

基于YOLOv3框架的高分辨电镜图像原子峰位置检测

南虎 麻晓晶 赵海博 汤少杰 刘卫华 王大威 贾春林

Detection of intensity peaks in high-resolution transmission electron microscopy image based on YOLOv3

Nan Hu Ma Xiao-Jing Zhao Hai-Bo Tang Shao-Jie Liu Wei-Hua Wang Da-Wei Jia Chun-Lin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 076803 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201502

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201502>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于深度学习压缩感知与复合混沌系统的通用图像加密算法

General image encryption algorithm based on deep learning compressed sensing and compound chaotic system

物理学报. 2020, 69(24): 240502 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201019>

基于深度学习的联合变换相关器光学图像加密系统去噪方法

In depth learning based method of denoising joint transform correlator optical image encryption system

物理学报. 2020, 69(24): 244204 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200805>

基于深紫外激光-光发射电子显微技术的高分辨率磁畴成像

High resolution imaging based on photo-emission electron microscopy excited by deep ultraviolet laser

物理学报. 2020, 69(9): 096801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200083>

新型高分辨率电子能量损失谱仪与表面元激发研究

Development of novel high-resolution electron energy loss spectroscopy and related studies on surface excitations

物理学报. 2018, 67(12): 127901 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180689>

高分辨紫外电子轰击互补金属氧化物半导体器件的实验研究

High resolution electron bombarded complementary metal oxide semiconductor sensor for ultraviolet detection

物理学报. 2018, 67(1): 014209 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171729>

Fresnel波带片编码成像的高分辨重建

High-resolution reconstruction of Fresnel zone plate coded imaging

物理学报. 2017, 66(5): 054203 <https://doi.org/10.7498/aps.66.054203>

基于 YOLOv3 框架的高分辨电镜图像 原子峰位置检测*

南虎¹⁾ 麻晓晶¹⁾ 赵海博¹⁾ 汤少杰²⁾ 刘卫华¹⁾
王大威^{1)†} 贾春林¹⁾³⁾

1) (西安交通大学电子与信息学部微电子学院, 西安 710049)

2) (西安邮电大学自动化学院, 西安 710121)

3) (Ernst Ruska-Centrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (ER-C),
Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich, Germany)

(2020 年 9 月 9 日收到; 2020 年 11 月 22 日收到修改稿)

高分辨电镜图像中原子峰位置的检测具有十分重要的现实意义, 通过精确量化原子峰位置可以分析物质在微观尺度上的结构形变、电极化矢量分布等重要信息. 近年来深度学习技术在图像目标检测领域取得了巨大突破, 这一技术可用在高分辨电镜图像处理上, 因为原子位置的检测可以看作是一个目标检测问题. 本文利用先进的机器学习方法, 通过制作高质量原子图像样本集, 使用 YOLOv3 目标识别框架对原子图像进行自动检测, 达到预期效果, 实现了深度学习技术在高分辨电镜图像处理领域的应用. 该方法的运用有望突破自动处理动态、大量电镜图片的瓶颈问题.

关键词: 高分辨电镜图像处理, 深度学习, YOLOv3 网络, 原子峰位置检测

PACS: 68.37.Og, 07.05.Mh, 95.75.Mn, 42.30.Tz

DOI: 10.7498/aps.70.20201502

1 引言

球差校正透射电子显微镜能够实现对材料微观结构在亚埃级别分辨率的直接成像, 使得对物质中原子的占位和化学成分等的精确分析成为可能^[1,2]. 例如, 利用球差校正扫描透射电镜环形暗场像 (ADF-STEM) 模式, 实现了对硅 (Si)[112] 方向 78 pm 间距原子对的直接成像^[3]; 利用负球差成像条件得到的钛酸钡 (BaTiO_3) 高分辨原子像, 通过精确定量对应于每列原子柱的像素强度, 计算得到了氧原子空位分布情况^[4]; 利用 ADF-STEM 模式, 实现了氮化铝 (AlN) 量子阱结构的直接原子分辨

成像, 通过对高分辨像中氮-铝对衬度分布的形貌分析, 确定了其局部电极化矢量的分布情况^[5]. 此外, 球差校正扫描透射电镜电子能量损失谱 (EELS) 技术可以在原子尺度对物质的电子结构、化学成份进行分析^[6,7], 例如对镧锶锰氧/钛酸锶 ($\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3$) 界面化学键状态的确定^[8]. 球差校正透射电镜皮米级别的分辨率也使得对氧化物界面的精确分析成为可能^[9,10], 例如利用球差校正高角环形暗场像 (HAADF-STEM) 和 EELS 技术对钙钛矿结构氧化物镧铝氧 (LaAlO_3) 和钛酸锶 (SrTiO_3) 界面超导结构原子尺度的表征和分析^[11], 高分辨电子显微术正在极大推动氧化物电子材料的发展.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11974268, 61671368) 和陕西省重点研发计划 (批准号: 2020SF-377) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dawei.wang@xjtu.edu.cn

高分辨电镜图像中原子峰位置的精确量具有十分重要的现实意义. 例如在负球差成像条件下, 通过精确测量锆钛酸铅 ($\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$) 薄膜中每个单胞内锆/钛 (Ti/Zr) 原子柱与相邻氧原子 (O) 柱的相对位移, 首次在皮米精度精确表征了锆钛酸铅 ($\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$) 薄膜中电极化矢量的连续涡旋状翻转分布^[12]. 在钛酸铅/钛酸锶 ($\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$) 外延多层薄膜中, 通过精确确定每个原子柱的位置, 揭示了 $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ 多层膜中纳米拓扑缺陷的新颖结构, 包括电偶极子波、偶极子向错和其他电偶极子拓扑缺陷^[13]. 而对利用球差校正扫描透射电镜得到的钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜高角环形暗场像 (HAADF-STEM), 通过精确测量每个单胞中钛离子 (Ti^{4+}) 相对于相邻 4 个铅离子 (Pb^{2+}) 几何中心的皮米精度的位移, 观察到了钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜中的通量全闭合畴结构^[14]. 利用球差校正扫描透射电镜高角环形暗场像模式 (HAADF-STEM), 对钽酸铽 (TbScO_3) 衬底上铁酸铋 (BiFeO_3) 薄膜进行原子尺度的成像, 通过精确量计算每个单胞中铁 (Fe) 离子相对于相邻 4 个铋 (Bi) 离子几何中心的位移, 确定了铁酸铋 (BiFeO_3) 薄膜中 109° 畴壁在界面处的极化矢量的涡旋状分布情况^[15]. 利用钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜的 (HAADF-STEM) 像, 通过精确测量每个单胞中钛/氧 (Ti/O) 原子峰相对于相邻 4 个铅 (Pb) 原子峰几何中心的位移, 确定了钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜中的应力分布情况^[16]. 在钛酸锶/钛酸铅 ($\text{SrTiO}_3/\text{PbTiO}_3$) 外延多层薄膜中, 通过精确测量每个原子峰的实际位置, 确定了钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜中每个单胞内钛离子 (Ti^{4+}) 的相对位移, 进而确定了薄膜中存在的通量闭合畴结构, 并且利用这些实空间的原子峰坐标信息, 通过逐个单胞计算的方式确定了薄膜面内及法线方向的应力分布状况以及面内的晶格旋转信息^[17]. 在球差校正扫描透射环形明场像 (ABF-STEM) 成像模式下, 利用二维高斯函数拟合分别确定模拟像和实验像中原子峰的精确坐标位置, 通过测量不同离子原子峰之间的相对位置, 分离了样品倾转和扫描畸变两种因素的影响, 精确量化研究了样品倾转、样品厚度、离焦量、会聚角等因素对原子成像位置的影响^[18]. 使用原子分辨的积分差分相位衬度 (iDPC) 技术, 在扫描透射成像模式 (STEM) 下成功实现了对钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜中氧元素的成像, 利用二维高斯函

数逐个拟合原子峰得到精确坐标, 确定了单个铁电涡旋中的极化分布情况^[19]. 利用扫描透射成像模式下的原位实验技术, 通过精确量原子位置, 确定了外力调控下钛酸铅 (PbTiO_3) 薄膜中铁电畴拓扑结构的变化情况^[20].

上述的定量研究工作都是基于高分辨电镜图像中单个原子像的像素分布具有二维高斯分布的情况, 通过最小二乘法拟合将二维高斯分布的光斑中心, 实现精确定位, 是精确测量原子位置的基础^[21]. 这一工作如果由人工处理将是一个非常耗时耗力的过程, 因此考虑到处理高分辨电镜图像所需要的巨大工作量, 特别是随着实时高分辨电镜图像的逐渐增多, 利用计算机自动处理电镜图像就显得尤为重要.

在已经发表的相关算法中, 可以通过设定两个线性无关的基矢实现对原子峰位置的搜索, 并在实空间实现对晶格形变的直接可视化. 这个算法的优点在于计算效率十分高, 不需要人为干预, 可以处理大尺寸高分辨图像, 缺点在于其对噪声十分敏感, 且很难处理多元素复合晶格的情形, 需要提前对图像进行滤波和降噪处理, 鲁棒性有待提升^[22]. 另一种是自动构建布拉维格子的算法, 可获得和前一算法类似的效果, 这种算法同样具有计算效率很高的特点, 而且初始参数设定的灵活性很大, 但是该算法只适用于单元素周期性晶格, 对于存在多元素复合晶格、晶体缺陷、大幅形变以及图像局部衬度过低等情况的图像很难适用^[23]. 通过设定单胞的周期性数值分布形式, 迭代计算每个原子峰质心位置直至收敛的方法来实现对原子峰位置的提取, 其计算效率很高, 但是这种计算方法和上述两种算法一样, 提前预设了周期性的结构, 依然难以适用于晶体缺陷以及多元素复合晶格的情况, 且极易受到图像噪声的影响, 鲁棒性不强^[24].

上述几种代表性的寻峰算法均可以达到亚像素级别的精度, 计算效率也很高, 但是受限于周期性的算法设定, 往往需要针对特定图像做出人为干预以及参数调节措施, 在处理界面、位错、材料局部厚度变化引起的图像衬度差异过大等情形时会出现困难. 另一方面, 近年来以深度学习为代表的机器学习技术在计算机视觉领域取得了令人瞩目的进展^[25]. 这一方法在图像像素层面对目标的特征展开学习, 能够从低阶像素特征上升到高阶抽象特征, 不依赖于预设模型或者具体算法限制, 具有

强大的自适应性以及对噪声、形变等的鲁棒性^[26].

高分辨电镜图像中原子峰位置的精确测量可以等效为单原子目标检测问题,如果能够使用深度学习技术对图像中的原子峰进行识别和检测,然后对检测到的目标进行二维高斯拟合,就能实现原子峰位置的精确测量.目前,YOLOv3网络是性能领先的实时端到端目标检测框架,其架构特点为全卷积连接和多尺度检测,具有精度高、速度快等优势,尤其在小目标检测任务中表现十分优异^[27].而电镜图像的分析是计算密集型的,且当下电镜图像的产出数量十分巨大,为了兼顾准确性和高效率,需要选定实时性和准确性都较好的网络,YOLOv3网络在相同的检测精度下,检测速度明显优于其他几种主流的目标检测网络^[27].根据这一思路,本文利用YOLOv3框架训练了一套能够识别和检测原子图像的网络,并且对训练效果进行了测试.应用这一网络结合二维高斯拟合能够完整地处理电镜图像中原子峰位置的量化问题,为动态大规模电镜图像的处理提供了一个新方法,突破了自动化、快速处理大量高分辨电镜图像的瓶颈.

2 样本集图像的制作

机器学习检测目标成功的关键因素在于大规模高质量样本集的制作.本文处理了大量高分辨电镜图像,制作了403张 416×416 大小的样本图像,其中包括了透射电子显微像(TEM)和扫描透射电子显微像(STEM)两种类型的图像.选择把样本图像制作成 416×416 大小是因为YOLOv3网络会自动将输入图像缩放为 416×416 大小,提前把样本制作成 416×416 大小的好处是输入网络的图像是原始大小,不会被网络进一步拉伸或者缩放太多以至于变形严重,这样有利于网络对原子图像本征特征的学习.

在样本的制作过程中,对每一个样本图像,使用labelImg软件^[28]对每张图像中的原子峰进行标记,并生成对应的xml文件.由于每张高分辨电镜图像中原子峰的数量十分庞大,一张高分辨像中待标记的原子峰数目往往达到数千量级,而且样本集本身的数量也十分巨大,为了兼顾效率和质量,在标记的过程中,当图像中原子峰尺寸较大而利于标记时,把其中所有的原子峰都完全标记,如图1(a)、图1(b)和图1(d)所示,但当图像中原子峰尺寸较

小且数量十分庞大时,尽量做到标记其中90%的原子峰,如图1(c)所示.

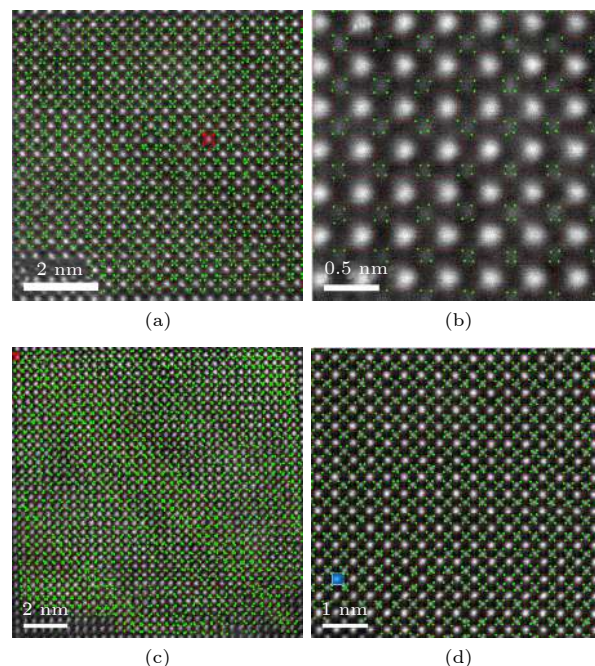


图1 样本图像标记示例 (a), (b), (d) 包含大尺寸原子峰,做到了100%标记; (c) 包含小尺寸原子峰,做到90%左右的标记.

Fig. 1. Sample images with the intensity peaks labeled. The images (a), (b) and (d) contain a relatively small number of atom peaks, which are all labeled. On the other hand, (c) has too many atom peaks, which are partially labeled (about 90%).

3 YOLOv3 网络的训练

完成样本集的标记以后就可以部署网络,并对其训练.将403张样本集中的367张图像用于训练,剩余的36张图像用于测试.训练设置如下,每个批次输入网络的图像数量为64张(batch=64);每个批次设定16个子批次,即将每个批次的64张图像分为16次输入网络,每次4张,以减轻显卡内存的压力;网络的训练使用两块NVIDIA Tesla P100 PCIe 16 GB显卡完成.

通过预训练发现,网络的误差函数(loss)在迭代次数为500次左右时就能实现收敛,为此,设定训练的最大迭代次数为3000.网络的误差函数和交并比(IoU)数值变化情况如图2所示,误差函数在500批次前后达到极小值,并一直到训练结束前保持稳定,交并比数值在500批次前后收敛,并一直呈缓慢震荡上升趋势,直至训练结束都没有出

现下降, 这说明网络训练情况良好. 通过检查输出文件发现, 此轮训练一直到结束, 并没有出现梯度

剧烈震荡的情形, 达到了对网络进行训练的目的. 因此, 可以使用此轮训练得到的网络权重参数.

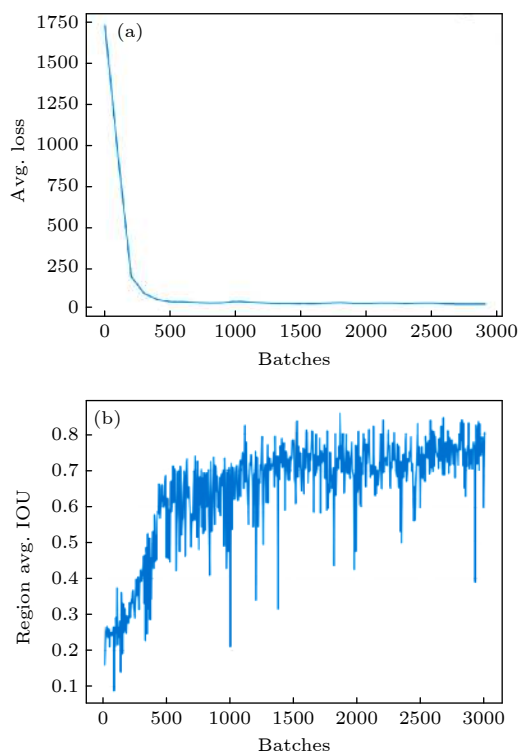


图 2 最大训练批次为 3000 时网络的训练情况 (a) 网络训练过程的误差函数, 在 500 批次前后收敛, 直至训练结束一直保持稳定; (b) 网络训练过程的交并比数值, 在 500 批次前快速上升, 之后一直缓慢上升, 没有下降趋势

Fig. 2. The YOLOv3 training process with an epoch number of 3000: (a) The loss function converges after 500 epochs, which remains stable until the end of the training; (b) the IOU value increases quickly during the first 500 epochs, and then slowly increases until the end of the training.

4 YOLOv3 网络的检测效果

从 YOLOv3 网络的训练部分可以看到, 网络训练结果收敛得很快, 可以将训练完成的网络参数用于测试. 训练过程在 200, 400, 800 和 3000 批次时分别输出了权重参数, 将这些参数文件用于目标检测, 通过测试发现训练批次为 800 的网络检测能力最强. 因而, 最终选用 800 训练批次的网络权重参数进行检测.

YOLOv3 网络检测物体的默认置信度阈值为 0.25, 检测中首先使用此置信度阈值对下面 9 张高分辨电镜图像进行测试, 测试采用了和训练样本一样大小 (即 416×416) 的图像作为检测样本.

测试结果如图 3 所示, 当使用默认的 0.25 作为检测置信度阈值时, 有很多图像中完全无法检测到原子目标, 比如图 3(a)—(d)、图 3(f) 和图 3(g), 有些图像只能检测到部分原子, 比如图 3(i). 只有图 3(e) 和图 3(h) 检测到了大部分原子.

但是, 上述结果并不能说明 YOLOv3 网络对于高分辨电镜照片无效. 当检测置信度阈值被降为 0.1 时, 重新检测上述图像, 检测结果如图 4 所示, 此条件下的网络几乎实现了对原子峰目标的 100% 检测. YOLOv3 网络在该条件下表现出了强大的检测能力, 甚至将图 4(h) 中处于最下面一行和最右面一列以及图 4(i) 中最右面一列的半原子

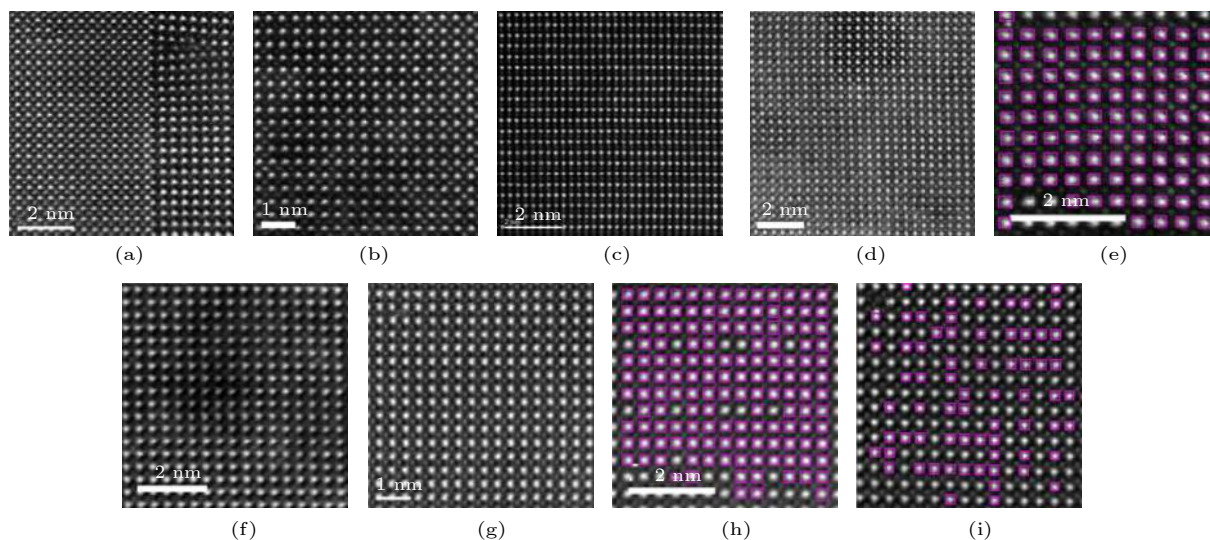


图 3 设置置信度为 0.25 时 YOLOv3 网络检测结果

Fig. 3. The detection results obtained with a confidence threshold of 0.25.

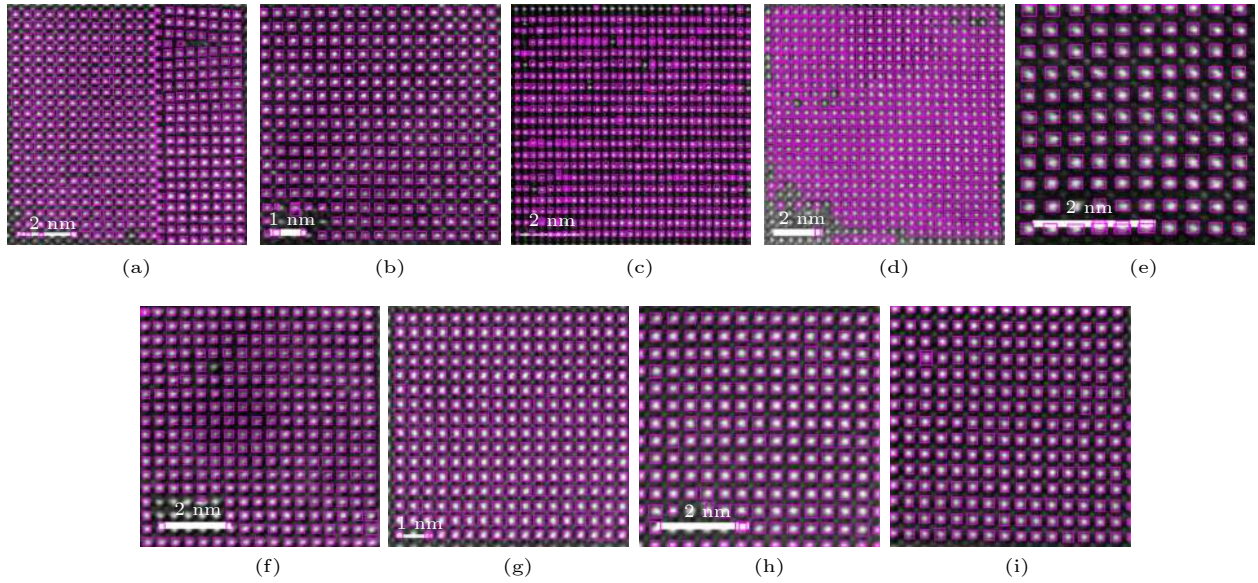


图 4 设置置信度为 0.1 的 YOLOv3 网络检测结果, 各图像的检测时间如下: (a) 7.40 s; (b) 7.38 s; (c) 7.2 s; (d) 7.24 s; (e) 7.28 s; (f) 7.25 s; (g) 7.24 s; (h) 7.24 s; (i) 7.22 s

Fig. 4. The detection results obtained with a confidence threshold of 0.1. The detection times for these images are: (a) 7.40 s; (b) 7.38 s; (c) 7.2 s; (d) 7.24 s; (e) 7.28 s; (f) 7.25 s; (g) 7.24 s; (h) 7.24 s; (i) 7.22 s.

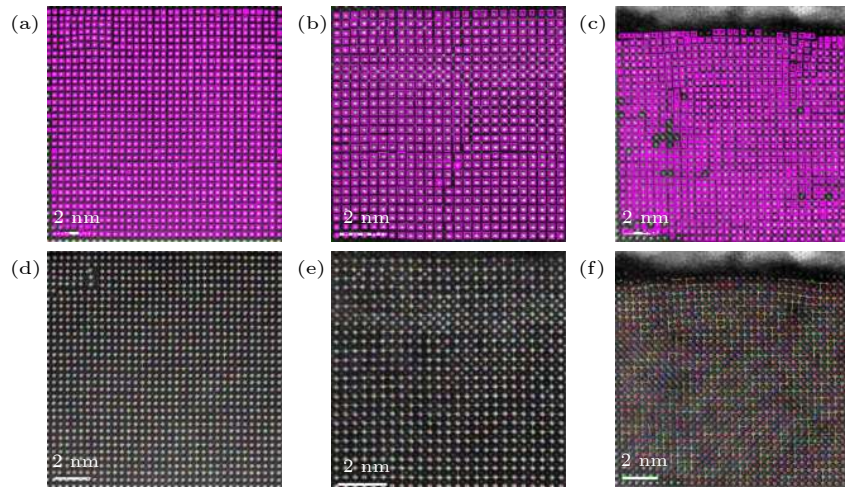


图 5 (a), (b) 1024×1024 尺寸图像检测效果; (c) 512×512 尺寸晶格缺陷图像检测效果, 图 (a)—图 (c) 检测时间均在 7.4 s 左右; (d), (e), (f) 分别是 (a), (b), (c) 中原子目标检测框内二维高斯拟合结果、单胞构建效果以及 B 位原子峰的拟合结果, 计算时间分别为 27.32 s, 10.51 s, 20.52 s

Fig. 5. (a), (b) The detection result of a 1024×1024 image; (c) the detection result of a 512×512 lattice distortion image. The detection time for each of them is about 7.4 s; (d), (e), (f) two-dimensional gauss fitting result within each detected window in (a), (b) and (c), constructed frames of unit cells, and fitting result of corresponding B site atom peaks. Computing times are 27.32 s, 10.51 s, 20.52 s respectively.

峰都检测了出来. 另外, 所有图像的检测速度都在 7.3 s 上下, 具体检测时间见图 4 图题中的说明. 这样的检测速度充分显示了 YOLOv3 网络的实用性, 使得其能够在后续的研究工作中应用于大规模动态高分辨电镜图像的量化处理.

更进一步, 测试了 YOLOv3 网络对更大尺寸图像的检测能力, 使用 0.05 作为置信度阈值, 检测

结果如图 5(a)—图 5(c) 所示. 从检测结果可以看出, 训练好的 YOLOv3 网络在图 5(a) 和图 5(b) 这样的 1024×1024 以及图 5(c) 这样的 512×512 的大尺寸图像上依然能够准确、全面地检测到绝大部分原子峰, 充分说明了网络检测能力的鲁棒性. 更重要的是, 3 张大尺寸图像的检测时间依然保持在 7.3 s 上下, 凸显了 YOLOv3 网络检测的速度优

势. 其中图 5(c) 存在比较明显的样品漂移现象, 且包含几处明显的晶格缺陷区域, 得益于神经网络从像素层面出发进行目标检测的原理, 这种周期性的破缺对 YOLOv3 的检测没有特别大的影响, 大部分原子峰依然能被准确地检测出来, 中间缺陷区域由于晶格畸变造成原子成像衬度效果较差, 未被检测出来.

在图 5(a)—图 5(c) 中, 剩余未被检测到的原子已经极少, 可以通过手工的办法进行处理. 值得注意的是, 通过将 1024×1024 的图像分割为 416×416 的图像, 检测精度还可以进一步提高, 因而能够实现检测过程的全自动化. 另外, 图 5(a) 中有少量的原子被重复检测了几次, 这在大尺寸、含有很多小原子峰的照片中可能出现, 主要是由于小原子峰之间距离靠得更近, 局部灰度形貌的微观起伏更容易影响检测精度, 另外, 这里设置的置信度较低, 可能引发误检测或者重复检测, 可以通过后期高斯拟合的方式, 把这些重叠的搜索框合并为一个.

5 检测结果的精确定量

将 YOLOv3 检测到的原子目标框的中心坐标以及宽和高输出出来, 使用二维高斯函数对目标框内的像素数据进行最小二乘法拟合, 就可以得到所有强原子峰的精确坐标位置. 更进一步, 利用这些拟合得到的强原子峰逐个构建单胞, 以标定较弱的 B 位原子峰. 这一过程本质上是对已有的数据进行重新整理的过程, 可以由不同的算法完成, 目前采用的算法具体过程如下, 对任意一个强原子峰 p_0 , 设它为单胞的左上顶点, 在所有其他强原子峰中搜索离它最近且两者连线近似平行于水平方向的右侧最近邻原子 p_1 , 搜索离它最近且两者连线近似平行于竖直方向的下侧最近邻原子 p_2 , 搜索离 p_2 最近且两者连线近似平行于水平方向的右侧最近邻原子 p_3 , 则 p_0, p_1, p_2, p_3 构成了一个单胞, 紧接着在单胞的几何中心区域使用二维高斯函数进行最小二乘法拟合, 得到 B 位原子峰的精确坐标位置, 如果需要可以在单胞内的区域进行搜索以确定较弱的 B 位原子的位置. 对 YOLOv3 网络检测到的所有强原子峰遍历上述过程, 即可得到所有原子的精确坐标位置.

上述简单的计算过程中, 设定当拟合成功时返回高斯峰的精确坐标位置, 并标记为红色, 拟合失

败时返回取样框的几何中心位置并标记为绿色. 此外, 将每个单胞中的 p_0 和 p_1 连线, p_0 和 p_2 连线, 即将每个单胞的上侧和左侧框线可视化出来, 以这两条框线代表一个完整单胞, 并随机赋予每个单胞不同的颜色, 通过这种方式可以显示单胞的构建效果. 使用此方法, 对图 5(a)—图 5(c) 三张图像进行处理, 结果如图 5(d)—图 5(f) 所示. 可以看到, 所有目标检测框中的强原子峰都能很好地拟合出来, 相应的单胞构建效果和 B 位原子峰检测结果也都很好. 图 5(f) 中由于晶格缺陷区域的若干强原子峰未被 YOLOv3 网络检测出来, 同时由于晶格缺陷导致的晶格畸变, 造成单胞构建的失败, 相应的这些区域的 B 位原子峰也未能被检测出来. 这说明对于复杂图像, 在 YOLOv3 识别出重要原子峰之后, 对原子峰坐标位置数据进行组织的程序需要在未来进一步开发.

6 结 论

本文对 403 张高分辨电子显微镜图像进行了高质量标记, 形成了一个训练集, 并使用其中 367 张图像对 YOLOv3 网络进行了训练. 分析训练结果发现, 迭代次数为 500 批次左右即可使网络达到收敛. 使用训练完成的网络对不同类型与尺寸的图像进行测试, 发现当把置信度阈值设为 0.1 的情况下网络可有效检测出各种尺度的高分辨电镜图像中的原子峰目标.

值得注意的是, 367 张图像的训练集属于典型的小规模样本集, 而 YOLOv3 网络在如此小规模量级的训练集上表现优异, 其在训练批次为 500 左右时就已经达到收敛, 并且给出十分优异的检测效果. 这一现象的原因在于原子峰目标图像较为简单, 主要表现为一个近似为圆形图像的目标, 神经网络能够比较快速和准确地学习并检测到这些结构特征. 通过这一工作, 发现完全可以使用 YOLOv3 网络对高分辨电镜图像中的原子峰进行识别或检测, 而这一网络的训练甚至可以通过小规模样本完成. 将这一技术与对原子峰的拟合^[23]的程序进行结合可以全面地实现对高分辨电镜图像的定量化.

在规则的周期性点阵图像检测任务中, 将 YOLOv3 网络同数据处理方法相结合, 能够实现和文献^[23]中的工作相似的精度和速度, 两者差距不大, 如图 5(d) 和图 5(e) 所示. YOLOv3 的优势

在于对缺陷非周期性图像的检测能力上, 得益于神经网络基于像素特征进行检测的原理, 其不依赖于原子点阵的周期性限定. 在对如图 5(f) 所示缺陷图像的检测任务中, YOLOv3 网络要显著优于文献 [23] 等基于周期性假定算法的检测能力, 即使 YOLOv3 网络不能检测出缺陷区域比较弥散的原子峰, 也不影响它对周围原子峰的检测. 事实上, 基于原子点阵规则周期性排列的算法在有大范围缺陷的图像中很难有效工作, 这些缺陷区域可能会造成算法搜索过程失败, 导致算法中断, 往往需要人为干预才能继续进行后续原子点阵的搜索 [22].

值得注意的是, 测试发现对图像的检测时间大约在 7 s 左右, 显示出利用深度神经网络进行图像处理的速度优势. 检测的速度优势使 YOLOv3 框架有望应用于后续大规模、动态高分辨电镜图像处理领域, 例如实现对原位图像数据的实时处理. 本文的工作充分展示了机器学习方法在高分辨电镜图像处理领域的广阔应用前景.

参考文献

- [1] Urban K W 2008 *Science* **321** 506
- [2] Falke U, Bleloch A, Falke M, Teichert S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 116103
- [3] Nellist P D, Chisholm M F, Dellby N, Krivanek O L, Murfitt M F, Szilagyi Z S, Lupini A R, Borisevich A, Sides W H, Pennycook S J 2004 *Science* **305** 1741
- [4] Jia C L, Urban K 2004 *Science* **303** 2001
- [5] Mkhoyan K A, Batson P E, Cha J, Schaff W J, Silcox J 2006 *Science* **312** 1354
- [6] Varela M, Findlay S D, Lupini A R, Christen H M, Borisevich A Y, Dellby N, Krivanek O L, Nellist P D, Oxley M P, Allen L J, Pennycook S J 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 095502
- [7] Bosman M, Keast V J, Garcia-Munoz J L, D'Alfonso A J, Findlay S D, Allen L J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 086102
- [8] Muller D A, Kourkoutis L F, Murfitt M, Song J H, Hwang H Y, Silcox J, Dellby N, Krivanek O L 2008 *Science* **319** 1073
- [9] Scott J F 2007 *Science* **315** 954
- [10] Nakagawa N, Hwang H Y, Muller D A 2006 *Nat. Mater.* **5** 204
- [11] Reyren N, Thiel S, Cavaglia A D, Kourkoutis L F, Hammerl G, Richter C, Schneider C W, Kopp T, Ruetschi A S, Jaccard D, Gabay M, Muller D A, Triscone J M, Mannhart J 2007 *Science* **317** 1196
- [12] Jia C L, Urban K W, Alexe M, Hesse D, Vrejoiu I 2011 *Science* **331** 1420
- [13] Lu L, Nahas Y, Liu M, Du H, Jiang Z, Ren S, Wang D, Jin L, Prokhorenko S, Jia C L, Bellaiche L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 177601
- [14] Tang Y L, Zhu Y L, Ma X L, Borisevich A Y, Morozovska A N, Eliseev E A, Wang W Y, Wang Y J, Xu Y B, Zhang Z D, Pennycook S J 2015 *Science* **348** 547
- [15] Nelson C T, Winchester B, Zhang Y, Kim S J, Melville A, Adamo C, Folkman C M, Baek S H, Eom C B, Schlom D G, Chen L Q, Pan X Q 2011 *Nano Lett.* **11** 828
- [16] Catalan G, Lubk A, Vlooswijk A H G, Snoeck E, Magen C, Janssens A, Rispens G, Rijnders G, Blank D H A, Noheda B 2011 *Nat. Mater.* **10** 963
- [17] Li S, Wang Y J, Zhu Y L, Tang Y L, Liu Y, Ma J Y, Han M J, Wu B, Ma X L 2019 *Acta Mater.* **171** 176
- [18] Gao P, Kumamoto A, Ishikawa R, Lugg N, Shibata N, Ikuhara Y 2018 *Ultramicroscopy* **184** 177
- [19] Sun Y, Abid A Y, Tan C, Ren C, Li M, Li N, Chen P, Li Y, Zhang J, Zhong X, Wang J, Liao M, Liu K, Bai X, Zhou Y, Yu D, Gao P 2019 *Sci. Adv.* **5** eaav4355
- [20] Chen P, Zhong X, Zorn J A, Li M, Sun Y, Abid A Y, Ren C, Li Y, Li X, Ma X, Wang J, Liu K, Xu Z, Tan C, Chen L, Gao P, Bai X 2020 *Nat. Commun.* **11** 1840
- [21] Du H, Jia C J, Mayer J 2016 *Chem. Mater.* **28** 650
- [22] Galindo P L, Kret S, Sanchez A M, Laval J Y, Yanez A, Pizarro J, Guerrero E, Ben T, Molina S I 2007 *Ultramicroscopy* **107** 1186
- [23] Nan H, Lu J B, Liu M, Jing H M, Tang S J, Wang D W, Jia C L 2016 *J. Chin. Electron. Microsc. Soc.* **035** 191 (in Chinese) [南虎, 卢江波, 刘明, 井红梅, 汤少杰, 王大威, 贾春林 2016 电子显微学报 **035** 191]
- [24] Gong Y J, Liu Z, Lupini A R, Shi G, Lin J H, Najmaei S, Lin Z, Elias A L, Berkdemir A, You G, Terrones H, Terrones M, Vajtai R, Pantelides S T, Pennycook S J, Lou J, Zhou W, Ajayan P M 2014 *Nano Lett.* **14** 442
- [25] Taigman Y, Yang M, Ranzato M, Wolf L 2014 *Proc CVPR IEEE* 1701
- [26] LeCun Y, Bengio Y, Hinton G 2015 *Nature* **521** 436
- [27] Redmon J, Farhadi A 2018 arXiv: 1804.02767 [cs.CV]
- [28] Tzutalin. LabelImg. Git code (2015). <https://github.com/tzutalin/labelImg> [2020-12-3]

Detection of intensity peaks in high-resolution transmission electron microscopy image based on YOLOv3*

Nan Hu¹⁾ Ma Xiao-Jing¹⁾ Zhao Hai-Bo¹⁾ Tang Shao-Jie²⁾
 Liu Wei-Hua¹⁾ Wang Da-Wei^{1)†} Jia Chun-Lin¹⁾³⁾

¹⁾ (School of Microelectronics, Faculty of Electronic and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

²⁾ (School of Automation, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an 710121, China)

³⁾ (Ernst Ruska-Centrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (ER-C), Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich, Germany)

(Received 9 September 2020; revised manuscript received 22 November 2020)

Abstract

The detection of intensity peaks, which correspond to atom positions, in high-resolution (scanning) transmission electron microscopy images is of great practical significance. By quantitatively determining the locations of these peaks, it is possible to obtain important information such as the structural deformation and the electric dipole distribution inside a material on the nanoscale. The detection of the peak positions in image processing can be regarded as a target detection problem, for which breakthroughs have been made with deep-learning neural networks. Comparing to the traditional target detection algorithms, which are based on specifically designed feature extractor and classifier, the deep-learning approach can obtain the features at multiple levels of abstraction automatically, thus improving the robustness of the detection process. In this paper, we realize the automatic detection of the intensity peaks in high-resolution electron microscopy images by building a high-quality atomic image sample set and using the YOLOv3 target detection framework. With its accuracy and speed, which are superior over other target detection neural networks, the YOLOv3 is suitable for image processing as the number of images increases explosively. The YOLOv3 network converges well in the training process using our atomic image sample set, with the loss function reaching a minimum after 500 epoches; the trained neural network can detect almost all the major atoms in the images, showing its excellent ability. With the aid of YOLOv3, we also develop a program to organize the detected atoms, enabling the detection of all the other atoms within each unit cell. It is found that, combining YOLOv3 with the newly developed algorithm, almost all the atoms can be successfully determined, showing its advantages over previous algorithms based on bravais lattice construction, especially for high-resolution transmission electron microscopy images with lattice defects. Our results show that this image processing technique has the potential in overcoming the bottleneck in the fast processing of high resolution electron microscopy images.

Keywords: high-resolution electron microscopy image, deep learning, YOLOv3, atom peak detection

PACS: 68.37.Og, 07.05.Mh, 95.75.Mn, 42.30.Tz

DOI: 10.7498/aps.70.20201502

* National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11974268, 61671368) and the Key R&D Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2020SF-377).

† Corresponding author. E-mail: dawei.wang@xjtu.edu.cn