

Restauração de imagens de AFM em paralelo usando um funcional de regularização de Tikhonov

Dalmo Stutz, Antônio José da Silva Neto

UERJ - Universidade Estadual do Rio de Janeiro - Instituto Politécnico,
CP 972825, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ.
E-mail: stutz@iprj.uerj.br, ajsneto@iprj.uerj.br,

Geraldo Antônio Guerrera Cidade

UFRJ – Universidade Federal do Rio de Janeiro,
Instituto de Biofísica Carlos Chagas
CEP 21949-900, Rio de Janeiro, RJ.
E-mail: gcidade@biof.ufrj.br

A técnica de Microscopia de Força Atômica é uma tecnologia que permite a aquisição de imagens em escalas nanométricas de quase todo tipo de superfície, inclusive de materiais não-condutores (polímeros, cerâmicas, amostras biológicas, etc.) e tem sido empregada em várias áreas de pesquisa com propósitos tanto científicos quanto comerciais. Devido às características do equipamento, entretanto, uma imagem obtida por um Microscópio de Força Atômica (AFM - Atomic Force Microscope) normalmente apresenta uma relação sinal/ruído pobre, causados por borramentos e ruídos aditivos. De forma a recuperar esta imagem ou, ao menos, minimizar-lhe os efeitos de degradação, métodos de restauração de imagens têm sido empregadas, tais como morfologia matemática e convolução, por exemplo. Este trabalho mostra que uma abordagem computacional paralela para restauração dessas imagens baseada na minimização de um funcional de Tikhonov com o emprego técnicas de decomposição de domínio tem produzido resultados satisfatórios com desempenhos computacionais aceitáveis e baixos tempos de processamento.

Palavras-chave. Regularização de Tikhonov, Restauração de imagens, Microscopia de Força Atômica (AFM), Processamento paralelo.

1 Introdução

Empregado no processo de aquisição de imagens nanométricas da superfície de materiais condutores ou não, o AFM [1] também é capaz de produzir imagens topológicas tridimensionais de estruturas vivas com grande utilidade e aplicação em estudos citológicos e histológicos. Atualmente, o AFM tem sido empregado em muitas outras aplicações e áreas de interesse, tais como: análise de DNA, estudo de estruturas e densidades atômicas de proteínas, caracterização de nanopartículas aplicadas à engenharia, redes neurais, estudos de semicondutores, etc.

De forma simplificada, um AFM usa uma sonda (cantilever) com uma ponta em formato piramidal (tip) em sua extremidade, que interage com a superfície da amostra que está sendo analisada.

Devido, predominantemente, às forças de van der Waals, a ponteira em contato com a superfície da amostra flexiona o cantilever. Um feixe de laser incidindo sobre o ele é refletido de volta para um sensor fotodetector, produzindo um sinal captado por um microcomputador que irá gerar uma representação

da imagem da superfície da amostra que está sendo analisada (Figura 1).

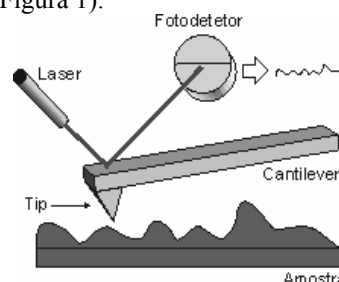


Figura 1: Esquema de funcionamento do AFM.

2 Modelo de degradação

Devido às características do microscópio, as imagens de AFM apresentam uma relação sinal/ruído (SNR) pobre, causados por efeitos degenerativos em sua qualidade sejam ocasionados por borramentos ou por contaminação de ruído aditivos do próprio equipamento.

No modelo de degradação de imagens de AFM (Figura 2), um operador borramento B , também conhecido como Função de Espalhamaneto Pontual (PSF – Point Spread Function) recebe uma imagem real x , que acrescida do ruído aditivo η , resulta na imagem degradada y obtida pelo AFM.

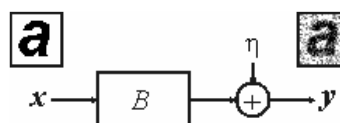


Figura 2: Modelo de degradação de imagens de AFM.

Disso resulta na equação geral do modelo de degradação definida como

$$y = B * x + \eta \quad (1)$$

Devido à dificuldade em se obter esta representação do modelo de iteração, o operador B assumido será uma representação matemática do tipo gaussiana [5] dada por

$$B \propto e^{-\frac{d^2}{\sigma^2}} \quad (2)$$

onde d é a distância dos pontos em relação a um ponto P qualquer da imagem e σ^2 é a variância que representa diferentes ponteiras (tips) [5].

3 Técnica de restauração baseado no funcional de regularização de Tikhonov

A Transformada Rápida de Fourier (Fast Fourier Transform - FFT) e sua inversa (FFT⁻¹) são técnicas muito utilizadas em restauração de imagens. Apesar de simples e de rápida aplicação, a FFT não é muito eficaz para resolver o problema de restauração de imagens de AFM. Isto ocorre porque este método penaliza tanto o ruído quanto os sinais de alta frequência, que poderiam conter informações úteis no processo de restauração [5]. Em substituição à ela, uma outra técnica algébrica, não usual, é empregada para deconvoluir as imagens borradas do AFM com resultados satisfatórios. Esta técnica é baseada na minimização do Funcional de Regularização de Tikhonov [5],[8].

Em termos gerais, a equação (1) descreve o modelo de aquisição de imagens de AFM. Porém, uma imagem compõe-se, ponto a ponto, pela convolução entre a ponteira e a superfície da amostra que está sendo analisada. Desprezando-se o ruído aditivo e redefinindo a equação, tem-se

$$y(i, j) = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N b(k, l) \hat{x}(i+k, j+l), \quad i, j = 1, 2, \dots, M \quad (3)$$

onde $y(i, j)$ representa a imagem no ponto (i, j) , N é um valor arbitrário que define a dimensão do operador B ($dim B=N$), aqui expressado por $b(k, l)$, e $\hat{x}(i+k, j+l)$ equivale às intensidades dos termos da vizinhança do ponto (i, j) , de acordo com a dimensão de B ($dim B$).

Partindo da Eq. (3), na busca de uma estimativa da imagem real, denotado aqui por \hat{x} , procura-se minimizar o Funcional de Regularização de Tikhonov, dado por

$$Q(\hat{x}) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M [y(i, j) - \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N b(k, l) \hat{x}(i+k, j+l)]^2 + \alpha S \quad (4)$$

onde αS é o termo de regularização, que irá tratar da porção ruidosa da imagem, α o parâmetro de regularização e S corresponde a uma família de funções de regularização, construída com distâncias de Bregman [2], baseados no funcional q -discrepância [3],[5].

$$S = D_q(\hat{x}, \bar{x}) = \frac{1}{1+q} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \left\{ \hat{x}_p \left[\frac{(\hat{x}_{i,j})^q - (\bar{x}_{i,j})^q}{q} \right] - (\bar{x}_{i,j})^q (\hat{x}_{i,j}) - \bar{x}_{i,j} \right\} \quad (5)$$

onde \bar{x} representa um valor referência para o ruído aditivo, que pode ser a própria imagem borrada obtida experimentalmente pelo AFM ou uma imagem com valor constante qualquer como, por exemplo, a média das intensidades dos diversos pixels da imagem, e q é um parâmetro ajustável.

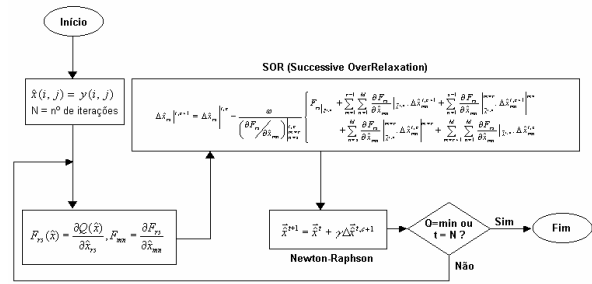


Figura 3: Algoritmo serial de restauração baseado no funcional de regularização de Tikhonov

4 Problema de bordas da imagem

De um modo geral, a Eq.(3) descreve como uma imagem experimental é composta. Entretanto, uma imagem possui um tamanho determinado e finito, com bordas bem demarcadas onde o operador B determina uma área de influência ao redor de um ponto central qualquer, em que os pontos próximos às bordas, diferente dos demais, sofrem influências de elementos que não tem representação na imagem (Figura 4).

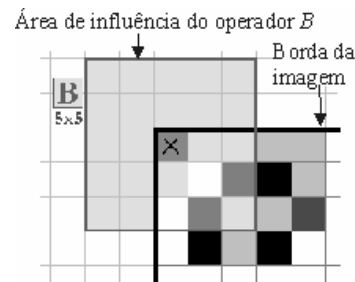


Figura 4: Borda da imagem e área de influência do operador B ($dim B=5$) em torno do ponto X .

Na tentativa de representar os pontos que faltam (externos à borda da imagem), algumas técnicas foram analisadas e testadas. Apesar de introduzir discretas distorções próximas às bordas de uma imagem recuperada, (Figura 5), a melhor técnica encontrada e que deu resultados satisfatórios foi a aquela onde os elementos que não estão representados são desconsiderados do cálculo empregado no processo de restauração, aqui denominado técnica de “Corte”.

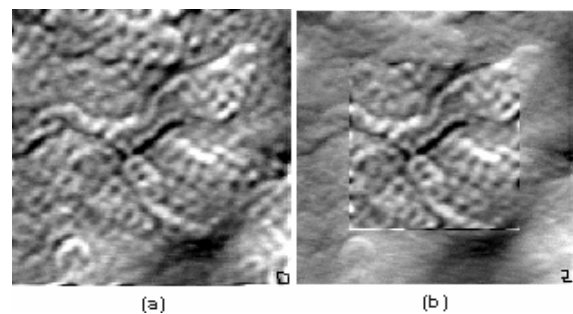


Figura 5: Imagem de AFM da superfície de um eritroblasto em estado leucêmico (1000nm x 1000nm) (a) restaurado integralmente e (b) parcialmente usando a técnica de "Corte".

5 Processo de decomposição

Devido a natureza estritamente serial do algoritmo de restauração de imagens com o Funcional de Regularização de Tikhonov (Figura 3) e as características do processo de restauração, onde um conjunto de operações são aplicadas à todos os pontos da imagem, a técnica de decomposição do domínio torna-se um processo natural para ser empregado na implementação do programa paralelo.

Na decomposição de domínio, um conjunto de dados (imagem) é particionado em unidades menores e cada um deles é enviado à uma tarefa independente, distribuída à múltiplos processadores rodando em paralelo.

Existe uma grande variedade de formas de se particionar uma imagem e cada uma delas se aplica à um problema em particular. A forma mais adequada ao problema de restauração empregada foi a partição bloco-linha, partição em que a imagem é dividida em faixa horizontais (Figura 6).

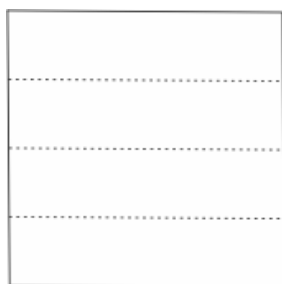


Figura 6: Partição bloco-linha.

6 Problema das bordas artificiais

A primeira técnica de decomposição de domínio empregada e testada no processo de restauração foi a do tipo Striped Partition. Nela, uma imagem é particionada em np blocos disjuntos e cada um deles é enviado a uma unidade de processamento diferente. Após a restauração, todas as partes são reunidas em uma única imagem de forma a compor a imagem final restaurada (Figura 7).

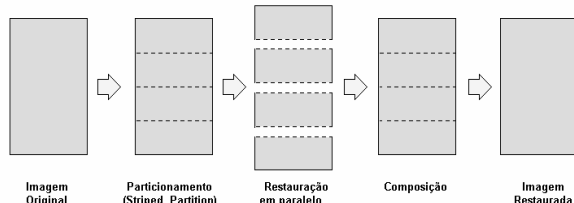


Figura 7: Processo de restauração em paralelo usando Striped Partition

No processo de restauração, esta técnica mostrou-se ineficiente pois ela produz ruídos na imagem final restaurada (Figura 8). Percebeu-se, então, que a decomposição de domínio por introduzir bordas (artificiais) na imagem onde não elas existiam causam problemas na restauração de imagens em paralelo [7].

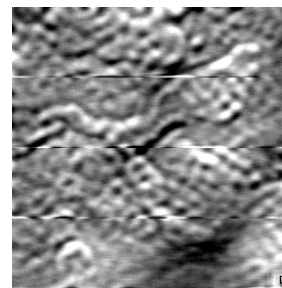


Figura 8: Perturbações próximas às bordas artificiais numa imagem restaurada em paralelo, usando o método Striped Partition e $np=4$.

Com o emprego do método Overlapping Partition, procurou-se resolver o problema ou, ao menos, minimizar os efeitos introduzidos pelas bordas artificiais no processo de restauração em paralelo. Diferente do Striped Partition, as partições resultantes não são disjuntas e se sobrepõem às partições vizinhas (Figura 9).

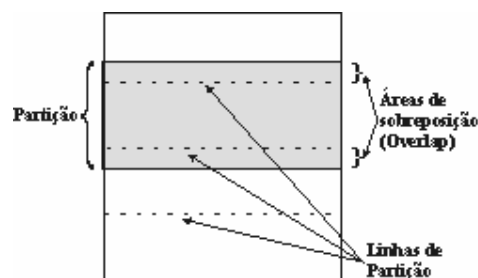


Figura 9: Overlapping Partition e, em detalhe, é mostrado uma partição (área cinza) e as áreas de sobreposição com as partições vizinhas.

O emprego do Overlapping Partition objetiva estender as bordas artificiais e seus efeitos para além das linhas de partição dentro da área de sobreposição (overlap). Após o processo de restauração em paralelo, a área de sobreposição é rejeitada e o restante é reunido para compor a imagem final (Figura 10).

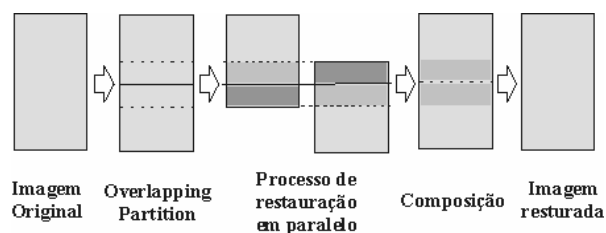


Figura 10.: Processo de restauração em paralelo usando Overlapping Partition.

Algumas abordagens usando o Overlapping foram analisadas e testadas e uma delas foi escolhida, pois apresentou resultados melhores do que as outras. Nela, além do processo de partição ser empregado, as áreas de sobreposição são substituídas pela média ponto a ponto com a área correspondente na partição vizinha à cada iteração do processo de restauração [7] (Figura 11).

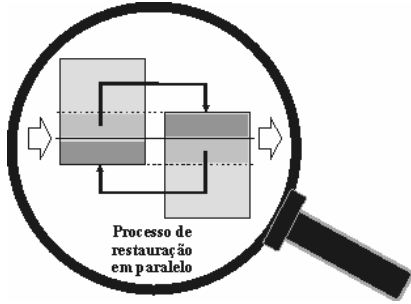


Figura 11: Detalhe do processo de restauração em paralelo usando Overlapping Partition

7 Processo de avaliação

7.1 Desempenho

Quando se discute a análise de desempenho de programas paralelos, faz-se necessária a utilização de medidas, que determinem e quantifiquem o desempenho deles. Dentre elas, as mais comuns são:

1) Speedup que mede a melhoria de desempenho, quando se modifica o hardware empregado.

$$S_p = \frac{T_s(n)}{T_p(n, np)} \quad (6)$$

onde n é a carga de trabalho, $T_s(n)$ é o tempo de processamento obtido com um programa serial otimizado, empregando o melhor algoritmo serial, e $T_p(n, np)$ o tempo alcançado com o programa paralelo, usando np processadores.

2) Eficiência:

$$E_p = \frac{S_p}{np} \quad (7)$$

7.2 Resultados de restauração

A qualidade da imagem restaurada no processo de restauração em paralelo foi avaliada por duas metodologias:

1) A primeira utilizou-se uma imagem-padrão (Figura 12) como referência e modificações desta foram usadas para simular os efeitos degenerativos que são produzidos durante a aquisição de imagens de AFM, para se avaliar o quanto as restaurações da imagem modificada se aproximam da imagem-padrão original [4].

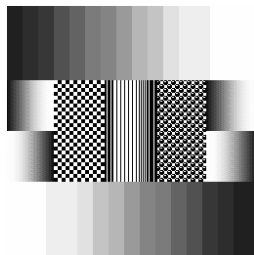


Figura 12: Imagem-padrão [4].

2) A segunda, utilizou-se de comparações entre as imagens restauradas serialmente, com aquelas que são obtidas de forma paralela, considerando que o método de restauração feito serialmente tem a sua eficiência já comprovada [4],[6]. Este método tem dois propósitos: (a) ser substituído do primeiro quando não existir a imagem de referência, por exemplo, imagens de AFM; ou (b) ser complemento do primeiro método, quando houver restaurações seriais e em paralelo.

A análise das imagens restauradas é feita por algumas medidas numéricas:

1) Erro médio quadrático (MSE - Mean Square Error):

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M [f(i, j) - \tilde{f}(i, j)]^2}{N_i} \quad (8)$$

onde (i, j) são as coordenadas da imagem, $N_i = M \times M$ é o número de pixels da imagem, f a imagem original e \tilde{f} a imagem restaurada.

2) Erro médio quadrático relativo: usado somente quando a imagem original (referência) existir.

$$\%MSE = \frac{MSE_{\text{imagem modificada}}}{MSE_{\text{imagem restaurada}}} \quad (9)$$

8 Resultados

A implementação do programa paralelo foi feita em C, usando a biblioteca MPI e a execução do programa paralelo foi feita num cluster (Cosmos) localizado no IPRJ/UERJ, montado sobre o sistema operacional Slackware 9.0, rodando MPI/LAM v 7.0, contendo 16 nós composto de um microcomputador AMD K6II/450MHz, 128Mb de memória, HD de 15Gb e uma placa de rede 10/100, interligados por um switch Intel 10/100.

8.1 Avaliação de resultados

Para a avaliação de resultados, foram feitos seis estudos de casos usando imagens de 256x256 pixels em que a restauração em paralelo foi utilizada e avaliada, cujo resultados são apresentados na Tabela 1.

Na restauração paralela foram empregados os mesmos parâmetros utilizados na restauração serial. Além disso, utilizou-se um total de 4 unidades de processamento ($np=4$).

Caso 1: Imagem modificada da imagem-padrão por: $dimB=5$, $\sigma^2=20$ e $SNR=20$ dB.

Caso 2: Imagem modificada da imagem-padrão por: $dimB=5$, $\sigma^2=20$ e $SNR=40$ dB.

Caso 3: Imagem de biológica de AFM de um eritroblasto em estado leucêmico de 1000nm x 1000nm

Caso 4: Imagem de biológica de AFM de um eritroblasto em estado leucêmico de 600nm x 600nm

Caso 5: Imagem de AFM de um filme de carbono

amorfo hidrogenado de $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$

Caso 6: Imagem de AFM de um filme termoplástico de amido de milho de $4\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$

	Processamento	MSE	% MSE	Total de pontos diferentes
Caso 1	Serial	2741,83	76,01	60077 (91,67%)
	Paralelo*	2606,5	72,26	60577 (92,43%)
	Paralelo**	39,651	N/A	52422 (79,99%)
Caso 2	Serial	1649,4	49,30	57130 (87,17%)
	Paralelo*	1586,8	47,43	56443 (86,13%)
	Paralelo**	25,326	N/A	31689 (48,35%)
Caso 3	Paralelo**	0,2359	N/A	11761 (17,95%)
Caso 4	Paralelo**	0,0971	N/A	6190 (9,45%)
Caso 5	Paralelo**	0,0904	N/A	5812 (8,87%)
Caso 6	Paralelo**	0,5676	N/A	30320 (46,26%)

Legenda: (*) Resultado tomando-se como referencia a imagem-padrão. (**) Resultado tomando-se como referencia uma imagem restaurada serial-mente. (N/A) Não se aplica.

Tabela 1: Avaliação de resultados

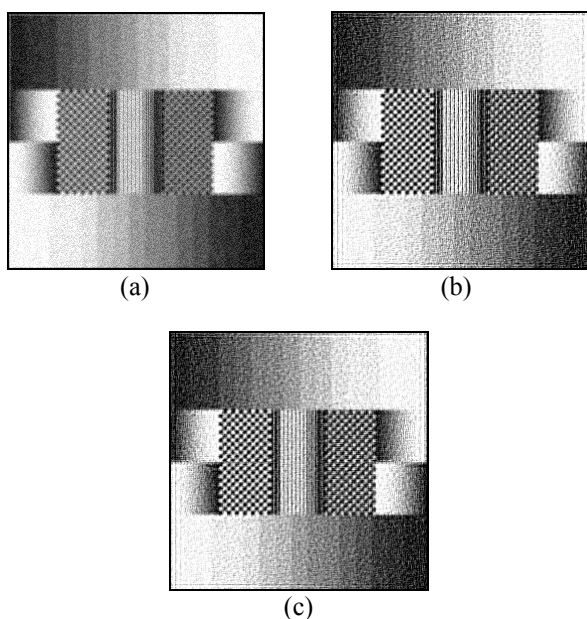


Figura 13: Caso 1. (a) Imagem-padrão modificada e restaurações feitas (b) em serie e (c) em paralelo.

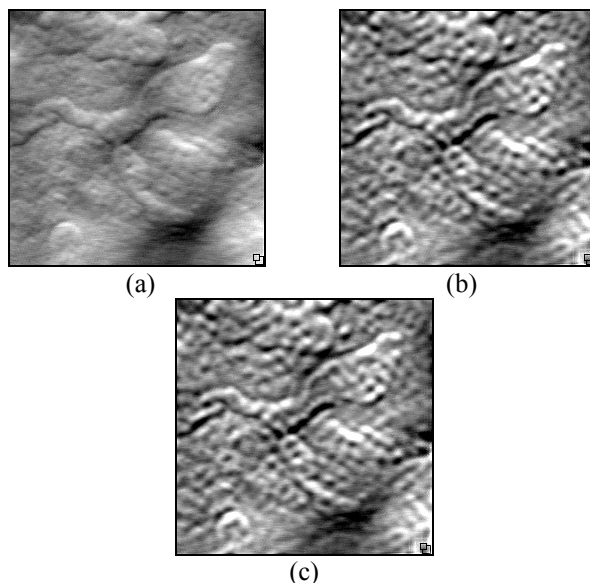


Figura 14: Caso 3. (a) Eritroblasto de $1000\text{nm} \times 1000\text{nm}$ em estado leucêmico e restaurações feitas (b) em serie e (c) em paralelo.

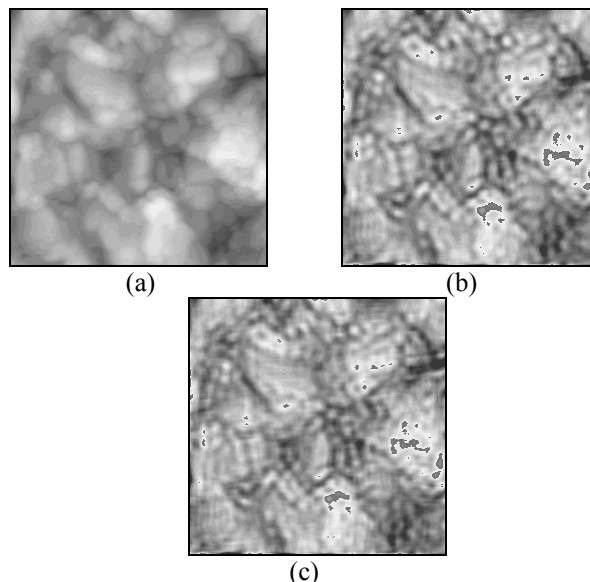


Figura 15: Caso 5. (a) Filme termoplástico de amido de milho de $4\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$ e restaurações feitas (b) em serie e (c) em paralelo.

8.2 Avaliação de desempenho

De maneira que os dados registrados refletissem, de forma fiel, as medidas reais de desempenho alcançado, a geração dos resultados de desempenho, seguiu a metodologia: (a) empregou-se os recursos computacionais disponíveis na Cosmos tanto para o processamento serial quanto paralelo; e (b) os tempos de processamento foram obtidos através da média de três tempos computacionais. Nos testes realizados, foram empregadas duas imagens: (a) uma de 256×256 pixels e (b) uma outra de 512×512 pixels. Os resultados são mostrados nas Tabela 2 e 3.

np	Tempos médios de execução em paralelo(seg.)	Speedup (Sp)	Eficiência (Ep)
1	477,33	0,99	0,99
2	280,00	1,69	0,84
3	234,33	2,02	0,67
4	189,00	2,50	0,63
5	170,00	2,78	0,56
6	155,67	3,04	0,51
7	140,33	3,37	0,48
8	136,33	3,47	0,43
Tempo médio de execução do programa serial = 473,00 (seg.)			

Tabela 2 - Medidas de desempenho de processamentos em paralelo na restauração de uma imagem de 256x256 pixels.

np	Tempos médios de execução em paralelo(seg.)	Speedup (Sp)	Eficiência (Ep)
1	1964,00	0,98	0,98
2	1099,00	1,75	0,87
3	799,00	2,40	0,80
4	635,00	3,02	0,76
5	542,67	3,54	0,71
6	480,67	3,99	0,67
7	431,33	4,45	0,64
8	395,00	4,86	0,61
Tempo médio de execução do programa serial = 1919,67 (seg.)			

Tabela 3 - Medidas de desempenho de processamentos em paralelo na restauração de uma imagem de 512x512 pixels.

9 Conclusões

A paralelização do algoritmo de restauração de imagens de AFM usando o funcional de regularização de Tikhonov é feita através de técnicas de decomposição de domínio, devido às características do próprio algoritmo. Entretanto, a decomposição de domínio introduz bordas artificiais na imagem onde elas não existem, produzindo distorções indesejáveis na imagem final restaurada.

Essas distorções foram minimizadas através do emprego de uma abordagem usando o método Overlapping Partition onde as áreas de sobreposição são substituídas, a cada iteração, pela média ponto a ponto com a área correspondente na partição vizinha.

Nos casos analisados, os resultados produzidos com a abordagem paralela foram satisfatórios e se aproximaram bastante dos resultados produzidos de forma serial. O emprego do processamento paralelo permitiu que as restaurações fossem feitas em um tempo relativamente menor que aquele que seria

consumido em uma restauração serial, alcançando o objetivo central deste trabalho que era produzir resultados satisfatórios com desempenhos computacionais aceitáveis e menores tempos de processamento.

Referências

- [1] BINNIG, G.; QUATE, E.C.F.; GERBER, C.H., Atomic Force Microscope, Phys. Rev. Lett., v. 56, n. 9, p. 930-933, 1986.
- [2] BREGMAN, L.M., The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming. Zh. vychisl. Mat. mat. Fiz., v. 7, n.3, p. 620-631, 1967.
- [3] CARITA MONTERO, R.F.; ROBERTY, N.C.; SILVA NETO, A.J. Natural base construction for absorption coefficient estimation in heterogeneous participating media with divergent beams. In: International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and practice, 3, Port Ludlow, Washington, 1999. Proceedings..
- [4] CIDADE, G.A.G., Desenvolvimento de metodologias de aquisição e processamento de imagens biológicas em microscopia de força atômica (AFM). 2000, Tese (doutorado), Instituto de Biofísica Carlos Chagas, Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- [5] CIDADE, G.A.G.; ANTENEODO, C.; ROBERTY, N.C.; SILVA NETO, A.J. A generalized approach for atomic force microscopy image restoration with Bregman distances as Tikhonov regularization terms, Inverse Problems in Engineering, 2000.
- [6] FURTADO, V., Avaliação do uso do funcional de Tikhonov com uma família de funções de regularização a um parâmetro para a restauração de imagens biológicas. 2002. Dissertação (mestrado), Pós-graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo.
- [7] STUTZ, D., Restauração de imagens em escala nanométrica com funcional de regularização de Tikhonov e computação paralela. 2004. Dissertação (mestrado), Pós-graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo.
- [8] KRESS, R., Linear integral equations. Applied Mathematical Sciences, v. 82, Springer-Verlag, 1989.