

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2413492

基于编码器-解码器卷积神经网络的 原子力显微镜针尖估计*

雷艺彤, 陈宇航

(中国科学技术大学工程科学学院精密机械与精密仪器系 合肥 230027)

摘要:原子力显微镜 (AFM) 探针针尖形貌尺寸是表面微纳结构精确测量、局域物理化学特性准确表征中的关键参数。基于数学形态学的传统方法, 针尖盲估计方法可以仅根据扫描图像来评估针尖形状尺寸, 但其往往能给出的是针尖尺寸上限值并非真正的针尖尺寸。而且此种方法受扫描噪声影响较大, 获得的尺寸精度难以完全满足需求。针对该问题, 基于编码器-解码器架构的卷积神经网络, 进行了 AFM 针尖形貌尺寸的稳定、准确的估计研究。在网络的监督学习训练中, 以包含不同半径和数量的纳米颗粒结构, 应用数学形态学膨胀算法模拟一系列设定半径针尖的扫描图像作为训练数据集, 并以平均绝对误差作为损失函数来更新网络参数。结果表明, 卷积神经网络模型对于针尖半径包含在训练集范围内的探针所得扫描图像具备准确预测针尖尺寸的能力。但是当扫描图像的对应针尖尺寸超出该范围时, 预测的准确性会降低。此外, 通过引入叠加噪声的训练数据, 模型的预测能力显著提高, 可以准确预测含噪声的扫描图像所用探针的针尖尺寸, 且无需额外去噪处理。随后在实际 AFM 扫描图像上的测试结果证实了该方法预测针尖形貌尺寸的有效性。最后通过模拟和实验数据验证了同样的方法还可以用在受针尖效应影响的图像处理上。

关键词: 卷积神经网络; 监督学习; 原子力显微镜; 针尖形状预测; 深度学习; 图像处理

中图分类号: TP23 TH742 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 460.40

Tip estimation of atomic force microscopy based on encoder-decoder convolutional neural networks

Lei Yitong, Chen Yuhang

(Department of Precision Machinery and Precision Instruments, School of Engineering Science,
University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: The geometry and dimensions of atomic force microscopy (AFM) probe tips are critical parameters for precise measurement of surface micro-nanostructures and accurate characterization of local physicochemical properties. While conventional blind tip estimation methods based on mathematical morphology can evaluate tip geometry solely from scanning images, they typically provide upper-bound estimates rather than true tip dimensions and suffer from significant sensitivity to scanning noise, resulting in insufficient measurement accuracy. To overcome these limitations, this study proposes a robust convolutional neural network (CNN) with an encoder-decoder architecture for stable and accurate AFM tip characterization. During supervised learning, a training dataset was generated by simulating scanning images of nanoparticle structures with varying radii and densities through mathematical morphology dilation operations, representing tips with predefined dimensions. The network parameters were optimized using mean absolute error as the loss function. Experimental results demonstrate that the CNN model achieves accurate tip radius predictions for scanning images when the tip dimensions fall within the training range. However, the model exhibits reduced accuracy for tip sizes outside the training distribution. Notably, the model's predictive capability is significantly enhanced through noise-augmented training data, enabling precise tip dimension estimation from noisy scanning images without requiring additional denoising procedures. Validation using actual AFM scanning images confirms the method's effectiveness in practical applications. Furthermore, simulations and experimental data verify the method's extensibility for processing tip-effect-distorted images.

Keywords: convolutional neural network; supervised learning; atomic force microscopy; tip estimation; deep learning; image processing

0 引言

原子力显微镜(atomic force microscopy, AFM)以其纳米甚至亚原子量级的高空间分辨率^[1]、柔性的工作环境和简便的样品制备等特色在表面结构微纳分析^[2]、各种物理/化学特性的表征中发挥着重要的作用^[3-4],成为纳米科技中的重要工具之一。AFM 探针是核心的元件,其结构包括单端固支的微悬臂梁和自由端集成的纳米尺度针尖。扫描成像时,检测微悬臂梁变形来感知针尖和样品间的相互作用力大小并反馈控制两者间距。因而,可以看出扫描图像是样品表面结构和探针针尖共同作用的结果。由于实际 AFM 探针针尖具有特定的形状和有限尺寸,测得的表面形貌图像中通常耦合有针尖形貌信息^[5-8],影响表面微纳结构的准确测量^[9]。特别地,当表面局域曲率或锐度与针尖的曲率或锐度相当或更高时,这种针尖膨胀效应体现得更为显著^[10]。除表面测量以外,针尖形状尺寸还与众多相互作用力相关,如范德华力、接触力和静电力等等,因而在表面局域物理、化学特性表征中,探针针尖也是其中一个重要因素^[11-12]。

为从已获得的扫描图像中减少探针针尖的耦合效应影响,可采用基于数学形态学的算法。若已知针尖形状尺寸,可由扫描图像和针尖形貌间的腐蚀算法操作来重建近似样品的实际表面^[13-15]。因此,为进行高精度表面纳米结构的分析和局域样品物理、化学特性的表征,准确获得针尖形状尺寸是其中至关重要的基础。

目前,有3类方法可以获得针尖形状^[8-16]。第1类方法是使用高分辨扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)或透射电子显微镜(transmission electron microscope, TEM)直接成像。然而,SEM和TEM都只提供探针针尖的二维投影,而其三维形貌较难准确获得。此外,SEM/TEM的观测难以原位适用,而通常只在探针使用前后来进行尺寸测量。但是,由于AFM测量过程中纳米针尖会产生磨损,在AFM实验之前或之后所确定的针尖形状不一定能准确体现扫描过程中的实际针尖。第2类方法是根据针尖和样品间结构的相互耦合作用建模分析,结合先验已知的样品结构和扫描图像来估计针尖形状^[17-19]。Fuchigami等^[20]提出了一种通过将假设的针尖形状生成的仿真AFM图像与真实探针实际扫描得到的AFM图像比较来估计针尖形状的方法。他们假设针尖形状是半球(半径 r)和圆锥体(半角 θ)的组合,估计这两个几何参数从而来近似针尖形状。然而,该方法仅分析具有简单理想几何结构的针尖和样品,其形状假设限制了在复杂针尖和样品结构场合中的应用。

第3类方法基于数学形态学,仅根据AFM扫描图像分析来估计针尖形状,而无需任何样品和针尖形状的先

验知识。1997年Villarrubia^[13]提出的盲估计(blind tip reconstruction, BTR)是一种从AFM图像中估计任意针尖形状的经典方法。该方法通过对扫描图像进行反向处理,结合腐蚀和膨胀操作并去除噪声和伪影。首先进行腐蚀操作去除不必要的细节,再通过膨胀操作恢复针尖形状的关键特征。这个过程通过多次迭代优化,最终得到接近真实的针尖形状。虽然BTR方法仅需要扫描图像,但是该算法容易受到噪声的影响,或者难以确定噪声平滑时的阈值参数。而这是一些应用场合中图像分析的关键,例如高速AFM(high-speed atomic force microscopy, HS-AFM),因为HS-AFM的快速扫描通常比常规AFM更容易产生显著噪声影响^[21-23]。

近二十年里,已经提出了一些改进或新方法来更好地估计针尖形状。Ruggeri等^[16]提出了BTR算法中AFM图像噪声阈值的参数调整方法,从而更准确地评估针尖形状。Qian等^[19]将Fuchigami等^[20]提出的半球和圆锥结合的针尖近似简化为标准AFM针尖。Tan等^[24]提出了一种系统的方法来确定AFM图像噪声的阈值参数。通过线性运算符近似数学形态运算符,Tranchida等^[25]提出了一种基于期望最大化的重建方法,其中针尖形状设置为隐藏变量。

尽管有这些进展,从原理上基于数学形态学的AFM针尖BTR容易受到噪声影响,很难准确地分辨扫描图像中精细结构是由样品实际几何形状还是测量噪声所导致^[26]。在BTR算法中,一旦这些精细的突变特征被识别为实际的表面形貌,探针针尖就会被“雕刻”以与所测精细结构相吻合。这会导致重建出异常尖锐的针尖。此外,BTR算法较为耗时。为了克服这些问题,Matsunaga等^[27]提出了一种基于机器学习的BTR方法,称为端到端可微BTR,即引入了一个包含正则化项的损失函数,以防止对噪声的过度拟合,并通过深度学习框架中开发的自动微分和反向传播来优化针尖形状尺寸。然而该方法的计算时间较长,依赖GPU算力,并且该算法中的腐蚀操作与针尖的真实形状尺寸关系密切。如果针尖的半角较大(如 $>30^\circ$),腐蚀操作的精度会迅速下降。克服这个问题的一个可能方案是使用卷积神经网络(convolutional neural networks, CNN)来替代腐蚀重建过程。

针对BTR的上述问题,为准确估计AFM探针针尖,在本研究中,使用监督学习和基于编码器(encoder)-解码器(decoder)的CNN,结合深度学习来进行AFM扫描图像过程中针尖形状的预测。在该方法中,采用叠加噪声的模拟AFM图像数据进行CNN训练,即可避免噪声影响而预测出准确的针尖形状尺寸。通过模拟仿真具有不同半径的纳米颗粒并叠加了多种类型噪声的扫描图像,以及实际AFM实验来验证方法的准确性和鲁棒性。

1 针尖估计原理

主要通过模拟不同针尖半径下的纳米颗粒扫描图像来对模型进行训练,具体过程如图 1 所示。方法和原理分为以下两部分:模拟针尖效应的膨胀算法以及基于编码器-解码器的卷积神经网络。

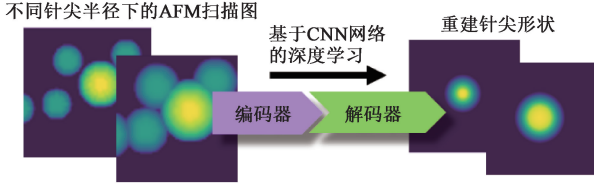


图 1 卷积神经网络监督学习方法估计 AFM 针尖形状尺寸

Fig. 1 Illustration of estimating AFM tip shape size using convolutional neural network supervised learning method

1.1 模拟针尖效应的膨胀算法

为方便进行 CNN 的训练,需要批量的不同针尖和相应扫描图像,而这在实际实验中较难获得。为此,首先需要模拟不同针尖扫描时的 AFM 图像,以获得训练数据集。在样品和针尖两者形貌已知时,AFM 扫描图像的模拟可以采用经典的膨胀算法进行^[13]。如图 2 所示,设 $i(x,y)$ 为扫描图像, $s(x,y)$ 为样品表面, $t(x,y)$ 为针尖轮廓。在任一扫描位置 (x',y') 时,平移的针尖为 $t(x-x',y-y')$,则 (x',y') 处的扫描图像高度值可以用式(1)表示。

$$i(x',y') = -\min_{(x,y)} [t(x-x',y-y') - s(x,y)] \quad (1)$$

对式(1)作变量代换,设:

$$x = x' - u, y = y' - v \quad (2)$$

则式(1)可改写为:

$$i(x',y') = \max_{(u,v)} [s(x'-u, y'-v) - t(-u, -v)] \quad (3)$$

记 $p(x,y) = -t(-x, -y)$, 则式(3)变为:

$$i(x,y) = \max_{(u,v)} [s(x-u, y-v) + p(u,v)] \quad (4)$$

记 I, S 和 P 是函数 i, s 和 p 相应轮廓曲面所围成的元素集合,则式(4)可以简化为 $I = S \oplus P$, 其中“ \oplus ”为数学形态学中的膨胀算符。由此,样品实际结构和针尖形貌间的膨胀操作即可模拟相应扫描的 AFM 图像,如图 2 所示。该模拟方式仅考虑了样品和针尖间结构的刚性相互作用,而忽略了可能存在的结构变形和其他如反馈控制等参数设置引起的扫描图像误差。

1.2 基于编码器-解码器的卷积神经网络

神经网络中的编码器可以表示为一个函数 f_{enc} , 其将输入图像 u 转换为潜在空间中的表示 $w; w = f_{enc}(u; \theta_{enc})$, 其中 θ_{enc} 是编码器的参数^[28-29]。解码器是另一个函数 f_{dec} , 它将潜在表示 w 转换回图像空间 $\hat{v}; \hat{v} = f_{dec}(w; \theta_{dec})$,

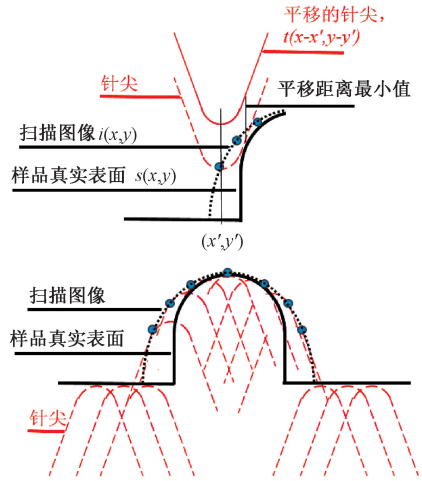


图 2 针尖和样品结构间相互作用的膨胀算法原理

Fig. 2 Principle of the dilation algorithm for the geometric coupling of the tip and the sample

其中 θ_{dec} 是解码器的参数。整个网络的目标是最小化原始图像 v 和生成图像 \hat{v} 之间的损失函数 $L: L(v, \hat{v})$ 。

假设有输入图像 u , 目标是生成针尖形状图像 v 。可以定义以下过程:

编码:将输入图像 u 映射到潜在空间表示 $w; w = f_{enc}(u; \theta_{enc})$ 。

映射:在潜在空间中,通过某种映射操作(通常由网络学习得出)将 w 映射到目标领域的潜在表示 $w'; w' = g(w)$, 其中 g 是网络学习到的映射函数。

解码:将映射后的潜在表示 w' 解码为输出图像 $\hat{v}; \hat{v} = f_{dec}(w'; \theta_{dec})$ 。

为了优化网络,使用平均绝对误差(mean absolute error, MAE) L 作为损失函数。

$$L(v, \hat{v}) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N |v_q - \hat{v}_q| \quad (5)$$

式中: N 为图像像素总数; q 表示图像的第 q 个像素; v_q 表示原始图像 v 的第 q 个像素的像素值; \hat{v}_q 表示生成图像 \hat{v} 的第 q 个像素的像素值。

在图像处理方面,CNN 有优势显著^[30-32]。一方面,CNN 具有空间不变性与局部感知能力,通过卷积层的局部感受野(输出对应原始输入的映射区域),可以有效捕捉图像的局部特征。不同的卷积核能够检测出图像中的不同局部特征,如边缘、角点和纹理等。这种特性允许 CNN 在图像处理上具有空间不变性,即使图像有所移动或轻微改变,CNN 仍能准确识别出其特征。另一方面,CNN 能够进行自动特征提取。通过多层卷积层的堆叠,CNN 可以从低级特征(如边缘和纹理)逐渐学习到高级特征(如形状和对象类别),大大简化了图像处理任务中的特征工程,而不再需要手工设计特征提取算法。

为了从目标检测图像中提取针尖形状信息,由前述分析,本研究选择采用 CNN 作为神经网络结构。基于 CNN 的编码器-解码器结构构架为:编码器由卷积层(convolution)和池化层(max pooling)组成;解码器主要由反卷积层(transposed convolution)组成。卷积层的作用是利用卷积核对输入做卷积操作,得到特征图,可以认为是做特征映射。池化层的作用是降低特征图的空间维度。反卷积层的作用是将特征图的空间维度恢复到原始输入图像的大小。各层的基本参数主要有卷积核(filter),用于确定输出特征图的通道数和形状,此外还有卷积核在垂直和水平方向上的步长(strides)^[33]。

2 基于 CNN 监督学习的针尖估计方法

为了实现监督学习,首先准备了批量模拟 AFM 扫描图像(64 pixels×64 pixels,250 nm×250 nm)。这些图像由半径不同(20~40 nm)、数目随机(不超过 15)、位置随机的纳米颗粒样品组成。与此同时,依据半径大小(其余锥角等形状参数一致)模拟 AFM 针尖。利用膨胀算法,由颗粒和针尖形貌间的膨胀算符操作来仿真该半径针尖扫描的 AFM 图像,如图 3(a)所示。准备 4 组不同针尖半径(10、16、21 和 27 nm)的 AFM 图像作为训练使用的

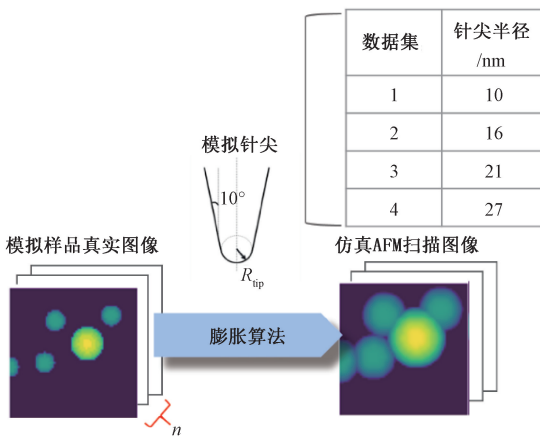
输入图像,这 4 组数据集将被同时囊括在训练集中,见图 3(b)。此外,AFM 图像中可叠加不同图像噪声,以期使模型具有良好的抗噪能力和鲁棒性。训练使用的输出图像则是输入的仿真 AFM 图像对应的针尖形状图像。为了保留精确表面轮廓分析的真实高度值,未对训练数据集应用任何预处理步骤,例如归一化或标准化。

数据集准备完毕后,搭建一个 13 层的 CNN 结构。其中,编码器由卷积层和池化层组成,共 8 层;解码器由 5 层反卷积层组成。网络层数、各层参数如表 1 所列。CNN 的搭建和训练使用 Python 编写,调用 TensorFlow 中的 Keras 库,基于显卡 NVIDIA GeForce RTX 2050 运行。

表 1 卷积神经网络层数、各层参数

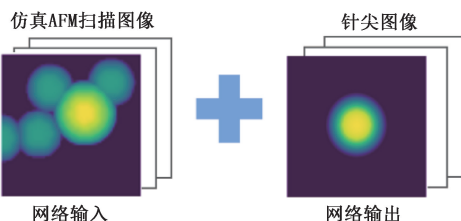
Table 1 Number of layers in the convolutional neural network and parameters for each layer

层序号	层类型	卷积核数	卷积核/池的大小	步长	输出形状	参数个数(权重和偏差值)
1	卷积层	4	(3,3)	1	(32, 64, 64, 4)	40
2	池化层	-	(2,2)	2	(32, 64, 64, 4)	0
3	卷积层	8	(3,3)	1	(32, 64, 64, 8)	296
4	池化层	-	(2,2)	2	(32, 32, 32, 8)	0
5	卷积层	8	(3,3)	1	(32, 32, 32, 8)	1 168
6	池化层	-	(2,2)	2	(32, 16, 16, 16)	0
7	卷积层	16	(3,3)	1	(32, 16, 16, 32)	4 640
8	池化层	-	(2,2)	2	(32, 8, 8, 32)	0
9	反卷积层	32	(4,4)	2	(32, 16, 16, 32)	16 416
10	反卷积层	16	(4,4)	2	(32, 32, 32, 16)	8 208
11	反卷积层	8	(4,4)	2	(32, 64, 64, 8)	2 056
12	反卷积层	4	(4,4)	2	(32, 64, 64, 4)	516
13	反卷积层	1	(3,3)	1	(32, 64, 64, 1)	37



(a) 数据集获取
(a) Schematic diagram of dataset acquisition

训练数据集包含数据集1、2、3、4



(b) 准备训练集
(b) Schematic diagram of training set preparation

图 3 数据集的获取与数据集组成

Fig. 3 Acquisition and composition of the dataset

随后,对 CNN 网络进行监督学习,目的是训练网络参数。将一批 $n(n=1\ 200)$ 个针尖卷积图像传递到 CNN 中,以获得针尖形状预测值,如图 4 所示,这些输出最初在训练过程之前通常是随机的。训练过程中使用式(5)的 MAE 作为损失函数计算输出针尖形状与相应真值之间的误差。计算出的误差传递给优化器(Adam 优化器,学习率=0.000 1),由该优化器更新网络参数。在迭代次数达到预设值或误差稳定小于预设阈值后,神经网络训练结束。

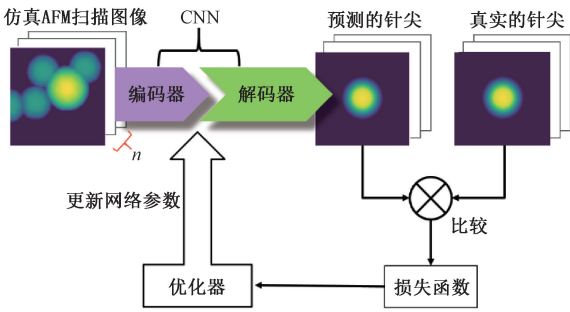


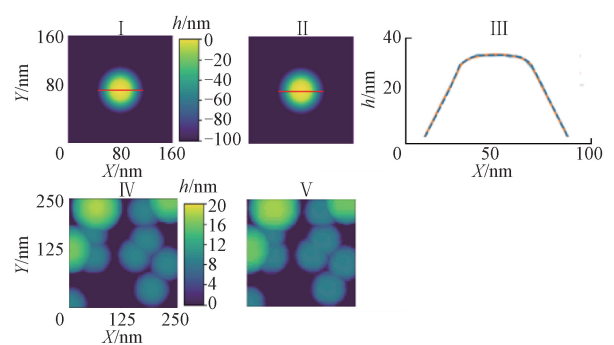
图 4 模型训练流程

Fig. 4 Flowchart of model training

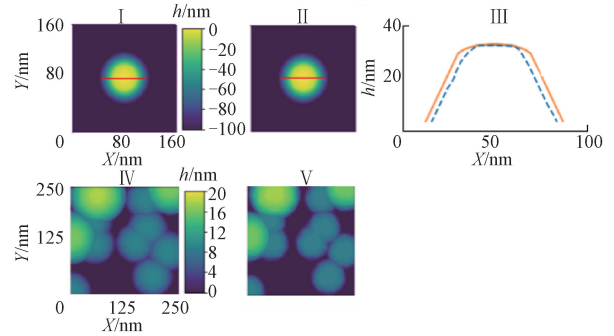
3 针尖预测效果分析

为了检验模型的针尖预测能力,用训练数据集范围之内(针尖半径 10~27 nm)以及之外(针尖半径>27 nm)的针尖半径下的纳米颗粒模拟扫描图像作为测试数据。这里为了展示模型典型效果,分别选取针尖半径为训练范围之内且非训练数据集取值的 25 nm,以及训练范围之外的 28 nm(略超出范围)和 37 nm(远超出范围)3 组半径针尖的测试进行结果依次展示,如图 5(a)~(c)所示。图 5 中 I 和 II 分别是针尖预设真值和 CNN 模型预测针尖,III 为针尖中心细实线位置剖面,IV 和 V 分别为实际针尖和预测针尖模拟的扫描图像。图 5 中 III 中实线为模拟时设定的针尖形状真值,虚线为模型预测值。对比图 5(a)中 IV 和 V 以及观察 I~III 可以发现,图 5(a)中预测的针尖和真值吻合一致,且基于预测针尖再仿真得到的扫描图像也与预设针尖模拟的扫描图像接近,表明当针尖半径在 10~27 nm 区间内时,CNN 模型具备准确预测针尖形状尺寸的能力。

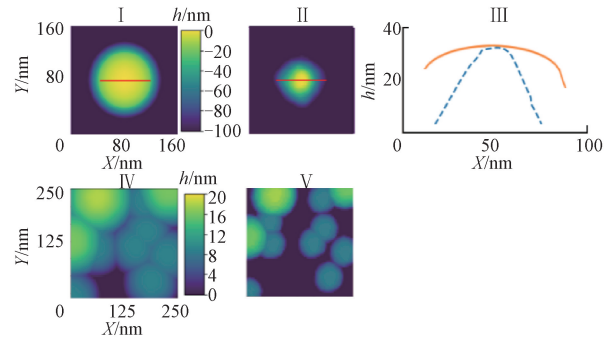
而图 5(b)中(针尖半径 28 nm),虽然从针尖形状和扫描图像上很难看出预测和真值间的明显区别,但从针尖剖面线来看,已经出现了一定预测偏差;当针尖半径进一步增大时,从图 5(c)中(针尖半径 37 nm)图像就已经能看出预测图像和针尖形状都出现了严重偏差。综合所有测试结果可以发现,当测试图像对应的针尖半径在训练集范围内(10~27 nm),预测的相对误差<0.2%(预测值和真值之差与真值的比值);当测试图像对应的针尖半径超出训练集范围之外时,在一定限度内(10-1~27+1 nm),CNN 模型依旧具备准确预测针尖的能力(相对误差<13%)。但是,随着针尖半径超出训练集范围值越大,相对误差也越大;当针尖半径超过训练集范围 10 nm 时(相对误差>90%),CNN 模型将失去准确预测针尖形状的能力,所预测的针尖形状尺寸与真实值偏差较大。



(a) 25 nm 半径针尖
(a) Tip radius of 25 nm



(b) 28 nm 半径针尖
(b) Tip radius of 28 nm



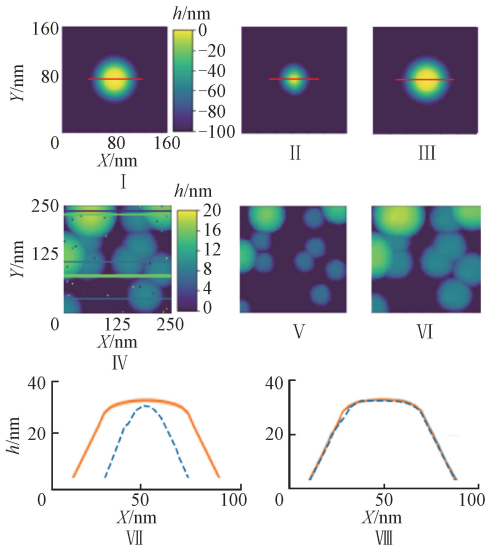
(c) 37 nm 半径针尖
(c) Tip radius of 37 nm

图 5 模型对 25、28 和 37 nm 半径针尖下的模拟颗粒扫描图像测试结果

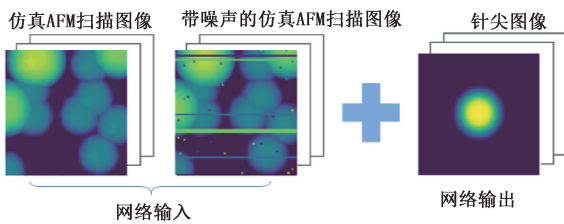
Fig. 5 Test results of the model on simulated particle images under tips with radii of 25, 28 and 37 nm

在实际 AFM 扫描中,获得的图像常常不是理想的,而会有诸如点噪声、线噪声在内的各种噪声和假象。为探究噪声影响,设计了一组对比试验。首先利用前述实验中 CNN 模型对同时叠加了随机点和线噪声的模拟颗粒扫描图像进行针尖形状的预测,得到结果如图 6(a)所示。图 6(a)中 I 和 II 分别是针尖真值和 CNN 模型预测针尖,图 6 中 VII 为二者针尖中间细实线处剖面对比图,图中虚线表示模型预测值,实线表示真值。图 6(a)中 IV 和 V 为预设的针尖真值和利用 CNN 模型预测的针尖对颗粒样品的模拟扫描图像。对比图像 I 和 II,可以发现,存

在图像噪声时预测值与真值严重不符。观察图像 VII 和仿真测试图像 II 也可以发现,测试图像对应的针尖半径在 10~27 nm 之间时,原本的 CNN 模型并不具备准确预测针尖形状的能力。



(a) 含噪模拟图像检验模型预测针尖形状能力结果
(a) Results of testing the model's ability to predict tip shapes with simulated AFM images



(b) 更新模型训练数据集
(b) Schematic diagram of updating the model's training dataset

图6 含噪声模拟图像检验模型预测针尖形状能力的结果及训练数据集组成

Fig. 6 Results of testing the model's ability to predict tip shapes using noisy simulated images and composition of the training dataset

随后改变训练集,在原本的训练数据集中增加一部分叠加了噪声的图像数据重新训练,如图 6(b)所示。再利用新训练的 CNN 模型对同一幅叠加了噪声的模拟纳米颗粒扫描图像进行针尖形状预测,结果如图 6(a)中图像 III 所示,与如图 6(a)中图像 I 的针尖细实线处剖面对比图见 6(a)-VIII。对比图 6(a)中图像 I 和 III 和 VIII 可以发现,在训练集中增加一部分叠加了噪声的图像数据就能够使模型在扫描图像中有随机点噪声和线噪声时,仍能准确预测针尖形状。测试时,并未对包含噪声图像本身进行去噪、平滑等预处理,这意味着该方法无需事先对图像进行额外的去噪。相对于针尖盲估计算法,基于 CNN 监督学习的模型预测针尖形状一方面体现了对图像噪声的

不敏感性。另一方面也提高了针尖预测精度,这是由于通常去噪处理不可避免地会同时对扫描图像中的一些精细结构进行了平滑,导致真实信息损失。此外,在时间效率上也提升了约 4 倍。在实验中,设置参数相同时经典盲估计和训练后的 CNN 针尖估计耗时分别为 170 和 0.004 s。

除模拟 AFM 图像上的测试外,还通过实际实验验证模型的针尖估计能力。实验选用标称直径为 40 nm 的 Ni 纳米颗粒样品(纯度 99.9%,基底为平整硅片),所用探针为 Tap300Al-G (Budget Sensors)。实验在 MFP-3D AFM (Oxford Instruments, Asylum Research) 上用接触模式进行,扫描范围固定为 250 nm×250 nm。典型扫描图像如图 7 中图像 I 所示。图 7 中图像 II 和 III 分别是盲估计和 CNN 模型预测针尖。图 7 中图像 VII 为 II 和 III 针尖中间细实线处剖面对比图,图中虚线表示模型预测值,实线表示盲估计值。由这 3 幅图可知,盲估计方法受图像噪声等影响明显,因此得到的针尖形状异常尖锐。使用 CNN 训练的模型进行预测,所得针尖则较为准确,其半径约为 20 nm,位于模型训练时半径 10~27 nm 的区间,也即在模型有效能力范围内。

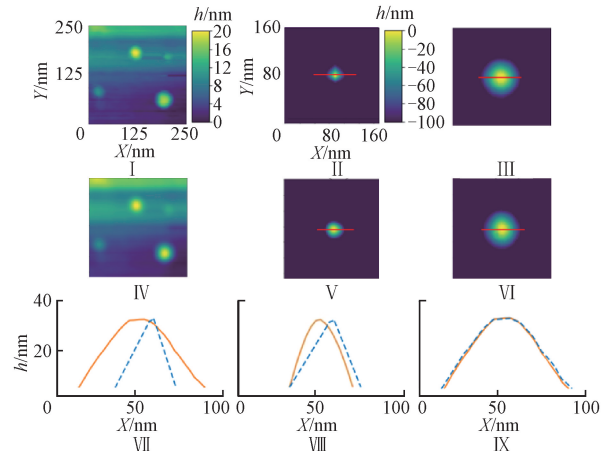


图7 AFM 实测图像检验模型预测针尖形状结果

Fig. 7 Results of testing the model's prediction of tip shapes using AFM-measured images

为了对比更明显,对原始图像进行平滑处理,去掉部分点噪声和线噪声,如图 7 中图像 IV 所示。再分别利用盲估计和 CNN 模型预测针尖形状,得到的结果如图 7 中图像 V 和 VI。对比去噪前后盲估计预测的针尖形状(图 7 中图像 II 和 V)可以发现,在图像去噪之后,盲估计方法的效果明显提升;而对比去噪前后模型预测的针尖形状(图 7 中图像 III 和 VI)可以发现,图像噪声对 CNN 模型预测方法的几乎没有影响,说明基于 CNN 监督学习的模型预测针尖形状对噪声不敏感,噪声的存在与否不影响最终输出。

此外,进一步对针尖中间细实线处剖面进行对比分析,由盲估计预测的针尖(图7中图像II和V)得到图7中图像VIII,由CNN模型预测的针尖(图7中图像III和VI)得到图7中图像IX,图中虚线表示平滑前值,实线表示平滑后值。由图7中图像IX可以更直观看出CNN模型预测对噪声不敏感,噪声的存在与否不影响最终效果;而由图7中图像VIII可以发现,噪声减少后,盲估计的预测效果明显提升,这从另一面也说明了该方法受噪声影响显著,噪声平滑的阈值设置跟估计的针尖密切相关。

以上实验结果说明基于CNN监督学习的模型预测针尖形状方法无需事先对图像去噪处理,就能直接预测针尖形状。相较于盲估计方法,其效率更高,处理方式也更简单。

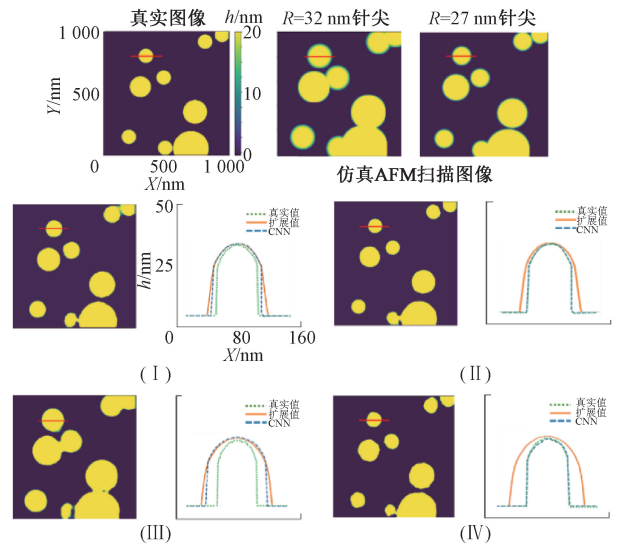
4 扫描图像针尖效应解耦

由于针尖和样品结构相互耦合作用时两者的互易性,上述基于CNN监督学习的模型图像处理方法也可以用于表面重构,即直接由扫描图像重构出样品的实际表面结构,而消除耦合的针尖形貌信息。

为此,本研究改变了用于CNN训练的数据集组成,将其从单一半径针尖的仿真图像扩展到多个半径的针尖的仿真图像(1 000 nm×1 000 nm, 128 pixels×128 pixels)。半径值分别是10、16、21和27 nm,同时将输出调整为纳米颗粒样品表面轮廓真值(扫描范围1 000 nm×1 000 nm,颗粒直径150~400 nm,数目、位置随机,数目不超过15)。这些模型训练调整的目的是使同一个模型适配多种半径不同的针尖,只要这些针尖半径被包含在10~27 nm范围内,该模型即可直接由扫描图像进行针尖膨胀效应解耦。

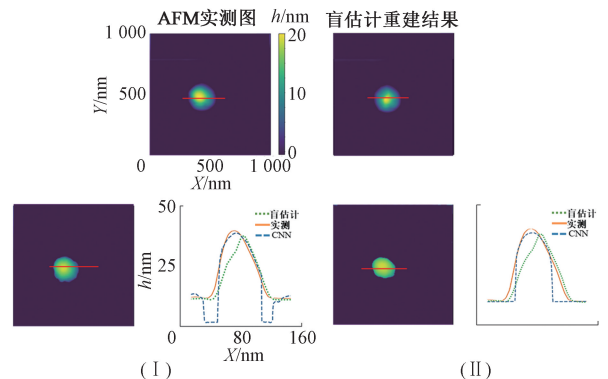
通过分析和对比具有各种半径大小和数目的颗粒样品的各种仿真模拟和实际实验获得的扫描图像来进行验证,典型结果如图8所示。图8(a)中图像I~IV展示了训练数据集扩展前/后,模型对25 nm(I和II)和32 nm(III和IV)半径的针尖仿真AFM扫描图像的解耦效果。每组图像左图为解耦图像,右图为细实线处剖面对比图。其中,虚线为模型解耦值,实线为仿真测试值,点虚线为真值。图8(b)展示了对实验实测标称直径为200 nm的 Fe_3O_4 纳米颗粒AFM图像的解耦效果。同时,为了对比模型效果,利用盲估计所得针尖来重建表面结构,如图8(b)中图像I和II所示。其中,虚线为模型解耦值,实线为实验测试值,点虚线为盲估计修正值。由图8(a)可以发现扩展训练数据集后,模型解耦(虚线)较真值(点虚线)更为接近,这说明了模型对于数据集范围内/外的AFM图像解耦能力均有明

显提升。图8(b)中图像I为仅包含单一探针半径训练数据的模型的解耦效果。由该图剖面线虚线(即模型解耦值)出现部分与实际不符的区域可知,模型解耦出现偏差,而图8(b)中图像II中解耦正常。说明所用针尖半径未知时,增加数据集丰富性更有利于样品表面的准确重构。



(a) I-IV数据集扩展前/后,模型对25和32 nm针尖所得仿真测试结果图的解耦效果

(a) Decoupling effects of the model on the simulated images for 25 and 32 nm tips before and after I-IV dataset expansion



(b) 模型对实测颗粒表面结构图像的解耦效果

(b) Decoupling tip dilation effects of the model on nano-particle images

图8 模型对颗粒表面结构图像的解耦(仿真和实验)结果

Fig. 8 Decoupling effects of the model on measured particle surface structure images

将训练数据集从基于单一半径的针尖的仿真图像扩展到基于多个半径的针尖的仿真图像有效地提升了模型的泛化能力,使其对于不同针尖半径所获取的扫描图像均具有一定的解耦能力。在实际应用中,相比于传统方法,该模型在针尖磨损或更换的情况下仍能够保持良好性能,无需每次重新测量针尖形状和训练新模型,从而显著提升了效率。

5 结 论

本研究提出了一种基于监督学习的编码器-解码器 CNN 方法来实现 AFM 针尖的高效预测,通过对 AFM 图像的训练与预测,该模型在不同半径和数目的纳米颗粒样品场合具备良好的预测能力,尤其是针尖半径在模型训练数据集范围内时,能够准确估计出针尖的真实形状。在引入含噪声的图像数据进行再训练后,能显著提高 CNN 模型对噪声的鲁棒性,使模型不仅能够有效预测噪声干扰下的针尖形状,而且无需任何去噪预处理。相较于经典的盲估计方法,基于 CNN 监督学习训练得到的模型在处理含噪声的实际 AFM 图像时表现出更高的准确性和效率。

由于针尖和样品形貌耦合时的互易性,该模型还可拓展至样品表面重构,模拟仿真和实验测试的结果均表明,拓展了训练数据集的模型对未知半径颗粒具有一定的针尖膨胀效应解耦能力。基于 CNN 监督学习的方法不仅提升了针尖形状尺寸预测和样品表面重构的准确性,也在实际应用中展现出对噪声影响的良好适应性,为 AFM 相关领域的研究与应用提供了有效的解决方案。

参考文献

- [1] BILLINGE S J L, LEVIN I. The problem with determining atomic structure at the nanoscale [J]. *Science*, 2007, 316(5824): 561-565.
- [2] TAN E P S, LIM C T. Mechanical characterization of nanofibers - a review [J]. *Composites Science and Technology*, 2006, 66(9): 1102-1111.
- [3] HE Z X, LI W X, CHEN Y W, et al. Nanoscale characterization of the solid electrolyte interphase and lithium growth by atomic force microscopy [J]. *Battery Energy*, 2024, 3(3): 20230045.
- [4] 秦亚莉, 杨续来. 锂离子电池膨胀特性检测方法研究进展 [J]. *仪器仪表学报*, 2023, 44(12): 22-33.
QING Y L, YANG X L. Research progress on measuring methods for expansion of lithium-ion batteries [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2023, 44(12): 22-33.
- [5] OURA K, LIFSHITS V G, SARANIN A A, et al. Surface science: An introduction [J]. *Physics Today*, 1904, 57(10): 79-80.
- [6] HAPALA P, KICHIN G, WAGNER C, et al. Mechanism of high-resolution STM/AFM imaging with functionalized tips [J]. *Physical Review B. Condensed Matter and Materials Physics*, 2014, 90(8): 085421.
- [7] FLATER E E, ZACHARAKIS-JUTZ G E, DUMBA B G, et al. Towards easy and reliable AFM tip shape determination using blind tip reconstruction [J]. *Ultramicroscopy*, 2014, 146: 130-143.
- [8] TIAN F L, QIAN X P, VILLARRUBIA J S. Blind estimation of general tip shape in AFM imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2008, 109(1): 44-53.
- [9] 袁帅, 董再励, 缪磊, 等. 基于精确探针模型的 AFM 图像重构研究 [J]. *仪器仪表学报*, 2009, 30(6): 1117-1122.
YUAN SH, DONG Z L, MIU L, et al. AFM image reconstruction based on accurate tip model [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2009, 30(6): 1117-1122.
- [10] LANTZ M A, WIESMANN D, GOTSMANN B. Dynamic super lubricity and the elimination of wear on the nanoscale [J]. *Nature Nanotechnology*, 2009, 4(9): 586-591.
- [11] CHUNG K H. Wear characteristics of atomic force microscopy tips: A review [J]. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 2014, 15(10): 2219-2230.
- [12] BYKOV V, GOLOGANOV A, SHEVYAKOV V. Test structure for SPM tip shape deconvolution [J]. *Applied Physics A Materials Science & Processing*, 1998, 66(5): 499-502.
- [13] VILLARRUBIA J S. Algorithms for scanned probe microscope image simulation, surface reconstruction, and tip estimation [J]. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 1997, 102(4): 425-454.
- [14] KELLER D J, FRANKE F S. Envelope reconstruction of probe microscope images [J]. *Surface Science*, 1993, 294(3): 409-419.
- [15] WILLIAMS P M, SHAKESHEFF K M, DAVIES M C, et al. Blind reconstruction of scanning probe image data [J]. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 1996, 14(2): 1557-1562.
- [16] RUGGERI F S, HABCHI J, CERRETA A, et al. AFM-based single molecule techniques: Unraveling the amyloid pathogenic species [J]. *Current Pharmaceutical Design*, 2016, 22(26): 3950-3970.
- [17] WANG CH M, ITOH H, SUN J L, et al. Characterizing atomic force microscopy tip shape in use [J]. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2009, 9(2): 803-808.
- [18] MARKIEWICZ P, GOH M C. Identifying locations on a substrate for the repeated positioning of AFM

- samples[J]. *Ultramicroscopy*, 1997, 68(4): 215-221.
- [19] QIAN X P, VILLARRUBIA J, TIAN F L, et al. Image simulation and surface reconstruction of undercut features in atomic force microscopy[C]. *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXI*. SPIE, 2007: 651811.
- [20] FUCHIGAMI S, NIINA T, TAKADA S. Case report: Bayesian statistical inference of experimental parameters via biomolecular simulations; Atomic force microscopy[J]. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 2021, 8: 636940.
- [21] WANG X, HUANG SH CH, HU SH, et al. Fundamental understanding and applications of plasmon-enhanced Raman spectroscopy [J]. *Nature Reviews Physics*, 2020, 2(5): 253-271.
- [22] ANDO T. High-speed atomic force microscopy and its future prospects [J]. *Biophysical Reviews*, 2018, 10(2): 285-292.
- [23] ANDO T, UCHIHASHI T, KODERA N, et al. High-speed atomic force microscopy for observing dynamic biomolecular processes[J]. *Journal of Molecular Recognition: An Interdisciplinary Journal*, 2007, 20(6): 448-458.
- [24] TAN CH L, CAO X H, WU X J, et al. Recent advances in ultrathin two-dimensional nanomaterials[J]. *Chemical Reviews*, 2017, 117(9): 6225-6331.
- [25] TRANCHIDA D, PICCAROLO S, DEBLIECK R A C. Some experimental issues of AFM tip blind estimation: The effect of noise and resolution [J]. *Measurement Science and Technology*, 2006, 17(10): 2630-2636.
- [26] VILLARRUBIA J S. Scanned probe microscope tip characterization without calibrated tip characterizers[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 1996, 14(2): 1518-1521.
- [27] MATSUNAGA Y, FUCHIGAMI S, OGANE T, et al. End-to-end differentiable blind tip reconstruction for noisy atomic force microscopy images[J]. *Scientific Reports*, 2023, 13(1): 129.
- [28] JIAO L CH, ZHAO J. A survey on the new generation of deep learning in image processing[J]. *IEEE Access*, 2019, 7: 172231-172263.
- [29] BONAGIRI L K S, WANG Z R, ZHOU SH, et al. Precise surface profiling at the nanoscale enabled by deep learning[J]. *Nano Letters*, 2024, 24(8): 2589-2595.
- [30] CHANHAN R, GHANSHALA K K, JOSHI R C. Convolutional neural network (CNN) for image detection and recognition[C]. *2018 First International Conference on Secure Cyber Computing and Communication (ICSCCC)*. IEEE, 2018: 278-282.
- [31] 蓝金辉,王迪,申小盼. 卷积神经网络在视觉图像检测的研究进展[J]. *仪器仪表学报*, 2020,41(4):167-182. LAN J H, WANG D, SHEN X P. Research progress on visual image detection based on convolutional neural network[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2020,41(4):167-182.
- [32] 王子辰,陈晓艳,王倩,等. 基于残差自注意力连接的深度电学层析成像方法[J]. *仪器仪表学报*, 2023, 44(5):288-301. WANG Z CH, CHEN X Y, WANG Q, et al. Electrical tomography imaging method based on deep CNN with residual self-attention skip connection [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2023,44(5):288-301.
- [33] LI Z W, LIU F, YANG W J, et al. A survey of convolutional neural networks: Analysis, applications, and prospects[J]. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2021, 33(12): 6999-7019.

作者简介



雷艺彤,2022年于中国科学技术大学获得学士学位,现为中国科学技术大学硕士研究生,主要研究方向为原子力显微镜控制技术 & 数据处理。

E-mail:jnlyt@mail.ustc.edu.cn

Lei Yitong received her B. Sc. degree from University of Science and Technology of China in 2022. Now she is a M. Sc. candidate in University of Science and Technology of China. Her main research interests include image-processing and control technology for atomic force microscopy.



陈宇航(通信作者),2000年于中国科学技术大学获得学士学位,2005年于中国科学技术大学获得博士学位,现为中国科学技术大学精密机械与精密仪器系任中国科学技术大学精密机械与精密仪器系副教授,主要研究方向为扫描探针显微镜仪器校准方法、表面纳米计量、新型原子力显微镜成像表征技术的研发及应用等。

E-mail:chenyh@ustc.edu.cn

Chen Yuhang (Corresponding author) received his B. Sc. degree from University of Science and Technology of China in 2000, and Ph. D. degree from University of Science and Technology of China in 2005. Now he is an associated professor in Department of Precision Machinery and Precision Instrumentation, University of Science and Technology of China. His main research interests include scanning probe microscopy, surface nanometrology, and advanced atomic force microscopy and applications.