

Восстановление фазы микроскопических изображений по обратной решетке

Кириллов Егор

Московский физико-технический институт
Факультет управления и прикладной математики
Кафедра интеллектуальных систем

Научный руководитель д.ф.-м.н. В. В. Стрижов

Москва,
2021 г.

Цель работы: восстановление фазы изображения

Задача

Повысить качество микроскопического изображения с электронного микроскопа восстанавливаемого по обратной решетке, где обратная решётка — точечная трёхмерная решётка в обратном пространстве (англ. reciprocal space).

Проблема

Отсутствие фазы при съемке кристаллической решетки в обратном пространстве. Фаза определяет сдвиг синусоидальных составляющих изображения. При нулевой фазе все синусоиды центрируются в одном месте, и вы получаете симметричное изображение, которое не имеет ничего общего с исходным изображением.

Предлагаемое решение

Алгоритм Герхберга-Сакстона и его модификации; предлагается повысить качество аппроксимации с помощью универсальной модели, стека автоэнкодеров.

I - исходное изображение

I' - восстановленное изображение

σW_x - автоэнкодер

FT - Фурье преобразование

IFT - обратное Фурье преобразование

Phase retrieval

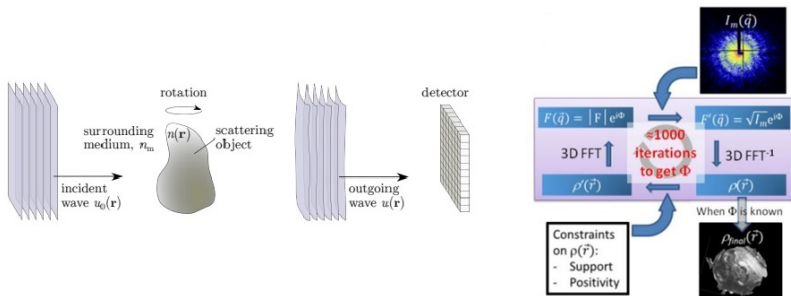
- 1 Tatiana Latychevskaia *Iterative phase retrieval in coherent diffractive imaging: practical issues*, 2018.
- 2 T. Beuvier, I. Probert, L. Beaufort, B. Suchéras-Marx, Y. Chushkin, F. Zontone A. Gibaud *X-ray nanotomography of coccolithophores reveals that coccolith mass and segment number correlate with grid size*. Nature, 2019.
- 3 Anthony Berdeu, Bastien Laperrousaz, Thomas Bordy, Ondrej Mandula, Sophie Morales, Xavier Gidrol, Nathalie Picollet-D'hahan Cédric Allier *Lens-free microscopy for 3D + time acquisitions of 3D cell culture* Nature, 2018

Bayesian modelling

- 1 Sjors H.W. Scheres *A Bayesian View on Cryo-EM Structure Determination*, 2012.
- 2 Sjors H.W. Scheres *RELION: Implementation of a Bayesian approach to cryo-EM structure determination*, 2012.

Процедура восстановления фазы

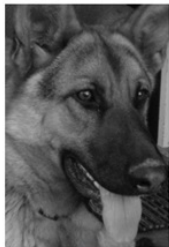
К распределению интенсивностей применяется преобразование Фурье, накладываются ограничения, применяется обратное преобразование и снова накладываются ограничения.



процедура восстановления фазы(1)

$$I(v, w) = |F(v, w)|^2 = \left| \int \int f(x, y) \exp[-i(xv + yw)] dx dy \right|^2,$$

где $f(x, y) = |f(x, y)| \exp[i\eta(x, y)]$ и $F(v, w) = |F(v, w)| \exp[i\psi(v, w)]$
комплекснозначные распределения в действительном и фурье
пространствах, соответственно, и (v, w) координаты в фурье
пространстве.



(a)



(b)



(c)



(d)

замена фаз двух изображений(1)

Дано

I / пара изображений I, I' обратной и прямой кристаллической решетки.

Модели

FT и $ITF, \sigma W_x$.

Критерий качества

Базовая ошибка: $L = \|x - r(x)\|_2^2$

$$F(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-j2\pi(ux+vy)} dx dy$$

$$f(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(u, v) e^{-j2\pi(ux+vy)} du dv$$

$$DCT - 1n = [\cos(kl \frac{\pi}{n-l})]$$

$$DCT - 2n = [\cos(k(l + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{n})]$$

$$DCT - 3n = [\cos((k + \frac{1}{2})l \frac{\pi}{n})]$$

$$DCT - 4n = [\cos((k + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{n})]$$

Итерационный процесс реконструкции обычно использует быстрое Фурье преобразование, которое оптимизированно производится цифровым Фурье преобразованием:

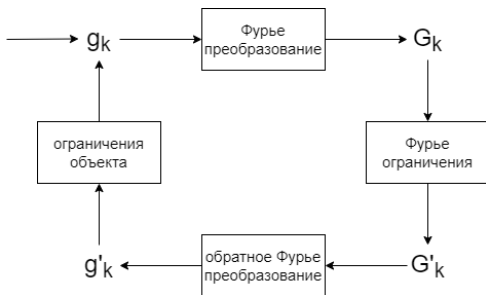
$$F = \sum_{p=0}^{N-1} f \exp(-2\pi qp/N)$$

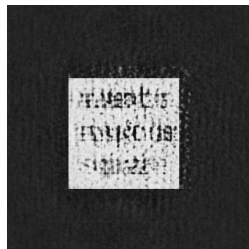
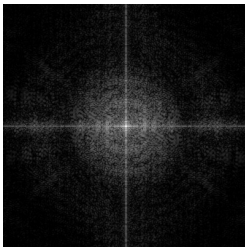
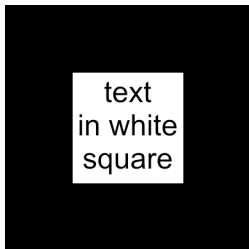
$$G_k(v, w) = |G_k(v, w)| \exp[i\phi_k(v, w)] = F[g_k(x, y)]$$

$$G'_k(v, w) = |F(v, w)| \exp[i\phi_k(v, w)]$$

$$g'_k(x, y) = |g'_k(x, y)| \exp[i\theta'_k(x, y)] = F^{-1}[G'_k(v, w)]$$

$$g_{k+1}(x, y) = \begin{cases} g'_k(x, y), & \text{if } (x, y) \in \gamma \\ 0, & \text{if } (x, y) \notin \gamma \end{cases}$$





пример работы алгоритма Герхберга-Сакстона

$X' = \{x_1, \dots, x_I\}$ - обучающая выборка

$f : X \rightarrow Z$ - кодировщик

$g : Z \rightarrow X$ - декодировщик

Суперпозиция $\hat{x} = g(f(x))$ должна восстанавливать исходные данные x_i :

$$L_{AE}(\alpha, \beta) = \sum (L(g(f(x_i, \alpha), \beta), x_i)) \rightarrow \min_{\alpha, \beta}$$

Квадратичная функция потерь $L(\hat{x}, x) = \|\hat{x} - x\|^2$

Цель: повысить качество восстановления изображения.
Данные: изображение и его диффракционная картина.

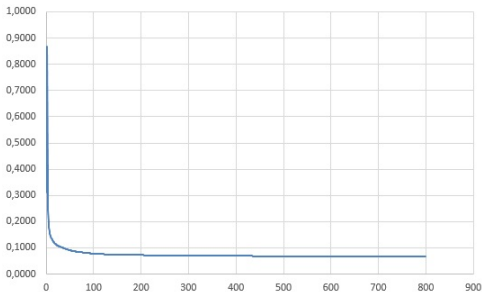
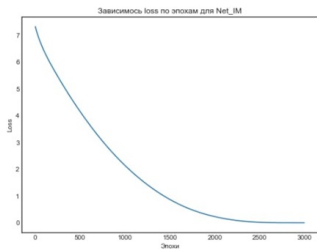


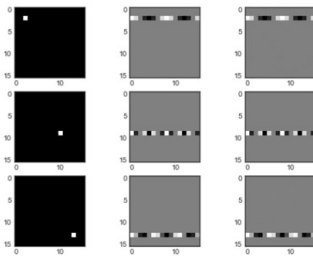
график ошибки алгоритма
Герхберга-Сакстона

Восстановление фазы значительно замедляется после 100ой итерации выполнения алгоритма.

Составлен автоэнкодер, имитирующий преобразование Фурье.



обучение преобразованию
Фурье

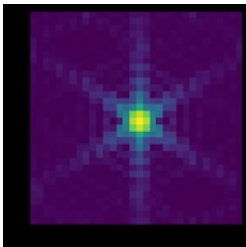


полученное преобразование

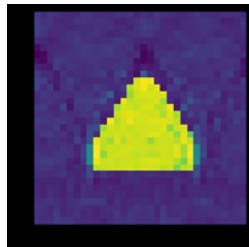
Результаты работы полученной модели.



исходное изображение



дифракционная
картина



восстановленное
изображение

- 1 Проанализирован ряд ранее предложенных алгоритмов восстановления микроскопических изображений по обратной решетке.
- 2 Предложена универсальная аппроксимирующая модель для восстановления изображений, повышающая качество аппроксимации восстановления.
- 3 Проведен вычислительный эксперимент по восстановлению фазы изображения.