

Szegedi Tudományegyetem  
Képfeldolgozás és Számítógépes Grafika  
Tanszék

# Diszkrét Tomográfiai Módszerek Alkalmazása a Nemroncsoló Anyagvizsgálatban és az Anyagtudományban

PhD Értekezés Tézisei  
Írta:  
Rodek Lajos

Témavezető:  
Kuba Attila, DSc

Szegedi Tudományegyetem  
Informatika Doktori Iskola



Szeged  
2015

# 1. Motiváció

A tomográfia egy képfeldolgozási eszköz képek (vagy, általánosságban, függvények) megállapítására (rekonstrukciójára) az azokon vett mérések (vetületek) alapján. A diszkrét tomográfia (DT), a képfeldolgozás egy viszonylag új területe, azzal a speciális esettel foglalkozik, amikor a képek / függvények értékkészlete egy ismert véges halmaz. Ez utóbbi feltételt sok valós életbeli probléma esetén igen könnyű teljesíteni, ily módon lehetővé téve a DT használatát ezekben az esetekben.

Jelen dolgozat a DT két eltérő alkalmazását tárgyalja: Az első olyan tárgyak képeinek rekonstrukciójával foglalkozik, amik néhány geometriai alakzattól állnak, mint pl. csövek, hengerek és gömbök. Az itt tekintett konkrét eset ipari nemroncsoló anyagvizsgálat közben merült fel, ahol tárgyakat vizsgáltak radiográfiai mérésekkel. Másrészt, a második alkalmazás deformált polikristályos anyagminták orientáció- és szemcsetérképének rekonstrukciójával foglalkozik, méghozzá az azok röntgendiffrakciós mintáiból. Bár ezek a feladatok igen komplikáltak, mégis kritikusak sok anyagtudományi téma szempontjából.

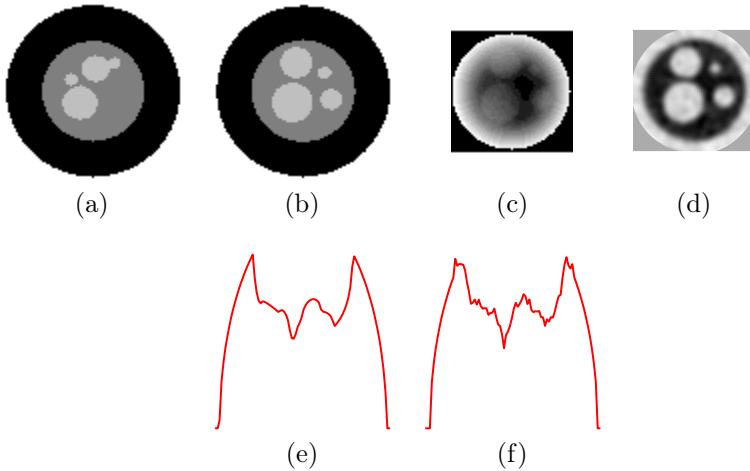
## 2. Geometriai Alakzatokkal Paraméterezhető Tárgyak Rekonstrukciója

Azért, hogy a motivációban felvetett problémát kezelni tudja, a szerző egy új sztochasztikus DT rekonstrukciós módszert dolgozott és fejlesztett ki, amely tárgyak 2D keresztmetszeti képeit képes rekonstruálni. Ezekről a tárgyakról feltételezzük, hogy egy konkrét geometriai szerkezettel bírnak: egész pontosan, körlapok és körgyűrűk kompozíciójaként írhatók le. Továbbá, a tárgy 4-féle homogén anyagból állhat, amelyek eltérő pixel intenzitás szinteként fognak megjelenni. Az algoritmus bemenetként kevés számú, párhuzamos geometriával vett területet vár. A mérési hibákkal szembeni robusztusság céljából a rekonstrukciós problémát optimalizációs feladatként fogalmazzuk meg oly módon, hogy a megoldásokat a tárgyat alkotó geometriai alakzatok paramétereivel fejezzük ki.

A szerző ezután kiterjesztette a fenti megközelítést, hogy az képes legyen csöveket, hengereket és gömböket tartalmazó 3D tárgyak rekonstrukciójára. Ez az algoritmus natív 3D rekonstrukciót nyújt ahelyett, hogy 2D alproblémákra vezetné vissza a problémát.

Mivel a későbbi szimulációs futásokhoz nagyméretű teszt adathalmazra volt szükség, a szerző kifejlesztett egy olyan algoritmust, ami a tárgyparaméterek véletlen konfigurációit képes automatikusan generálni oly módon, hogy bármely konfigurációt azonos valószínűséggel válasszunk.

Azon célból, hogy biztosítsa az optimalizációs folyamat gyorsabb konvergálását, a szerző kifejlesztett és megvalósított egy módszert a kezdőkonfigu-



**2.1. ábra.** Az I. Teszteset rekonstrukciója 4 vetületből. **(a)** Kezdőkonfiguráció. A két kisebb körlap véletlenszerűen lett hozzáadva. **(b)** Rekonstruált konfiguráció. **(c)–(d)** Szűrt visszavetítéssel (FBP) készült rekonstrukciók. **(e)** A **(b)** szimulált vetülete  $\vartheta = 0^\circ$  esetén. **(f)** Bemeneti vetület  $\vartheta = 0^\circ$  esetén.

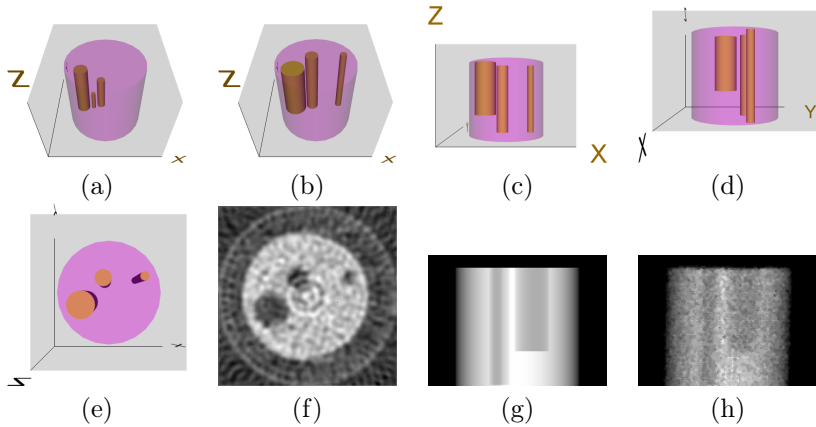
rációk automatikus és determinisztikus konstruálására a bemeneti vetületek alapján. Mivel a fizikai mérések során a pontos pixel intenzitások néha nem állnak rendelkezésre, az algoritmus ezek értékéről is szolgáltat egy becslést.

A rekonstrukciós módszerek hatásosságát, valamint azok érzékenységét különböző tényezőkkel szemben először szimulációs tesztekkel vizsgáltuk. A következő paramétereket tekintettük: a konfiguráció geometriai bonyolultsága, a bemeneti vetületek száma, a vetületekben jelenlevő zaj mennyisége, valamint a kezdőkonfiguráció minősége. Azért, hogy minél közelebb kerüljünk a fizikai méréseknél tapasztalható körülményekhez, a szerző egy additív zajmodellt fejlesztett ki, amit a szimulált vetületek eltorzítására használhatunk.

Azon kívül, hogy megfelelő kezdőkonfigurációból indítjuk az optimalizációs folyamatot, további gyorsulást értünk el az algoritmus logikájának optimalizálásával.

Végezetül, a szerzőnek lehetősége volt számos fizikai méréssel is tesztelni az algoritmust. Ezek között 2D (ld. 2.1. ábra) és 3D (ld. 2.2. ábra) tárgyak is voltak, amiket röntgen-, neutron- és gamma-sugárzással vizsgáltak.

A fentebb bemutatott eredmények itt kerültek publikálásra: [2,3,5–9].



**2.2. ábra.** A II. Teszteset rekonstrukciója 4 vetületből. **(a)** Kezdőkonfiguráció. A legkisebb henger véletlenszerűen lett hozzáadva. **(b)–(e)** A rekonstruált konfiguráció különböző nézetei. **(f)** Az egyik keresztmetszeti kép szűrt visszavetítéssel (FBP) készült rekonstrukciója. **(g)** A **(b)–(e)** szimulált vetülete  $\vartheta = 180^\circ$  esetén. **(h)** Bemeneti vetület  $\vartheta = 180^\circ$  esetén.

### 3. Deformált Polikristályos Minták Rekonstrukciója

A második ipari alkalmazás során a feladat az, hogy polikristályos minták mikroszerkezetét határozzuk meg. Az általános esetet megcélzó első próbaként, a szerző kitalált és megvalósított egy új sztochasztikus DT rekonstrukciós technikát, ami egy deformált polikristály 2D keresztmetszetében képes rekonstruálni az orientáció-térképet röntgendiffrakciós mérésekből. A mintáról feltételezzük, hogy egyfázisú, azaz egyféle anyagból és egyetlen kristályszerkezetből áll. Azért, hogy robusztusabb legyen a mérési pontatlanságokkal szemben, a rekonstrukciós problémát optimalizációs feladatként fogalmazzuk meg, ami az összes lehetséges orientáció-térképet tartalmazó térben keres megoldást. Számos alternatíva áttekintése után a szerző végül úgy döntött, hogy az orientációkat egységkvaterniókkal reprezentálja, valamint az orientáció-térképet Markov valószínűségi mezőként modellezi.

Mivel a fent említett általános esetet látszólag nehéz volt hatékonyan kezelni, a szerző kiterjesztette a rekonstrukciós módszert, hogy az képes legyen szimultán egy orientáció- és egy szemcsetérképet gyártani úgy, hogy mindkét térképet Markov valószínűségi mezőként modellezzük. Ez a megközelítés mérsékelt deformált mintákhoz használható, amik esetében értelmes módon

lehetséges az orientáció-térképből a szemcsetérképet kinyerni.

Mivel mindkét technika az orientációk hasonlóságának fogalmán alapszik, a szerző definiált és megvalósított egy módszert, amivel ezt a mennyiséget kristályszimmetriák jelenléte esetén kifejezhetjük és hatékonyan kiszámolhatjuk.

A rekonstrukciós módszer gyorsabbá tétele érdekében a szerző számos optimalizálást alkalmazott az algoritmus logikájában, hogy a módszer megfelelő teljesítményt nyújtson gyakorlati használatra.

Mindkét rekonstrukciós módszert teszteltük egy sor szimulációval, mind deformálatlan (ld. 3.2. ábra), mind mérsékelten deformált (ld. 3.1. ábra) orientáció-térképekkel, amik mindegyikét fizikai kísérletek során nyerték ki. Ezek a vizsgálatok segítettek a szerzőt, hogy meghatározza néhány tényezőnek a behatását a rekonstrukciós minőségre: az orientáció szórásának nagysága a szemcséken belül, a szemcsetérképek morfológiai bonyolultságának foka, és a vetületekben jelenlevő zaj mennyisége. Ahhoz, hogy minél valóságosabb tesztkörnyezetet kapjunk, ami a fizikai méréseket imitálja, a szerző egy multiplikatív zajmodellt valósított meg, amivel eltorzíthatók a szimulált vetületek,

Az itt bemutatott eredmények a következő helyeken lettek publikálva: [1, 10, 11].

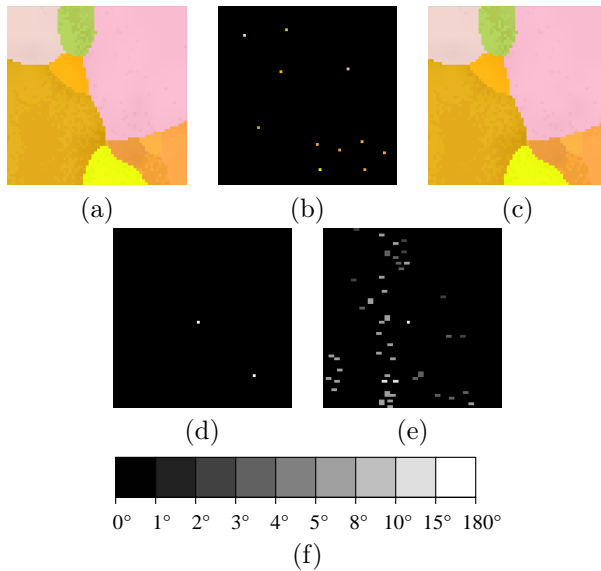
## 4. Konklúziók

Két ipari problémával foglalkoztunk. Miközben eléggé eltérő természetűek, mégis volt pár közös pontjuk: mindkettő feltételezte, hogy a kinyerendő kép értékkészlete egy véges, ismert halmaz, továbbá hogy tipikusan csak limitált számú mérések állnak rendelkezésre. Ezek a problémák együtt komoly akadályokat állítanak a klasszikus tomográfiai megközelítések elé.

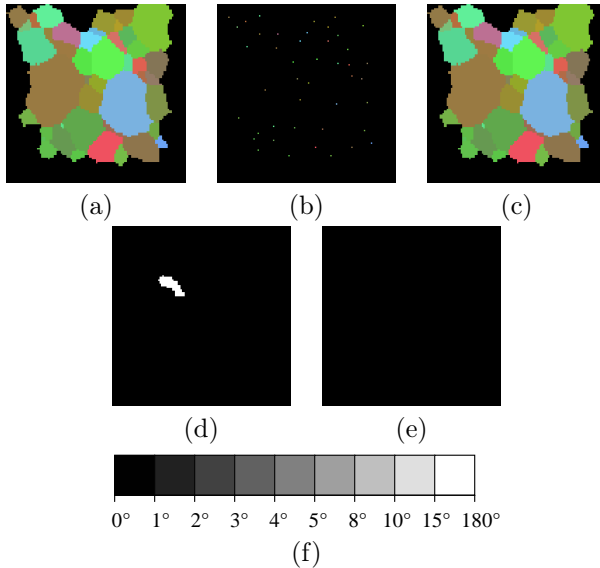
A keresett képről rendelkezésre álló néhány előzetes információ segítségével a DT technikák még ilyen szituációkban is sikeresek lehetnek. A dolgozatban bemutatott esetekben ezek az előzetes információk egyrészt a várt geometriai szerkezetből, másrészt a szemcse-morfológiák statisztikai eloszlásából és pár egyéb lokális képjellemzőből álltak. Amint demonstráltuk, a szerző által kifejlesztett új módszerek jó rekonstrukciós minőséget tudnak nyújtani azáltal, hogy az előzetes információkat beépítik a rekonstrukciós folyamatba.

## A Disszertáció Tézispontjai

A disszertációban bemutatott eredmények két téziscsoportba oszthatók. A 4.1 táblázat mutatja, melyik tézispont a szerző melyik publikációjában van leírva.



**3.1. ábra.** Az I. Teszteset rekonstrukciója zajmentes vetületekből. **(a)** Referencia orientáció-térkép. **(b)** Kezdő orientáció-térkép. **(c)** Rekonstruált orientáció-térkép. **(d)** A referencia és a rekonstruált szemcsetérkép különbsége. A fekete pixelek azonos, míg a fehér pixelek eltérő szemcsecímkét jelölnek. **(e)** A referencia és a rekonstruált orientáció-térkép különbsége. A pixelek intenzitását az egymásnak megfelelő orientáció-párok távolsága (a diszorientáció-szög) határozza meg, amint ezt az (f) mutatja.



**3.2. ábra.** Az V. Testeset rekonstrukciója zajmentes vetületekből. A térképek elhelyezkedése, valamint a szürkességi szintek értelmezése a 3.1. ábra alapján. Az orientáció-térképben a fekete pixelek légüres régiót jelölnek. (Megjegyzés: a (d)-ben látható hibát illetően lásd a disszertáció szövegében található magyarázatot.)

# Geometriai Alakzatokkal Paraméterezhető Tárgyak Rekonstrukciója

Az eredmények a [8] konferenciakiadványban, a [2,5–7,9] cikkekben, valamint a [3] könyvfejezetben kerültek publikálásra.

- I/1. A szerző kifejlesztett és megvalósított egy új sztochasztikus DT rekonstrukciós módszert, ami olyan tárgyak 2D diszkrét képeit képes rekonstruálni, amik egyszerű geometriai alakzatok (konkrétan, körlapok és körgyűrűk) kompozíciójaként írhatók le, és 4-féle homogén anyagból állnak (amelyek különféle pixel intenzitásként jelennek meg). Az algoritmus bemenetként kevés számú, párhuzamos geometriájú vetületet vár. A rekonstrukciós problémát optimalizációs feladatként fogalmazzuk meg a konfigurációk terében, tehát a megoldásokat a tárgyat alkotó geometriai alakzatok paramétereivel fejezzük ki. [8,9] (4.2. alfejezet)
- I/2. A szerző kiterjesztette a megközelítést, hogy az képes legyen csöveket, hengereket és gömböket tartalmazó 3D tárgyak rekonstrukciójára, amik továbbra is 4-féle homogén anyagból állnak. Néhány más technikától eltérően ez a módszer natív 3D rekonstrukciót ad, azaz a 3D eredmény nem úgy születik, hogy az egyes 2D keresztmetszeteket egyszerűen egymásra halmozzuk. [3,5–7] (4.3. alfejezet)
- I/3. Azért, hogy lehetőség legyen a rekonstrukciós megközelítés hatékonyságának tesztelésére, a szerző kifejlesztett egy algoritmust, ami a tárgyparaméterek véletlen konfigurációit képes automatikusan generálni. Ez az automatikus folyamat arra törekszik, hogy bármely potenciális konfigurációt azonos valószínűséggel válasszuk. [5,8,9] (4.4. alfejezet)
- I/4. A szerző kifejlesztett és megvalósított egy módszert a kezdőkonfigurációk automatikus és determinisztikus konstruálására a bemeneti vetületek alapján, amely konfigurációk utána a rekonstrukciós módszerek kezdőpontjává válhatnak. A megközelítés geometriai elvekkel kombinált heurisztikára épül. Ezen eljárás részeként a szerző kiterjesztette az algoritmust, hogy az becslést tudjon adni a tárgy rekonstrukciójához szükséges pixel intenzitásokról, melyek a fizikai mérések során esetleg nem elég pontossággal ismertek. [5] (4.5. alfejezet)
- I/5. A szerző számos szimulációs kísérlet segítségével megvizsgálta a rekonstrukciós technikák hatékonyságát, amelyek nagyrészt véletlenül generált konfigurációt, másrészt néhány manuálisan konstruált konfigurációt használtak mind 2D-ben, mind 3D-ben. Ennek a tanulmánynak az volt a célja, hogy meghatározza, mennyire érzékenyek az algoritmusok a következő tényezőkkel szemben: a konfiguráció geometriai bonyolultsága, a bemeneti vetületek száma, és a vetületekben jelenlevő zaj mennyisége.



Az is meg lett határozva, mi a befolyása, ha automatikusan megállapított kezdőkonfigurációt használunk véletlen helyett. Azon célból, hogy szimulálhassuk a fizikai mérések pontatlan természetét, a szerző egy additív zajmodellt fejlesztett ki, amit a szimulált vetületek eltorzítására használhatunk. A rekonstrukciós eredményének pontosságát minden esetben több mérőszámmal mértük; ezek közül az egyiket a szerző találta ki és valósította meg. A rekonstrukció teljesítményének javítása érdekében a szerző számos optimalizálást hajtott végre az algoritmus logikáján. Az egyik kritikus lépésként a célfüggvény – amire az optimalizáció miatt van szükség – kiértékelése fel lett gyorsítva azáltal, hogy a számolásokat inkrementális módon hajtjuk végre, tehát a célfüggvény aktuális értéke frissítésre kerül a javasolt konfigurációban elkövetett változtatás alapján. [3, 5–9] (5.1.2. és 5.3. alfejezet)

I/6. A szerző számos fizikai méréssel tesztelte az algoritmusokat. A 2D esetben két tárgy lett rekonstruálva, amelyek vetülete röntgen- ill. neutron-sugárzással lett begyűjtve. A technikát 3D tárgyak rekonstrukciójával is kiértékeljük; konkrétan, ugyanaz a tárgy lett rekonstruálva röntgen-, neutron- és gamma-sugárzással készült vetületekből. A rekonstrukció pontosságát a 2D keresztmetszetek és egy klasszikus technika (FBP) eredményének összevetésével ellenőriztük. [2, 3, 5–9] (6.2. alfejezet)

## Deformált Polikristályos Minták Rekonstrukciója

Az eredmények a [10, 11] cikkekben és a [1] könyvfejezetben kerültek publikálásra.

II/1. A szerző kifejlesztett és megvalósított egy új sztochasztikus DT rekonstrukciós módszert, ami egy deformált polikristály 2D keresztmetszetében képes rekonstruálni az orientáció-térképet röntgendiffrakciós mérésekből. Néhány más megközelítéstől eltérően ez a módszer a változatlan vetületeket (diffrakciós mintákat) használja, és diszkrét megoldást nyújt. Az algoritmus egyféle anyagból és egyetlen kristályszerkezetből álló mintákkal használható. A rekonstrukciós problémát optimalizációs feladatként fogalmazzuk meg, ami az összes lehetséges orientáció-térképet tartalmazó térben keres megoldást, ahol minden pixel a kristályrács azon pontján mért lokális orientációját reprezentálja egységkvaterniókkal. Az orientáció-térképeket Markov valószínűségi mezőként modellezzük egy homogenitási feltétel és klikk konfigurációk kombinációja segítségével, ahol az utóbbiak lokális képjellemzőket fejeznek ki (konkrétan, szemcsehatárokat). [10] (7.2. alfejezet)

II/2. A szerző kiterjesztette a rekonstrukciós módszert, hogy az képes legyen szimultán egy orientáció- és egy szemcsetérképet gyártani. A bemene-

ti vetületek (röntgendiffrakciós minták) mellett az algoritmusnak egy kis előzetes információra is szüksége van, mégpedig a tipikus szemcsemorfológiák statisztikája, valamint a szemcsék megközelítő helyzete és alaporientációja formájában. A kiterjesztett megközelítés mérsékelt deformált mintákhoz használható, amik esetében értelmes módon lehetséges az orientáció-térképből a szemcsetérképet kinyerni. A lokális képjellemzők előnyeinek kihasználása érdekében mindkét térképet Markov valószínűségi mezőként modellezzük. [1,11] (7.3. alfejezet)

- II/3. A szerző definiált és megvalósított egy módszert, amivel az orientációk hasonlóságát kristályszimmetriák jelenléte esetén kifejezhetjük. Az alapdefiníció mellett a szerző arra is kitért, hogyan lehet ezt a mennyiséget hatékonyan kiszámolni. [1, 10, 11] (7.4. alfejezet)
- II/4. A rekonstrukció teljesítményének javítása érdekében a szerző számos optimalizálást alkalmazott az algoritmus logikájában. Az egyik ilyen ötlet a look-up táblák használata volt számolásigényes kifejezésekben. További gyorsulást értünk el kvantált egységkvaterniók használatával az orientációk reprezentációja esetén, továbbá a célfüggvény értékének inkrementális frissítésével a javasolt térképben vagy térkép-párban elkövetett változtatás alapján. [1, 10, 11] (8.1.2. alfejezet)
- II/5. A szerző számos szimulációt futtatott, hogy számszerűsítse a rekonstrukciók minőségét, egyrészt egy deformálatlan, valamint 4 mérsékelt deformált orientáció-térképpel, amik mindegyikét fizikai kísérletek során nyerték ki. Ezeknek a vizsgálatoknak az volt a céljuk, hogy megállapítsák, mennyire érzékenyek az algoritmusok a következő tényezőkkel szemben: az orientáció szórásának nagysága a szemcséken belül, a szemcsetérképek morfológiai bonyolultságának foka, és a vetületekben jelenlevő zaj mennyisége. Azért, hogy jobban utánozzuk a fizikai mérésekben megtalálható pontatlanságokat, a szerző egy multiplikatív zajmodellt valószínűsített meg, amivel eltorzíthatók a szimulált vetületek. A rekonstrukciók eredményének pontosságát minden esetben két mérőszámmal mértük, ahol az egyik a szemcsetérképen, a másik az orientáció-térképen volt definiálva. [1, 11] (8.3. alfejezet)

## Hivatkozások

- [1] Andreas Alpers, Lajos Rodek, Henning Friis Poulsen, Erik Knudsen, and Gabor T. Herman. Discrete tomography for generating grain maps of polycrystals. In Herman and Kuba [4], chapter 13, pages 271–301. Based on the proceedings of the Workshop on Discrete Tomography and its

**4.1. táblázat.** A tézispontok és a szerző publikációi közötti kapcsolat.

Tézispont	Publikáció										
	[1]	[2]	[3]	[5]	[6]	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]	
I/1.							•	•			
I/2.			•	•	•	•					
I/3.				•			•	•			
I/4.				•							
I/5.			•	•	•	•	•	•			
I/6.		•	•	•	•	•	•	•			
II/1.									•		
II/2.	•									•	
II/3.	•								•	•	
II/4.	•								•	•	
II/5.	•									•	

Applications 2005.

cited on: [4](#), [8](#), [9](#), [10](#)

- [2] Márton Balaskó, Attila Kuba, Antal Nagy, Zoltán Kiss, Lajos Rodek, and László Ruskó. Neutron-, gamma- and X-ray three-dimensional computed tomography at the Budapest research reactor site. *Nucl. Instrum. Meth. A*, 542A:22–27, apr 2005. Proceedings of the Fifth International Topical Meeting on Neutron Radiography (ITMNR-5, 2004).

cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)

- [3] Joachim Baumann, Zoltán Kiss, Sven Krimmel, Attila Kuba, Antal Nagy, Lajos Rodek, Burkhard Schillinger, and Jürgen Stephan. Discrete tomography methods for nondestructive testing. In Herman and Kuba [4], chapter 14, pages 303–331. Based on the proceedings of the Workshop on Discrete Tomography and its Applications 2005.

cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)

- [4] Gabor T. Herman and Attila Kuba, editors. *Advances in Discrete Tomography and Its Applications*. Applied and Numerical Harmonic Analysis. Birkhäuser Boston, 2007.

cited on: [9](#), [10](#)

- [5] Zoltán Kiss, Lajos Rodek, and Attila Kuba. Image reconstruction and correction methods in neutron and X-ray tomography. *Acta Cybernetica*, 17(3):557–587, 2006.  
cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)
- [6] Zoltán Kiss, Lajos Rodek, Antal Nagy, Attila Kuba, and Márton Balaskó. Reconstruction of pixel-based and geometric objects by discrete tomography. Simulation and physical experiments. *Electron. Notes Discrete Math.*, 20:475–491, jul 2005. Proceedings of the Workshop on Discrete Tomography and its Applications 2005.  
cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)
- [7] Attila Kuba, Lajos Rodek, Zoltán Kiss, László Ruskó, Antal Nagy, and Márton Balaskó. Discrete tomography in neutron radiography. *Nucl. Instrum. Meth. A*, 542A:376–382, apr 2005. Proceedings of the Fifth International Topical Meeting on Neutron Radiography (ITMNR-5, 2004).  
cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)
- [8] Attila Kuba, László Ruskó, Lajos Rodek, and Zoltán Kiss. Application of discrete tomography in neutron imaging. In Piero Chirco and Roberto Rosa, editors, *Proceedings of The Seventh World Conference on Neutron Radiography (WCNR-7, 2002)*, pages 361–371, Rome, Italy, sep 2002. ENEA (Italian National Agency for New Technologies, Energy and the Environment).  
cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)
- [9] Attila Kuba, László Ruskó, Lajos Rodek, and Zoltán Kiss. Preliminary studies of discrete tomography in neutron imaging. *IEEE T. Nucl. Sci.*, 52(1):380–385, feb 2005. Based on the proceedings of The Seventh World Conference on Neutron Radiography (WCNR-7, 2002).  
cited on: [2](#), [7](#), [8](#), [10](#)
- [10] Lajos Rodek, Erik Knudsen, Henning Friis Poulsen, and Gabor T. Herman. Discrete tomographic reconstruction of 2D polycrystal orientation maps from X-ray diffraction projections using Gibbs priors. *Electron. Notes Discrete Math.*, 20:439–453, jul 2005. Proceedings of the Workshop on Discrete Tomography and its Applications 2005.  
cited on: [4](#), [8](#), [9](#), [10](#)
- [11] Lajos Rodek, Henning Friis Poulsen, Erik Knudsen, and Gabor T. Herman. A stochastic algorithm for reconstruction of grain maps of moderately deformed specimens based on X-ray diffraction. *J. Appl. Crystallogr.*, 40(2):313–321, apr 2007.  
cited on: [4](#), [8](#), [9](#), [10](#)