

# Anticurtaining - obrazový filtr pro elektronovou mikroskopii

Martin Dvořák\*



## Abstrakt

Tomografická 3D analýza v nanometrovém měřítku využívá snímky vzorků získané s využitím fokusovaného iontového svazku (FIB), při jejichž snímání ale dochází z fyzikálních důvodů k poškození "curtaining" efektem. Tento článek představuje nový přistup k odstranění curtaining efektu ze snímků pomocí strojového učení. Pro jeho odstranění je využita konvoluční neuronová síť (CNN) a technika učení s učitelem. Navržená síť pracuje s příznaky, které vytváří vlnková (Wavelet) transformace a jejím výstupem je vizuálně "vyčištěný" snímek. K učení sítě je využita syntetická datová sada poškozených snímků, které jsou vytvořeny generátorem simulujícím fyzikální proces tvorby reálného snímku. Simulace se skládá z "opotřebení" vzorku pomocí fokusovaného iontového svazku (FIB) a zobrazení povrchu pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM). Nově vytvořený přístup velmi dobře pracuje i s reálně pořízenými snímky. Kvalitativní vyhodnocení představeného řešení a srovnání s jiným řešením hodnotili laici i experti na tuto problematiku. Představené řešení představuje nový nadějný přístup k odstranění curtaining efektu a přispívá k lepšímu postupu zpracování i porozumění snímkům pořízeným při materiálové analýze.

Klíčová slova: curtaining efekt - snímky curtaining efektu - konvoluční neuronová síť

Přiložené materiály: Syntetický datový set - Vyčištěné snímky představenou metodou

\*xdvora2l@fit.vutbr.cz, Faculty of Information Technology, Brno University of Technology

## 1. Úvod

*Curtaining* představuje nežádoucí jev v rychle se rozvíjejícím oboru elektronové mikroskopie. Tento jev vzniká při *tomografické* materiálové analýze. Zásadně zhoršuje kvalitu snímků a tím negativně ovlivňuje porozumění *heterogenních* materiálů jako jsou polovodičové součástky v *nanometrovém měřítku*. Správné odstranění *curtaining* efektu tedy přispívá k pochopení mikroskopické struktury těchto materiálů a může pozitivně ovlivnit i proces výroby polovodičových součástek. Odstraněním *curtaining* efektu se také otevírá cesta k dalšímu postupu výzkumu *heterogeních* materiálů. Tomografie materiálu pomocí fokusovaného iontového svazku (FIB) umožňuje prozkoumat struktury materiálu v *nanometrovém měřítku*. FIB-SEM systém kombinuje klasický skenovací elektronový mikroskop (SEM) s fokusovaným iontovým svazkem (FIB). FIB obrábí povrch zkoumaného materiálu po tenkých řezech. Každý vytvořený řez materiálu zobrazuje technika SEM, čímž vzniká prostorový snímek celého materiálu. Detailnější popis poskytují publikace [1] [2] [3] [4]. Zkoumání *heterogeních* materiálů často vytváří nežádoucí *curtaining* efekt. Ten vzniká z důvodu různých oprašovacích rychlostí (*sputtering rates*) pro jednotlivé komponenty materiálu. Změny oprašovacích rychlostí v jednotlivých částech kompozitu vytváří nesouměrně obrobený povrch materiálu a jeho zobrazení vytváří pruhovaný šum ve směru iontového svazku. Čas potřebný pro vytvoření jednoho 3D snímku je okolo 25 hodin [5]. Výsledný poškozený obraz popisuje rovnice 1, kde *u* vyjadřuje snímek bez zkreslení a *s* popisuje přidané nežádoucí zkreslení (curtainig).

$$I(x,y) = u(x,y) + s(x,y)$$
 (1)

Cílem je potlačením nebo odstranění složky s získat snímek bez curtaining efektu. Existující postupy potlačení se liší zpracováním poškozených 2D snímků nebo přímo 3D snímků. Vyhodnocení úspěšnosti ztěžuje nedostatek referenčních vyhodnocovacích dat z důvodu časové náročnosti jejich vytvoření. Neexistují ani obecně uznávané metriky pro vyhodnocení úspěšnosti, a proto se k vyhodnocení metod užívají obecnější metriky *PSNR* a *SSIM*.

Metody odstranění curtaining efektu lze rozdělit do dvou hlavních skupin na základě jejich přístupu k odstranění. První skupina řeší odstranění curtaining efektu pomocí fyzikálních přístupů a navrhuje zdokonalení procesu obrábění materiálu. Hlavní přistup ke zdokonalení obrábění je naklápění vzorku [6] [7]. Zkoumaný materiál je oprášen pomocí postupné aplikace dvou iontových svazků o různých proudech a časových expozicích. Následně obrobený snímek prochází procesem leštění. Zkoumaný materiál je před zkoumáním nehybně umístěn do držáku pro vzorek. V průběhu obrábění se držák postupně naklápí (rocking*mode*) o  $\pm 8^{\circ}$ . Výsledné zlepšení obrábění zobrazuje obrázek 1. Hlavní nevýhoda této metody je komplexnější mikroskopický aparát a hlavně téměř dvojnásobný čas pro vytvoření snímku. I přes tyto nevýhody se metoda naklápění snímku používá při analýze klíčových vzorků.

Druhá skupina metod upravuje získaný snímek pomocí technik zpracování obrazu. Metody pracují převážně minimalizací navržené objektivní funkce a filtrováním obrazu pomocí Fourierovy (FFT) a Wavelet (FWT) transformace. Odstranění svislých pruhů ve frekvenční doméně má minimalizovat ovlivnění ostatních částí snímku. Metody [8] [9] navrhují ve spektrální doméně použit funkci založenou na Laplaceově operátoru. Vyfiltrovaný spektrální obraz roztřídit do tříd a na vybrané třídy použit filtr pro odstranění zašuměných pixelů. Rozšíření modelu [10], spojuje výhody FFT a FWT do komplexního nástroje. Metoda na koeficienty získané FWT aplikuje jednorozměrnou FFT ve vertikálním směru. Získané agregovaná informace o vertikálním šumu je odstraněna pomocí Gaussovou funkcí. Výsledný obraz zrekonstruuje inverzní FWT.



**Obrázek 1.** Snímky *silikonového* preparátu s kousky *mědi*, které byly uměle vloženy do silikonového preparátu. (a) Snímek pořízený standardním procesem oprašování a snímání. (b) Snímek pořízený procesem postupného naklápění (*rocking-mode*). Šipky naznačují směr působení iontového svazku na zkoumaný preparát [6].

Filtrovací metody poskytují kvalitní výsledky v rychlém čase.

Komplexní metody, které se zakládají na *totálních* variačních modelech, dosahují přesnějších výsledků, ale mají mnohem větší výpočetní nároky. Metody založené na variačních modelech představují state of the art řešení pro odstranění curtaining efektu. Metody [11] [12] popisují objektivní funkce minimalizující rovnici 1. Navržené funkce představují optimalizační problém několika proměnných, který nemá analytické řešení. Proto se používají výpočetně velmi náročné iterační optimalizační algoritmy. Metody [13] [14] rozšiřují objektivní funkce o neznámé, které popisují gradient šumu v určitém směru.

Metoda [5] představuje komplexnější soustavu rovnic než ostatní zmíněné články a i díky tomu vytváří kvalitnější řešení. Představený model pracuje s 3D snímky. Časová náročnost výpočtu jednoho 3D snímku je ale v řádu několika hodin a to i při využití paralelizaci jednotlivých částí výpočtu. Výsledný snímek po aplikaci metody [5] znázorňuje obrázek 2.

Tento článek navrhuje nový přístup pro odstranění curtaining efektu založený na konvoluční neuronové síti. Navržené řešení vychází z publikací řešících vizuálně obdobné úlohy pomocí neuronových sítí [15] [16]. Protože nejsou dostupné velké datové sady sním-ků, které jsou potřebné pro trénování sítě navrženého modelu, bylo zapotřebí získat alespoň syntetickou da-tovou sadu. Proto bylo třeba vytvořit generátor syntetických snímků simulující chování FIB-SEM systému. Simulace se skládá z napodobení procesu obrábění vytvořeného modelu zkoumaného materiálu iontovým svazkem (FIB) a zobrazovacího procesu probíhajícího v elektronovém mikroskopu (SEM).

Představené řešení dosahuje podobně kvalitních



**Obrázek 2.** Výřez snímku polovodičové součástky pořízené firmou TESCAN. (a) Snímek obsahující masivní curtaining. (b) Snímek po aplikaci metody [5] pro odstranění curtainingu. U zrekonstruovaného snímku dochází k deformaci vnitřní struktury preparátu, snímek neobsahuje vertikální pruh černého materiálu.

nebo lepších výsledků jako jedna z nejmodernějších metod [5]. Navrhovaný přístup má přitom ve fázi vyhodnocování snímků podstatně menší výpočetní náročnost oproti ostatním používaným přístupům. Má sice vysokou výpočetní náročnost při trénovací fázi, ale ta není podstatná z pohledu uživatelů.

#### 2. Navrhované řešení - anticurtaining

Navrhované řešení odstraňuje nežádoucí curtaining efekt pomocí konvoluční neuronové sítě. Síť přijímá na vstupu snímek obsahující curtaining efekt. Výstupem navržené sítě je snímek zbavený nežádoucího šumu. Pro potřeby trénování neuronové sítě je potřeba disponovat vhodnou datovou sadou a vzhledem ke skutečnosti, že pořízení reálných dat mikroskopem je velmi pracné a drahé, je první částí navrhovaného řešení generátor syntetických snímků s curtaining efektem. Generátor simuluje činnost reálného mikroskopu, čímž vytváří dostatečně věrohodná data pro trénování neuronové sítě, která realizuje anticurtaining. Generátor popisuje část 2.1, představenou neuronovou síť s potřebnými *hyperparametry* popisuje část 2.2.

## 2.1 Generátor syntetických snímků

Generátor syntetických snímků simuluje fyzikální a mechanické jevy, které se odehrávají při oprašování a snímání zkoumaného vzorku. Simulátor vznikl na základě informacích o FIB-SEM systému [1] a o vzniku rastrového snímku pomocí SEM [2]. Detailní informace poskytli experti Ing. Tomáš Hrnčíř Ph.D. a Ing. Vojtěch Filip z firmy TESCAN<sup>1</sup>. Vytvořený generátor představuje první známé řešení simulace tohoto jevu. Simulace je rozdělena do několika části: vytvoření mapy tvrdosti, obrábění povrchu iontovým svazkem, zobrazení povrchu elektronovým svazkem a následné vytvoření snímku. První tři popsané části realizují chování reálného FIB-SEM mikroskopu. Obrázek 3 popisuje závislosti mezi částmi návrhu a zároveň ukazuje chronologické uspořádání jednotlivých částí generátoru. Generátor přijímá na vstupu reálný snímek, který neobsahuje curtaining efekt. Pomocí tohoto snímku je vytvořena mapa tvrdosti a vytvořený curtaining efekt zakomponován do vstupního snímku. Generátor pracuje s velikostí vstupního snímku

 $512 \times 512$  px. Pro učení neuronové sítě je nezbytné, aby generátor v první řadě "vystihl charakter" poškození snímku, a to i s tím, že simulace nemusí být nutně zcela fyzikálně přesná.



**Obrázek 3.** Schématický diagram vnitřní struktury generátoru syntetických snímků. Generátor obsahuje čtyři hlavní části: vytváření mapy tvrdosti materiálu, obrábění povrchu materiálu pomocí iontového svazku, zobrazení povrchu materiálu elektronovým svazkem a nanesení textury na zobrazený povrch materiálu.

#### Vytvoření mapy tvrdosti

Proces tvorby mapy tvrdosti aproximuje více fyzikálních dějů a atomové vlastnosti různých materiálů a shrnuje je do jedné skalární hodnoty s tím, že mapu tvrdosti popisuje dvou-dimenzionální matice, která má stejný rozměr jako vstupní reálný snímek pro který byla vytvořena. Hodnoty této matice aproximují zejména interakční objem snímaného materiálu při kontaktu s urychlenými ionty, které tvoří iontový svazek. Při reálném ději dochází k výpočtu oprašovací rychlosti, kterou je nutné působit na zkoumaný povrch, aby došlo k ideálnímu obrobení. Pro vyčíslení těchto parametrů slouží v aproximované matici hodnota 1.0. Hodnoty větší než 1.0 představují měkčí materiál, který bude oprášen do větší hloubky. V opačném případě u hodnot menších než 1.0 dojde k nedostatečnému obrobení materiálu. Mapu tvrdosti H vytváří generátor pomocí vstupního snímku a empiricky stanovené rovni-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>https://www.tescan.com/

ce 2, kde *I* představuje vstupní snímek, I(x, y) konkrétní hodnotu pixelu na souřadnici (x,y) a vytvořenou mapu tvrdosti popisuje matice *H*.

$$H(x,y) = 0.9 + \frac{I(x,y)}{max(I(x,y)) - min(I(x,y))}$$
(2)

Vstupní snímek generátoru a vizualizovanou matici tvrdosti v 3D pohledu znázorňuje obrázek 4. Do výsledné matice tvrdosti jsou pseudonáhodně generovány šumy tvrdosti, které způsobují větší vznik curtaining efektu. Šum představuje oblasti s rozměrem setiny rozměru matice s vysokou (0.7) nebo nízkou (1.3) hodnotou tvrdosti.



**Obrázek 4.** (a) Vstupní reálný snímek polovodičového materiálu, na základě kterého je vypočtena konkrétní mapa tvrdosti. (b) Výstupní matice, zobrazená jako 3D obrazec, reprezentující mapu tvrdosti pro konkrétní vstupní snímek. Hodnota 1.0 (zobrazena na středu hodnotové lišty) představuje ideální materiál pro konkrétní oprašovací rychlost.

#### Obrábění povrchu iontovým svazkem

Simulace tohoto jevu odpovídá dosti věrohodně reálnému chování iontového svazku. Z pohledu zobrazované plochy, kterou představuje obrázek 5, dochází k oprašování materiálu po sloupcích ve směru osy y. K obrábění daného sloupce dochází sekvenčně. V sloupci dochází k současnému odstranění materiálu přes celou šířku svazku (pět hodnot matice ve směru osy x). Svazek postupně prochází materiálem z vrchní části snímku do spodní části (ve směru osy y). Pozice iontového svazku je určena diskrétní adresou (adresou obráběného sloupce). Po uplynutí předem určeného času oprašování dochází k inkrementaci této adresy a přesunu iontové hlavy ve směru osy x na další pozici v souřadném systému. Na nové pozici svazku pokračuje oprašovací proces. Šířka iontového svazku je stanovena na 5 px. Velikost odpovídá reálnému poměru velikosti svazku a zobrazeného snímku.

Svazek má definovanou energií pro každý obráběný sloupec (osa *y*), který je vypočten na základě zkoumaného materiálu. Pokud dochází k obrábění *tvrdších* 



**Obrázek 5.** Trojrozměrné zobrazení jednotlivých komponent FIB-SEM systému. Obrázek umisťuje počátek souřadného sytému na zkoumaný vzorek. Plocha *xy* představuje jeden řez (*slice*) měření. Osa *z* ukazuje směr obrábění materiálu po jednotlivých řezech [5].

materiálu, je potřeba větší energie svazku a nedochází k důkladnému obrábění. Naopak je to pro materiály měkčí. Iontový svazek je široký přes více hodnot matice, proto je nutné stanovit průměrnou tvrdost materiálu  $\overline{m}$  v místě interakce. Výpočet lokální tvrdosti popisuje rovnice 3, kde je spočítána průměrná hodnota tvrdosti přes šířku iontového svazku w. Rovnice 4 stanovuje počáteční energii svazku pro každý sloupec. V průběhu obrábění jednoho sloupce dochází k poklesu této energie  $e_n$  pomocí empirické rovnice 5, kde  $\overline{m}$  představuje průměrnou tvrdost materiálu v šířce svazku a  $e_{n-1}$  zbývající energii svazku po výpočtu předchozího obrobení v daném sloupci (předchozí body matice ve směru osy y). Hloubku obrobení r v daném místě v daném místě stanovuje empirická rovnice 6. Bodu na souřadnici y = 0 odpovídá energie  $e_0$  iontového svazku, analogicky bodu y = n odpovídá zbývající energie svazku  $e_n$ .

$$\overline{m} = \frac{1}{w} \sum_{i=-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} H(x+i,y)$$
(3)

$$e_0 = 1 \tag{4}$$

$$e_n = e_{n-1} - 0,005(1 - \overline{m}) \tag{5}$$

$$r = 100 - 50e_n$$
 (6)

Iontový svazek má intenzitu v průřezu přibližně s Gaussovým rozložením, které simulátor aproximuje pomocí válcového tvaru. Výsledek obráběcího procesu je zaznamenáván v matici *D*, která popisuje hloubku obrobení (osa *z* na obrázku 5) pro zobrazovanou plochu svíranou osami *xy*. Hodnota matice na indexech D(x,y)představuje hloubku obrobení (ve směru osy *z*) na konkrétní pozici plochy *xy*. Hloubku obrobení D(x,y)ve středu svazku popisuje rovnice 7. Výpočet hloubky obrobení v nestředové části svazku zobrazuje rovnice 8, kde *i* udává počet pixelů od středu svazku. Proměnná *i* se pohybuje v rozmezí hodnot {-2,-1,1,-2}, které stanovuje šířka iontového svazku. Počáteční hodnota každého prvku v matici *D* je 100, jak vyplývá z rovnice 6.

$$D(x,y) = r \tag{7}$$

$$D(x+i,y) = D(x-i,y) = \sqrt{r^2 - i^2}$$
(8)

Pro dosažení realističtější simulaci syntetických snímků dochází k *vychylování* iontového svazku z původního směru obrábění. To nastává i v realitě. Vychýlení určuje matice *B*. Ta obsahuje hodnoty z množiny -1,0,1 a popisuje velikost vychýlení v pixelech na konkrétní souřadnici (x,y). Matice vychýlení *B* je vytvořena pseudonáhodně. Pravděpodobnostní rozložení hodnot vychýlení popisuje diskrétní funkce hustoty pravděpodobnosti uvedená v rovnici 9. Hodnoty -1 a 1 jsou generovány se stejnou pravděpodobností p=0,1% a hodnota zachovávající původní směr svazku je generována s pravděpodobností p = 99,8%. Výpočet výsledného posunutí svazku vyjadřuje rovnice 10, kde proměnná *w* udává šířku iontového svazku v pixelech a *x<sub>old</sub>* původní pozici svazku.

$$B(x,y) = rand([-1;0;1], [0,001;0,998;0,001])$$
(9)

$$x = x_{old} + \sum_{i=-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} B(x+i,y)$$
(10)

Zobrazení povrchu simulací elektronového svazku Simulace skenovacího elektronového svazku při snímání obrazu poměrně věrně odpovídá reálnému chování SEM mikroskopu. Z pohledu zobrazovací plochy hlava elektronového mikroskopu "adresuje" všechny vzorky snímku a pro každý z nich se provede simulace zobrazovacího procesu. Výsledkem procesu je snímek intenzit zachycených elektronů odpovídající obrazu z elektronového mikroskopu. Při požití konkrétního typu detektoru těchto elektronů lze celý proces korektně transformovat na osvětlovací model známý z počítačové grafiky. Detailní popis převedení problému poskytuje [2]. Simulace pracuje s lesklou C<sub>s</sub> a difúzní C<sub>d</sub> složkou Phongůvova osvětlovacího modelu, které jsou popsány rovnicí 11. Rovnice 12 představuje jednotlivé parametry osvětlovacího modelu a v rovnici 13 jsou představeny použité hodnoty v této práci. Koeficienty difúzní složky, intenzita difúzního osvětlení scény  $I_d$  a odrazový koeficientu materiálu  $k_d$  jsou stanoveny empiricky na hodnotu 1,0. Parametry *lesklé* složky pro intenzitu odlesků  $I_s$  a odrazový koeficient  $k_s$  jsou nastaveny na hodnotu  $I_sk_s = 0,55$ . *Phongův exponent* je nastaven na hodnotu n = 5. Proměnné N, L a V zastupují specifické vektory zobrazované scény a jsou zobrazeny obrázkem 6. Proměnná Lpředstavuje směrový vektor detektoru elektronů, Vpopisuje směrový vektor elektronového svazku a N je normálový vektor zobrazovaného povrchu.

$$C = C_d + C_s \tag{11}$$

$$C = I_d k_d (N \cdot L) + I_s k_s (V \cdot R)^n$$
(12)

$$C = 1,0(N \cdot L) + 0,55(V \cdot R)^5$$
(13)



**Obrázek 6.** (a) Zobrazovací plocha materiálu, kde na konkrétním pixelu dochází k výpočtu osvětlovacího modelu. Obrázek zaznamenává vektory nutné pro výpočet osvětlovacího modelu. (b) Výsledný syntetický snímek vyrobený vytvořeným generátorem.

#### Vytvoření výsledného snímku

Nanesení vytvořeného osvětlení *curtaining* zkreslení popisuje rovnice 14, kde se výstupní obrázek  $I_r$  skládá z vynásobení pixelu vstupního snímku I a vypočteného osvětlení C daného řezu zkoumaného preparátu.

$$I_r(x,y) = I(x,y) \cdot C(x,y) \tag{14}$$

V reálném prostředí nemusí být poloha vzorku a iontový svazek přesně kalibrovány. Z tohoto důvodu se osvětlovací scéna v horizontálním směru natáčí p o pseudonáhodně vybraný počet stupňů. Generované otočení je nastaveno v intervalu –4 až 4 stupně.

#### 2.2 Architektura konvoluční neuronové sítě

Navrhovaná síť využívá vytvořené dvojice syntetických snímků pro učení *curtaining* vzorů, které lze pozorovat u reálných snímků pomocí techniky učení s učitelem. Představená architektura vychází z *reziduálně paralelní* architektury [15] a je rozšířena o úpravu vstupních dat diskrétní *Wavelet* transformací s použitím



**Obrázek 7.** Schématické zapojení vrstev navržené konvoluční neuronové sítě. Síť obsahuje čtyři paralelní větve, kde každá pracuje s jiným rozlišením dat. Jádro architektury se skládá ze čtyř reziduálních bloků zapojených do sériového propojení. *Upsampling* blok zajišťuje sjednocení rozměru dat do původní velikosti. Pracuje pomocí *upsampling* vrstvy se vzorem typu *shuffle*. Síť obsahuje reziduální propojení mezi vstupem a výstupem sítě.

tvaru vlnky *Haar* [16]. Výsledkem transformace jsou čtyři příznakové matice: aproximační koeficienty, gradient ve vertikálním směru, gradient v horizontálním směru a diagonální gradient. Architektura sítě z původní publikace je zachována, ale obsahuje v počátečních konvolucích jiné velikosti jader a *reziduální* blok obsahuje dvojnásobný počet konvolučních a ReLU vrstev. Nově navržený přístup představuje první neuronovou síť pro odstranění *curtainingu*.

Schématický diagram architektury znázorňuje obrázek 7. Skládá se ze čtyř paralelních větví. Větve jsou tvořeny ze stejných výpočetních bloků. Jádro výpočtu každé větve je složeno ze čtyř reziduálních bloků, které jsou zapojeny sériově. Každá paralelní větev pracuje s jiným rozlišením vstupních dat. První pracuje s původním rozlišením a další jej snižují s mocninou dvou. Snížení je provedeno pomocí Avg-pooling bloku s korektní velikostí jádra pro dané snížení rozlišení. První konvoluční vrstva zvětšuje počet kanálů na 16 s velikostí jádra  $7 \times 7$ . Další konvoluční vrstvy nemění počet kanálů ani rozměr dat a pracují s  $3 \times 3$ jádry. Reziduální blok se skládá ze sériového zapojení čtyř dvou-vrstev: konvolční, ReLU. Reziduální propojení realizuje aritmetické přičtení vstupních hodnot k výstupním. K rekonstrukci sníženého rozlišení vstupu slouží Upsampling blok, který rozlišení zvyšuje dvakrát. Tento blok vytváří se skládá z: konvoluční, ReLu a upsampling vrstvy. Použitá konvoluční vrstva zvětšuje počet kanálů na 64, protože každý výstupní kanál upsampling vrstvy se skládá ze čtyř vstupních kanálů a vytváří se pomocí vzoru shuffle. Pomocí sériového zapojení více Upsampling bloků dochází k požadovanému zvětšení na původní vstupní velikost. Výsledky paralelních částí se konkatenují a dojde k jejich redukci na výstupní 4 vrstvy pomocí konvoluční vrstvy. K výstupu sítě je reziduálním propojením přičten vstup. Chybová funkce 15 respektuje vstupní

tvar dat a skládá se ze dvou částí.

$$Loss = L_w + \lambda L_D \tag{15}$$

V první části 16 dochází k minimalizaci kvadratické chyby pro jednotlivé čtyři matice příznaků: aproximační matice *cA*, matice gradientu ve vertikálním směru *cV*, matice gradientu v horizontálním směru *cH* a matice diagonálního gradientu *cD*, které vypočítává diskrétní *Wavelet* transformace [16].

$$L_{w} = \|cA - \overline{cA}\|_{2}^{2} + \|cV - \overline{cV}\|_{2}^{2} + \|cH - \overline{cH}\|_{2}^{2} + \|cD - \overline{cD}\|_{2}^{2} \quad (16)$$

Druhá část 17 tvoří regulační složku, kde  $\nabla$  popisuje diferenciální operátor v kolmém směru na *curtaining* efekt. U této části chybové funkce dochází také k minimalizaci kvadratické chyby.

$$L_D = \|\nabla cA\|_2^2 + \|\nabla cH\|_2^2 \tag{17}$$

## 2.3 Implementace a trénovaní představeného řešení

Navrhovaný přístup je vytvořen v jazyce Python3 s využitím objektového paradigmatu. Tento jazyk byl vybrán z důvodu podpory maticových operací při tvorbě generátoru a kvůli efektivním knihovnám podporující *machine learning*. Generátor používá knihovny *Numpy* a *cv2*. Konvoluční neuronová síť je implementována pomocí knihovny *PyTorch* s využitím knihovny *Numpy*. Knihovna *PyTorch* poskytuje vhodnou podporu a nástroje pro tvorbu neuronových sítí.

Trénování navrhované neuronové sítě proběhlo na synteticky vytvořené datové sadě pomocí představeného generátoru 2.1. Vstupní data generátoru dodala firma *TESCAN*. Počet dodaných snímků je 21. Firma poskytla pouze malé množství snímků pro potřeby trénování především z důvodu vysokých nákladů na jejich pořízení. Poskytnuté snímky byly náhodně rozděleny na disjunktní množiny: *trénovací* a *testovací*. Poskytnutá data mají různé rozlišení a proto bylo nutné sjednotit jejich rozměry na velikost  $512 \times 512$  pixelů. Rozměry byly upraveny ručním *ořezáváním* s důrazem na zachycení různých struktur snímaného materiálu. Ručně ořezané snímky byly *Augmentovány* rotacemi a zrcadlením původního snímku. Datová sada obsahuje 2553 snímků rozdělených na 2268 trénovacích a 285 testovacích.

Síť byla trénována algoritmem *ADAM* s učícím koeficientem  $\lambda = 0,001$ . Velikost *Batch* byla nastavena pro jeden průchod z důvodu velikosti grafické paměti na 16 snímků. Koeficient chybové funkce popsané rovnicí 15 byl nastaven na hodnotu  $\lambda = 0,5$ . Trénování proběhlo v prostředí *Google Colabory*<sup>2</sup> s použitím grafického procesoru *NVIDIA Tesla K80* s velikostí paměti 12 GB. Síť obsahuje 311 204 trénovatelných parametrů a na průchod jednoho vstupního snímků potřebuje 559 MB paměti.

## 3. Vyhodnocení řešení

Navrhovaný přístup je vyhodnocen kvalitativně pomocí expertů, kteří pocházejí z firmy TESCAN a z výzkumné skupiny Graph@FIT<sup>3</sup>. Představená metoda je konfrontována s nejmodernějším přístupem [5]. Software realizující tento přístup se sice od jeho autorů nepodařilo získat, ale TESCAN propůjčil snímky opravené touto metodou k vizuálnímu porovnání s představeným řešením. K porovnávaným snímkům ale neexistují ground truth data z důvodu vysoké cenové i časové náročnosti při jejich vytvoření. Pomocí testovací syntetické datové sady bylo ověřeno i použití Wavelet transformace pro úpravu vstupních dat. Firma TES-CAN poskytla pouze malé množství reálných snímků s curtaining zkreslením, u kterých byl odstraněn curtaining efekt správnými fyzikálními principy (skutečným obrobením vzorku). Pro tyto snímky byla vyhodnocena podobnost se snímky s odstraněným curtaining efektem neuronovou sítí, a to s využitím SSIM metriky. Obrázek 9 zobrazuje výsledky dosažené představeným řešením. První dvojice ukazuje výsledek na reálně získaném snímku a druhá dvojice obrázků ukazuje vyčištění syntetického snímku.

#### Kvalitativní vyhodnocení odborníky

Odborníci porovnávali představenou metodu s metodou Fitschen [5]. Expertům byla předložena trojice snímků: vstupní s curtaining efektem a dva vyčištěné. Oba přístupy byly hodnotitelům představeny anonymně. Během testování bylo posouzeno odstranění curtainingu ze snímku, zachování vnitřní struktury materiálu, obsažení šumu ve výsledném snímku a nakonec přímé porovnání obou metod. Na odpovědi respondentů bylo nahlíženo jako na náhodnou veličinu a se znalostí centrální limitní věty se dalo předpokládat, že tato náhodná veličina bude mít Gaussovo (normální) rozložení. Proto byly vypočteny parametry normálního rozdělení  $\mu$  a  $\sigma^2$  u každého posuzovaného snímku. Aproximaci normálního rozložení znázorňuje obrázek 8 na konkrétním posuzovaném snímku. Pravděpodobnost, že představená metoda dosahuje lepších výsledků než metoda Fitschen vyčísluje rovnice 18 pomocí integrálu z rovnice 19, kde a(x) a b(x) představují hustotu pravděpodobnosti normálního rozložení v bodě x. Pro všechny posuzované snímky byla vypočtena tato pravděpodobnost. Výsledný rozdíl kvality řešení popisuje průměrná hodnota pravděpodobností z jednotlivých snímků.

$$p(A < B) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x)p(x < B)dx \qquad (18)$$

$$p(x < B) = \int_{x}^{\infty} b(y) dy$$
(19)



**Obrázek 8.** Odpovědi respondentů z firmy TESCAN u konkrétního snímku na otázku "jak úspěšně je odstraněn curtaining efekt", na které je nahlíženo jako na náhodou veličinu. Ta je aproximována normálním rozložením. Hodnota 1 reprezentuje úplné odstranění curtainingu, hodnota 5 představuje neodstranění curtainigu. Normální rozdělení popisující představené řešení má parametry  $\mu = 2,09$  a  $\sigma^2 = 0,49$ . Normální rozdělení popisující metodu Fitschen má parametry  $\mu = 3,36$  a  $\sigma^2 = 1,05$ . Představené řešení v tomto konkrétním snímku dosahuje lepšího odstranění curtaining efektu s pravděpodobností p = 84,59%.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>https://colab.research.google.com/

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>https://www.fit.vut.cz/research/group/graph/.en



**Obrázek 9.** Ukázka výsledků předvedené metody. (a) Reálně získané pozorování polovodičového materiálu.(c) Synteticky vytvořený snímek představeným generátorem. (b) (d) Výsledky představené neuronové sítě pro zobrazený vstup (a) a (c).

**Tabulka 1.** Přímé porovnání představené metody a metody Fitschen [5] na reálných datech. Ostatní dotázaní označili obě metody za stejně kvalitní z pohledu odstranění curtainingu.

	Představená metoda	Metoda Fitschen
TESCAN	60,34%	28,94%
Graph@FIT	58,00%	31,00%

Tabulka 2 zobrazuje výsledky kvalitativního testování. Výsledky jednotlivých otázek jsou rozděleny podle dotazovaných skupin. Metody jsou porovnány pravděpodobností z pohledu představeného řešení, která byla vyčíslena podle výše popsaného postupu. Podle skupiny expertů z firmy TESCAN je představené řešení s pravděpodobností průměrně p = 58,40%lepší než nejmodernější přístup. Podle akademické skupiny Graph@FIT představené řešení s průměrnou pravděpodobností p = 60,30% kvalitněji odstraňuje curtaining než metoda Fitschen. Obě expertní skupiny se shodují s průměrnou pravděpodobností  $p \approx 70\%$ , že představená metoda obsahuje méně nežádoucího jiného šumu. Experti firmy TESCAN tvrdí s průměrnou pravděpodobností p = 60,28%, že představená metoda zachovává více vnitřní struktury než metoda Fitschen.

**Tabulka 2.** Odpovědi respondentů kvalitativního testování. Na odpovědi je nahlíženo jako na náhodnou veličinu S Gaussovým (normálním) rozložením. Výsledná pravděpodobnost je průměrná hodnota pravděpodobností, které jsou vypočteny u každého pozorovaného snímku. Procentuální hodnoty ukazují s jakou pravděpodobností je představené řešení v daném kritériu lepší nebo stejně kvalitní jak metoda Fitschen.

Představená metoda	TESCAN	Graph@FIT
Odstranění curtainingu	58,40%	60,30%
Zachování struktury	60,28%	51,62%
Obsažení méně šumu	70,24%	71,88%

Tabulka 1 zobrazuje výsledky přímého porovnání obou metod. Respondenti vybírali jednu z anonymních metod, která lépe odstranila curtaining na konkrétním snímku. Napříč dotazovanými skupinami přibližně 60% expertů vybralo představovanou metodu oproti metodě Fitschen. Metodu Fitschen vybralo přibližně 30% respondentů a 10% dotázaných hodnotilo obě metody stejně kvalitně.

#### Ověření použití Wavelet transformace

Vyhodnocení použití *Wavelet* transformace pro předzpracování vstupních dat popisuje metrika PSNR, která počítá kvadratickou odchylku od *ground truth* hodnoty syntetického snímku. U syntetických snímků nedochází ke změně kontrastu mezi vstupní a *ground truth* snímkem, proto může být použita metrika PSNR. Tabulka 3 ukazuje vliv použití *Wavelet* transformace na výslednou podobnost syntetických snímků. *Wavelet* transformace zlepšuje průměrnou podobnost mezi snímky, představuje stabilnější výsledky, maximální i minimální podobnost zvyšuje o necelé 3 body PSNR metriky.

**Tabulka 3.** Tabulka PSNR metriky hodnoticí význam předzpracování dat *Wavelet* transformací na syntetických datech.

PSNR	Wavelet transf.	Bez předzpracování
$\overline{x}$	35,26	32,21
$\sigma^2$	7,63	10,85
$x_{max}$	42,08	39,36
$x_{min}$	29,71	27,41

#### Vyhodnocení reálných dat

Firma dodala 7 reálných snímků obsahují curtaining efekt a následně snímky bez tohoto efektu, které vznikly fyzikálně správně oprášeným vzorkem. Jednotlivé dvojice snímků se od sebe liší zaostřením a natočením elektronového svazku. Tento jev byl potlačen manuálními transformacemi se snímky. Správné fyzikální oprášení změní vnitřní strukturu materiálu. Zobrazí se struktury dříve překryté neobrobenou vrstvou materiálu. Snímky se od sebe vizuálně liší a metriky pro hodnocení podobnosti budou vykazovat menší podobnost. Představené řešení pouze rekonstruuje vizuálně poškozený snímek nikoliv opravuje vnitřní strukturu materiálu, proto na těchto datech bude vykazovat menší výkonnost. Podobnost snímků popisuje metrika SSIM, která reflektuje změnu jasu s kontrastem snímku. Tabulka 4 zobrazuje dosažené hodnoty podobnosti SSIM. Podobnost na reálných datech je nižší také z důvodu změny vnitřní struktury materiálu při přesném obrobení.

**Tabulka 4.** Tabulka SSIM metriky hodnotí podobnost SW vyčištěného snímku se správně oprášeným vzorkem materiálu. Výsledky měření jsou dány do kontextu se synteticky vytvořenými daty.

SSIM	Reálné snímky	Syntetické snímky
$\overline{x}$	0,90	0,98
$\sigma^2$	0,002	0,0003

#### Slovní hodnocení odborníky

Úryvky hodnocení expertů firmy TESCAN k představenému řešení i ke srovnání s nejmodernější metodou [5]:

- "Kvalitu odstranění curtainingu hodnotím kladně. Nedochází ani k příliš velkému zkreslení obrázku/informace, což je nejčastější problém. Největší výzvou je zachování původní struktury..."
- "Kvalita odstranění curtaining efektu mi příjde dostatečná a zdá se, že většinou funguje opravdu dobře pro obě metody, až na několik snímků, kde buď první nebo druhá metoda z nějakého důvodu selhala..."
- "Kvalita odstranění curtainingu pomocí aplikované metody je absolutně dostačující pro rekonstrukci 3D tomografie. Nedochází k zásadní ztrátě informace získané pomocí FIB-SEM a nepozoruji ani žádné výrazné zvýšení šumu ve vygenerovaných obrázcích."

## 4. Závěr

Článek představil nový přistup pro odstranění nežádoucího curtaining efektu při tomografické analýze materiálu systémem mikroskopů FIB-SEM. Řešení odstraňuje vizuálně curtaining zkreslení snímků, které představují vždy jeden řez tomografické analýzy. Odstranění nežádoucího efektu probíhá pomocí konvoluční neuronové sítě. Navržená architektura sítě obsahuje čtyři paralelní větve na různých rozlišeních vstupních příznaků. Příznaky jsou získány pomocí diskrétní Wavelet transformace (DWT). Výsledek neuronové sítě představuje vyčištěný snímek. Pro použití techniky učení s učitelem bylo nutné vytvořit syntetický datový set se snímky obsahující curtaining efekt. Generátor těchto snímků simuluje fyzikální a mechanické jevy v FIB-SEM systému. Ve vytvořené simulaci se povedlo věrohodně napodobit činnost iontového svazku a proces elektronového mikroskopu převést na ekvivalentní světelný model.

Navrhované řešení úspěšně odstraňuje nežádoucí curtaining efekt. Kvalitativní vyhodnocení experty ukazuje, že s průměrnou pravděpodobností p=58,40% představené řešení dosahuje lepších výsledků než metoda Fitschen. Představené řešení s průměrnou pravděpodobností p = 60,28% zachovává více vnitřní struktury materiálu a s průměrnou pravděpodobností p = 70,24% vyčištěné snímky obsahují méně šumu než metoda Fitschen. V přímém porovnání 60% respondentů považuje snímky vyčištěné touto metodou za lépe vyčištěné a 10% respondentů považuje obě

metody za stejně kvalitní. Metoda na reálných snímcích, ke kterým existuje opravdová *ground truth* hodnota, dosahuje v metrice SSIM hodnotu 0,9. Tyto snímky mají často jinou vnitřní strukturu po řádném oprášením iontovým svazkem. Proběhlo i slovní zhodnocení kvality reálných výsledků odborníky z firmy TESCAN. Dotazovaní experti konstatovali, že metoda dostatečně odstraňuje curtaining.

Článek poskytuje první řešení odstraňování curtaining efektu pomocí konvolučních neuronových sítí. Představuje první simulátor syntetického curtaining šumu a ukazuje do jisté míry možnost nahrazení reálných dat syntetickými pomocí velice přesné simulace FIB-SEM systému.

Představené řešení otevírá nejen možnost dalšího výzkumu v oblasti odstraňování curtaining efektu pomocí konvolučních neuronových sítí, ale také v procesu simulace syntetických snímků. Vytvořený přístup má velký potenciál pro použití v praxi zejména z důvodů nízké časové náročnosti, ale současně dosahuje stejných nebo lepších výsledků než jiné metody.

#### Poděkování

Rád bych poděkoval prof. Dr. Ing. Pavlovi Zemčíkovi za poskytnuté cenné rady a jeho vstřícný přístup. Rád bych také poděkoval externím odborníkům Ing. Vojtěchovi Filipovi a Ing. Tomášovi Hrnčířovi Ph.D. z firmy TESCAN za konstruktivní konzultace.

## Literatura

- [1] Nan Yao. Focused ion beam systems : basics and applications. Cambridge University Press, Cambridge, 1 edition, 2007.
- [2] I. Joseph Goldstein. Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis. Kluwer, New York, 3. edition, 2003.
- [3] Warren MoberlyChan, David Adams, Michael Aziz, Gerhard Hobler, and Thomas Schenkel. Fundamentals of focused ion beam nanostructural processing: Below, at, and above the surface. *MRS Bulletin*, 32(1):424–432, 2007.
- [4] Gonzalo Prieto. Fib-sem tomograph. In *Encyclopedia of Membranes*, pages 1–3. Springer, Berlin, 1 edition, 2015.
- [5] Jan Henrik Fitschen, Jianwei Ma, and Sebastian Schuff. Removal of curtaining effects by a variational model with directional forward differences. *Computer Vision and Image Understanding*, 15(5):24–32, 2017.

- [6] Frank Altmann, Jens Beyersdorfer, Jan Schischka, and Michael Krause. Cross section analysis of cu filled tsvs based on high throughput plasmafib milling. *Conference Proceedings from the International Symposium for Testing and Failure Analysis*, 38(1):39–43, 2012.
- [7] Laurens Kwakman, German Franz, and Maaike Margrete Visser Taklo. Characterization and failure analysis of 3d integrated systems using a novel plasma-fib system. *Frontiers Of Characterization And Metrology FOR Nanoelectronics*, 1395(1):269–273, 2011.
- [8] Jonathan Schwartz, Jiang Yi, Yongjie Wang, and Anthony Aiello. Removing stripes, scratches, and curtaining with nonrecoverable compressed sensing. *Microscopy and Microanalysis*, 25(3):705–710, 2019.
- [9] Shu wen W Chen and Jean-Luc Pellequer. Destripe: frequency-based algorithm for removing stripe noises from afm images. *BMC structural biology*, 11(7):1–9, 2011.
- [10] Beat Munch, Pavel Trtik, Federica Marone, and Marco Stampanoni. Stripe and ring artifact removal with combined wavelet - fourier filtering. *Optics express*, 17(10):8567–8591, 2009.
- [11] Paul Rodríguez. Total variation regularization algorithms for images corrupted with different noise models: A review. *Journal of Electrical and Computer Engineering*, 2013(1):18, 2013.
- [12] K.H. Jürgen Buschow, Robert W. Cahn, Merton C. Flemings, and Bernhard Ilschner. *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. Elsevier Ltd, Pergamon, 2001.
- [13] Yi Chang, Houzhang Fang, Luxin Yan, and Hai Liu. Robust destriping method with unidirectional total variation and framelet regularization. *Optics express*, 21(20):23307–23323, 2013.
- [14] Jérôme Fehrenbach, Pierre Weiss, and Corinne Lorenzo. Variational algorithms to remove stationary noise: Applications to microscopy imaging. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(10):4420–4430, 2012.
- [15] Yair Riverson, Yibo Zhang, Harun Günaydin, Da Teng, and Aydogan Ozcan. Phase recovery and holographic image reconstruction using deep learning in neural networks. *Light Sci Appl*, 7(1):17141, 2018.
- [16] Juntao Guan, Rui Lai, and Ai Xiong. Wavelet deep neural network for stripe noise removal. *IEEE Access*, 7(1):44544–44554, 2019.