

APLICACIONES DE LA TRANSFORMADA DE "WAVELETS" (ONDELETAS) AL PROCESAMIENTO DE IMÁGENES DE MICROSCOPIO ELECTRÓNICO Y DE PATRONES DE RETROREFLEXIÓN.

L. Beltrán del Río, A. Gomez, D. Romeu y M. José Yacamán

Instituto de Física U.N.A.M.
Apartado postal 20-364, México D.F. C.P. 01000

En este trabajo se explora el uso de las llamadas transformadas de wavelet (ondeletas) en el procesamiento digital de imágenes. Después de revisar las transformadas de ondeletas y sus principales propiedades matemáticas se muestran algunas imágenes artificiales con las cuales se ilustra cómo la transformada puede ser útil para revelar bordes y fronteras de conglomerados ("clusters"). En seguida se aplica esta técnica al estudio de fronteras hexagonales en catalizadores de Co-Mo-S y se muestra cómo el contraste de las fronteras puede enfatizarse con las ondeletas al tiempo que se filtra el ruido. Finalmente se aplica esta técnica al análisis de patrones de retroreflexión ("back scattering") y se demuestra que esta técnica permite una considerable reducción del ruido y un énfasis de las líneas de difracción.

I- Introducción.

Muchas de las técnicas modernas para la investigación estructural de los materiales nos proporcionan su información en forma de imágenes. Algunos ejemplos de esto son el microscopio electrónico de transmisión (tanto en sus modos de campo claro y oscuro como en el modo de difracción), el microscopio electrónico de barrido, el microscopio Auger, el microscopio de tunelaje, el microscopio óptico y el microscopio iónico de emisión de campo.

Además otras técnicas dan su información en forma de señales unidimensionales (que podríamos considerar como imágenes unidimensionales), siendo los difractómetros de rayos X un buen ejemplo de esto.

En todos estos casos las señales pueden tener "enmascarada" la información de interés. Por ejemplo el nivel de ruido puede ser tal que impida la detección de información que se sabe o sospecha que está presente en la imagen. A veces no es el ruido, sino las demás componentes de la señal lo que enmascara la información deseada.

Por ello se han venido desarrollando desde hace varios años diversas técnicas de procesamiento digital de imágenes para que, con el auxilio de las computadoras, podamos reducir el ruido y enfatizar los detalles de las imágenes que son relevantes en un momento dado [referencias 1-4].

De entre las técnicas de procesamiento digital de imágenes destacan las basadas en la transformada de Fourier, que nos permiten hacer el análisis no en el dominio de las "posiciones" (es decir de la imagen original) sino en el dominio de las frecuencias espaciales (es decir, de las periodicidades presentes).

Sin embargo han aparecido recientemente diversas técnicas que permiten un análisis híbrido, caracterizando las imágenes simultáneamente en posición y en frecuencia espacial (en la medida en que los principios de incertidumbre lo permiten).

Ejemplos de estas técnicas serían la distribución de Wigner, la transformada de Fourier "ventaneada" (Gabor) y la transformada de ondeleta ("wavelet").

El propósito del presente trabajo es explorar el uso de las transformadas de ondeleta en el procesamiento digital de imágenes de microscopio electrónico de transmisión y en patrones de difracción.

2- La transformada de ondeleta.

En las siguientes subsecciones presentamos una revisión general de las transformadas de ondeleta. Por simplicidad toda la teoría se presenta en el caso unidimensional. En las imágenes (bidimensionales) se usa la generalización obvia de las ecuaciones (sección 2-16). Las referencias 5,6 y 7 presentan la teoría en gran detalle.

2-1- Definiciones básicas

Sea $\psi(x)$ una función compleja de variable real (que llamaremos "ondeleta"). Se supondrá que ψ satisface la llamada condición de admisibilidad (que discutimos en la sección 2-2).

Dados $s \neq 0$ y u , números reales, formamos las funciones re-escaladas y desplazadas $\sqrt{|s|} \psi(s(x-u))$.

Cuando $u=0$ usamos la abreviatura $\psi_s(x) = \sqrt{|s|} \psi(sx)$.

Sea $f(x)$ otra función compleja (la función o "señal" que se va a analizar). Definimos la transformada de $f(x)$ con respecto a la ondeleta $\psi(x)$ como

$$Wf(s,u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \sqrt{|s|} \psi^*(s(x-u)) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \psi_s^*(x-u) dx$$

2-2 La condición de admisibilidad.

Se puede demostrar que, para que haya una inversa para la transformada, la ondeleta ψ debe satisfacer la llamada condición de admisibilidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\psi}(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega < \infty$$

donde $\hat{\psi}$ denota la transformada de Fourier de ψ .

Si $\hat{\psi}(\omega)$ tiende a cero suficientemente rápido a medida que $|\omega| \rightarrow \infty$ entonces la condición de admisibilidad equivale a decir que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx = 0$$

2-3- La transformada de ondeleta como un producto interior.

La transformada Wf puede ser

escrita como

$$Wf(s,u) = \langle \psi_s(x-u), f(x) \rangle$$

donde \langle, \rangle denota el producto interior habitual

$$\langle h, f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} h^*(x) f(x) dx$$

2-4 La transformada de ondeleta como una convolución

Definamos $\tilde{\psi}_s(x) = \psi_s(-x)$, entonces

$$Wf(s,u) = [f * \tilde{\psi}_s^*](u)$$

donde $*$ denota la operación de convolución definida en general como

$$[h*f](u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(u-x) dx$$

2-5 Representación de Fourier

De la representación como convolución se sigue que la transformada de Fourier de la transformada de ondeleta (con respecto al parámetro de translación u) es, por el teorema de la convolución,

$$\hat{W}f(s,\omega) = \hat{f}(\omega) \mathcal{F} \tilde{\psi}_s^*$$

$$= \hat{f}(\omega) (s^{-1/2}) \hat{\psi}^*(\omega/s)$$

(aquí el símbolo \mathcal{F} se ha usado para denotar la transformada de Fourier).

Esta representación es importante pues nos dice que la transformada de ondeleta es un filtro lineal que, como veremos mas adelante, es un filtro pasabanda.

2-6 Inversión de la transformada.

Se puede demostrar que la transformada de ondeleta se puede invertir de la siguiente manera:

$$f(x) = (1/C_\psi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Wf(s,u) \psi_s(x-u) ds du$$

donde $C_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\psi}(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega$

De esta expresión se puede ver que la función $f(x)$ puede pensarse como una superposición de las diversas ondeletas.

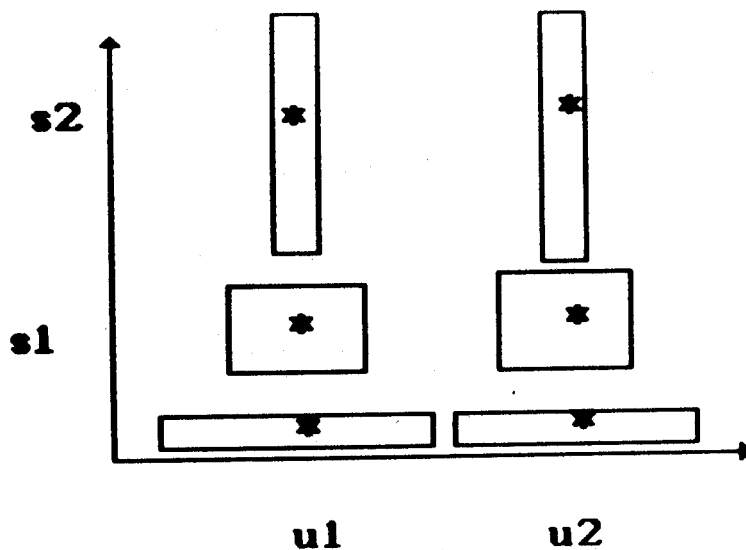


Figura 1. Se muestra el tipo de partición del espacio fase que hace la transformada de ondeleta. El espacio se divide en celdas desiguales pero de igual área.

2-7 Pasabandas y anchura de bandas

En lo que sigue supondremos que $\psi(x)$ está normalizada de modo que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\psi}(\omega)|^2 d\omega = 1$$

El centro de la pasa-banda de $\hat{\psi}(\omega)$ se calcula como

$$\omega_0 = \int_0^{\infty} \omega |\hat{\psi}(\omega)|^2 d\omega$$

Nota: usualmente ψ es real de modo que $|\psi(\omega)| = |\psi(-\omega)|$ y la integral de $-\infty$ a $+\infty$ daría cero. Por esto la integral se toma de 0 a $+\infty$.

La anchura r.m.s. de $\hat{\psi}(\omega)$ alrededor de ω_0 se define, consecuentemente, como σ_ω donde

$$\sigma_\omega^2 = \int_0^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 |\hat{\psi}(\omega)|^2 d\omega$$

El centro de la pasa-banda de $\hat{\psi}(\omega/s)$ (y consecuentemente de $\mathcal{F}\psi_s$) es, entonces,

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \omega |\hat{\psi}^*(\omega/s)|^2 d\omega / \int_0^{\infty} |\hat{\psi}^*(\omega/s)|^2 d\omega \\ &= s \int_0^{\infty} \omega |\hat{\psi}(\omega)|^2 d\omega = s\omega_0 \end{aligned}$$

La anchura rms of $\hat{\psi}(\omega/s)$ está dada por $s\sigma_\omega$, puesto que

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 |\hat{\psi}(\omega/s)|^2 d\omega / \int_0^{\infty} |\hat{\psi}^*(\omega/s)|^2 d\omega \\ &= s^2 \sigma_\omega^2 \end{aligned}$$

Por ello vemos que ψ_s representa una función con frecuencias alrededor de $s\omega_0$ con desviación rms $s\sigma_\omega$.

2-8- Localización espacial

Haciendo la misma clase de cálculos, pero ahora en el espacio real, encontramos que la ondeleta está centrada alrededor de cero (siempre y cuando se suponga que $|\psi(x)|$ es par) pues

$$\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = 0$$

La desviación r.m.s. de ψ con respecto a 0 estará dada por

$$\sigma_u^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx$$

Se puede ver fácilmente que $\psi_s(x-u)$ está concentrada alrededor de

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_s(x-u)|^2 dx$$

$$s \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(s(x-u))|^2 dx = u$$

La desviación r.m.s de $\psi_s(x-u)$, $\sigma_{u,s}^2$, está dada por σ_u/s puesto que

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x-u)^2 |\psi_s(x-u)|^2 dx = \sigma_u^2 / s^2$$

de modo que $\sigma_{u,s} = \sigma_u / s$.

Por ello vemos que las funciones $\psi_s(x-u)$ están centradas alrededor de u con desviaciones rms σ_u/s .

2-9 Localización en espacio fase

La transformada de ondeletas es una descomposición en funciones que están razonablemente bien localizadas tanto en posición como en frecuencia espacial (o tiempo y frecuencia), claro que dentro de las limitaciones del principio de incertidumbre $\sigma_u \sigma_\omega \geq 1/2$.

Quizá el ejemplo mas sencillo de localización en tiempo y frecuencia sea una partitura musical, en la cual uno indica cuándo una nota se toca y cuál es su frecuencia (pero tome en cuenta que no es posible dar ambos datos con precisión infinita).

De la sección previa puede verse que el espacio fase puede ser dividido en celdas como se ilustra en la figura 1. Note que el tamaño de las celdas varia con s .

22-10 Transformadas discretas: Muestreo

En la práctica uno trabaja con transformadas en las que las variables s y u no son continuas pero se muestrean. A fin de ajustarnos a la forma de las celdas (sección 2-9), el muestreo se elige de modo que tenga la forma

$$s = \alpha^j, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

$$u = n\beta/\alpha^j, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \beta \in \mathbb{R}$$

En el caso $\alpha=2$ tenemos una interpretación interesante. Puesto que s etiqueta frecuencias (los centros de las

pasa-bandas) el parámetro j etiqueta las "octavas". Por otro lado las anchuras de banda van como $1/s$ de modo que si comenzamos con una ondeleta "madre" y nos imaginamos que es una "nota redonda", digamos do, entonces la ondeleta para $j=1$ corresponderá a una nota blanca pero una octava arriba, $j=2$ corresponde a una nota negra (otra octava mas arriba) etc. Por esta razón se dice que la transformada de ondeleta es una "partitura" de la señal.

2-11 Algo de heurística

Considere un microscopio con función de respuesta a los pulsos $t(x)$ y función de transferencia $T(\omega)=t(\omega)$.

Un objeto $V(y)=\delta(y-y_0)$ formará una imagen $t(y-y_0)$ de modo que la imagen de un objeto arbitrario $V(y)$ será

$$\phi(x) = \int t(y-x)V(y) dy$$

Ahora consideremos una serie de microscopios con respuestas $t(sx)$ donde $s > 0$. El parámetro s controla la resolución, entre mas grande sea s mejor será la resolución del instrumento.

Si definimos $\psi(x)$ como

$$\psi(x) = t^*(-x)$$

$$\phi(x) = s^{-1/2} W_V(s, x).$$

La función de transferencia es, entonces,

$$T(\omega) = \hat{\psi}^*(\omega)$$

y la transformada de ondeleta describe (excepto por factores multiplicativos) la imagen de un objeto $V(x)$ con función de respuesta $t(x)=\psi(-sx)$.

2-12 Revelando bordes.

Considere una escalón $s(x)$ definido como $s(x)=-1/2$ para $x<0$ y $s(x)=1/2$ para $x>0$. $S(x)$ tiene la conocida propiedad de que $ds(x)/dx = \delta(x)$.

Considere

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y) s(x-y) dy$$

entonces, derivando,

$$dh/dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y) \delta(x-y) dy = \psi(x)$$

$$y \quad h(x) = \int_{-\infty}^x \psi(x) dx$$

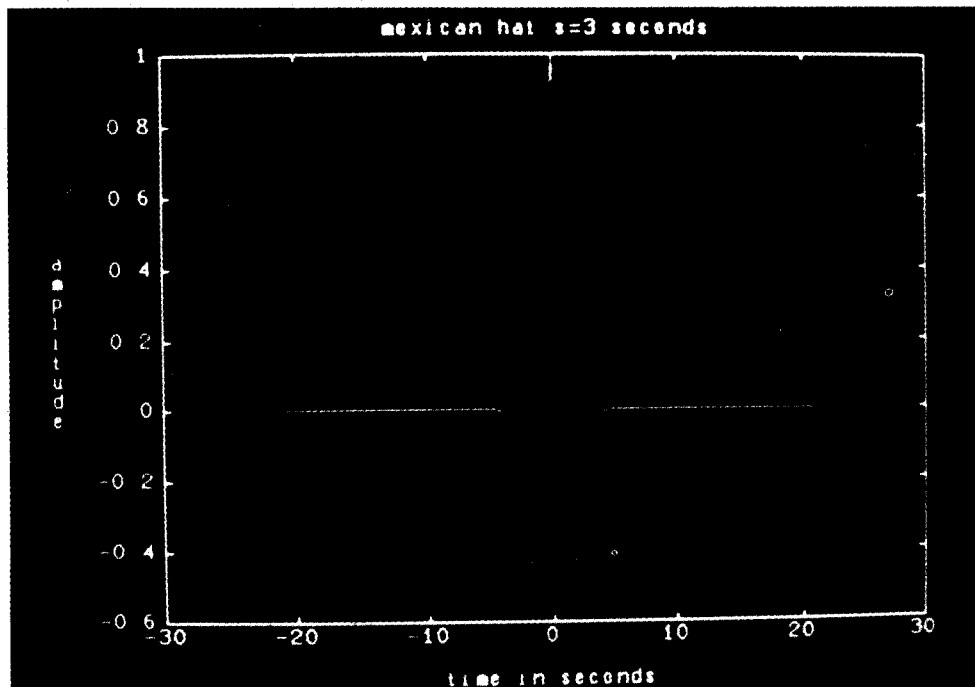


Figura 2a. Sombrero Mexicano. en espacio real

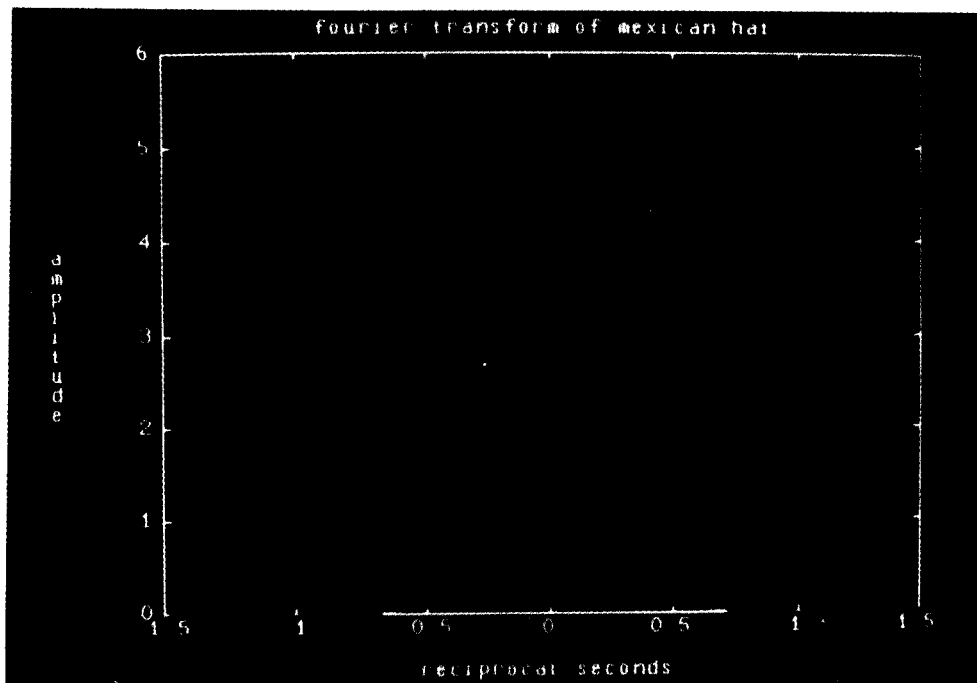


Figura 2b. Sombrero Mexicano. en espacio reciproco

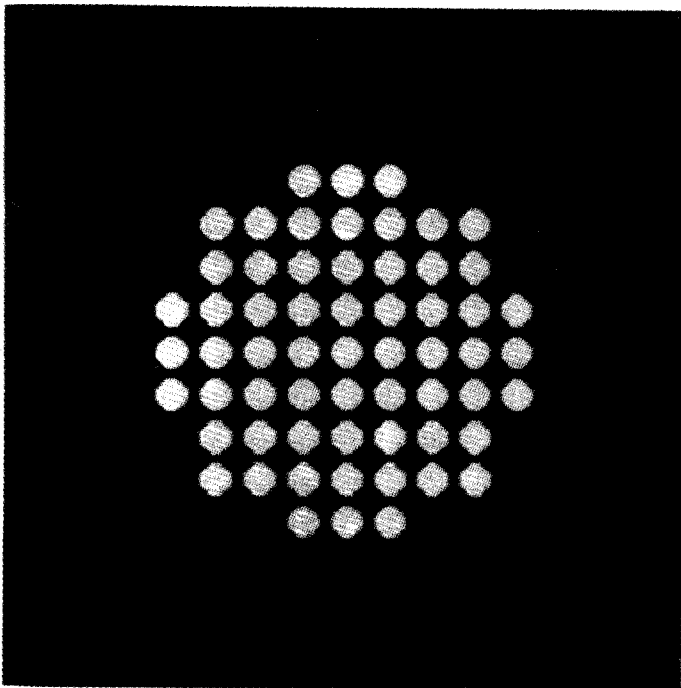


Figura 3a. Ejemplo de realce de bordes usando la transformada de ondeleta. La imagen es un arreglo de círculos simulando una nanofase. esta es la imagen original.

lo que nos dice que en los bordes la transformada de ondeleta nos dará una integral de la función ondeleta. Los bordes pueden ser enfatizados mediante una elección adecuada de ondeleta.

2-13 Propiedades de reescalamiento y desplazamiento.

Para ciertos propósitos es conveniente notar que si la función f se cambia de modo que

$$f(x) \longrightarrow f(x-b)$$

entonces las transformadas también cambian y

$$Wf(s,u) \longrightarrow Wf(s,u-b).$$

Análogamente, bajo un cambio de escala

$$f(x) \longrightarrow f(\lambda x)$$

la transformada cambia a

$$Wf(s,u) \longrightarrow \sqrt{\lambda} Wf(s/\lambda, u\lambda)$$

Es por estas propiedades que las ondeletas son muy populares para analizar fractales.

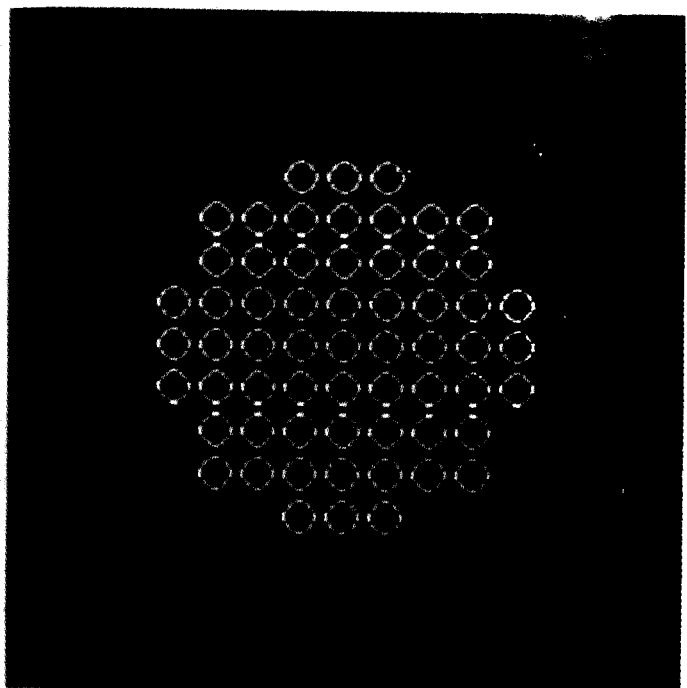


Figura 3b. Imagen procesada.

2-14 El sombrero mexicano

Uno de las ondeletas más populares es el llamado sombrero mexicano que está dado por (excepto por constantes de normalización)

$$\psi(x) = (1-x^2) \exp(-x^2/2)$$

Nótese que ψ es menos la segunda derivada de la Gaussiana $\exp(-x^2/2)$.

Esta función tiene la apariencia mostrada en la fig. 2.

Su transformada de Fourier está dada por

$$\hat{\psi}(\omega) = \omega^2 \exp(-\omega^2/2).$$

Para valores pequeños de ω ,

$$\hat{\psi}(\omega) \cong \omega^2$$

indicando que la transformada, para valores pequeños de ω/s , se comporta como una segunda derivada. Para ω en la pasabanda, la función y su transformada serán similares y para mayores valores de ω/s la transformada atenuará fuertemente la señal.

2-15 Efecto de "zoom"

De la ecuación

$$Wf(s,u) = \int_{-b}^{\infty} f(x) \sqrt{s} \psi^*(s(x-u)) dx$$

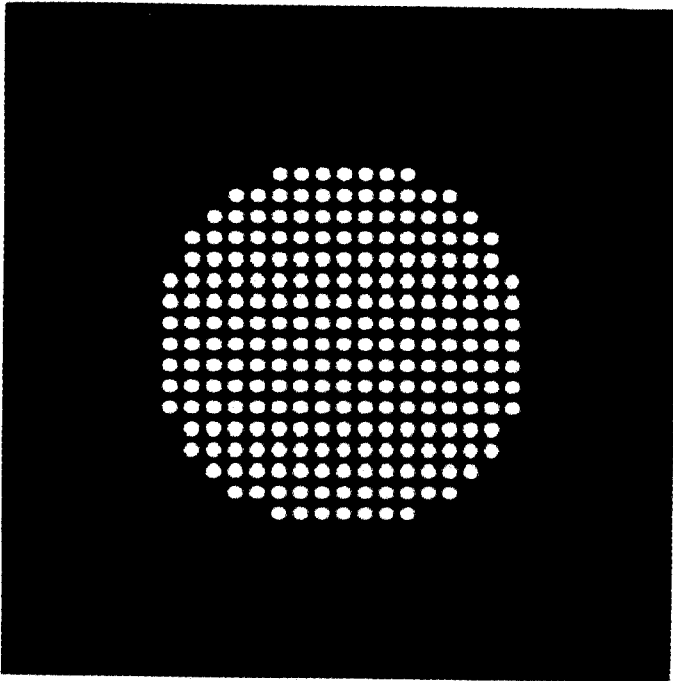


Figura 4a. Ejemplo del uso de la transformada de ondeleta para obtener el tamaño y la forma global de un objeto simulado.

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-\infty}^{\infty} f(y/s) \sqrt{s} \psi^*(y-su) s^{-1} dy \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} f(y/s) s^{-1/2} \psi^*(y-su) dy \\
 &= s^{-1/2} [f(y/s) * \bar{\psi}_s^*(y)](su)
 \end{aligned}$$

tenemos que uno puede fijar $\bar{\psi}_s^*$ y reescalar f . En este sentido, transformar es como ampliar el objeto en un microscopio de barrido. Se tiene una imagen ampliada cuyo detalle se modifica por la convolución con una función de respuesta a los impulsos (la forma del haz, en el caso del microscopio de barrido).

2-16 El caso bidimensional.

En 2 dimensiones definimos la transformada como

$$Wf(s, (u, v))$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) s \psi^*(s(x-u), s(y-v)) dx dy$$

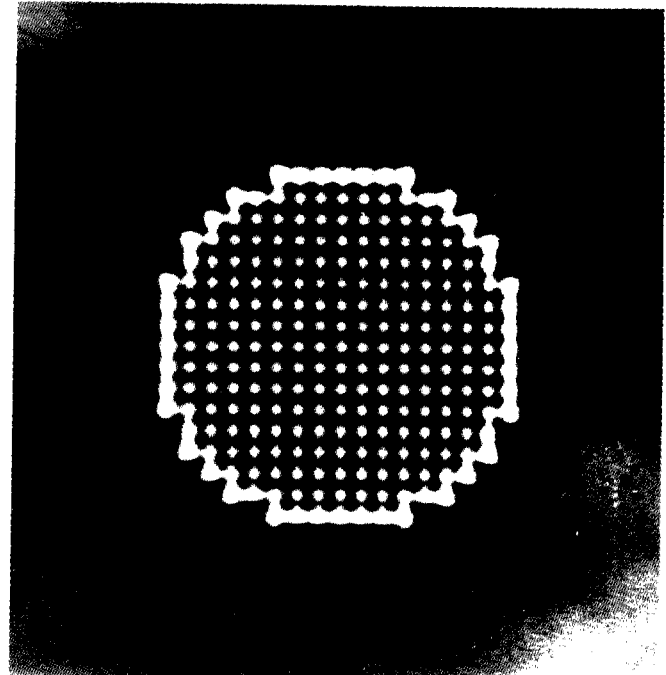


Figura 4b. Objeto procesado. Nótese los bordes bien definidos.

3- Resultados.

A fin de evaluar el uso de las transformadas de ondeleta en el procesamiento digital de imágenes de microscopio electrónico implementamos en lenguaje C la transformada por medio del sombrero mexicano cuya gráfica mostramos en la figura 2-a (2-b muestra la transformada de Fourier del sombrero).

3-1- Objetos sintéticos.

En la figura 3-a mostramos una simulación de lo que podría ser un conjunto de átomos o conglomerados. La figura 3-b ilustra el resultado de procesar con el sombrero mexicano. Aquí los parámetros han sido ajustados para que se sobreenfaticen los bordes, característica claramente visible en la figura.

Si la ondeleta es muy ancha (extendida en el espacio) ocurre lo ilustrado en la figura 4. En la parte 4-a se muestra otra imagen simulada y en la parte 4-b mostramos el resultado de transformar con el sombrero mexicano. En este caso el efecto es como si se tratara de un "desenfoco" y se enfatiza la forma externa del cúmulo (a expensas de la resolución).

3-2 Fronteras en catalizadores.

En la figura 5-a mostramos la imagen tomada con el microscopio electrónico de alta resolución de una

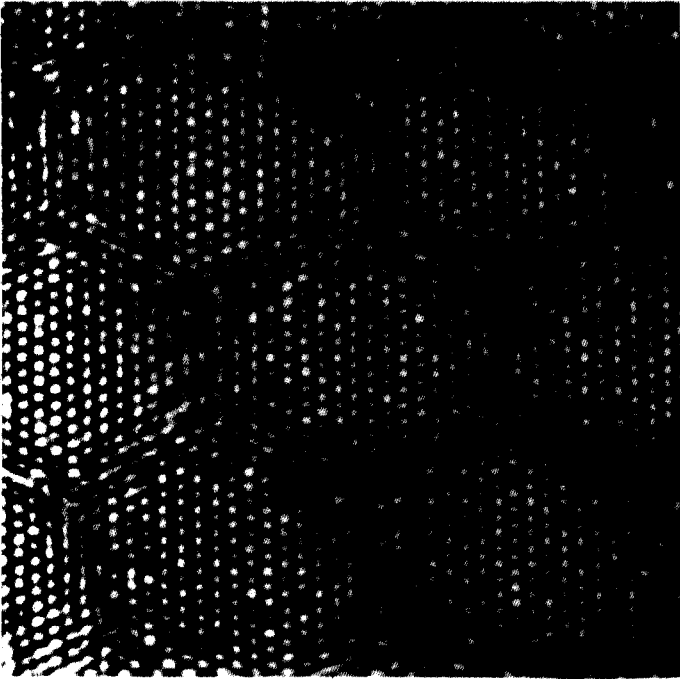


Figura 5a. Imágen de un arreglo de fronteras de antifase en un monocristal de $\text{MoS}_2:\text{Co}$

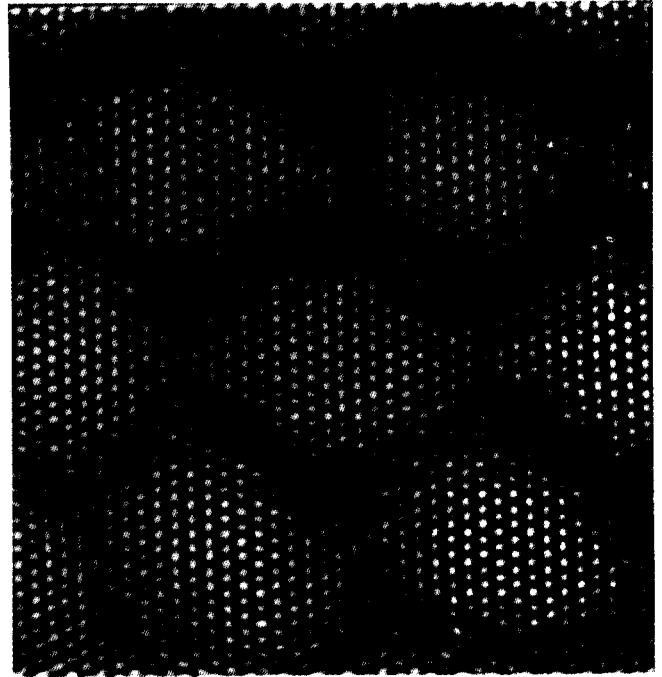


Figura 5b. Imágen procesada con ondeletas.

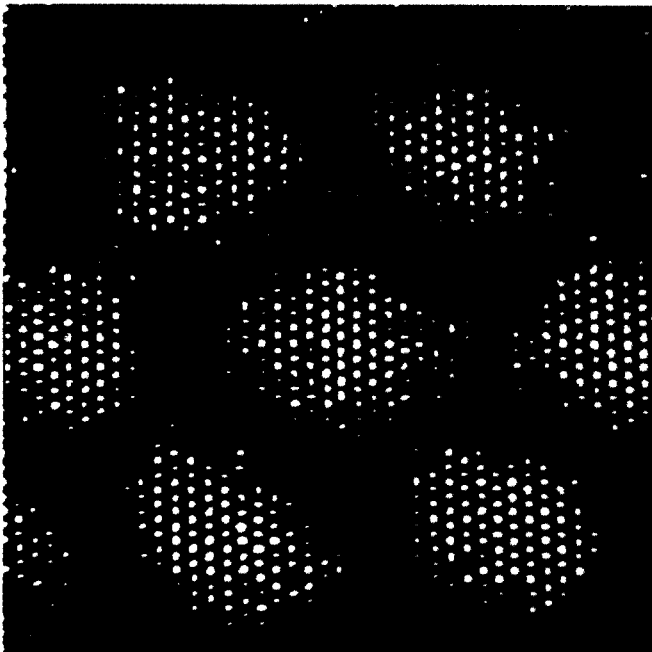


Figura 5c. Umbral aplicado a la imagen procesada.

muestra de $\text{MoS}_2:\text{Co}$. Se puede apreciar claramente que hay dominios hexagonales.

En la parte 5-b se aprecia el efecto de la transformada. El ruido se ha reducido considerablemente y ha habido una

notable reducción o substracción del trasfondo ("background"). Si además restamos de la imagen toda contribución abajo de un cierto umbral (de aprox. 40 % en este ejemplo) tenemos la imagen mostrada en la parte 5-c en la cual se aprecian con mucho mayor claridad los dominios.

Todo esto aparece en mucho mayor detalle en la ref. [8].

3-3 Patrones de retroreflexión.

En los patrones de retroreflexión (como el de la figura.6) se presenta en forma aguda el problema de extraer la información de difracción (en forma de líneas en este caso) que está inmersa en un maremagnum de información extra que aparece como trasfondo ("background"). De hecho en la fig. 6 es imposible ver las líneas de difracción (en parte debido a que en el despliegue se usaron solo 4 colores).

En la figura 6-b se muestra el mismo patrón después de la transformación de ondeleta. Las líneas son claramente visibles y si restamos un umbral (como en el caso anterior de los catalizadores) el patrón mejora aún mas haciendo las mediciones (por ejemplo, de distancia entre líneas o ángulos entre líneas) factibles.

En general se observa que los mejores resultados se obtienen con la secuencia transformación-substracción de un umbral.

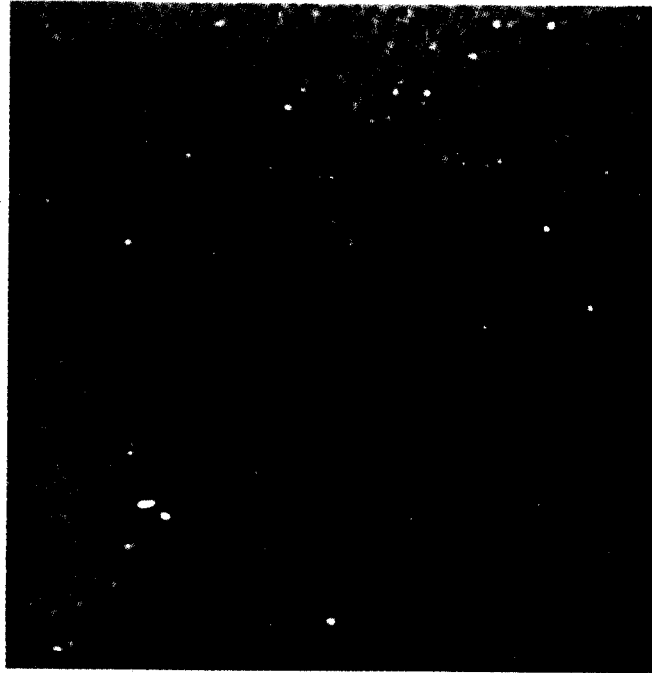
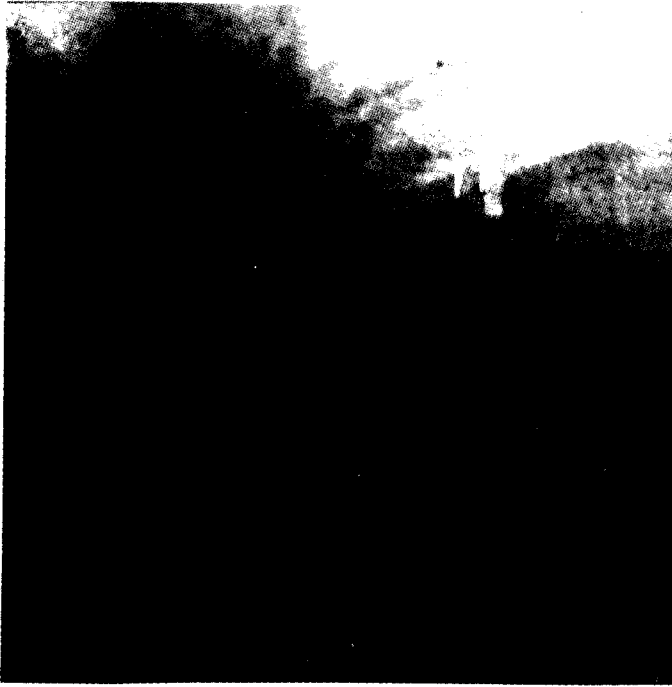


Figura 6a. Patrones de retroreflexión de una muestra quasicristalina (fase T). Las líneas son apenas visibles.

Figura 6b. Patrón transformado por ondeletas. Las líneas son ahora claramente visibles, y el trasfondo se ha eliminado casi completamente.

La razón por la cual el trasfondo desaparece en 6-b es que la transformada se comporta básicamente como una segunda derivada (ver sección 2-14).

4-Conclusiones.

Vemos que las transformadas de ondeleta permiten mejorar muchas imágenes, particularmente aquellas con bordes. También son muy útiles en el tratamiento de patrones de retrodispersión pues permiten separar el trasfondo fácilmente.

AGRADECIMIENTOS

Deseamos agradecer a Alfredo Sánchez A. su valiosísima ayuda en los aspectos fotográficos del presente trabajo. Las fotos de alta resolución fueron tomadas por Luis Rendón. Mucho del procesado se realizó con el programa SAID desarrollado, en parte, por los Ingenieros Aldo Granados y Sergio Avendaño. Los patrones de difracción se tomaron en el H.H. Wills Physics Laboratory, University of Bristol donde uno de los autores (DR) gozó de la hospitalidad del Dr. David Dingley. Por último deseamos agradecer a Samuel Tehuacanero su ayuda en la digitalización de las imágenes.

Se reconoce el apoyo del CONACYT en la forma de apoyos puntuales y de la DGAPA (UNAM), proyecto IN104491.

REFERENCIAS

- [1] W.O. Saxton - Computer Techniques for Image Processing in Electron Microscopy in: Advances in Electronics and Electron Physics L. Marton and C. Marton Ed. Academic Press. New York 1978.
- [2] E. Kirkland - Ultramicroscopy 15, (1984) 151.
- [3] M. Tomita, H. Hashimoto, T. Ikura, H. Endoh and Y. Yokota. Ultramicroscopy 16, (1985) 9.
- [4] A. De Jong, W. Coene and D. Van Dyck. Ultramicroscopy 27, (1989) 53.
- [5] A. Grossmann, J. Morlet and T. Paul. J. Math. Phys. 26, (1985) 2473.
- [6] S. Mallat. IEEE Transactions on acoustics, speech and signal processing 37, (1989) 2091.
- [7] I. Daubechies. IEEE Transactions on Information Theory 36, (1990) 961.
- [8] M. José-Yacamán and R. Chianelli to be published.