

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA**

**CLASSIFICAÇÃO DE FASES EM  
IMAGENS HIPERESPECTRAIS DE  
RAIOS X CARACTERÍSTICOS PELO  
MÉTODO DE AGRUPAMENTO POR  
DESLOCAMENTO PARA A MÉDIA**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Diego Schmaedech Martins**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2012**

**CLASSIFICAÇÃO DE FASES EM IMAGENS  
HIPERESPECTRAIS DE RAIOS X  
CARACTERÍSTICOS PELO MÉTODO DE  
AGRUPAMENTO POR DESLOCAMENTO PARA A  
MÉDIA**

**por**

**Diego Schmaedech Martins**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Informática da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para a obtenção do grau de  
**Mestre em Informática**

**Orientador: Prof. Dr. José Antônio Trindade Borges da Costa  
(UFSM)**

**Co-orientador: Prof. Dr. Marcos Cordeiro d'Ornellas (UFSM)**

**Dissertação de Mestrado  
Santa Maria, RS, Brasil**

**2012**

**Universidade Federal de Santa Maria  
Centro de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Informática**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,  
aprova a Dissertação de Mestrado

**CLASSIFICAÇÃO DE FASES EM IMAGENS HIPERESPECTRAIS  
DE RAIOS X CARACTERÍSTICOS PELO MÉTODO DE  
AGRUPAMENTO POR DESLOCAMENTO PARA A MÉDIA**

elaborada por  
**Diego Schmaedech Martins**

como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Mestre em Informática**

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

**Prof. Dr. José Antônio Trindade Borges da Costa (UFSM)**  
(Presidente/Orientador)

**Prof. Dr. Marcos Antônio Zen Vasconcellos (UFRGS)**

**Prof. Dr. Cesar Pozzer (UFSM)**

Santa Maria, 23 de Janeiro de 2012.

## **AGRADECIMENTOS**

Às entidades UFSM e CAPES pela infra-estrutura e disponibilização de recursos.

Ao Prof. Dr. José Antônio Trindades Borges da Costa (Juca) pela orientação, paciência, apoio e amizade durante mais estes dois anos de mestrado.

Ao Prof. Dr. Marcos Cordeiro d'Ornellas, coordenador do LaCA, pelos diversos ensinamentos durante o tempo em que participei das atividades do grupo e também pela disponibilização do ambiente LaCA.

Ao Prof. Victor Galván Josa pela colaboração efetiva e constante neste trabalho.

Ao Prof. Dr. Marcos Antônio Zen Vasconcellos e Prof. Dr. Cesar Pozzer pelas contribuições nas áreas de Microscopia e Computação e pelas correções do trabalho.

Ao coordenador do PPGI, Prof. Dr. Eduardo Piveta e ao secretário do curso Josmar Nuernberg pelos auxílios burocráticos.

Ao pessoal da empresa Animati pelas transferências tecnológicas nos nomes de Jean Carlo Berni e Gabriela Bauermann.

Aos colegas e amigos do LaCA e do curso, nas figuras de Daniel Michelin De Carli, Cristiano Albieiro Berni, Érico Amaral, Francisco Tiago Avelar e Guilherme Shardong.

Aos amigos Jorge Rodrigo Massing e Ivan Gabe pelas colaborações aleatórias na hora do café.

Aos demais que contribuíram explicitamente na jornada, nas pessoas de Susiane Marques, Emílio Takase, Márcio Pinheiro, Andrei Cerentini e Raquel Mello.

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

*"Na natureza nada se cria e nada se perde."* — LAVOSIER

# RESUMO

Dissertação de Mestrado  
Programa de Pós-Graduação em Informática  
Universidade Federal de Santa Maria

## **CLASSIFICAÇÃO DE FASES EM IMAGENS HIPERESPECTRAIS DE RAIOS X CARACTERÍSTICOS PELO MÉTODO DE AGRUPAMENTO POR DESLOCAMENTO PARA A MÉDIA**

Autor: Diego Schmaedeck Martins

Orientador: Prof. Dr. José Antônio Trindade Borges da Costa (UFSM)

Co-orientador: Prof. Dr. Marcos Cordeiro d'Ornellas (UFSM)

Local e data da defesa: Santa Maria, 23 de Janeiro de 2012.

No presente trabalho será introduzido o algoritmo de Agrupamento por Deslocamento para a Média (ADM) como uma alternativa para executar a classificação de fases em materiais a partir de imagens hiperspectrais de mapas raios X característicos. Ao contrário de outras técnicas estatísticas multivariadas, tal como Análise de Componentes Principais (ACP), técnicas de agrupamentos atribuem diretamente uma classe de rótulo (fase) para cada pixel, de modo que suas saídas são imagens de fase segmentadas, i.e., não há necessidade de algoritmos adicionais para segmentação. Por outro lado, em comparação com outros procedimentos de agrupamento e métodos de classificação baseados em análise de agrupamentos, ADM tem a vantagem de não necessitar de conhecimento prévio do número de fases, nem das formas dos agrupamentos, o que faz dele um instrumento particularmente útil para a pesquisa exploratória, permitindo a identificação automática de fase de amostras desconhecidas. Outras vantagens desta abordagem são a possibilidade de análise de imagens multimodais, compostas por diferentes tipos de sinais, e de estimar as incertezas das análises. Finalmente, a visualização e a interpretação dos resultados também é simplificada, uma vez que o conteúdo de informação da imagem de saída não depende de qualquer escolha arbitrária do conteúdo dos canais de cores. Neste trabalho foram aplicados os algoritmos de ADM e ACP para a análise de mapas de raios X característicos adquiridos em Microscópios de Varredura Eletrônica (MEV) que está equipado com um Espectrômetro de Raios X por Dispersão em Energia (EDS). Nossos resultados indicam que o método ADM é capaz de detectar as fases menores, não claramente identificadas nas imagens compostas pelo três componentes mais significativos obtidos pelo método ACP.

**Palavras-chave:** Classificação de fases, análise de componentes principais, deslocamento para a média, imagens hiperspectrais, mapas de raios X.

# ABSTRACT

Master's Dissertation  
Programa de Pós-Graduação em Informática  
Universidade Federal de Santa Maria

## PHASE CLASSIFICATION IN CHARACTERISTIC X-RAYS HYPERSPETRAL IMAGES BY MEAN SHIFT CLUSTERING METHOD

Author: Diego Schmaedeck Martins  
Advisor: Prof. Dr. José Antônio Trindade Borges da Costa (UFSM)  
Coadvisor: Prof. Dr. Marcos Cordeiro d'Ornellas (UFSM)

In the present work we introduce the Mean Shift Clustering (MSC) algorithm as a valuable alternative to perform materials phase classification from hyperspectral images. As opposed to other multivariate statistical techniques, such as principal components analysis (PCA), clustering techniques directly assign a class (phase) label to each pixel, so that their outputs are phase segmented images, i.e., there is no need for an additional segmentation algorithm. On the other hand, as compared to other clustering procedures and classification methods based on cluster analysis, MSC has the advantages of not requiring previous knowledge of the number of data clusters and not assuming any shape of these clusters, i.e., neither the number nor the composition of the phases must be previously known. This makes MSC a particularly useful tool for exploratory research, allowing automatic phase identification of unknown samples. Other advantages of this approach are the possibility of multimodal image analysis, composed of different types of signals, and estimate the uncertainties of the analysis. Finally, the visualization and interpretation of results are also simplified, since the information content of the output image does not depend on any arbitrary choice of the contents of the color channels. In this paper we apply the PCA and MSC algorithms for the analysis of characteristic X-ray maps acquired in Scanning Electron Microscopes (SEM) which is equipped with Energy Dispersive Detection Systems (EDS). Our results indicate that MSC is capable of detecting minor phases, not clearly identified when only three components obtained by PCA are used.

**Keywords:** fase classification, mean shift, hyperspectral images, XRM, PCA.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – MEV-EDS utilizado para aquisição das imagens de Portezuelo. Na figura, canhão de elétrons (1), câmara de vácuo (2), detector de Si (Li) (3), monitor para visualizar imagens (4), monitor para visualizar espectros (5) .....	16
Figura 1.2 – Mapa temático ilustrando as áreas do conhecimento envolvidas neste trabalho. ....	17
Figura 2.1 – Relação entre o tempo de aquisição de uma imagem e o seu tamanho para diferentes tempos de amostragem. ....	21
Figura 2.2 – Representação esquemática do modelo de aquisição baseado no espectro de energia (KOTULA; KEENAN; MICHAEL, 2003). ....	22
Figura 2.3 – Caminho percorrido pela função de média para encontrar o centro do agrupamento. ....	27
Figura 2.4 – Gráfico do resultado ACP sobre os dados do espaço de características. ....	29
Figura 3.1 – Imagens de MEV de uma amostra de mica polida (RUSS, 2006). ....	31
Figura 3.2 – Imagem de elétrons secundários, XRM, amostra e espectros de EDS da amostra de Portezuelo. ....	32
Figura 3.3 – Diagrama de fluxo do funcionamento geral do software. ....	33
Figura 3.4 – Conjunto de imagens usadas para a validação do ADM (a) . Imagens de saída para diferentes BWs (b) .....	34
Figura 3.5 – LUT para resultados do ADM, representação no cubo de cores das cores dos 12 agrupamentos maiores. ....	37
Figura 4.1 – Resultado da aplicação do método ACP sobre o primeiro conjunto de imagens. ....	39
Figura 4.2 – Mapa de colocalização dos três componentes principais e suas respectivas projeções nos três sub-espacos bidimensionais formados pelos referidos componentes. ....	40
Figura 4.3 – Gráfico da variação do número de agrupamentos por BW. ....	40
Figura 4.4 – Resultados ADM para BW = 130, 115, 85 e 45. ....	41
Figura 4.5 – Gráficos com o tamanho dos agrupamentos da Figura 4.4 .....	42
Figura 4.6 – Mapas de colocalização dos componentes principais com os agrupamentos detectados por ADM identificados pelas cores correspondentes às fases da Figura 4.4 .....	43
Figura 4.7 – Detalhe da ROI aumentada em 4 vezes. ....	44
Figura 4.8 – Resultado da aplicação do método ACP sobre o segundo conjunto de imagens (tamanho real: 128 × 100 pixels). ....	46



Figura 4.9 – Gráfico de colocalização dos componentes componente #1 vs componente #2 vs componente #3 da amostra Portezuelo (a) e suas respectivas projeções (b). . . . .	47
Figura 4.10 – Resultados do método ADM para BW = 20, 13, 12 e 10. . . . .	48
Figura 4.11 – Gráficos com o tamanho dos agrupamentos da Figura 4.10. . . . .	49
Figura 4.12 – Gráficos de colocalização com a tabela de cores dos resultados mostrados na Figura 4.10. . . . .	50
Figura 4.13 – Resultados da ADM com aplicação de filtro gaussiano. . . . .	51
Figura 4.14 – Influência da aplicação de filtro de suavização no número de agrupamentos. . . . .	53
Figura 4.15 – Efeito da aplicação do filtro gaussiano sobre os mapas de colocalização das componentes principais. . . . .	54
Figura 4.16 – Efeito da aplicação do filtro gaussiano sobre as imagens de saída do método ACP . . . . .	55
Figura 4.17 – Influência da aplicação de filtro de suavização no tempo de execução do algoritmo de ADM. . . . .	56
Figura 4.18 – Imagens de rutilo, mostrando o efeito do "arraste". . . . .	58

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 3.1 – Principais passos do algoritmo de ADM. ....	34
Tabela 3.2 – Principais passos do algoritmo de ACP.....	35
Tabela 4.1 – Coeficientes obtidos pela ACP para a amostra de mica.....	38
Tabela 4.2 – Coordenadas dos dos protótipos das fases no espaço de características.	45
Tabela 4.3 – Coeficientes obtidos pelo método ACP para a amostra de Portezuelo. .	46
Tabela 4.4 – Coordenadas dos protótipos das fases no espaço de características.....	52

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADM	Agrupamento por Deslocamento para a Média
ACP	Análise de Componentes Principais
AEM	Análise Estatística Multivariada
BSE	Elétrons Retroespalhados (do inglês <i>Backscattered Electrons</i> )
BW	Largura de Banda (do inglês <i>Bandwidth</i> )
CL	Catodo Luminescência
EDS	Espectroscopia (ou Espectrometro) de Raios X por Dispersão em Energia (do inglês <i>Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy</i> )
FCM	<i>Fuzzy C-Means</i>
LUT	<i>Lookup Table</i> (tabela de cores para visualização)
MET	Microscopia (ou Microscópio) Eletrônica(o) de Transmissão
MEV	Microscopia (ou Microscópio) Eletrônica(o) de Varredura
MO	Microscopia (ou Microscópio) Óptica(o)
MSC	<i>Mean Shift Clustering</i> (mesmo que ADM)
ROI	<i>Region Of Interest</i> (região de interesse)
SE	Elétrons Secundários (do inglês <i>Secondary Electrons</i> )
TIFF	<i>Tagged Image File Format</i>
VDM	Vetor Deslocamento para a Média
XRM	Mapa de Raios X (do inglês <i>X Ray Map</i> )

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	13
<b>1.1</b>	<b>Objetivos</b> .....	14
<b>1.2</b>	<b>Justificativa</b> .....	15
<b>1.3</b>	<b>Contextualização</b> .....	15
<b>1.4</b>	<b>Organização do texto</b> .....	16
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	18
<b>2.1</b>	<b>Classificação de fases</b> .....	18
<b>2.2</b>	<b>Microscopia</b> .....	19
<b>2.3</b>	<b>Processamento e análise de imagens</b> .....	23
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b> .....	30
<b>3.1</b>	<b>Conjunto de Imagens</b> .....	30
<b>3.2</b>	<b>Implementação</b> .....	33
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	38
<b>4.1</b>	<b>Mica</b> .....	38
4.1.1	Método de análise de componentes principais .....	38
4.1.2	Método de agrupamento por deslocamento para média .....	39
<b>4.2</b>	<b>Portezuelo</b> .....	45
4.2.1	Método de análise de componentes principais .....	45
4.2.2	Método de agrupamento por deslocamento para média .....	47
<b>4.3</b>	<b>Tópico Relevantes</b> .....	52
4.3.1	BW, tempo e filtros .....	52
4.3.2	O "arraste" das imagens .....	57
4.3.3	Métrica para estimativa de semelhança de padrões .....	59
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b> .....	60
<b>5.1</b>	<b>Trabalhos Futuros</b> .....	61
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	63

## 1 INTRODUÇÃO

Materiais heterogêneos podem ser descritos como um aglomerado de componentes homogêneos, ou fases, cada uma caracterizada pela sua composição química e arranjo estrutural. O número, a natureza e a distribuição espacial destes componentes homogêneos determinam as propriedades de rochas, ligas metálicas e materiais compostos. Esta informação também é usada para caracterizar uma diversidade de outras amostras, revelando materiais e processos que produziram a estrutura observada. Em particular, no caso de amostras arqueológicas esta informação fornece pistas sobre possíveis fontes de matérias primas, tecnologias de produção, rotas de intercâmbio e formas de viver das antigas civilizações (BERTOLINO et al., 2009).

Por sua natureza, a classificação de fases é frequentemente realizada com o auxílio de mapas de composição química e/ou estrutura cristalina, obtidos por técnicas de imageamento e de sondagem local. Mapas de raios X característicos (XRM - do inglês *X-Ray Map*), obtidos em microscópios eletrônicos de varredura (MEV) equipados com espectrômetros de raios X por dispersão em energia (EDS - do inglês *Energy Dispersive Spectrometry*), são particularmente úteis para revelar a distribuição espacial dos elementos químicos. Nestes equipamentos, um feixe de elétrons de alta energia varre a amostra enquanto as intensidades dos raios X emitidos, em faixas de energias correspondentes a transições eletrônicas radiativas características dos átomos presentes na amostra, são registradas como níveis de cinza em imagens monocromáticas. Um conjunto de mapas corregistrados, isto é, mapas nos quais pixels com as mesmas coordenadas correspondem ao mesmo ponto na superfície da amostra, obtidos, cada um, em uma faixa do espectro de emissão de raios X (característica de cada elemento químico presente na amostra) formam uma imagem multi ou hiperespectral, que contém informação sobre a composição química local.

A análise e interpretação da informação contida em imagens hiperespectrais tem sido feita por técnicas computacionais diversas (ver Seção 2.3). Do ponto de vista do processamento de imagens, a classificação de fases é um problema de segmentação por cor, ainda que os componentes espectrais da imagem a ser segmentada estejam fora do espectro visível. Já do ponto de vista da teoria de reconhecimento de padrões e visão computacional, este é um problema de classificação dos pixels, de acordo com seus atributos espectrais, em um certo número de classes (as fases ou componentes homogêneos da amostra estudada) que podem ou não ser previamente conhecidas.

## 1.1 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo geral avaliar o método de agrupamento por deslocamento para a média (ADM, ou MSC - do inglês *Mean Shift Clustering*) como uma ferramenta auxiliar na classificação de fases de materiais heterogêneos por análise de imagens hiperespectrais de raios X característicos obtidas em microscópios eletrônicos de varredura (MEV) equipados com espectrômetros de raios X por dispersão em energia (EDS).

A fim de validar o método de análise proposto, dois conjuntos de XRM's foram estudados com o auxílio do método ADM e os resultados foram comparados com aqueles obtidos pelo método de análise de componentes principais (ACP, ou PCA - do inglês *Principal Components Analysis*). O primeiro conjunto foi gentilmente cedido por John Russ, que publicou os resultados da análise por ACP (RUSS, 2006), e o segundo foi cedido e previamente descrito por Bertolino e colaboradores (BERTOLINO et al., 2009).

Para o primeiro conjunto de imagens o método ADM mostrou estar de acordo com a análise feita por Russ através do método ACP. Além disso, uma fase minoritária não identificada pelo ACP foi revelada pelo ADM. Para o segundo conjunto, a análise realizada por ADM permitiu a classificação dos pixels em correspondência com as cores dos pigmentos presentes na superfície da amostra. Em contraste com o conjunto anterior, os mapas de colocação dos componentes principais não forneceram qualquer informação relevante sobre as cores, principalmente devido às incertezas associadas a baixa contagem utilizada na aquisição dos XRM's.

## 1.2 Justificativa

O problema da classificação de fases em materiais heterogêneos é de grande aplicabilidade e importância em áreas tão diversas como geologia, metalurgia, ciência dos materiais, arqueologia e análise forense, entre outros.

Os princípios e técnicas discutidos neste trabalho, para o tratamento de imagens hiperespectrais, os quais foram aplicados aos XRM, são também aplicáveis a conjuntos combinados de dados obtidos por diferentes técnicas, i.e, combinações de imagens produzidas pela utilização de diferentes tipos de sinais (MACRAE et al., 2005) (COLPAN; DING, 2006) ou adquiridas em diferentes condições de imageamento (PIRARD, 2004) (COSTA et al., 2007).

## 1.3 Contextualização

Este é um trabalho de computação aplicada, mais especificamente em processamento e análise de imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV). O tema abordado, classificação de fases em mapas de raios X característicos (XRM), está inserido no projeto **Determinação de seções eficazes de ionização por impacto de elétrons e íons para aplicação em microanálise de materiais** aprovado no Programa Projetos Conjuntos de Pesquisa do MERCOSUL da CAPES sob a coordenação do Prof. Dr. Marcos A. Z. Vasconcellos. Um projeto de cooperação internacional que envolve a *Facultad de Matemática, Astronomía y Física de la Universidad Nacional de Córdoba* a Universidade Federal do Rio Grande do Sul e a Universidade Federal de Santa Maria. No presente trabalho são discutidos os resultados da aplicação de métodos computacionais de processamento e análise de imagens à classificação de fases em um conjunto de XRM.

As imagens analisadas foram de uma amostra polida de mica<sup>1</sup>, cedidas por John Russ (RUSS, 2006), e de um objeto cerâmico da cultura Aguada (ca. 600-900 D.C.) estilo Portezuelo (Catamarca, Argentina), cedidas por Bertolino e colaboradores (BERTOLINO et al., 2009). O MEV utilizado para aquisição dos mapas de raios X desta última amostra é da marca LEO VP modelo 1450 do *Laboratorio de Microscopía Electrónica y Microanálisis* (LabMEM) da *Univerdad Nacional de San Luis* (UNSL) equipado com EDS marca EDAX modelo Genesis 2000, como pode ser visto na Figura 1.1.

---

<sup>1</sup>Míneral do grupo dos silicatos, de alta rigidez dielétrica e grande estabilidade química, usado como isolante de equipamentos de alta tensão e na fabricação de capacitores, entre outras aplicações.

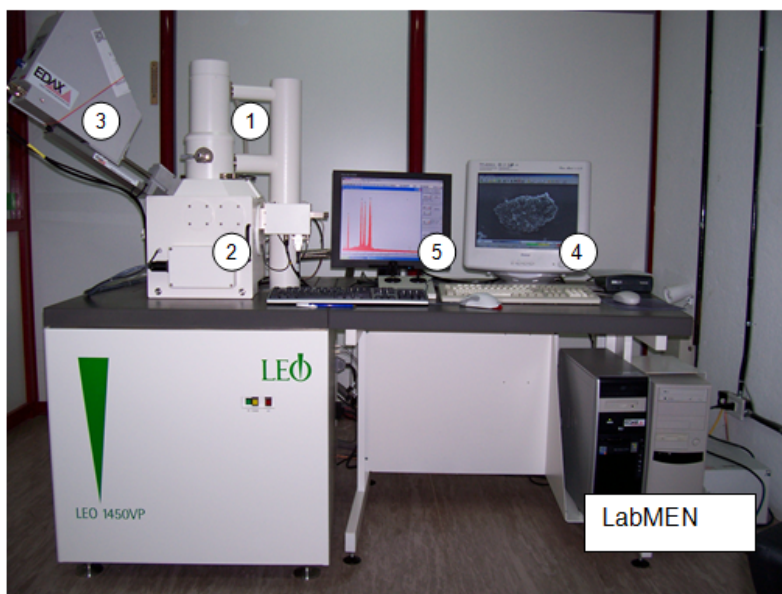


Figura 1.1: MEV-EDS utilizado para aquisição das imagens de Portezuelo. Na figura, canhão de elétrons (1), câmara de vácuo (2), detector de Si (Li) (3), monitor para visualizar imagens (4), monitor para visualizar espectros (5)

Na realização deste trabalho estão envolvidos conhecimentos das técnicas de micro-análise e imageamento utilizadas na aquisição das imagens analisadas, que incluem elétrons secundários (SE - do inglês *Secondary Electrons*), elétrons retroespalhados (BSE - do inglês *Backscattered Electrons*) e XRM que, somados aos métodos computacionais de processamento e análise de imagens, de reconhecimento de padrões e de visão computacional, formam um corpo multidisciplinar, que pode ser organizado conforme o mapa temático da Figura 1.2.

#### 1.4 Organização do texto

Este trabalho está dividido em cinco capítulos, sendo o primeiro esta breve introdução. No segundo, é feita uma revisão bibliográfica sobre o problema abordado neste trabalho, bem como métodos utilizados para a sua solução. No terceiro capítulo são descritos os materiais e métodos utilizados, e no quarto os resultados obtidos são apresentados e discutidos. No quinto e último capítulo são apresentadas as conclusões e apontadas algumas propostas de continuidade do trabalho.



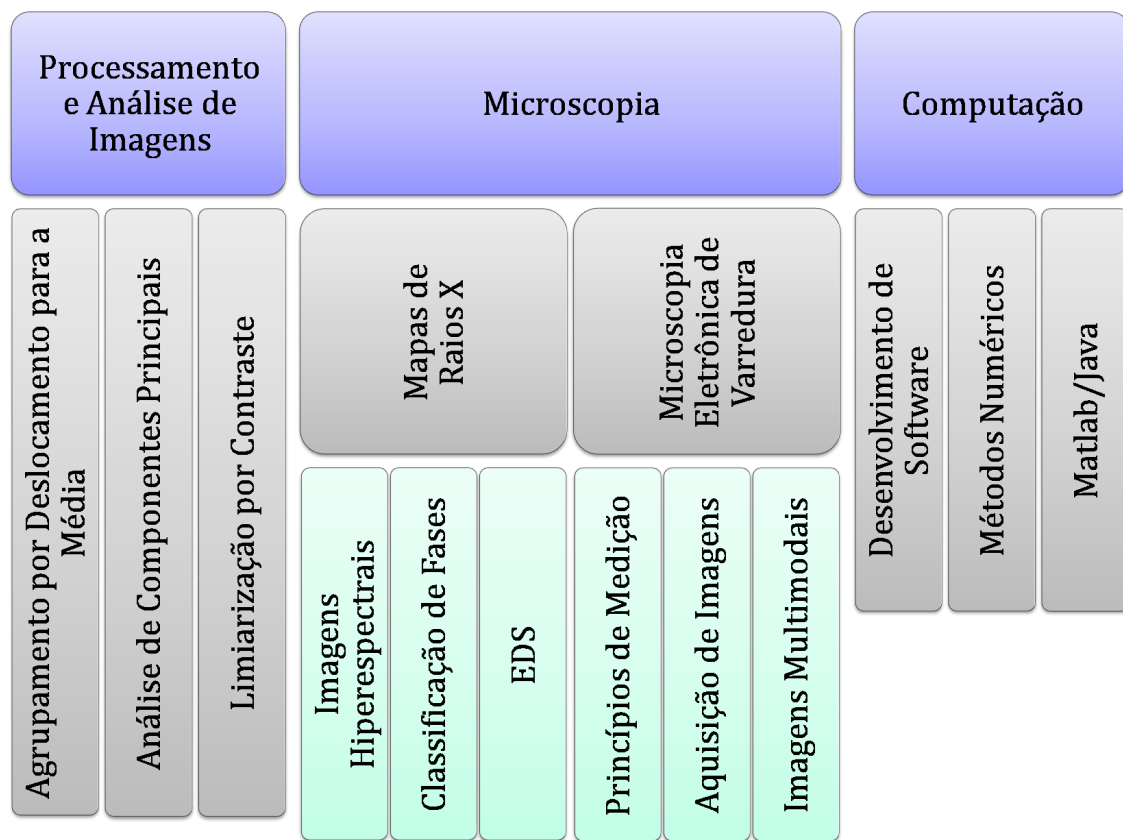


Figura 1.2: Mapa temático ilustrando as áreas do conhecimento envolvidas neste trabalho.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são abordados os conceitos fundamentais relacionados aos métodos implementados neste trabalho. Primeiramente é discutido o problema da classificação de fases com o auxílio de técnicas de microscopia. Em seguida, o processo de aquisição dos mapas de raios X característicos é descrito em detalhe e, por fim, os aspectos relacionados ao tema processamento e análise de imagens, incluindo reconhecimento de padrões e visão computacional, são apresentados e discutidos.

### 2.1 Classificação de fases

Uma fase é como uma parte de um sistema físico que possui composição química e propriedades físicas uniformes, ou invariantes. Em outras palavras, pode-se dizer que uma fase é uma parte homogênea de um sistema heterogêneo. O objetivo da classificação de fases é determinar a distribuição espacial destas regiões homogêneas em uma amostra heterogênea. Por sua natureza, esta tarefa é frequentemente realizada com o auxílio de mapas da composição química, isto é, imagens cujas intensidades ou cores relacionam-se com a composição química e/ou estrutura da amostra estudada. Os mapas de composição química, por sua vez, são obtidos pela composição dos mapas de distribuição dos elementos. Neste processo, a identificação dos componentes de amostras desconhecidas é possível, se os mapas forem tornados quantitativos (de intensidades calibradas) e analisados em associação com um banco de dados.

Os XRFs, obtidos pela detecção dos raios X característicos, gerados pelas transições eletrônicas radiativas induzidas dos elementos presentes na amostra, são particularmente úteis para determinação da distribuição dos elementos químicos. Em um MEV, a fonte de excitação dos átomos da amostra é um feixe de elétrons, que varre a superfície da amostra enquanto as intensidades dos raios X emitidos são registradas como níveis de

cinza (geralmente um registro de 8 bits, proporcional ao valor físico da intensidade) dos pixels correspondentes a cada ponto percorrido pelo feixe.

Imagens de BSE também são úteis para determinar o número de fases, uma vez que seus níveis de cinza estão relacionados com o número atômico médio dentro do volume de interação. Entretanto, esta técnica não pode ser usada, isoladamente, para determinar a composição química.

Informações sobre a estrutura cristalina podem ser obtida com o auxílio de outras técnicas como a difração de elétrons retroespalhados (HUMPHREYS, 2001) e Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET). No entanto, os custos e as dificuldades associadas à preparação da amostra para MET impedem a sua utilização frequente.

O contraste das fases também pode ser produzido por Catodo Luminescência (CL), que pode ser realizada tanto em MEV, como em Microscópios Ópticos (MO) com detectores especializados. Imagens hiperspectrais de CL contém informação sobre a composição química, estrutura cristalina e impurezas (MACRAE; WILSON; BRUGGER, 2009). Em um microscópio eletrônico, imagens de CL podem ser adquiridas simultaneamente com XRM, e imagens BSE, permitindo a combinação da informação das diferentes técnicas analíticas.

O imageamento multiespectral calibrado também já foi utilizado em MO para a identificação de minérios (PIRARD, 2004) e óxidos de ferro (PIRARD; LEBICHOT, 2005).

## 2.2 Microscopia

Os conjuntos de imagens analisadas neste trabalho foram adquiridos em MEVs equipados com EDS.

Um MEV é capaz de produzir imagens topográficas de alta ampliação e resolução além de mapear outros sinais cujas intensidades estão relacionadas com a composição química e a estrutura das amostras estudadas.

A formação de imagens topográficas em um MEV é feita através da contagem de elétrons secundários (SE) emitidos pela superfície da amostra ao ser atingida pelo feixe de elétrons provenientes do eletrodo do microscópio.

A resolução, definida como o tamanho do detalhe mais claramente visível na imagem, é limitada não somente pelo diâmetro do feixe de elétrons incidente, mas também pela interação entre os elétrons e a amostra. O diâmetro do feixe é determinado por diversos

fatores instrumentais e pode ser reduzido para poucos nanômetros (REED, 2005).

A espectroscopia por dispersão em energia (EDS) é uma técnica analítica que utiliza os raios X que são emitidos como resultado da incidência dos elétrons sobre a superfície da amostra para identificar a sua composição elementar. Depois que os átomos da amostra são ionizados pelos elétrons do feixe, os elétrons mais externos dos átomos ionizados sofrem transições para os níveis energéticos mais baixos, liberando energia na forma de radiação eletromagnética em comprimentos de onda na faixa espectral de raios X. A radiação emitida tem intensidade variável com o comprimento de onda ou energia observados. De fato, a intensidade apresenta máximos bem pronunciados, ou linhas espectrais, quando estas energias correspondem às diferenças entre os níveis energéticos dos átomos dos elementos químicos presentes na amostra. Por meio destas linhas espectrais é possível determinar quais elementos químicos estão presentes no local de prova, e assim identificar que mineral está sendo observado. O diâmetro reduzido do feixe permite a determinação da composição mineral em regiões de tamanhos muito pequenos (em torno de  $100nm$ ), produzindo uma análise praticamente pontual (REED, 2005).

Quando são detectados apenas os raios X com energias dentro de uma faixa que engloba uma linha espectral característica de um determinado elemento, então a imagem resultante é, de fato, um mapa de raios X característicos (XRM).

A resolução espacial dos XRMs é limitada pelo diâmetro do volume de interação, isto é, o volume próximo à superfície da amostra que é afetado pela incidência dos elétrons provenientes da coluna do MEV. Este volume é de cerca de  $2\mu m$  para as condições usuais de operação de um MEV, dependendo da composição global da amostra, do elemento específico mapeado, e do arranjo experimental.

O tempo de aquisição necessário para registrar um XRM com  $256 \times 256$  pixels com uma incerteza estatística razoável é cerca de 30 minutos (a  $20kcps$ )<sup>1</sup>. Mapas maiores demoram mais tempo. Um mapa mais aceitável,  $512 \times 512$  pixels, por exemplo, pode demorar em torno de duas horas. A relação entre tempo de amostragem, número de pixels e tempo total de aquisição é ilustrada na Figura 2.1 (REED, 2005).

Os recentes avanços no desenvolvimento de espectrômetros por dispersão em energia resultaram em sistemas de detecção com maiores taxas de contagem, tornando a técnica mais conveniente. Alguns destes detectores já podem produzir imagens de alta qualidade

---

<sup>1</sup>Um  $kcps$  corresponde a mil contagens de fótons por segundo.

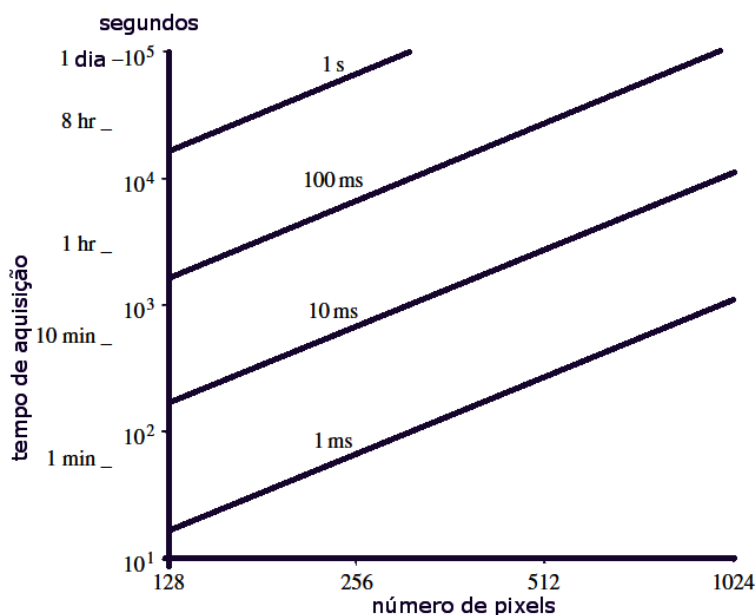


Figura 2.1: Relação entre o tempo de aquisição de uma imagem e o seu tamanho para diferentes tempos de amostragem.

a  $60kcp/s$  (GERNERT, 2008).

Os XRM's adquiridos com EDS permitem a detecção de elementos presentes em concentrações superiores a  $100ppm^2$ . Limites ainda mais baixos de detecção podem ser alcançados na espectrometria de dispersão em comprimento de onda (WDS - do inglês *Wavelength Dispersive Spectrometry*).

O uso em conjunto do MEV com EDS é de grande importância na caracterização estrutural de materiais. Enquanto o MEV proporciona imagens nítidas da topografia da superfície, o EDS permite sua imediata identificação além do mapeamento da distribuição de elementos, através da qual se pode visualizar a distribuição de fases constituintes de uma amostra.

### Aquisição de XRM's

Como no artigo de Stork e Keenan (STORK; KEENAN, 2010), ao longo deste trabalho, grandezas escalares são representados por itálico, ex.,  $n$  e grandezas vetoriais na forma de vetores coluna são representados por letras caixa baixa em negrito, ex.,  $\mathbf{d}$ . A transposição de vetores é representado pelo superescrito  $T$ , ex.,  $\mathbf{d}^T$ .

Na aquisição de XRM's, a amostra é irradiada com um feixe de elétrons, enquanto as

<sup>2</sup>Um  $ppm$  corresponde a uma parte por milhão, isto é, a décima milésima parte de um por cento.

intensidades,  $I(E, \Delta E, x, y)$ , das emissões induzidas de raios X nas posições  $(x, y)$ , em uma faixa de energia de  $E - \Delta E/2$  até  $E + \Delta E/2$ , são medidas por um espectrômetro, e mapeadas em valores de níveis de cinza de 8 bits,  $d = 0, 1, 2, \dots, 255$ , os quais são atribuídos a pixels de coordenadas  $(r, c) = (\text{linha}, \text{coluna})$ , em que  $r = 0, 1, 2, \dots, R - 1$  e  $c = 0, 1, 2, \dots, C - 1$ . Este processo é representado de forma resumida na Figura 2.2. Cada canal de energia, centrado em  $E$ , é selecionado para englobar a faixa de dos fótons de raios X emitidos pelos átomos de um elemento específico durante a transição característica de um estado excitado para um estado de menor energia. Os níveis de cinza de um XRM,  $d(r, c)$ , são proporcionais às concentrações locais de um elemento selecionado. Coordenadas de pixels são relacionadas às posições da superfície da amostra por  $(x, y) = (r\Delta x, c\Delta y)$ , em que  $\Delta x$  e  $\Delta y$ , são os tamanhos de passo da sonda nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente. Estes, por sua vez, são dados por  $\Delta x = W/(C - 1)$  e  $\Delta y = L/(R - 1)$ , em que  $W$  e  $L$  são a largura e o comprimento da região observada pela sonda,  $C$  e  $R$  correspondem, cada um, ao número de pontos de sondagem da superfície nas respectivas direções.

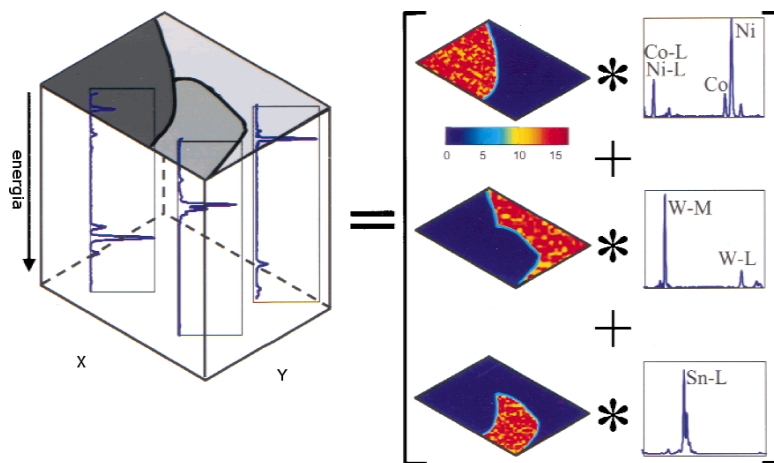


Figura 2.2: Representação esquemática do modelo de aquisição baseado no espectro de energia (KOTULA; KEENAN; MICHAEL, 2003).

Se  $n$  XRM's são adquiridos, um para cada elemento de interesse, identificados pela energia,  $E$ , de seu raio X característico, e indexados por  $s = 1, 2, \dots, n$ , então os valores de nível de cinza  $d_s(r, c)$  estão diretamente relacionados à composição química local, na posição correspondente na superfície da amostra. Os  $n$  valores de níveis de cinza de uma mesma coordenada  $(r, c)$ , são os atributos de pixel da imagem hiperespectral resultante.

Cada pixel hiperespectral  $(r, c)$  pode ser indexado por um inteiro  $i = C.r + c + 1$ , para

o qual  $i = 1, 2, \dots, m$ , e em que  $m = R \times C$  é o número total de pixels. Os atributos deste pixel, por sua vez, podem ser representados por um vetor  $\mathbf{d}_i$  de componentes  $d_{si}$ , i.e.,  $\mathbf{d}_i = [d_{1i}, d_{2i}, \dots, d_{ni}]^T$ . Este é o vetor de características que descreve a composição química da posição correspondente na superfície da amostra. Vetores de características de pontos sondados que sejam quimicamente similares, tendem a agrupar-se ao redor da sua média,  $\mathbf{p}_j$ , formando regiões de alta densidade no espaço de características, cujas dimensões são os níveis de cinza  $d_s$ . O vetor  $\mathbf{p}_j$  é identificado como o *protótipo* da classe, ou fase,  $j$ . Se, durante a aquisição dos XRM, as intensidades dos raios X são calibradas para concentrações, então os componentes do protótipo estarão diretamente relacionados à composição química da fase correspondente.

Neste contexto, o problema da classificação de fases torna-se o problema de determinar a qual agrupamento pertence cada pixel. Duas situações podem ocorrer. Na primeira, o número de fases e suas composições são conhecidas, i.e., o conjunto dos protótipos  $\{\mathbf{p}_j\}$ , onde  $j = 1, 2, \dots, \ell$  é dado. Então o problema se reduz a classificar cada pixel como pertencente à fase cujo protótipo é a mais próximo ao seu vetor de características. Métodos de classificação como *Support Vector Machines* (SVM) dão uma resposta para este problema. Na segunda, nem o número das fases e nem suas composições são conhecidas, i.e., as fases devem ser encontradas. Então, uma vez que as fases estão associadas aos agrupamentos no espaço de características, o problema é encontrar os centros das regiões de alta densidade.

### 2.3 Processamento e análise de imagens

Existem diversas técnicas para tratamento de imagens hiperespectrais. Composição de imagens coloridas (RUSS, 2006), feita através da atribuição de diferentes componentes espectrais para cada canal de cor, é a técnica de visualização mais comum, que também pode ser usado para identificação da fase, dependendo das propriedades da amostra e das metainformações disponíveis.

A técnica de segmentação baseada em limiares de múltiplos componentes espectrais já foi utilizada para a determinação quantitativa da abundância de minerais em amostras geológicas a partir de imagens de CL (GOETZE; MAGNUS, 1997) e para a identificação das fases do cimento a partir de XRM (HAECKER; REMOND; BENTZ, 1999). Neste contexto, Ding e Colpan (COLPAN; DING, 2006) construíram uma árvore de decisões

para o particionamento do espaço de características formado pelos componentes espectrais das fases constituintes da amostra. Todos estes são métodos supervisionados, que dependem de decisões de peritos em várias fases do processamento e análise.

Na segmentação por limiarização, o valor de cada limiar pode ser interpretado como a coordenada de um hiperplano perpendicular ao respectivo eixo em um espaço de características multidimensional, e cada pixel é atribuído a uma fase se estiver dentro de um hiperparalelepípedo limitado por estes planos. Assim, uma hipótese é implicitamente feita sobre a forma dos agrupamentos de pixels no espaço de características: eles devem ser separados por hiperplanos perpendiculares aos eixos deste espaço. Esta hipótese, torna inapropriadas as técnicas anteriormente referidas quando minerais não estequiométricos<sup>3</sup>, ou soluções sólidas, estão presentes. A razão é que variações de concentração de um elemento esticam os agrupamentos de pixels ao longo da direção correspondente no espaço de características, produzindo sobreposição das projeções de diferentes grupos sobre um mesmo eixo, impedindo assim a partição do espaço de característica em hiperparalelepípedos. De fato, cada hiperparalelepípedo pode conter pixels da "cauda" dos agrupamentos vizinhos.

A análise estatística multivariada (AEM) foi recentemente aplicada a imagens multi-espectrais de raios X (KOTULA, 2002) (KOTULA; KEENAN; MICHAEL, 2003) (KOTULA; KEENAN, 2006). A análise de componentes principais (ACP) é uma técnica de AEM útil para produzir uma imagem com o máximo de contraste, revelando a estrutura de uma amostra a partir de um conjunto de imagens. Os componentes principais são combinações lineares das medidas originais que maximizam a discriminação entre os componentes de uma amostra (HARRIS, 2001). A ACP pode ser aplicada a imagens hiperespectrais para produzir representações visuais da distribuição de fases pela atribuição de cada um dos componentes mais importantes a um canal de cor (RUSS, 2006). No entanto, é importante estar ciente de que os componentes principais não representam fases e que os coeficientes lineares não são as abundâncias relativas dos elementos nestas fases. Em vista disso, este é um método puramente qualitativo. A classificação de fases por ACP de imagens hiperespectrais requer pós-processamento e análise adicionais.

Métodos de agrupamento de dados no espaço de características, como o k-médias (ANIL; JAIN, 2010), podem ser usados para explorar a ocorrência de fases em uma amostra des-

---

<sup>3</sup>Materiais não estequiométricos são aqueles que apresentam composição atômica variável.



conhecida. Entretanto, é importante estar claro para quem realiza a análise que o resultado pode depender fortemente dos protótipos iniciais. Resultados melhores são obtidos quando a escolha destes protótipos é conduzida com o auxílio de alguma ferramenta de visualização. Assim, por exemplo, é comum que o algoritmo seja executado diversas vezes sob condições iniciais variadas, sendo feita, em seguida, uma comparação dos resultados.

No caso em que os agrupamentos não são conhecidos previamente, e devem ser descobertos pelo sistema de forma não supervisionada, há duas possibilidades: ou a forma da densidade de probabilidade dos agrupamentos é conhecida (ex., uma gaussiana multivariada), devendo ser determinados alguns dos seus parâmetros (ex., matrizes de covariância), ou a forma desta função não é conhecida. As abordagens para tratar do primeiro caso são ditas paramétricas e aquelas para tratar do segundo são não paramétricas.

Em um artigo recente, Stork e Keenan (STORK; KEENAN, 2010) salientaram as vantagens de métodos de agrupamento (ANIL; JAIN, 2010) na classificação de fases de imagens hiperespectrais de materiais, ao aplicar *Fuzzy C-Means* (FCM) para realizar a classificação de fases a partir de XRM's. Na FCM cada pixel tem um grau de pertinência a cada um dos agrupamentos no espaço de características, os quais são identificados pelos protótipos correspondentes. Nesta técnica, tanto o valor de pertinência como os protótipos dos grupos são determinados iterativamente de modo a minimizar uma função de mérito. A classificação é obtida através da atribuição de cada pixel ao agrupamento para o qual ele apresenta o maior valor de pertinência *fuzzy*. O requisito essencial para aplicar técnicas de análise multivariada a imagens hiperespectrais ou multimodais, é o co-registro da informação local para a mesma coordenada de pixel.

### **Agrupamento por deslocamento para a média**

*Mean Shift Clustering* (MSC) ou, livremente traduzido, agrupamento por deslocamento para a média (ADM), é um processo iterativo de propósito geral para encontrar modas ou agrupamentos de dados em conjuntos multivariados, primeiramente descrita por Fukunaga e Hostetler (FUKUNAGA; HOSTETLER, 1975), e recentemente generalizada por Cheng (CHENG, 1995). Foi usado pela primeira vez para a segmentação de imagem coloridas por Comaniciu e Meer (COMANICIU; MEER, 1997), e mais recentemente foi aplicado ao tratamento de imagens de sensoriamento remoto (CELLIER; ORIOT; NICOLAS, 2005) (BO et al., 2009) e à segmentação de imagens multiradiais de grãos de he-

matita, obtidas por luz plano-polarizada em diferentes orientações (COSTA et al., 2007). O algoritmo de ADM é baseado no deslocamento iterativo do centro de uma função de cálculo de média para a posição média dos pontos no domínio desta função. Em comparação com outros procedimentos de agrupamento ou de métodos de classificação baseada na análise de agrupamentos (ANIL; JAIN, 2010), esta técnica tem as vantagens de não assumir qualquer forma dos agrupamentos de dados e não exigir conhecimento prévio do número de agrupamentos, o que torna o método adequado para análise de imagens de amostras desconhecidas.

De modo geral, o ADM é uma técnica de AEM para procurar padrões em um conjunto de dados, visando a análise e agrupamento de dados similares. Em uma linguagem mais formal, é um estimador não-paramétrico do gradiente de densidade (COMANICIU; MEER, 2002), que no contexto de processamento de imagens tem sido aplicado à segmentação.

Computacionalmente, o ADM é um algoritmo que busca, de forma iterativa, agrupamentos de dados multivariados. Depois de um número finito de iterações (deslocamentos para a média), o deslocamento do centro da função de média cessará quando este se encontrar, de acordo com algum critério de precisão predefinido, no máximo de densidade do dados. Este será o centro do agrupamento, cujos membros têm coordenadas, ou valores característicos, similares. O processo é repetido com o centro da função de média inicializado em cada um dos pontos do conjunto de dados, os quais serão atribuídos ao agrupamento onde o centro da função pára.

De modo simplificado, esse processo, que passa a ser descrito matematicamente a seguir, pode ser visualizado na Figura 2.3, onde o domínio da função de média, isto é, a região de busca no espaço de características, é representada por uma esfera.

Começando pelo ponto  $\mathbf{d}_o$ , tomado como o protótipo inicial  $\mathbf{p}_j$ , da classe  $j$ , i.e.,  $\mathbf{p}_j \leftarrow \mathbf{d}_o$ , seja  $K(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j)$  a função de peso empregada no cálculo da média. Ainda que funções Gaussianas tenham sido amplamente utilizadas, bons resultados também podem ser obtidos com uma função homogênea cujo domínio se restringe a uma hipersfera, isto é, uma distância multidimensional fixa onde todos os pontos possuem o mesmo peso,

$$K(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } \|\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j\| \leq h \\ 0 & \text{se } \|\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j\| > h \end{cases}, \quad (2.1)$$

em que  $\|\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j\| = \sqrt{(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j)^2} = \sqrt{\sum_{s=1}^n (d_{si} - p_{sj})^2}$  é a distância euclidiana entre os pontos  $\mathbf{d}_i$  e  $\mathbf{p}_j$ , e  $h$  é o raio da hipersfera, comumente denominado largura de banda,

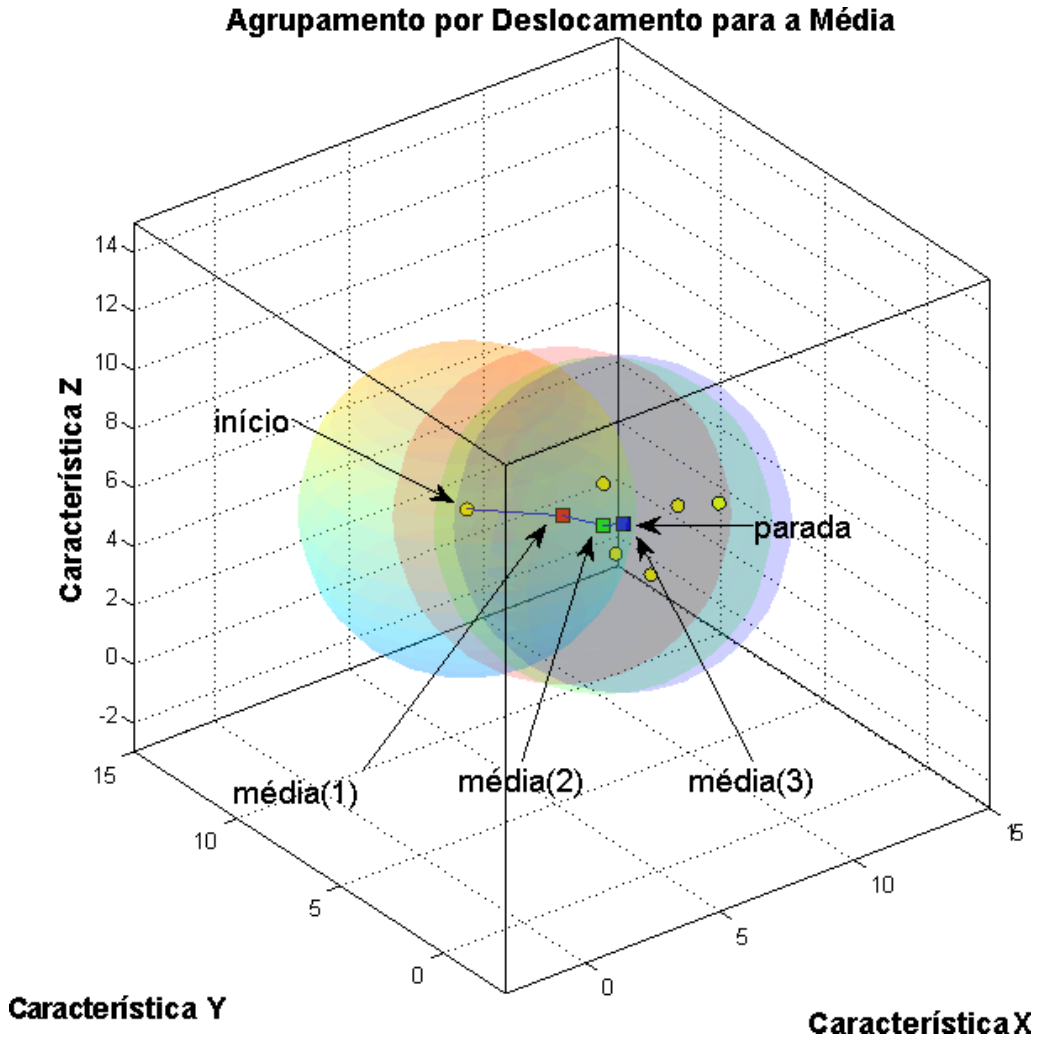


Figura 2.3: Caminho percorrido pela função de média para encontrar o centro do agrupamento.

do inglês *bandwidth* (BW).

A média ponderada,  $\mathbf{m}$ , dos pontos englobados pelo domínio de  $K$ , é

$$\mathbf{m}(\mathbf{p}_j) = \frac{\sum_{\mathbf{d}_i \in N_h(\mathbf{p}_j)} K(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j) \cdot \mathbf{d}_i}{\sum_{\mathbf{d}_i \in N_h(\mathbf{p}_j)} K(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j)} \quad (2.2)$$

em que  $N_h(\mathbf{p}_j) = \{\mathbf{d}_i \mid \|\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j\| \leq h\}$  é o conjunto de pontos na vizinhança hipersférica de  $\mathbf{p}_j$  para os quais  $K \neq 0$ . Para a função de cálculo da média dada pela Equação 2.1, o somatório  $\sum_{\mathbf{d}_i \in N_h(\mathbf{p}_j)} K(\mathbf{d}_i - \mathbf{p}_j)$  no denominador da Equação 2.2 é apenas o número  $|N(\mathbf{p}_j)|$  dos pontos em  $N_h(\mathbf{p}_j)$ .

Depois de calcular a média, o algoritmo de ADM atribui  $\mathbf{p}_j \leftarrow \mathbf{m}(\mathbf{p}_j)$ , i.e., o centro da função é deslocado de  $\mathbf{p}_j$  para  $\mathbf{m}(\mathbf{p}_j)$ , que então será o novo  $\mathbf{p}_j$ . Estes passos são repetidos até que  $\mathbf{m}(\mathbf{p}_j)$  convirja para  $\mathbf{p}_j$ , i.e.,  $\mathbf{m}(\mathbf{p}_j) = \mathbf{p}_j$ . Este  $\mathbf{p}_j$  final é o protótipo da classe  $j$ , ao qual se diz que o ponto inicial  $\mathbf{d}_o$  pertence. Este resultado corresponde

à detecção de um agrupamento no espaço de características e a atribuição do ponto inicial à classe correspondente. Após repetir esse processo para todos os pontos (todos os pixels da imagem hiperespectral), tanto a distribuição dos agrupamentos no espaço de características como a distribuição das fases na imagem são revelados.

O vetor que vai da média anterior  $\mathbf{p}_j$  para a nova média  $\mathbf{m}(\mathbf{p})_j$  é chamado de Vetor Deslocamento para a Média (VDM). Se os dados são vistos como amostras de uma função densidade de probabilidade multivariada de encontrar um vetor de características entre  $\mathbf{d}_i$  e  $\mathbf{d}_i + \delta\mathbf{d}_i$ , então o VDM é uma estimativa do gradiente local desta função densidade. O rastreamento dos VDMs consecutivos resulta em um caminho desde o ponto inicial até o ponto de máxima densidade local. No problema de segmentação de imagens, esta função é a probabilidade de encontrar um pixel com um dado conjunto de intensidades espectrais, então o protótipo final está relacionado com a composição química mais provável da fase.

Conforme foi dito anteriormente, não é preciso fazer nenhuma hipótese sobre o número e a forma dos agrupamentos quando a ADM é aplicada. O algoritmo é de implementação simples e é robusto em relação aos erros de amostragem. Por outro lado, pelo menos um parâmetro deve ser inserido pelo usuário, a BW (ex., raio da hipersfera). Esta não é uma tarefa trivial, uma vez que a escolha inapropriada pode gerar um número equivocado de agrupamentos. Assim, quando a BW é muito grande, agrupamentos vizinhos se mesclam, sendo considerados um único agrupamento, e, quando a BW é muito pequena, flutuações locais (ruído) podem ser considerados como novos agrupamentos. Quando a ADM é aplicada à classificação de fases, a mesclagem de agrupamentos vizinhos implica que diferentes fases são interpretadas como uma única, e, no segundo caso, defeitos na estrutura do material ou artefatos de aquisição das imagens são considerados como fases adicionais. O uso de um raio variável e adaptativo foi proposto por (RAMESH; MEER; COMANICIU, 2001), (COMANICIU, 2003) como uma solução geral para o problema da sobre-segmentação de padrões multiescala, como é o caso de objetos texturizados. Entretanto, quando aplicado à caracterização de materiais, este método pode eliminar as fases minoritárias. Classificações erradas são melhor resolvidas em análise de fases de materiais por pós-processamento, quando a informação espacial pode ser adicionada via operações morfológicas (RUSS, 2006), frequentemente contando com a decisão final do especialista.

## Análise de componentes principais

Esta também é uma técnica de AEM para procurar padrões; ela visa salientar similaridades e diferenças, por isso é uma técnica dedicada para visualização dos dados. Em processemaneto de imagens o método é utilizado para maximizar o contraste nos canais mais significantes (RUSS, 2006), geralmente utilizado com o propósito de filtragem mas também é comum ser usado para compactação de imagens. Matematicamente, é um procedimento que facilita a simplificação de grandes conjuntos de dados, transformando uma série de variáveis correlacionadas em um número menor de variáveis não correlacionadas, chamadas componentes principais (LEONIDAS, 2004), para as quais quais a variância é máxima. O conjunto de todas as componentes principais é do mesmo tamanho que o conjunto de dados de entrada, mas é comum que a soma das variâncias dos primeiros componentes principais não ultrapasse 80% da variância total dos dados originais (JOLLIFFE, 2002). O resultado do ACP pode ser observado na Figura 2.4 em que os pontos originais (mesmo pontos da Figura 2.3) são representados no novo sistema de coordenadas definido pelo ACP. Tanto a Figura 2.3 como a Figura 2.4 são para simples demonstração do tipo de resultados gráficos obtido pelos métodos ADM e ACP.

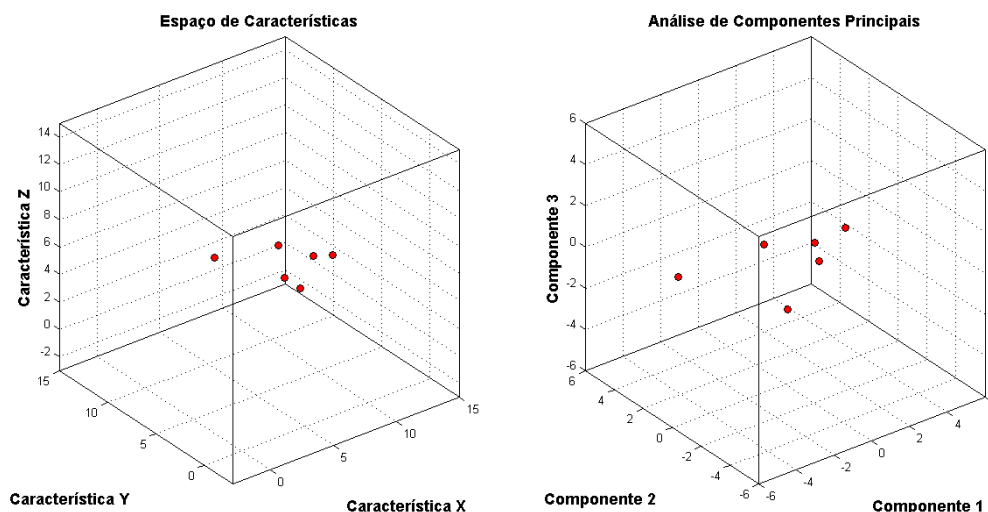


Figura 2.4: Gráfico do resultado ACP sobre os dados do espaço de características.

Frequentemente, ACP é o primeiro passo para análise de dados, análise de agrupamentos e outros métodos multivariados (ROUSSEEUW; BRANDEN; HUBERT, 2005). O método pode ser utilizado em conjunto com o método ADM de diversas maneiras. Xie (XIE et al., 1993) utiliza ADM como um passo anterior ao ACP. Já em Lee (LEE;

LEE, 2010) e Chenaoua (CHENAOUA; BOURIDANE, 2010) o método de ACP é aplicado como um passo anterior ao ADM, com o propósito de redução da dimensionalidade das imagens de entrada, que podem ser tanto RGB como hiperespectrais. Neste trabalho, os métodos são utilizados de um modo a permitir uma comparação entre os resultados. Assim, a ADM foi aplicada no espaço de características formado pelas três componentes principais, conforme será discutido na sessão de resultados.

## 3 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo, serão apresentados, inicialmente, os dois conjuntos de imagens usados para avaliação dos métodos de ACP e ADM como ferramentas para classificação de fases em imagens hiperespectrais e, por fim, os métodos computacionais e suas implementações.

### 3.1 Conjunto de Imagens

#### 3.1.0.1 *Mica*

O primeiro conjunto de imagens analisado, mostrado na Figura 3.1, foi disponibilizado por John Russ (RUSS, 2006). Trata-se um conjunto de XRM de uma seção fina e polida de mica adquiridos em um MEV equipado com EDS. Cada um destes mapas é uma imagem em escala de cinza que representa as intensidades locais do sinal de raio X característico de um dos nove elementos (Al, Ca, Fe, K, Mg, Na, O, Si, Ti) presentes na amostra. Todas as imagens têm o mesmo tamanho ( $256 \times 199$  pixels), e foram quantizadas em 8 bits (256 níveis de cinza), e armazenadas no formato TIFF, sem compressão. Já as imagens de saída, que resultam da aplicação dos métodos aqui testados, são imagens de 24 bits (16,7 milhões de cores no espaço RGB).

#### 3.1.0.2 *Portezuelo*

O segundo conjunto de XRM foi adquirido de uma amostra arqueológica de cerâmica em um MEV marca LEO VP 1450, também equipado com EDS. A amostra é um pedaço de cerâmica de um vaso do sítio de Portezuelo (idade de radiocarbono 600-900 A.C.) localizado no Vale de Catamarca, Argentina. O estilo de Portezuelo é caracterizada por uma louça muito fina, de produção e técnicas decorativas muito complexas e altamente variáveis (FABRA; BERTOLINO, 2003) (BERTOLINO et al., 2009), que tem como uma

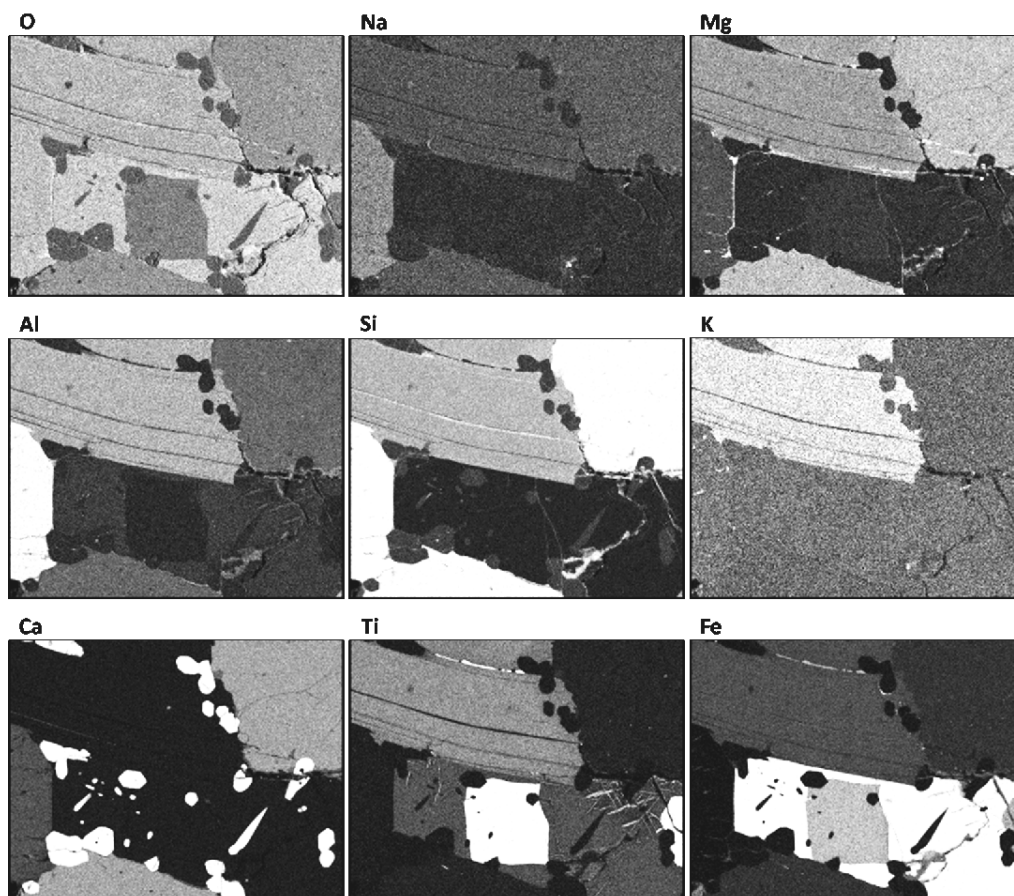


Figura 3.1: Imagens de MEV de uma amostra de mica polida (RUSS, 2006).



das características mais marcantes a sua notável policromia, isto é, a variedade de cores. Na amostra selecionada, os motivos decorativos são pintados nas cores vinho, vermelho, preto e branco.

O conjunto de imagens de Portezuelo é formado pelos mapas dos sinais de raios X individuais de cinco elementos, a saber, Al, Fe, Si, Ca e Mn, mostrados na Figura 3.2. A primeira imagem (marcada como SEI) é a imagem de elétrons secundários, e não foi incluída nas análises realizadas no presente trabalho. Os XRM's deste conjunto são todos do mesmo tamanho ( $128 \times 100$  pixels, de 8 bits) em formato TIFF, sem compressão.

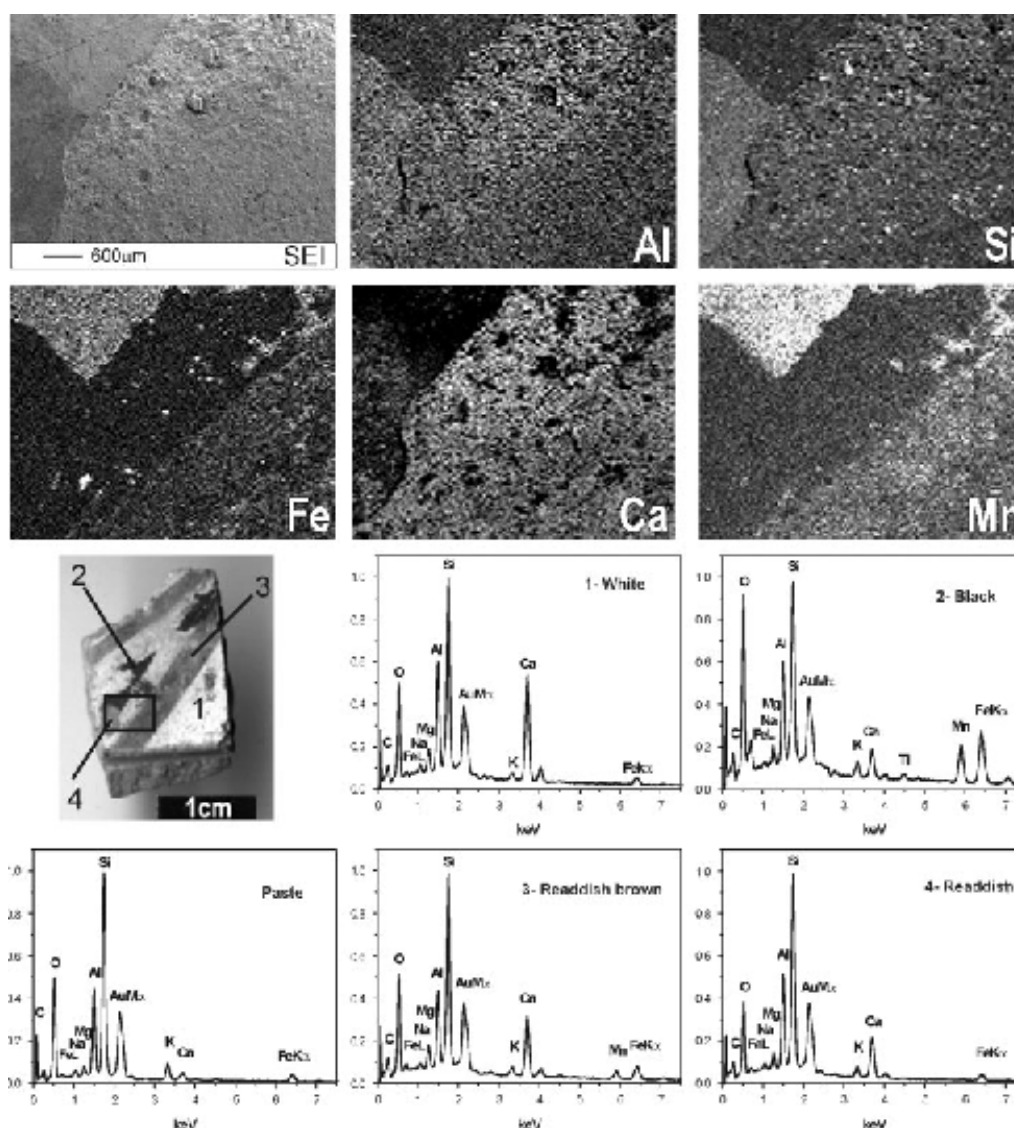


Figura 3.2: Imagem de elétrons secundários, XRM's, amostra e espectros de EDS da amostra de Portezuelo.

## 3.2 Implementação

Os métodos apresentados neste trabalho foram implementados em MATLAB<sup>TM</sup> (MATLAB, 2009) em um computador com processador i7-920<sup>TM</sup> (INTEL, 2010) equipado com uma placa de vídeo NVIDIA GeForce<sup>TM</sup> (NVIDIA, 2010) GT 230 e 8 GB de memória RAM DDR3.

### Software

O software construído para exploração dos métodos é dividido em módulos, que serão detalhados nesta seção. Na Figura 3.3 é mostrado o diagrama de fluxo para os módulos principais.

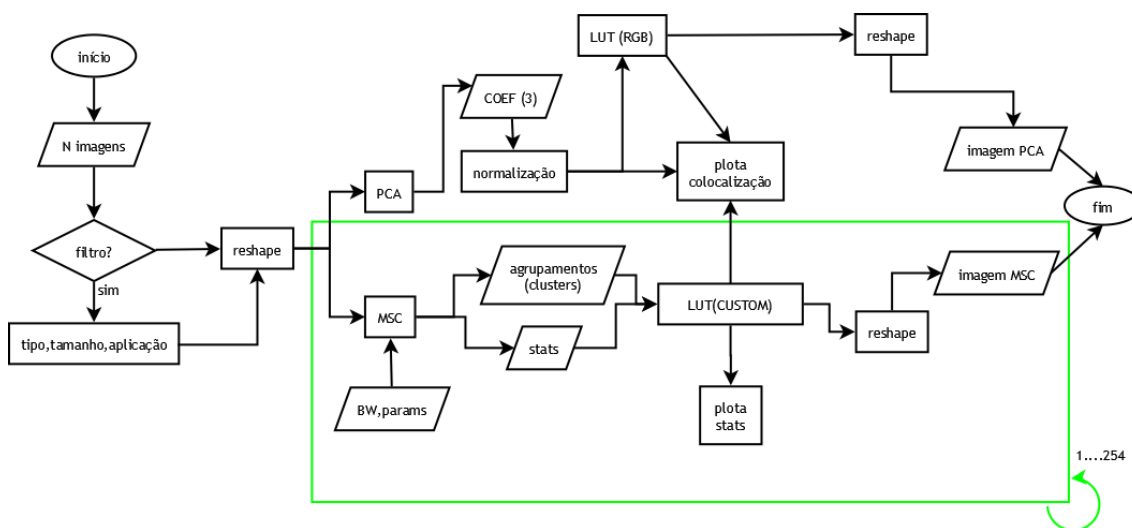


Figura 3.3: Diagrama de fluxo do funcionamento geral do software.

O algoritmo de ADM foi baseado na implementação de Bart Finkston (FINKSTON, 2010), o qual foi modificado para aceitar um conjunto de imagens hiperespectrais como o conjunto de dados de entrada. Em nossa implementação os  $n \times m$  elementos da matriz de entrada são os valores em escala de cinza de  $m$  pixels em cada uma das  $n$  imagens de 8 bits. A saída do algoritmo fornece, além da atribuição de cada pixel a um determinado agrupamento, ou fase, informações estatísticas como posição do centro do agrupamento, desvio padrão e porcentagem dos pixels pertencentes a cada agrupamento, igual à fração de área da fase correspondente. A imagem de saída é construída utilizando o número de agrupamentos encontrados pelo algoritmo, o qual determina o número de cores. Como cada pixel das imagens de entrada está necessariamente associado a um agrupamento, de

modo que todos os pixels serão coloridos de acordo com número do agrupamento a que pertencem. Os principais passos do algoritmo de ADM são mostrados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Principais passos do algoritmo de ADM.

Algoritmo de ADM	
1.	conversão das imagens para o formato da matriz de entrada <sup>1</sup> ;
2.	execução do algoritmo ADM;
3.	atribuição dos pixels aos respectivos agrupamentos;
4.	construção da imagem resultado com os pixels rotulados por cor.

O algoritmo de ADM foi validado através de imagens sintéticas, para as quais os números de agrupamentos foram gerados computacionalmente. A Figura 3.4 (a) mostra o conjunto de imagens sintéticas e em (b) resultados obtidos para diferentes BWs. Cada resultado é uma imagem segmentada e colorida segundo uma tabela de cores predefinida.

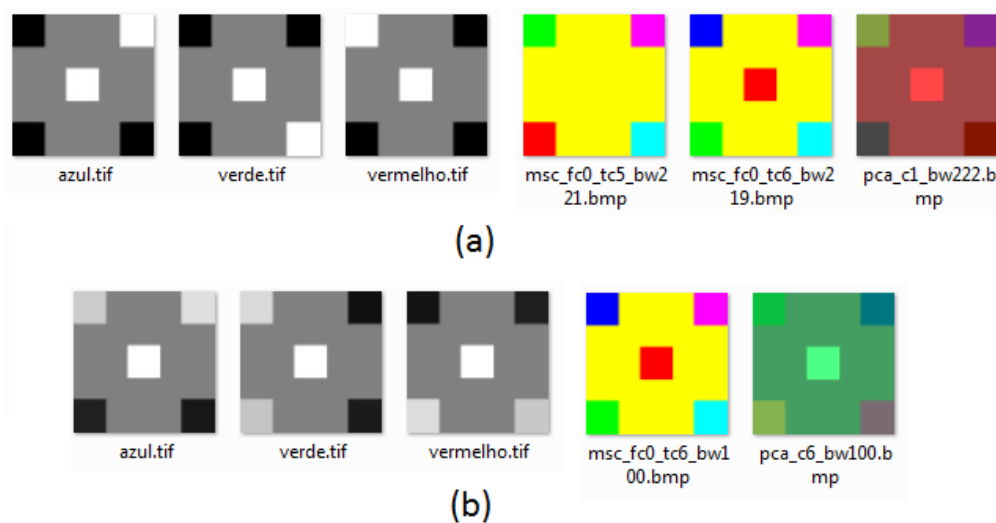


Figura 3.4: Conjunto de imagens usadas para a validação do ADM (a) . Imagens de saída para diferentes BWs (b) .

O algoritmo de ACP é executado por uma função chamada *princomp*, que está disponível da biblioteca padrão do MATLAB<sup>TM</sup>. O ACP é executado sobre a matriz  $m \times n$ , onde  $m$  corresponde ao número de pixels das imagens individuais e  $n$  ao número de imagens. A saída do algoritmo é o conjunto das componentes principais em ordem decrescente de significância. Cada um dos componentes principais é definido pelos coeficientes

das combinações lineares não correlacionadas dos dados originais em que a variância é a máxima possível. Para compor a imagem de saída, são feitas três combinações lineares das imagens de entrada, usando os coeficientes dos três componentes principais mais significativos. Os resultados destas combinações lineares são então renormalizados para ficar limitados ao intervalo de valores de 0 a 255 de cada um dos três canais de 8 bits da imagem colorida resultante. Os principais passos do algoritmo de ACP são mostrados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Principais passos do algoritmo de ACP.

Algoritmo de ACP
1. conversão das imagens para o formato da matriz de entrada;
2. execução do algoritmo ACP;
3. construção dos três componentes mais significativos;
4. montagem da imagem resultado com os componentes obtidos em 3.

### Visualização de resultados e pós-processamento

Após executar o algoritmo de ADM, rótulos de classe  $j$  são atribuídos a cada pixel, e são mapeados para cores únicas de acordo com uma tabela de cores previamente definida. Apesar da arbitrariedade da escolha particular de cores usada na LUT, o número e a distribuição das fases na imagem de saída não depende desta escolha. Uma característica importante deste método em comparação com o ACP é que a classificação de fases resultante leva em conta todas as informações contidas nas imagens de entrada.

Ao executar o algoritmo de ACP, uma representação visual da distribuição é produzida pela atribuição dos três componentes mais significantes aos canais de cor da imagem de saída. Cada componente de cor de cada pixel na imagem de saída é portanto determinado por uma particular combinação linear dos níveis de cinza dos pixels correspondentes nas imagens de entrada, as quais são redimensionadas para se ajustarem aos níveis de intensidade de cada canal, conforme dito anteriormente. Uma vez que as imagens de entrada são ruidosas, as imagens de saída também o serão. Assim, inúmeras cores resultam deste processamento, as quais, embora semelhantes para pixels de uma mesma fase, não são rótulos de classe, de modo que um outro procedimento é necessário para classificar pixels de cores semelhantes como pertencentes à mesma fase. O número e a distribuição

das fases na imagem de saída depende da escolha de tanto o conteúdo dos canais de cor (os componentes principais escolhidos) quanto ao algoritmo de segmentação de cores que seria utilizado no pós-processamento.

É comum a utilização de filtros de suavização para diminuir o ruído das imagens de entrada antes da aplicação de métodos de análise. Este procedimento baseia-se na correlação normalmente existente entre as propriedades de pontos vizinhos na superfície da amostra. Na discussão dos resultados, o efeito deste processo sobre os resultados de ACP e ADM será analisado.

### Heurísticas

Como dito anteriormente, o algoritmo de ADM recebe um parâmetro do usuário, a saber, o raio da hipersfera (BW) dentro da qual é calculada a posição média dos pixels por ela englobados no espaço de componentes espectrais. No entanto, há outros dois parâmetros que devem ser inseridos, a saber, o critério de parada para convergência e a distância para união de agrupamentos próximos. É importante notar que estes valores são definidos arbitrariamente, ainda que seja possível estipular métodos autônomos, especialmente para o segundo caso. Assim, por exemplo, em Chenaoua (CHENAOUA; BOURIDANE, 2010) uma função semelhante à força gravitacional é definida para determinar se ocorrerá a união de agrupamentos, e em Lee (LEE; LEE, 2010) é usada a distância de Bhattacharyya<sup>2</sup> para determinar a proximidade de agrupamentos. Neste trabalho, o primeiro parâmetro é fixado como sendo um milésimo do raio da hipersfera e o segundo como a metade do raio. Ou seja, quando a diferença entre duas médias consecutivas for menor que um milésimo do raio, o algoritmo pára a busca e determina o agrupamento, e quando os agrupamentos estão a uma distância euclidiana menor que a metade do raio são mesclados formando um único agrupamento.

Outra heurística adotada neste trabalho está relacionada às imagens de saída, tanto do ACP como do ADM. Como, devido à natureza do processo de aquisição, as imagens originais são em tons de cinza, i.e., níveis discretos de 8 bits, as imagens finais da aplicação dos métodos são imagens coloridas artificialmente, que dependem da escolha arbitrária de uma tabela de cores para visualização (LUT) que melhor represente esse resultado. O uso de uma LUT colorida deve-se ao fato de que variações em cores são melhores

---

<sup>2</sup>Bhattacharyya, A. On a measure of divergence between two statistical populations defined by their probability distributions. Bull. Calcutta Math. Soc. 35, (1943). 99 - 109.

percebidas pelo olho humano do que variações em tons de uma mesma cor. No caso do ACP, é feita uma normalização dos resultados para associar cada componente diretamente a um dos canais de cor RGB, enquanto que, no caso do ADM, a LUT (Figura 3.5), é formada por uma tabela de cores indexadas, sendo que os 12 primeiros agrupamentos recebem cores pré-determinadas (ciano, magenta, amarelo, vermelho, verde, etc) e, no caso de haver mais de 12 agrupamentos, as cores dos agrupamentos seguintes são geradas aleatoriamente (excluindo-se as 12 primeiras).

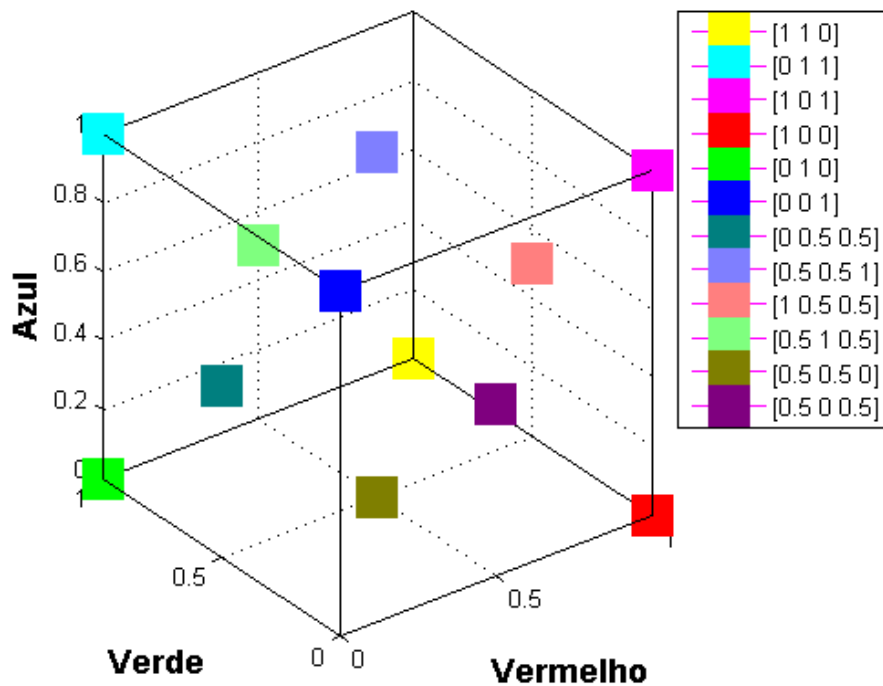


Figura 3.5: LUT para resultados do ADM, representação no cubo de cores das cores dos 12 agrupamentos maiores.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 Mica

#### 4.1.1 Método de análise de componentes principais

Os resultados obtidos pela aplicação do método de ACP ao conjunto de imagens cedido por John Russ é extensamente discutido na publicação original (RUSS, 2006). Na Tabela 4.1 são mostrados os coeficientes lineares dos componentes principais deste conjunto de imagens e, na Figura 4.1, é mostrada a imagem produzida com as três componentes de maior significado estatístico (Componente 1 = Canal R; Componente 2 = Canal G; Componente 3 = Canal B). Esta imagem é uma representação visual da distribuição de fases e contém cerca de 83% do conteúdo de informação do conjunto completo de imagens. Como dito anteriormente, esta imagem não é uma imagem segmentada em fases, tendo em vista que os atributos dos pixels não são rótulos de classe e sim uma combinação linear dos níveis de cinza do conjunto de imagens. Uma vez que os XRM's são naturalmente ruidosos e os valores locais dos componentes principais incorporam este ruído, o que implica na ocorrência de flutuações locais nas cores dos pixels de uma mesma fase.

Tabela 4.1: Coeficientes obtidos pela ACP para a amostra de mica.

		Canal Original								
		Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	O	Si	Ti
PC	Sig. %									
1	49.46	-0.238	-0.221	0.598	-0.042	-0.256	-0.112	0.053	-0.636	0.220
2	20.92	0.397	-0.674	0.073	0.405	0.163	0.081	0.224	0.177	0.320
3	12.86	-0.060	0.142	-0.568	0.279	-0.042	-0.049	-0.282	-0.373	0.592
4	7.08	0.394	0.164	-0.095	0.519	-0.257	0.026	0.149	-0.403	-0.534
5	4.77	-0.506	0.199	0.184	0.553	0.578	-0.082	0.126	0.024	-0.072
6	2.21	0.286	0.619	0.310	0.061	-0.134	0.160	0.390	0.180	0.453
7	1.33	-0.128	0.008	0.267	0.409	-0.490	-0.0292	-0.564	0.429	0.011
8	0.79	0.461	0.141	0.316	-0.083	0.493	0.147	-0.597	-0.195	-0.004
9	0.57	-0.241	-0.073	-0.039	0.023	-0.057	0.960	-0.011	-0.083	-0.036

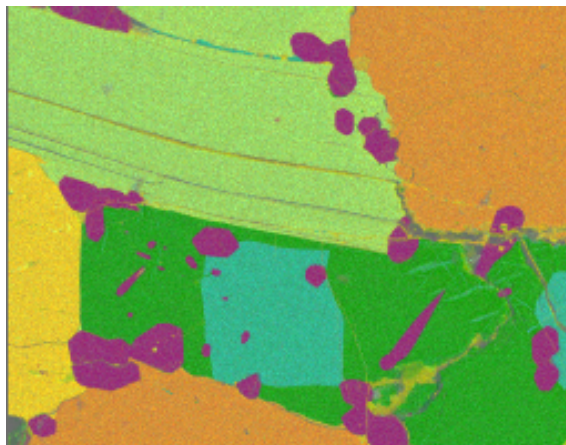


Figura 4.1: Resultado da aplicação do método ACP sobre o primeiro conjunto de imagens.

Se, por um lado, a classificação de fases pixel a pixel requer pós-processamento, o número de fases pode ser inferido pela análise visual de mapas de colocação, construídos como auxiliares na visualização dos resultados numéricos. Nestes mapas, as coordenadas dos pixels são os valores dos seus componentes principais formados por combinação linear dos níveis de cinza dos XRM. Os agrupamentos neste espaço de características aparecem como regiões de mesma cor no gráfico, revelando a ocorrência de aglomerados de pixels com atributos semelhantes. Na Figura 4.2 são mostrados o mapa de colocação dos três componentes principais mais significativos e suas respectivas projeções nos três sub-espacos bidimensionais formados pelos referidos componentes. A estrutura do espaço de características mostrado nestes gráficos usa o mesmo sistema de cores da imagem de saída (Figura 4.1), onde seis matizes são facilmente distinguíveis.

#### 4.1.2 Método de agrupamento por deslocamento para média

Como foi dito na Seção 2.3, os resultados do método ADM dependem da escolha da variável BW. A questão é, então, qual a BW que melhor representa o resultado esperado. A este respeito, é importante observar que o volume de interação, isto é, a porção da amostra onde ocorre a interação entre o feixe de elétrons incidente e o material, o qual é representado por um pixel, pode abranger limites de fase (interfaces) e outros defeitos estruturais. Além disso, os processos de indução de emissão e de detecção dos raios X é estocástico, de modo que os XRM são naturalmente ruidosos.



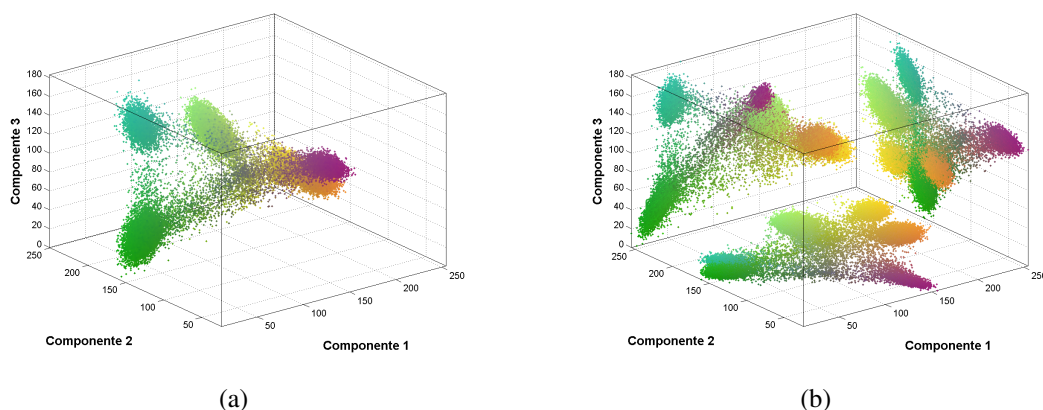


Figura 4.2: Mapa de colocação dos três componentes principais e suas respectivas projeções nos três sub-espacos bidimensionais formados pelos referidos componentes.

A BW é um número que poder variar de 0 a 255, sendo que os valores 0 e 255 são obviamente excluídos. Faixas de valores próximo a zero podem gerar um número elevado de agrupamentos e faixas de valores próximos a 255 podem gerar um número muito pequeno de agrupamentos, ou mesmo um único agrupamento igual à imagem toda. O gráfico da Figura 4.3 mostra que valores de BW muito baixos geram agrupamentos que representam menos de 0.5% do total de pixels presentes na amostra.

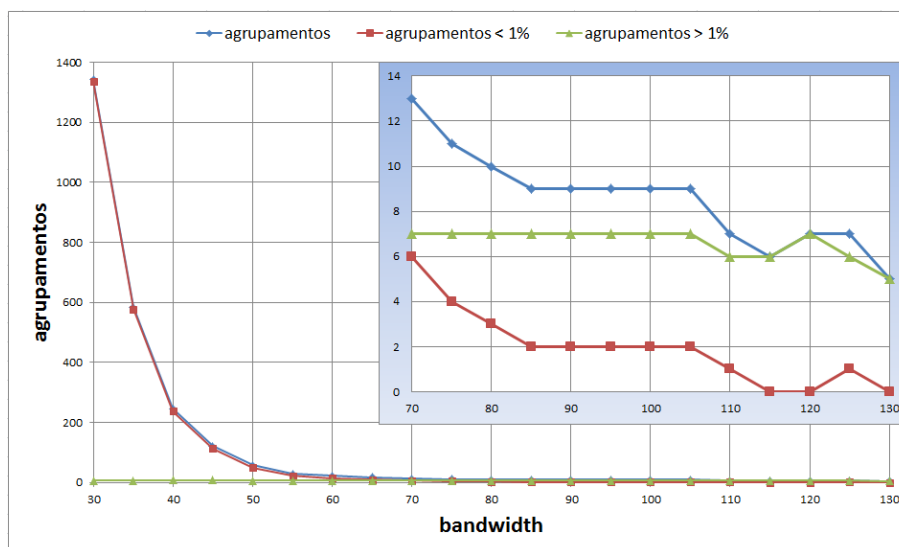
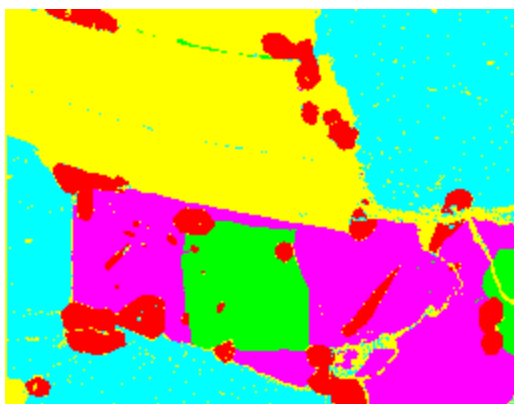


Figura 4.3: Gráfico da variação do número de agrupamentos por BW.

Ao gerar resultados de ADM para uma faixa intermediária de BW, e adotando a heurística de que agrupamentos com menos de 0.5% devem ser descartados reduzimos a escolha da imagem resultado a imagens com 6, 7 e 8 fases. Imagens obtidas desta forma

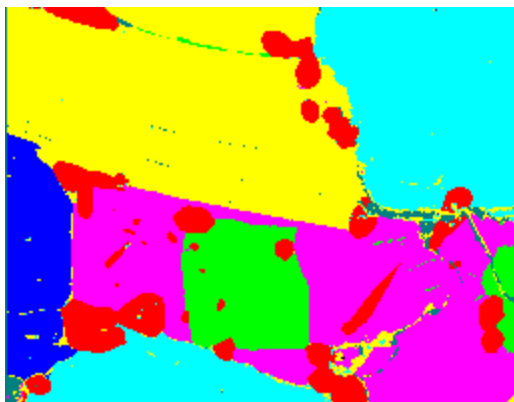
são mostradas na Figura 4.4, em que a cor preta corresponde aos agrupamentos mesclados que representavam menos de 0.5% do total de pixels.



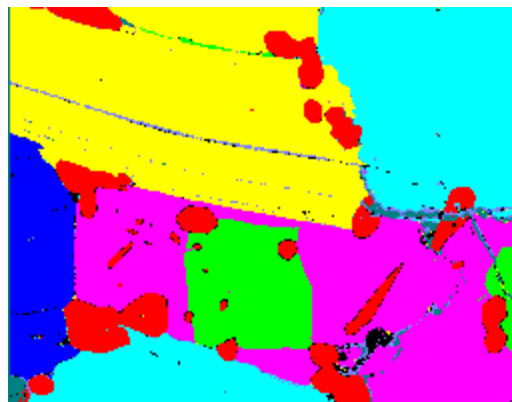
(a) BW = 130, 5 agrupamentos, nenhum agrupamento < 0.5%, 5 fases detectadas.



(b) BW = 115, 6 agrupamentos, nenhum agrupamento < 0.5%, 5 fases detectadas.



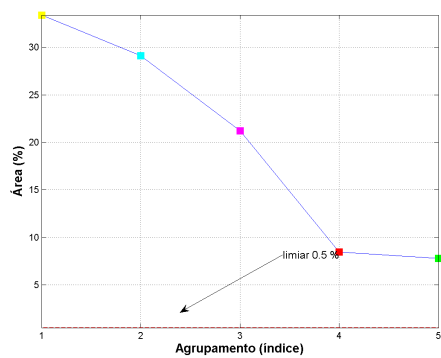
(c) BW = 85, 9 agrupamentos, 2 agrupamentos < 0.5%, 5 fases detectadas.



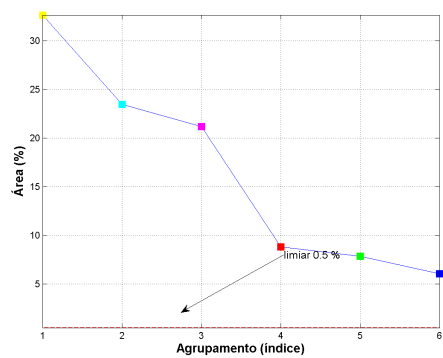
(d) BW = 45, 121 agrupamentos, 113 agrupamento < 0.5%, 5 fases detectadas.

Figura 4.4: Resultados ADM para BW = 130, 115, 85 e 45.

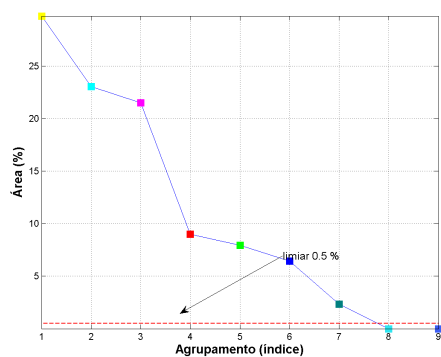
Os gráficos da Figura 4.5 representam o tamanho dos agrupamentos identificados por seus respectivos índices. Os agrupamentos com tamanho abaixo do limiar (0.5% do total de pixels da imagem), foram mesclados, de acordo com a heurística proposta.



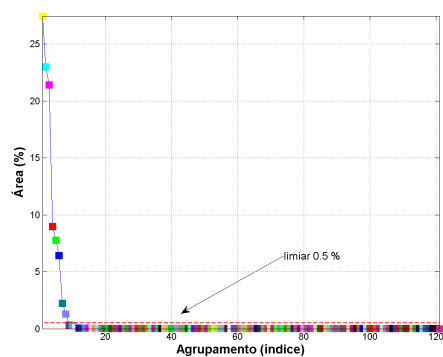
(a)  $BW = 130$ , 5 agrupamentos, nenhum agrupamento  $< 0.5\%$ , 5 fases detectadas



(b)  $BW = 115$ , 6 agrupamentos, nenhum agrupamento  $< 0.5\%$ , 6 fases detectadas



(c)  $BW = 85$ , 9 agrupamentos, 2 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 7 fases detectadas



(d)  $BW = 45$ , 121 agrupamentos, 113 agrupamento  $< 0.5\%$ , 8 fases detectadas

Figura 4.5: Gráficos com o tamanho dos agrupamentos da Figura 4.4

Duas questões devem ser repondidas a partir desta análise. A primeira é onde está a sétima fase que não aparece nos gráficos de colocação nem na imagem de resultado método ACP? A segunda é como justificar, do ponto de vista do método de ADM a escolha do valor de BW com resultado de sete fases, que supostamente é o resultado esperado? Para tentar responder à primeira questão foram construídos mapas de colocação, mostrados na Figura 4.6, com a mesma tabela de cores de visualização utilizada na construção da imagem de saída do ADM.

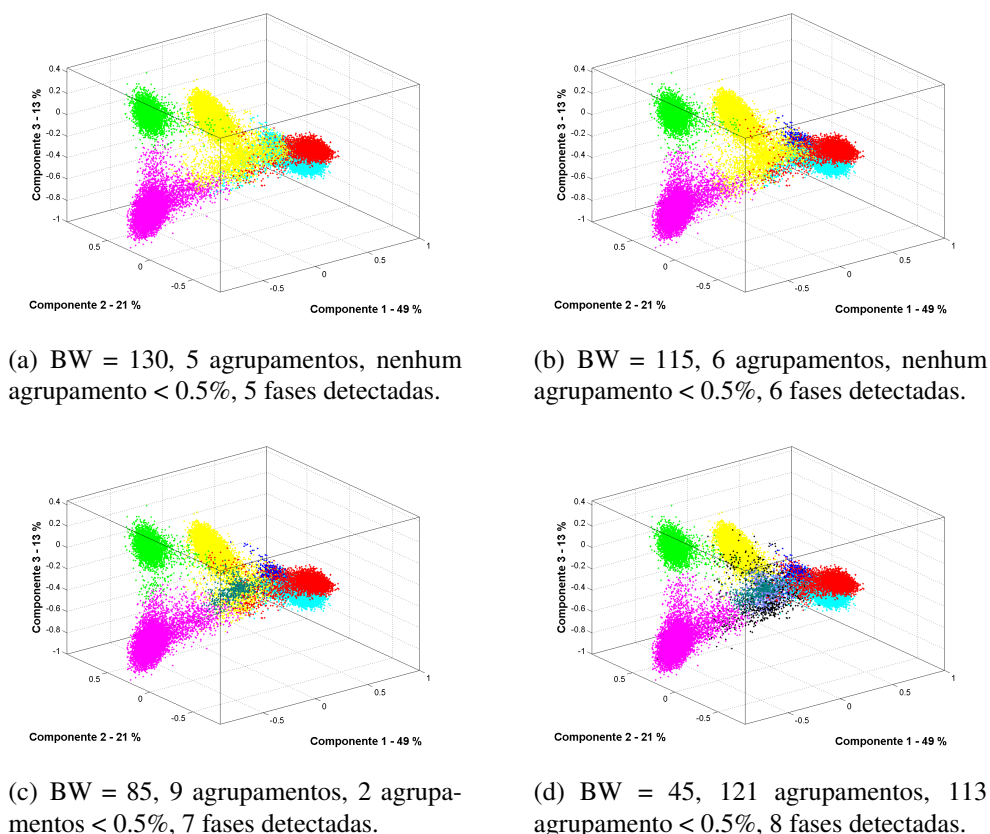
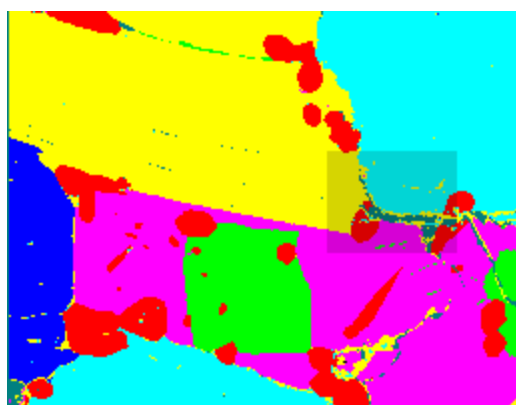


Figura 4.6: Mapas de colocação dos componentes principais com os agrupamentos detectados por ADM identificados pelas cores correspondentes às fases da Figura 4.4

Já a questão relativa à justificativa para escolha do valor de BW é respondida com base na informação do usuário a respeito do sistema estudado (meta-informação). O método de ACP determina a existência de, pelo menos, seis fases. Em vista disso, os resultados de ADM com menos de seis fases são descartados. Por outro lado, quando mais de sete fases são obtidas, estas ocorrem com tamanho menor que o limiar de detecção, previamente estabelecido, com base no tamanho do feixe de elétrons, volume de exclusão e do tamanho dos artefatos produzidos por interfaces e defeitos estruturais. Assim, descarta-

mos imagens com mais de sete fases. A decisão tomada pelo especialista para decidir se o sétimo agrupamento detectado é realmente uma fase ou se trata de algum artefato deve ter por base algum conhecimento prévio a respeito da amostra.

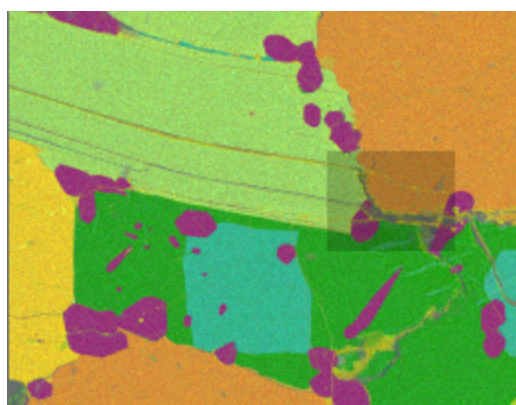
Ainda na análise da mica, na Figura 4.7 é mostrado em detalhe uma região de interesse (ROI - do inglês *Region Of Interest*), onde está concentrada a maior parte dos pixels pertencentes a sétima fase (menor fase). Como é possível notar pelas ROIs aumentadas, a sétima fase também é sugerida na imagem de ACP, mas dificilmente identificada por uma análise visual. Desse modo revela-se a principal vantagem do ADM sobre o ACP, que é a identificação e quantificação dessa fase minoritária, o que iria requerer muita imaginação e processamento adicional na imagem de ACP. Além disso, como será mostrado no segundo conjunto de imagens, a identificação de fases minoritárias pelo método de ACP nem sempre é possível.



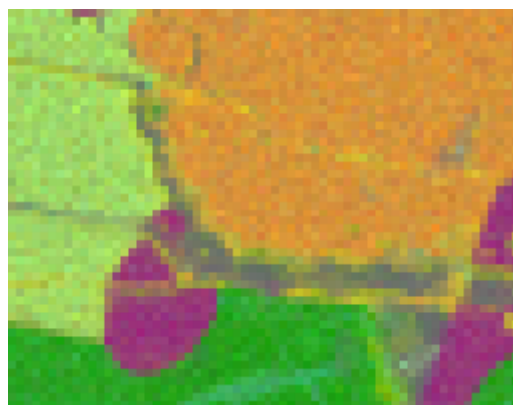
(a) BW= 85, 7 agrupamentos, nenhum agrupamento < 0.5%, 7 fases detectadas.



(b) ROI descada na imagem ao lado.



(c) Imagem resultado do ACP



(d) ROI descada na imagem ao lado.

Figura 4.7: Detalhe da ROI aumentada em 4 vezes.

Finalmente, a Tabela 4.2 mostra as coordenadas dos protótipos das sete fases no es-

paço de características. Como as intensidades dos raios X característicos de cada elemento estão relacionadas com os respectivos valores de concentração, se as imagens forem calibradas, é possível associar esse conjunto de intensidades com a composição química da fase.

Tabela 4.2: Coordenadas dos dos protótipos das fases no espaço de características.

Fase	Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	O	Si	Ti	Área (%)
Fase 1	88	7	32	132	77	37	91	93	65	29.74
Fase 2	46	79	18	51	100	41	72	185	10	23.03
Fase 3	23	7	190	57	18	18	108	13	34	21.49
Fase 4	17	188	6	53	17	21	43	28	6	9
Fase 5	13	6	99	54	24	18	59	12	192	7.95
Fase 6	177	32	3	59	36	67	98	195	7	6.43
Fase 7	5	4	12	11	4	4	9	12	4	2.33

## 4.2 Portezuelo

O conjunto de imagens de Portezuelo é mais difícil de analisar devido às características peculiares da amostra (composição heterogênea, presença de poros, espessura variável das tinta, superfície rugosa), e à estatística muito pobre (devido ao baixo tempo de aquisição das imagens).

### 4.2.1 Método de análise de componentes principais

Como pode ser observado na Figura 4.8, e de acordo com análise por difração de raios X anterior (BERTOLINO et al., 2009), pode-se concluir que a tinta branca tem um alto teor de Ca, o preto é associado à presença de Fe e Mn (mais conteúdo menor de Ca), roxo tem Fe, Mn e Ca e avermelhada está relacionado com Fe e Ca, portanto 4 fases devem ser encontradas. Este é o tipo de metainformação a que nos referimos anteriormente.

A análise ACP aplicada aos mapas de raios X correspondente às linhas K de Al, Si, Fe, Ca e Mn para a amostra de Portezuelo estão apresentados na Tabela 4.3. Neste caso, cerca de 93% da informação está contida nos primeiros três componentes. De acordo com os gráficos de colocação (Figura 4.9) não mais do que duas fases podem ser inferidas, ou claramente distinguidas. A imagem RGB formada pelos três componentes principais mais significativos é mostrada da Figura 4.8.

Tabela 4.3: Coeficientes obtidos pelo método ACP para a amostra de Portezuelo.

		Canal Original				
		Al	Ca	Fe	Si	Ti
PC	Sig. %					
1	51.4	-0.5597	-0.6068	0.2269	0.1577	-0.4921
2	28.9	0.2293	-0.7280	0.0072	0.0175	0.6458
3	12.2	-0.7917	0.1902	-0.2426	-0.1606	0.5025
4	6.0	0.0866	-0.2555	-0.7782	-0.4831	-0.2970
5	1.5	0.0012	-0.0184	0.5329	-0.8460	-0.0042



Figura 4.8: Resultado da aplicação do método ACP sobre o segundo conjunto de imagens (tamanho real:  $128 \times 100$  pixels).

Na Figura 4.9 é mostrado o gráfico de colocalização e suas projeções no espaço de componentes.

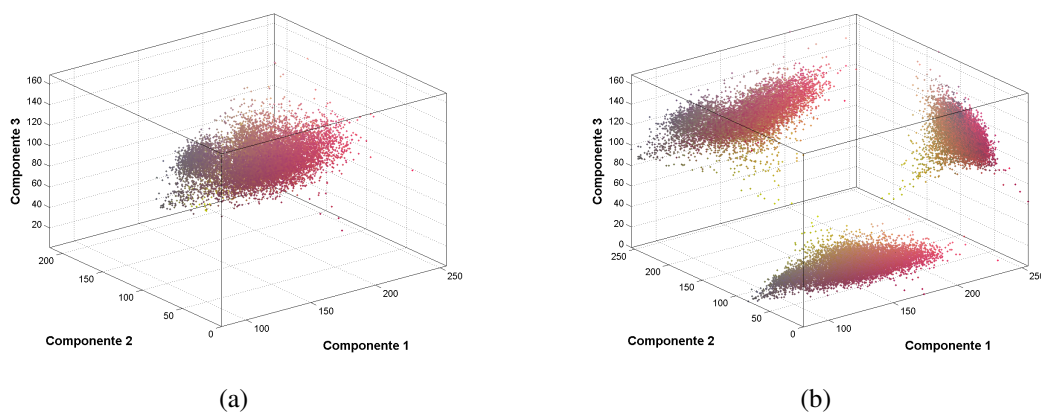
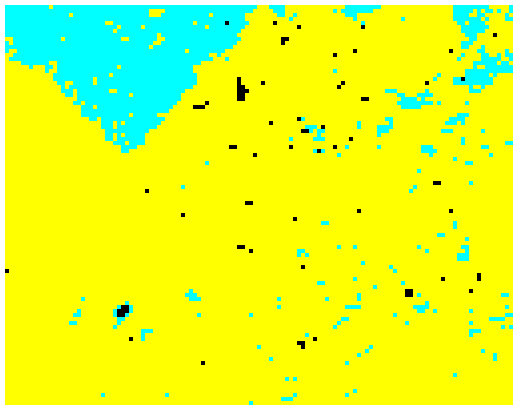


Figura 4.9: Gráfico de colocação dos componentes componente #1 vs componente #2 vs componente #3 da amostra Portezuelo (a) e suas respectivas projeções (b).

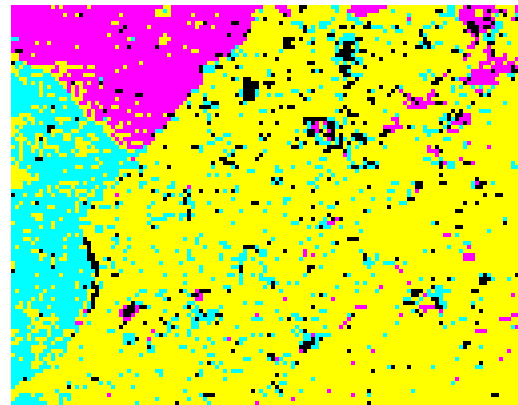
#### 4.2.2 Método de agrupamento por deslocamento para média

No método ADM, para a melhor escolha da BW, quatro fases diferentes são detectadas, conforme é mostrado na Figura 4.10 (C), em que quatro valores de BW são selecionados (10, 12, 12 e 20). A Figura 4.10 também evidencia o caráter ruidoso do conjunto de imagens de Portezuelo, além de um enorme número de artefatos que são contados como agrupamentos, dos quais a maioria são apenas pontos isolados no espaço de características (Figura 4.10 (D)).

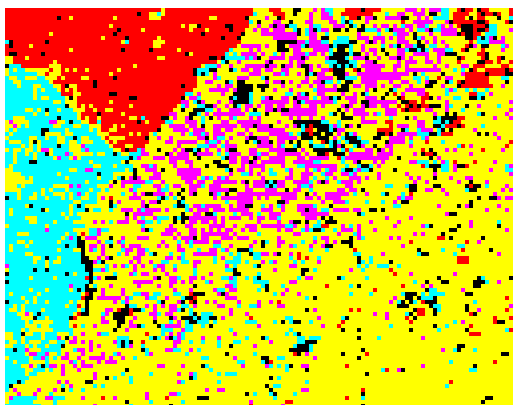




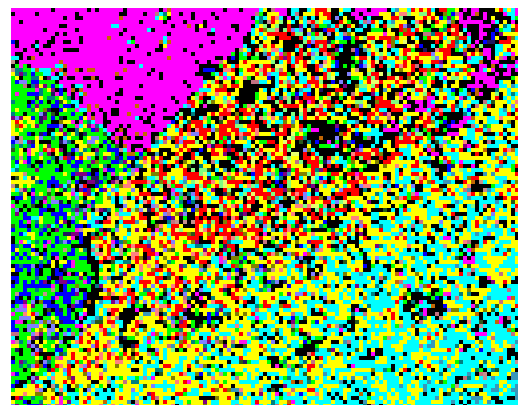
(a)  $BW = 20$  25 agrupamentos, 23 agrupamentos  $< 0.5\%$ .



(b)  $BW = 13$ , 202 agrupamentos, 199 agrupamentos  $< 0.5\%$ .



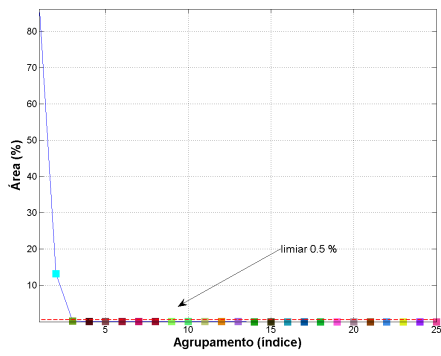
(c)  $BW = 12$ , 303 agrupamentos, 299 agrupamentos  $< 0.5\%$ .



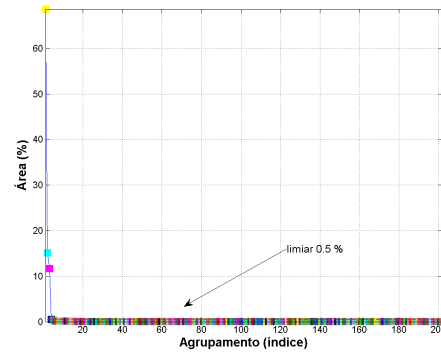
(d)  $BW = 10$ , 733 agrupamentos, 713 agrupamentos  $< 0.5\%$ .

Figura 4.10: Resultados do método ADM para  $BW = 20, 13, 12$  e  $10$ .

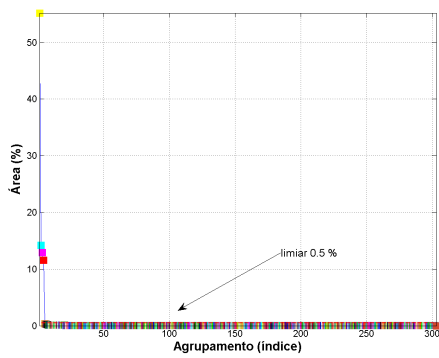
Como no primeiro conjunto de XRM's, as Figuras 4.11 e 4.12 representam, respectivamente, os gráficos de tamanho dos agrupamentos e os mapas de colocação dos componentes principais, utilizando a mesma tabela de cores das fases correspondentes, conforme detectadas pelo método de ADM.



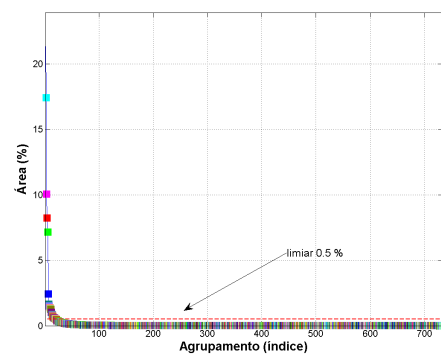
(a)  $BW = 20$ , 25 agrupamentos, 23 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 2 fases detectadas.



(b)  $BW = 13$ , 202 agrupamentos, 199 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 3 fases detectadas.

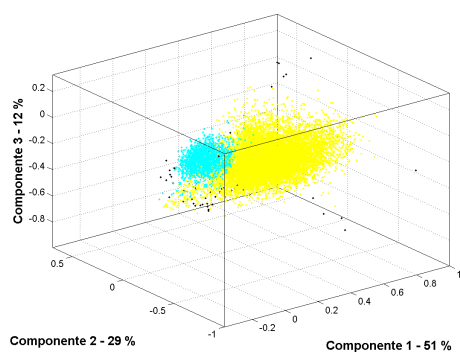


(c)  $BW = 12$ , 303 agrupamentos, 299 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 4 fases detectadas.

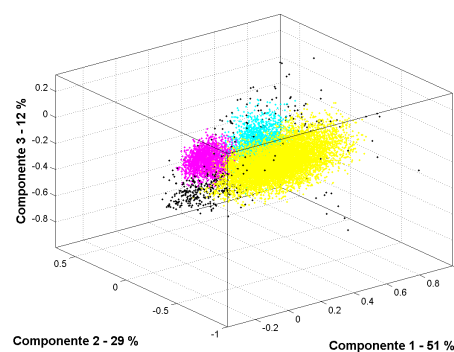


(d)  $BW = 10$ , 733 agrupamentos, 713 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 20 fases detectadas.

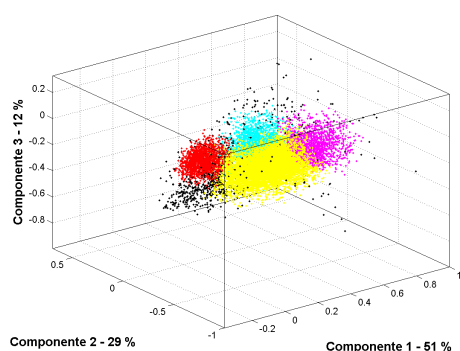
Figura 4.11: Gráficos com o tamanho dos agrupamentos da Figura 4.10.



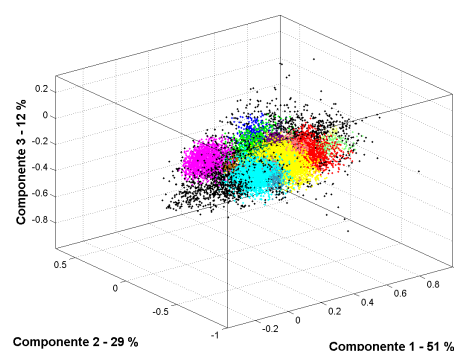
(a)  $BW = 20$ , 25 agrupamentos, 23 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 2 fases detectadas.



(b)  $BW = 13$ , 202 agrupamentos, 199 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 3 fases detectadas.



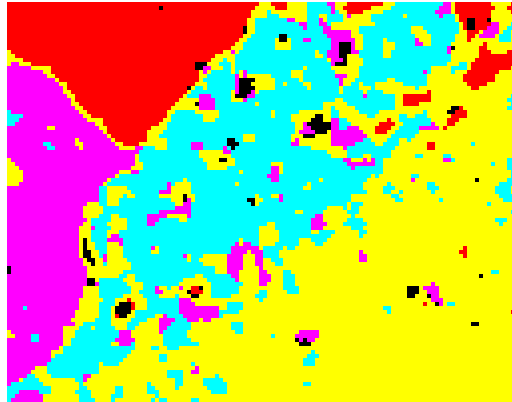
(c)  $BW = 12$ , 303 agrupamentos, 299 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 4 fases detectadas.



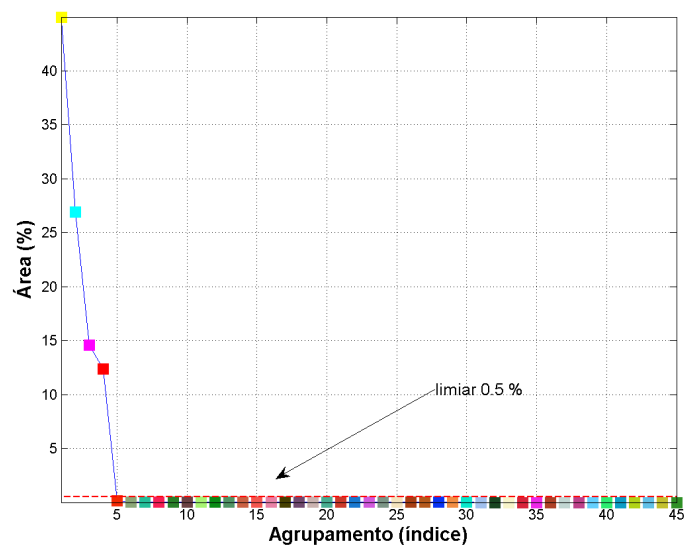
(d)  $BW = 10$ , 733 agrupamentos, 713 agrupamentos  $< 0.5\%$ , 20 fases detectadas.

Figura 4.12: Gráficos de colocação com a tabela de cores dos resultados mostrados na Figura 4.10.

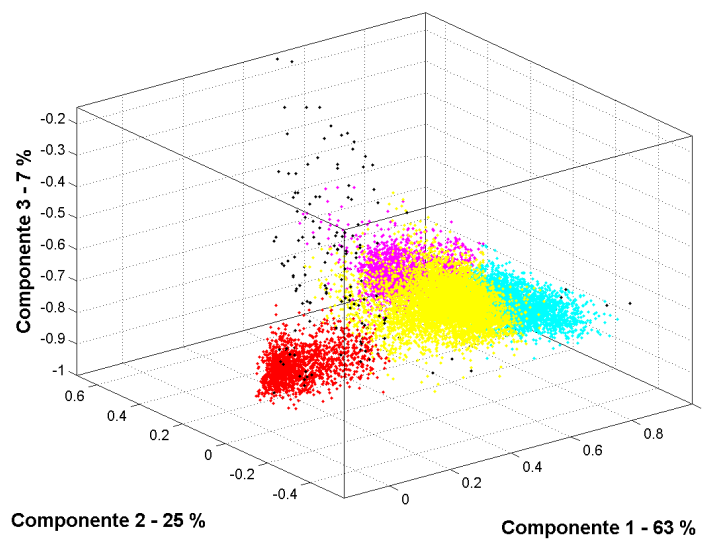
A aplicação de um filtro de suavização diminui significativamente o número de fases falsamente detectadas pelo método ADM. A Figura 4.13 mostra resultados obtido pelo ADM com o tratamento prévio das imagens com um filtro gaussiano de tamanho  $5 \times 5$ .



(a)  $BW = 10$ , 45 agrupamentos, 41 agrupamentos  $< 0.5\%$ .



(b) Tamanho dos agrupamentos.



(c) Gráfico de colocação com cores do ADM.

Figura 4.13: Resultados da ADM com aplicação de filtro gaussiano.

As regiões isoladas atribuídas ao agrupamento correspondente à tinta branca indicam que a superfície foi previamente pintada de branco antes da aplicação das cores preto e vermelho. Na imagem RGB obtidas por ACP não é possível ver esta característica. Outra vantagem do ADM sobre o ACP é que o primeiro delimita perfeitamente as bordas de cada fase.

Finalmente, a Tabela 4.4 mostra as coordenadas dos protótipos das quatro fases no espaço de características.

Tabela 4.4: Coordenadas dos protótipos das fases no espaço de características.

	Al-K	Ca-K	Fe-K	Mn-K	Si-K	Área (%)
Fase						
Fase 1	67	72	17	11	62	55.2
Fase 2	82	44	13	6	82	14.16
Fase 3	81	83	15	9	69	12.88
Fase 4	51	20	40	29	43	11.53

## 4.3 Tópico Relevantes

### 4.3.1 BW, tempo e filtros

Embora a aplicação de filtros de suavização diminua o ruído nas imagens e, consequentemente, o número de agrupamentos para pequenos valores de BW, este procedimento resulta em uma perda em resolução espacial nas imagens. Para efeito comparativo, o efeito da aplicação de um filtro gaussiano de tamanho  $5 \times 5$  sobre os resultados obtidos com todas as *bandwidths* é mostrado na Figura 4.14.

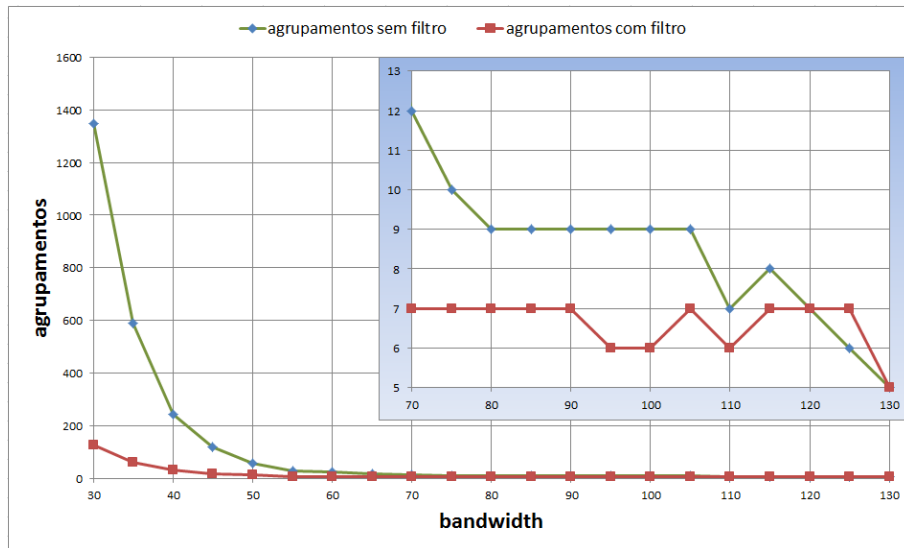
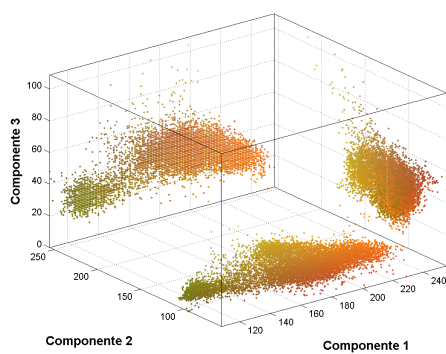


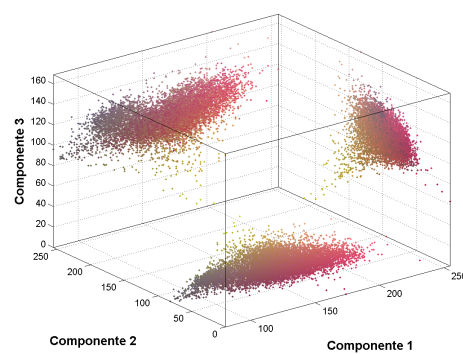
Figura 4.14: Influência da aplicação de filtro de suavização no número de agrupamentos.

É possível notar na Figura 4.14 que a suavização remove os agrupamentos que aparecem devido ao ruído nas imagens originais. Estes são pixels isolados no espaço de características que são contados como agrupamentos para valores pequenos de BW.

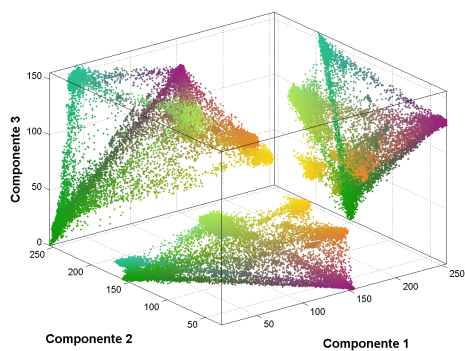
No caso do método ACP ocorre a inclusão e desaparecimento de agrupamentos, de modo que os resultados gerados pelo ACP podem ficar diferentes, como pode ser observado na Figura 4.15.



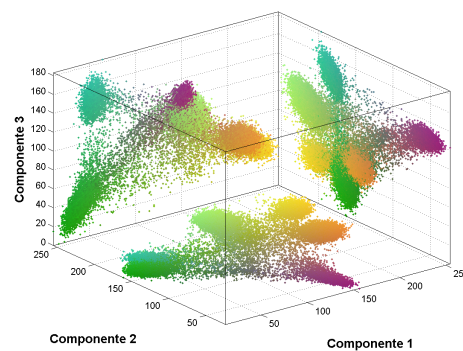
(a) Projeções do mapa de colocalização (Portezuelo) com filtro



(b) Projeções do mapa de colocalização (Portezuelo) sem Filtro



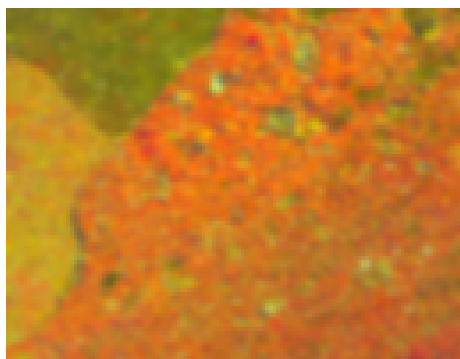
(c) Projeções do mapa de colocalização (mica) com Filtro



(d) Projeções do mapa de colocalização (mica) sem Filtro

Figura 4.15: Efeito da aplicação do filtro gaussiano sobre os mapas de colocalização das componentes principais.

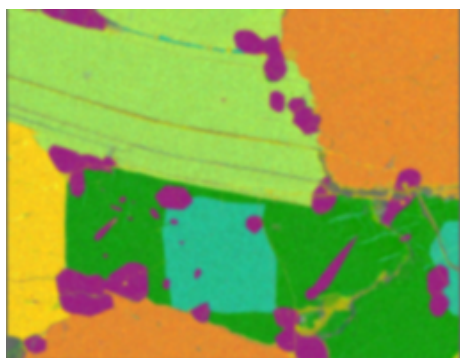
Na imagem de resultado do método ACP não há grandes modificações no que se refere à visualização de agrupamentos, as cores das imagens mudam porque o espaço de componentes é modificado, como pode ser visto na Figura 4.16.



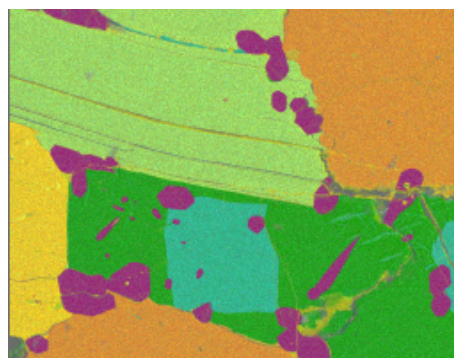
(a) Imagem resultado ACP com filtro



(b) Imagem resultado ACP sem filtro



(c) Imagem resultado ACP com filtro



(d) Imagem resultado ACP sem filtro

Figura 4.16: Efeito da aplicação do filtro gaussiano sobre as imagens de saída do método ACP



A aplicação de filtros de suavização também implica na redução do tempo de execução do algoritmo de ADM, como pode ser observado na Figura 4.17.

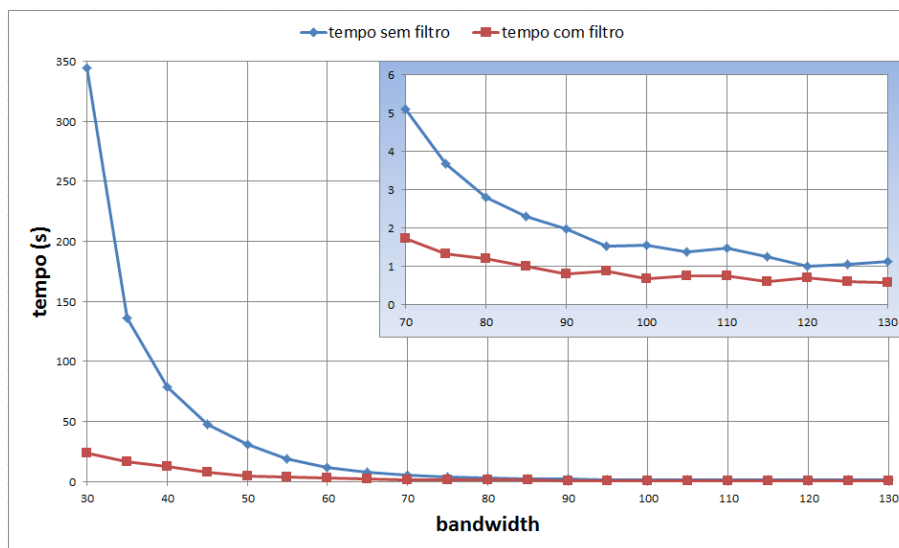


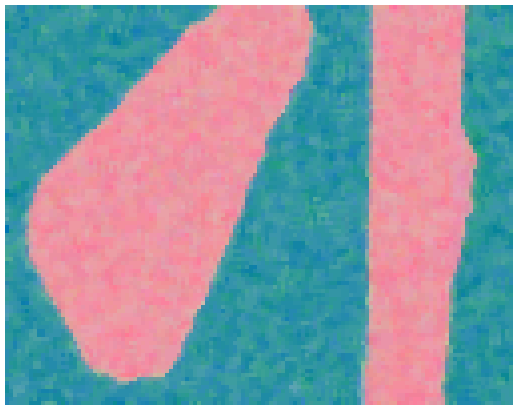
Figura 4.17: Influência da aplicação de filtro de suavização no tempo de execução do algoritmo de ADM.

### 4.3.2 O "arraste" das imagens

O processo de aquisição das imagens é determinante para uma boa análise computacional. No caso estudado neste trabalho um dos problemas comuns do processo de aquisição é o "arraste" nas imagens. Por serem adquiridas em tempos diferentes, as perturbações do ambiente entre uma aquisição e outra podem gerar pequenas perturbações no posicionamento da amostra, fazendo com que o conjunto de imagens estejam levemente deslocadas umas em relação às outras. A consequência deste deslocamento em XRM's analisados por métodos de agrupamentos é o número elevado de artefatos nas fronteiras entre as fases, identificados de agrupamentos adicionais. Este caso pode ser exemplificado pela Figura 4.18 que é um conjunto de três XRM's de rutilo<sup>1</sup> onde os pixels pretos representam essa interface.

---

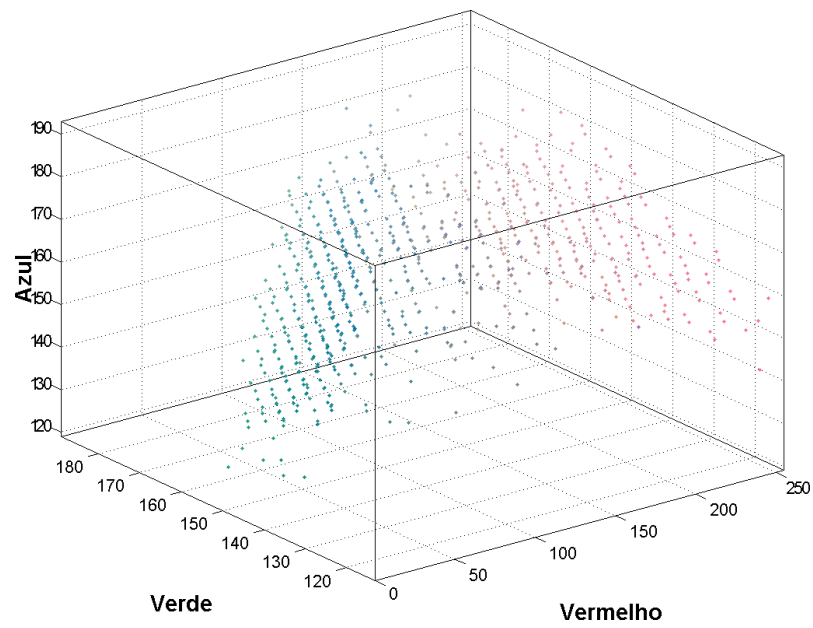
<sup>1</sup>Mineral composto por dióxido de titânio.



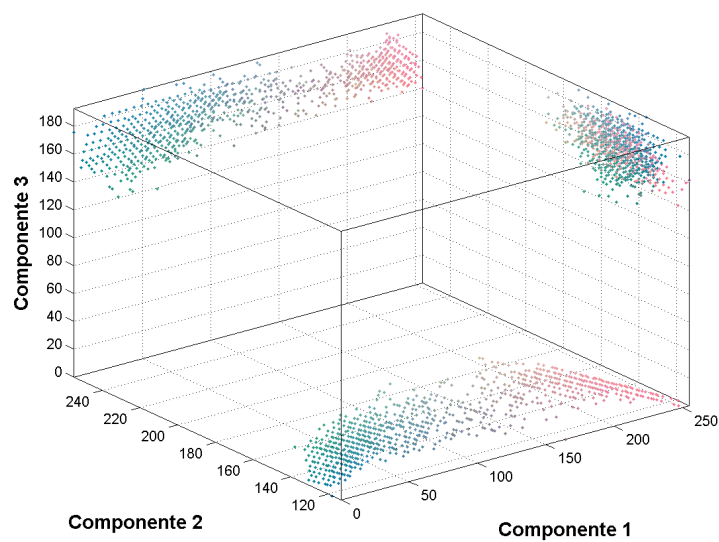
(a) Imagem de ACP



(b) Imagem de ADM



(c) Espaço de cores ACP



(d) Projeção das componentes

Figura 4.18: Imagens de rutilo, mostrando o efeito do "arraste".

A correção deste defeito de aquisição pode ser feito através de translações e rotações com a finalidade de produzir o "casamento" das imagens, o que não é uma tarefa trivial e está fora do escopo deste trabalho.

### **4.3.3 Métrica para estimativa de semelhança de padrões**

A escolha da métrica é importante quando algoritmos de análise de agrupamentos são utilizados. Neste trabalho foi usada a distância Euclidiana como medida de proximidade entre os vetores  $d_i$ . Com isso, admite-se implicitamente que todas as suas componentes são igualmente importantes. No entanto, cabe discutir e testar outras métricas, tais como, por exemplo, a medida de distância de Mahalanobis, bastante utilizada em estatística multivariada. Esta distância distingue-se da Euclidiana por levar em conta as correlações do conjunto de dados, e por ser invariante às dimensões físicas das características adotadas escala. No contexto deste trabalho a utilização de uma métrica deste tipo permitiria a inclusão da imagem de elétrons secundários ao conjuntos dos XRM's fornecendo informação adicional para a classificação.

## 5 CONCLUSÕES

Neste trabalho o método de agrupamento por deslocamento para a média foi avaliado como ferramenta auxiliar na classificação de fases de materiais heterogêneos por análise de imagens hiperspectrais de raios X característicos em comparação com o método de análise de componentes principais.

Com este objetivo, os métodos de ADM e ACP foram implementados de modo que admitissem como entrada imagens hiperspectrais e então aplicados para determinar o número e a distribuição espacial das fases em conjuntos de mapas de raios X característicos adquiridos de duas amostras diferentes, uma geológica (Russ (RUSS, 2006)) e outra arqueológica (Bertolino (BERTOLINO et al., 2009)).

Ainda que os resultados do ADM dependam da escolha de um parâmetro (BW), este problema pode ser resolvido com o auxílio de heurísticas que tem por base a meta-informação agregada pelo usuário especialista da área de aplicação. Assim, por exemplo, a detecção de um grande número de agrupamentos muito pequenos, ou mesmo unitário, de pixels, é entendida pelo especialista em microanálise por EDS como resultado de imperfeições da superfície, fronteiras entre fases e ruído no processo de aquisição. Usando esta meta-informação, adota-se a heurística de desprezar agrupamentos menores do que um certo tamanho, determinado pelas características da amostra e condições de aquisição dos XRM. Por outro lado, a ocorrência de uma faixa de valores de BW para a qual o número e a distribuição de fases quase não varia pode ser usada pelo especialista para orientar a sua análise.

Entre as vantagens no uso desta técnica, quando comparada com o ACP, destacamos que o ADM tem como saída imagens segmentadas das fases presentes, com as respectivas frações de área e composições espectrais médias (e variância) identificadas, enquanto a saída do ACP é uma imagem não segmentada e, portanto, não fornece nem frações de área

nem composições espectrais médias. Por outro lado mesmo depois de pós-processadas para segmentar as fases, as imagens obtidas por ACP não informam sobre a composição espectral das fases detectadas.

Para o conjunto de imagens da mica, o método ADM mostrou estar de acordo com a análise feita por Russ (RUSS, 2006) através do método ACP. Além disso, uma fase minoritária não identificada pelo ACP foi revelada pelo ADM. Para o conjunto de imagens da amostra arqueológica, a análise realizada por ADM permitiu a classificação dos pixels em correspondência com as cores dos pigmentos presentes na superfície da amostra. Em contraste com o conjunto anterior, os mapas de colocação dos componentes principais não forneceram qualquer informação relevante sobre as cores, principalmente devido às incertezas associadas a baixa contagem utilizada na aquisição dos XRM's.

O estudo da amostra arqueológica mostrou que, o método de ADM aplicado à análise de imagens hiperespectrais de XRM's promete ser uma ferramenta útil para pesquisa exploratória, permitindo a classificação e auxiliando na identificação de fases em amostras desconhecidas. Se os XRM's forem calibrados, o método pode inclusive torna-se capaz de fornecer a composição mineralógica de cada uma das fases apresentadas na amostra.

Finalmente, os princípios e as idéias apresentados neste trabalho, para o tratamento de imagens hiperespectrais, os quais foram aplicados aos XRM's, são também aplicáveis a conjuntos combinados de dados obtidos por diferentes técnicas, i.e, combinações de imagens produzidas por diferentes técnicas, que utilizam diferentes tipos de sinais (MACRAE et al., 2005) (COLPAN; DING, 2006) ou adquiridas em diferentes condições de imageamento (LEBICHOT; KRIER; PIRARD, 2007) (COSTA et al., 2007). Independentemente da origem física do conteúdo da informação dos canais, bandas ou componentes de uma imagem, melhores resultados são esperados quando informações complementares são obtidas por meio de adição de uma nova dimensão no espaço de características, respeitando, é claro, os limites impostos pela bem conhecida "maldição da dimensionalidade"<sup>1</sup>.

## 5.1 Trabalhos Futuros

As propostas para o desenvolvimento de trabalhos futuros dependem da integração de conhecimentos em microanálise e computação. Assim, a integração do método ADM

---

<sup>1</sup>A maldição da dimensionalidade refere-se ao problema do crescimento exponencial do volume que ocorre quando aumenta a dimensão de um espaço matemático. Em consequência, os pontos amostrais dispersam-se, dificultando a identificação de aglomerados.

a uma base de dados é um problema de computação que depende do desenvolvimento prévio da base de dados por especialistas em microanálise e que pode permitir que XRM's calibrados sejam usados para a identificação automática de fases.

Também devem merecer atenção, o estudo sobre a possibilidade de desenvolver um método automático para a escolha da BW e a implementação e teste de outras métricas (diferentes da euclidiana) que atribuam importância diferente às diferenças de intensidade dos diversos componentes espectrais. Também aqui, a medida desta importância deve ter por base o conhecimento sobre o processo de formação dos XRM's, que é de domínio do especialista da área de aplicação.

Temas de domínio exclusivo da computação estariam relacionados com a implementação paralelizada do algoritmo de ADM e com o desenvolvimento de métodos de visualização de baixo custo computacional.

## REFERÊNCIAS

ANIL, K.; JAIN. Data clustering: 50 years beyond k-means. **Pattern Recognition Letters**, [S.l.], v.31, n.8, p.651 – 666, 2010.

BERTOLINO, S. R.; GALVÁN JOSA, V.; CARRERAS, A. C.; LAGUENS, A.; FUENTE, G. de la; RIVEROS, J. A. X-ray techniques applied to surface paintings of ceramic pottery pieces from Aguada Culture (Catamarca, Argentina). **X-Ray Spectrometry**, [S.l.], v.38, n.2, p.95 – 102, 2009.

BO, S.; DING, L.; LI, H.; DI, F.; ZHU, C. Mean shift-based clustering analysis of multispectral remote sensing imagery. **Int. J. Remote Sens.**, Bristol, PA, USA, v.30, p.817 – 827, January 2009.

CELLIER, F.; ORIOT, H.; NICOLAS, J. Introduction of the Mean Shift algorithm in SAR imagery : application to shadow extraction. in global developments in environmental earth observation. In: ANNUAL SYMPOSIUM OF THE EUROPEAN ASSOCIATION OF REMOTE SENSING LABORATORIES, 25., 2005. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2005.

CHENAOUA, K.; BOURIDANE, A. A mean shift and Non-negative PCA based color image segmentation approach. In: ISSPA, 2010. **Anais...** IEEE, 2010. p.582 – 585.

CHENG, Y. Mean shift, mode seeking, and clustering. **IEEE Trans Pattern Anal Machine Intell**, [S.l.], v.17, n.8, p.790 – 799, 1995.

COLPAN, M.; DING, Q. Decision Tree Induction on Hyper-Spectral Cement Images. In: INTERNATIONAL JOURNAL OF COMPUTATIONAL INTELLIGENCE, 2006. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2006.

COMANICIU, D. An Algorithm for Data-Driven Bandwidth Selection. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, [S.l.], v.25, n.2, p.281 – 288, 2003.



COMANICIU, D.; MEER, P. Robust analysis of feature spaces: color image segmentation. In: CONFERENCE ON COMPUTER VISION AND PATTERN RECOGNITION (CVPR 97), 1997., 1997. **Proceedings...** IEEE Computer Society, 1997. p.750. (CVPR 97).

COMANICIU, D.; MEER, P. Mean shift: a robust approach toward feature space analysis. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, Los Alamitos, CA, USA, v.24, n.5, p.603 – 619, May 2002.

COSTA, J. Borges da; ROSA, M.; TAKEHARA, L.; ORNELLAS, M.; VASCONCELLOS, M. Grain Segmentation of Hematite-Rich Ore by Multivariate Analysis of Polarized Light Image Stacks. In: VIII SIMPÓSIO BRASILEIRO DE MINÉRIO DE FERRO, 2007. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2007.

FABRA, M.; BERTOLINO, S. R. Provenance and ceramic technology of pot sherds from ancient Andean cultures at the Ambato valley, Argentina. **Applied Clay Science**, [S.l.], v.24, n.1 - 2, p.21 – 34, 2003.

FINKSTON, B. **Mean Shift Clustering**. 2010.

FUKUNAGA, K.; HOSTETLER, L. The estimation of the gradient of a density function, with applications in pattern recognition. , [S.l.], v.21, n.1, p.32 – 40, Jan. 1975.

GERNERT, U. Comparing the Si(Li)-detector and the silicon drift detector (SDD) using EDX in SEM. In: EUROPEAN MICROSCOPY CONGRESS, 14., 2008. **Anais...** Springer Berlin Heidelberg, 2008. p.697 – 698.

GOETZE, J.; MAGNUS, M. Quantitative determination of mineral abundance in geological samples using combined cathodoluminescence microscopy and image analysis. **European Journal of Mineralogy**, [S.l.], v.9, n.6, p.1207 – 1215, 1997.

HAECKER, P. S. C.; REMOND, S.; BENTZ, D. SEM/X-ray Imaging of Cement-Based Materials. **Proceedings of the 7th Euroseminar on Microscopy Applied to Building Materials**, [S.l.], p.457 – 466, 1999.

**A Primer of Multivariate Statistics**. 3.ed. [S.l.]: Lawrence Erlbaum, 2001.

HUMPHREYS, F. J. Review Grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction. **Journal of Materials Science**, [S.l.], v.36, p.3833 – 3854, 2001.

INTEL, C. 2010.

**Principal Component Analysis**. 2nd ed..ed. [S.l.]: Springer, 2002.

KOTULA, P. Spectral imaging: towards quantitative x-ray microanalysis. **Microscopy and Microanalysis**, [S.l.], v.8, p.440 – 441, 2002.

KOTULA, P. G.; KEENAN, M. R. Application of multivariate statistical analysis to STEM X-ray spectral images: interfacial analysis in microelectronics. **Microscopy and Microanalysis**, [S.l.], v.12, n.6, p.538 – 544, 2006.

KOTULA, P. G.; KEENAN, M. R.; MICHAEL, J. R. Automated Analysis of SEM X-Ray Spectral Images: a powerful new microanalysis tool. **Microscopy and Microanalysis**, [S.l.], v.09, p.1 – 17, 2003.

LEBICHOT, S.; KRIER, W.; PIRARD, E. Particle texture analysis using polarized light imaging and grey level intercepts. **International Journal of Mineral Processing**, [S.l.], v.84, n.1 - 4, p.299 – 309, 2007.

LEE, S.; LEE, C. Unsupervised segmentation for hyperspectral images using mean shift segmentation. In: SATELLITE DATA COMPRESSION, COMMUNICATIONS, AND PROCESSING VI. PROCEEDINGS OF THE SPIE, 2010. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2010.

LEONIDAS, F. **Principal Components Based Techniques for Hyperspectral Image Data**. 2004. Tese (Doutorado) — Naval Postgraduate School.

MACRAE, C. M.; WILSON, N. C.; BRUGGER, J. Quantitative cathodoluminescence mapping with application to a Kalgoorlie scheelite. **Microsc Microanal**, [S.l.], v.15, n.3, p.222 – 230, Jun 2009.

MACRAE, C. M.; WILSON, N. C.; JOHNSON, S. A.; PHILLIPS, P. L.; OTSUKI, M. Hyperspectral mapping-combining cathodoluminescence and X-ray collection in an electron microprobe. **Microscopy Research and Technique**, [S.l.], v.67, n.5, p.271 – 277, 2005.

MATLAB. **The MathWorks Inc**. 2009. version R2009a.

NVIDIA, C. 2010.

PIRARD, E. Multispectral imaging of ore minerals in optical microscopy. **Mineralogical Magazine**, [S.l.], v.68, n.2, p.323 – 333, 2004.

PIRARD, E.; LEBICHOT, S. **Automated identification of iron oxides under the optical microscope**. 2005. Université de Liège, Liège, Belgium, Mineral Georesources and Geo-Imaging Group, GeomaC Department.

RAMESH, V.; MEER, P.; COMANICIU, D. The Variable Bandwidth Mean Shift and Data-Driven Scale Selection. In: EIGHTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTER VISION, 2001. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2001. p.438 – 445.

**Electron microprobe analysis and scanning electron microscopy in geology**. 2th Ed..ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.

ROUSSEEUW, P. J.; BRANDEN, K. V.; HUBERT, M. ROBPCA: a new approach to robust principal component analysis. **Technometrics**, [S.l.], v.47, p.64 – 79, 2005.

RUSS, J. **The Image Processing Handbook**. 5th Ed..ed. [S.l.]: Boca Raton, FL., 2006.

STORK, C. L.; KEENAN, M. R. Advantages of clustering in the phase classification of hyperspectral materials images. **Microscopy and Microanalysis**, [S.l.], v.16, n.6, p.810 – 820, 2010.

XIE, Y.-L.; WANG, J.-H.; LIANG, Y.-Z.; SUN, L.-X.; SONG, X.-H.; YU, R.-Q. Robust principal component analysis by projection pursuit. **Journal of Chemometrics**, [S.l.], v.7, n.6, p.527 – 541, 1993.