди (рисунок 2 г)), никеля (рисунок 2 д) и цинка (рисунок 2 е)), показаны на рисунках 4 (а–в)), соответственно.

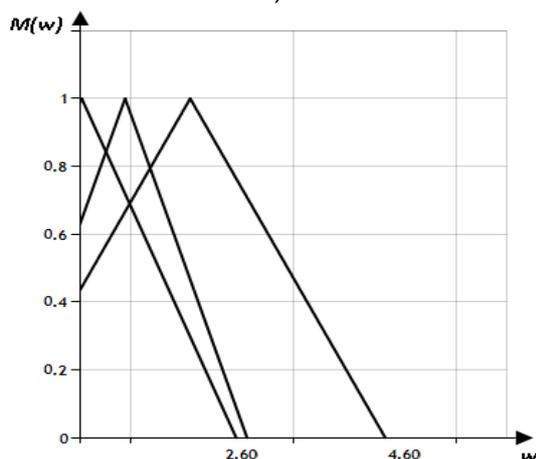
Результаты классификации представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Результаты классификации СТМ-профилограмм

Распознаваемый образец	Значение выходной переменной	Вектор принадлежности образца
Медь	0,94	(0,82;033;0)
Никель	3,05	(0,35;091;0,03)
Цинк	3,75	(0;0,36;087)



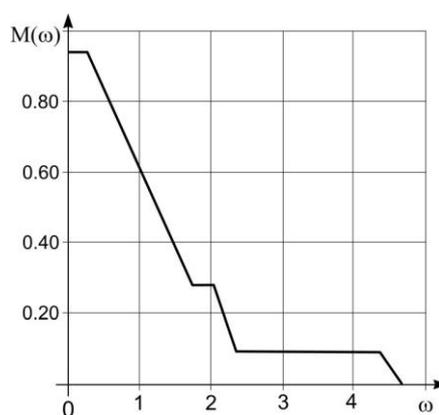
а)



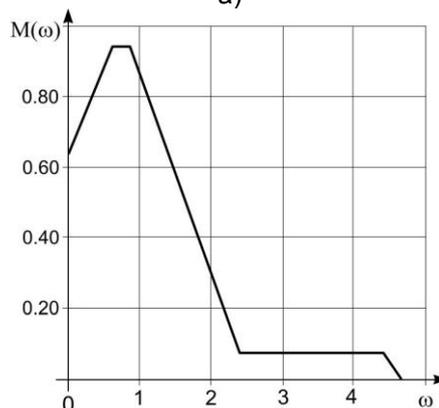
б)

Рисунок 3 – Пример рассчитанных автоматически функций принадлежности а) – входных переменных эталона меди; б) – выходных переменных всех трех эталонов

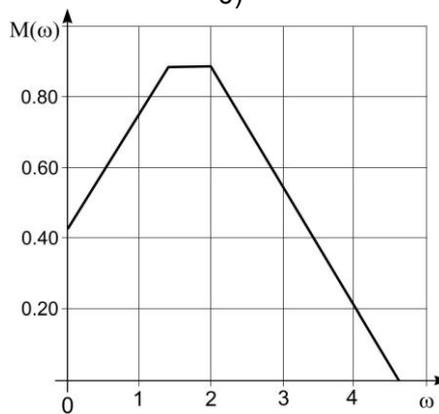
В целом, следует отметить, что применение предложенной методики дает возможность распознавать входные зашумленные СТМ-изображения поверхности образцов достаточно достоверно. Это позволяет говорить о применимости методики в сканирующей туннельной микроскопии для классификации частиц наноматериалов.



а)



б)



в)

Рисунок 4 – Композитные фигуры при распознавании образцов меди (а), никеля (б) и цинка (в)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуляев, П. В. Методы и средства контроля дисперсности наночастиц в сканирующей туннельной микроскопии / П. В. Гуляев и др. // Материалы сборника: "Механика и физико-химия гетерогенных сред, наносистем, и новых материалов. Материалы научных исследований". – Ижевск, 2016. – С. 291–311.
2. Липанов, А. М. Инерционный пьезоэлектрический шаговый привод субнанометровой точности / А. М. Липанов, П. В. Гуляев, Е. Ю. Шелковников, А. В. Тюриков // Приборы и техника экспе-

КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАШУМЛЕННЫХ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АППАРАТА НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ

римента. – 2009. – № 5. – С. 121–122.

3. Шелковников, Е. Ю. Диагностика непроводящих поверхностей сканирующим туннельным микроскопом / Е. Ю. Шелковников, А. В. Тюриков, П. В. Гуляев, Н. И. Осипов, С. И. Липанов // Ползуновский вестник. – 2012. – № 3. – С. 186–190.

4. Жуйков, Б. Л. Исследование макроскопической формы зондов СТМ при их изготовлении методом механического среза / Б. Л. Жуйков, Е. Ю. Шелковников, А. В. Тюриков, С. Р. Кизнерцев, Н. И. Осипов // Химическая физика и мезоскопия. – 2015. – Т. 17, № 1. – С. 138–142.

5. Шелковников, Е. Ю. Помехозащищенный микроскоп для идентификации изображений наноструктуры поверхности / Е. Ю. Шелковников, А. В. Тюриков, П. В. Гуляев, С. Р. Кизнерцев, С. И. Липанов // Ползуновский вестник. – 2012. – № 3. – С. 166–170.

6. Шелковников, Ю. К. Применение сферического детектора для анализа СТМ-изображений / Ю. К. Шелковников, П. В. Гуляев, А. В. Тюриков, С. Р. Кизнерцев, А. И. Кириллов // Ползуновский вестник. – 2012. – № 3. – С. 96–99.

7. Шелковников, Е. Ю. Сегментация и идентификация СТМ-изображений модифицируемой поверхности электрохимическим туннельным микроскопом / Е. Ю. Шелковников, М. Р. Гафаров, П. В. Гуляев, А. В. Тюриков, А. С. Суворов // Химическая физика и мезоскопия. – 2012. – Т. 14, № 1. – С. 143–146.

8. Тюриков, А. В. Методика распознавания профилограмм СТМ-изображений с применением нейронной сети / А. В. Тюриков, П. В. Гуляев, С. Р. Кизнерцев, А. С. Суворов // Материалы меж-

дународной НТК «Измерения, контроль, информатизация». – Барнаул : АлтГТУ, 2009. – С. 189–192.

9. Тюриков, А. В. Методика сравнения теоретических и экспериментальных СТМ-изображений на основе алгоритмов сегментации и морфинга / А. В. Тюриков, А. С. Суворов, Н. И. Осипов, С. Р. Кизнерцев, С. И. Липанов // Ползуновский альманах. – 2011. – № 1. – С. 85–87.

10. Шелковников, Ю. К. Методика автоматизированного построения функций принадлежности для оперативного распознавания СТМ-профилограмм / Ю. К. Шелковников, А. В. Тюриков, М. В. Тарасов, П. В. Гуляев // Ползуновский вестник. – 2010. – № 2. – С. 84–88.

11. Липанов, А. М. Применение генетического алгоритма для обучения нейронной сети в задаче идентификации СТМ-изображений / А. М. Липанов, А. В. Тюриков, А. С. Суворов, Е. Ю. Шелковников, П. В. Гуляев // Ползуновский вестник. – 2010. – № 2. – С. 217–221.

Липанов С.И. – аспирант ИМ УрО РАН, e-mail: HPotterS@yandex.ru.

Шелковников Е.Ю. – д.т.н., зав. лаб. ИМ УрО РАН, e-mail: iit@udman.ru.

Тюриков А.В. – к.ф.-м.н., с.н.с. ИМ УрО РАН, e-mail: alex.tyurikov@mail.ru.

Гуляев П.В. – к.т.н., с.н.с. ИМ УрО РАН, e-mail: lucas@e-izhevsk.ru.

Осипов Н.И. – к.т.н., с.н.с. ИМ УрО РАН, e-mail: niosip@mail.ru.