arXiv:2302.00816v1 [stat.AP] 2 Feb 2023

通过脊线估计检测透射电子显微镜视频中的动态原子柱

Yuchen Xu[1],**Andrew M.Thomas**[1],**Peter A.Crozier**[2],**和 David S. Matteson** [1]

[1] *Department of Statistics and Data Science, Cornell University, e-mail:* yx439@cornell.edu; amt269@cornell.edu; matteson@cornell.edu

[2] *School for Engineering of Matter, Transport and Energy, Arizona State University, e-mail:* crozier@asu.edu

摘要： 脊线检测是图像处理中提取曲线特征的经典工具，因此在材料科学问题中具有很大的应用潜力；具体而言，它可用于对图像序列（如透射电子显微镜（TEM）视频）中相对稳定的原子形状物体进行趋势滤波。对 TEM 视频的标准分析仅限于逐帧目标识别。我们则通过同时分析长图像序列（将其表示为时空图像张量），利用帧间的时间相关性。我们定义了新的脊线检测算法，以非参数方式估计原子级目标位置随时间连续变化的显式轨迹。我们的方法专门针对这样一类目标进行了设计：它们看似随机地消失，并在序列过程中再次出现。我们证明，所提出的方法在模拟场景中高效且效果显著；与其他材料科学基准方法相比，该方法在透射电子显微镜实验中也取得了显著的性能提升。

关键词和短语： 函数型数据、图像处理、纳米颗粒、目标识别、脊线检测、透射电子显微镜（TEM）。

1. 引言

透射电子显微镜（TEM）是研究原子层面材料的重要工具。TEM 领域的重大技术进步不仅提升了时间分辨率，也提高了原子结构检测的灵敏度（Ruskin、Yu 和 Grigorieff，2013；Faruqi 和 McMullan，2018；Levin，2021）。众所周知，透射电子显微镜图像的信噪比（SNR）会严重下降（Lawrence 等，2020年，2021；Vincent 和 Crozier，2021），这是因为科学研究要求即时分析，而设备的电子通量能力又有限（Egerton、Li 和 Malac，2004；Egerton，2013，2019）。图1 展示了一段具有高时间分辨率的真实透射电子显微镜视频，从示例帧中可以看出其面临严峻的信噪比挑战。因此，对透射电子显微镜图像和视频的分析算法需求持续增长，相关算法也在不同的研究重点和力度下不断涌现（Lawrence 等，2020年）。然而，重要的不足依然存在，亟需配套的数据密集型方法论。

在灰度透射电子显微镜图像的分析中，最重要的任务是估计（检测）纳米颗

粒结构并总结（提取）重要的原子特征，以量化和理解原子物理动力学，尤其是原位催化剂实验。拟合高斯模型是经典的基准方法，因其解释直观而广受欢迎。这需要采用多种估计程序，包括非线性最小二乘高斯峰拟合（GPF，Levin、Lawrence 和 Crozier，2020年）和 Atomap（AM，Nord 等人，2017年）。然而，该方法受椭圆形状假设的限制，且对初始化和信噪比条件都极为敏感，计算开销也很大。Manzorro 等人(2022年) 最近提出了一种专为透射电子显微镜图像设计的斑点检测（BD）方法。该算法不再施加明确的形状约束，并能应对严峻的信噪比挑战。与此同时，仍存在一些局限，尤其是在还需要区分原子柱缺失与真空背景的情况下。（Thomas 等人，2022年）提出了一种拓扑数据分析（TDA）方法，通过假设检验框架验证此类差异。该算法所需的图像假设限制也较少。一些机器学习算法（例如，Lin 等人，2021）也已开发出来，但这些模型通常是在非常狭窄的信噪比范围内训练的，目前的应用场景缺乏泛化能力。

由于这些分析大多局限于单帧，通常需要采用从图形形状到纳米颗粒完整晶格结构等一系列假设。然而，在真实实验中，由于原子的剧烈运动，这些假设可能经常不成立。另一方面，原始透射电子显微镜数据似乎并未得到充分利用。本文从一个全新的角度审视时空透射电子显微镜图像张量（图1），并提出一种广义脊线检测（RD）算法，以利用鲜少得到考虑的时间相关性。我们的脊线建模自然地受到以下思路的启发并得到其论证：沿时间方向堆叠同一原子柱的 BD 输出斑块，形成一条管状结构；见图2。请注意，在原始透射电子显微镜视频中，这类管状结构通常对应的是谷而非脊线，因为根据透射电子显微镜成像机制，原子柱的像素强度低于其邻近区域，因此在进行脊线处理之前需要先取反。

一些现有的里程碑式算法可能只在预处理阶段利用透射电子显微镜历史数据进行去噪。我们提出的脊线检测方法则以不同方式处理这类信息。它不仅更深入地利用数据结构，对沿时间方向堆叠的原子柱所形成的弯曲圆柱体进行插值，还能在帧与帧之间保持足够的独立性，而不是将局部特征完全平滑掉。

在图像处理领域，Lindeberg(1996) 首次提出尺度空间检测算子，以自适应地考虑线条的宽度。此后，人们开发出了一些先进的脊线检测方法，例如 Meijering (Meijering 等人，2004)、Sato (Sato 等人，1998)、Frangi (Frangi 等人，1998) 和 海森矩阵 (Ng 等人，2015)。事实上，这些算法会为每个像素重新分配一个分数，以表示其位于脊线上的可能性，并生成去噪且增强了曲线模式的图像。图像

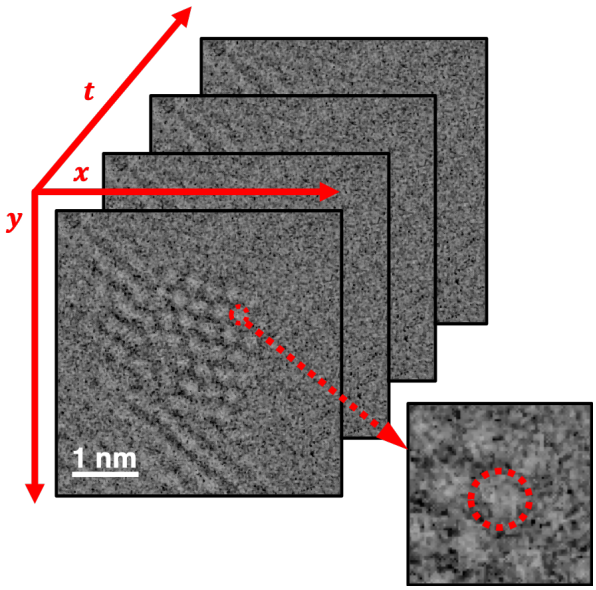

图1：时间分辨原位透射电子显微镜视频中 CeO_2 纳米颗粒的示意图，时间分辨率为 2.5 毫秒。这里，x 和 y 轴表示单帧透射电子显微镜图像中的空间坐标，而 t 轴表示时间维度。每一帧都以灰度投影图像呈现纳米颗粒的物理模型，较亮的区域表示原子堆叠形成垂直于页面的原子柱的位置。图2展示了其中一根原子柱的放大图。

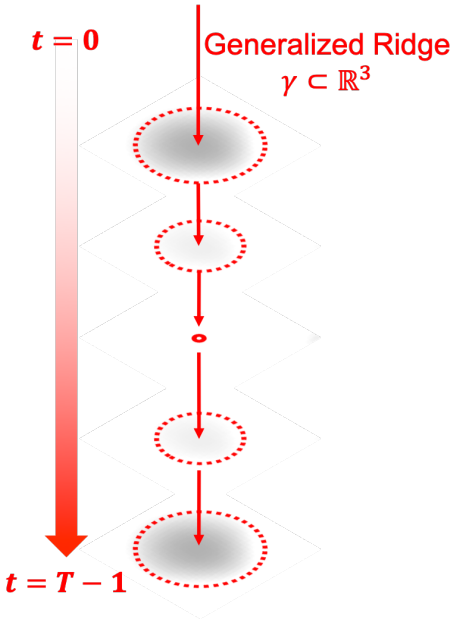

图2：广义脊线曲线的示意图 $\gamma \subset \mathbb{R}^3$ 作为时间 t的轨迹函数，对选定的原子柱进行描述；该原子柱取自反相处理后的透射电子显微镜视频。反相处理的依据见备注1。在示例序列中，原子柱经历了各种动力学变化，例如半径收缩和扩张、对比度降低和增强，以及在序列中部完全退化为一个点。此外，原子柱的外轮廓形成了一个随时间延伸的管状物体。

处理 Python 软件包 Scikit-Image（van der Walt 等人，2014年）提供了上述四种方法的实现。后续研究借助多种工具提出了不同类型的滤波度量和/或阈值方案。例如，Norgard 和 Bremer（2013）提出组合雅可比集，以确保全局结构的有效性；Lopez-Molina 等人（2015）使用各向异性高斯核（AGK）提高灵敏度和稳健性；Reisenhofer 和 King（2019）则将对比度不变相位一致性度量与 α-分子结合，在样本有限的情况下细化局部特征。关于脊线检测与增强算法的综合综述，参见 Shokouh 等人（2021）；Alhasson 等人（2021）及其中所引文献。脊线检测有许多应用，包括医学图像分析（Lopez 等人，1999年）、指纹增强（Lindeberg 和 Almansa，2000）、自主导航（Beyeler、Mirus 和 Verl，2014）、信号处理（Colominas、Meignen 和 Pham，2020；Laurent 和 Meignen，2022年）以及地质学（Pham 等人，2021），等等。

相关的拉格朗日相干结构（LCS，Haller and Yuan 2000；Haller 2002）方法在机械工程和动力系统中被视为一种脊线变体（Mathur等人，2007；

Senatore 和 Ross，2011年；Schindler 等人，2012年）；它们旨在分离有限时间李雅普诺夫指数场中的不同流体行为（Kasten 等人，2009）。在计算中，通常使用数值微分方程求解器对其进行滤波；示例见 Ameli、Desai 和 Shadden (2014)。

总体而言，图像处理领域主要致力于建立经过滤波的逐像素脊线似然图像，以便进行更有效的目视检查；而机械工程领域则专注于利用离散化数值求解器近似脊线。因此，我们需要结合脊线检测与连续表征的分析工具。本研究的突破在于提出一种创新方法论，能够以非参数方式提取透射电子显微镜视频中原子柱的连续轨迹，并容忍序列中偶尔出现的退化。实践中，我们借鉴了一些现有方法的思路（Levin、Lawrence 和 Crozier，2020年；Manzorro 等人，2022年），并提出每次处理一根原子柱。该算法针对在空间上对应于原子柱近似区域的裁剪视频进行处理，每次运行后输出一条脊线曲线。鉴于数据的离散性质、轨迹曲率的多样性以及潜在的退化，获得预期的连续输出颇具挑战，也具有创新性。

本文的结构安排如下。第2节介绍预备知识，包括符号、必要的设定假设和预处理步骤。我们的方法论详见第3节。第 4 节给出了关于估计曲线的不确定性摘要的一些初等离散结果。结合第5节中的模拟结果，第6节展示了我们的方法在材料科学中具有启发性的透射电子显微镜应用（见上文）中的优越性能。第7节最后进行讨论。附录A介绍了一种可选的方法论开发替代方案，对第3节进行了补充和部分更新。全文中部分命题的证明见附录B。

2. 预备知识

本文中，视频由一系列（长度为 T）灰度图像表示，每幅图像的尺寸为 $M \times N$。像素索引集合由集合 $\Omega = \{(m,\ n,\ \tau)\colon m \in [M];\ n \in [N];\ \tau \in [T]\}$ 给出，其中我们引入记号 $[k] = \{0,\ 1,\ \ldots\ldots,\ k-1\}$，表示整数 k。此外，对于 $\tau \in [T]$，我们将 $t = \tau$图像帧记作 $\Omega(\tau) = \Omega \bigcap \{(x,\ y,\ t)\colon t = \tau\}$。

图像序列的像素值通过映射 $f(x,y,t)$ 在三元组网格位置 $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ $(x,y,t) = (m,n,\tau) \in \Omega$ 处离散求值得到，记为 $f_{m,n,\tau}$。连续脊线曲线可以不受格点 Ω 的限制，其定义为 $\gamma\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$。

记 e_t 为时间维度的指示向量，即 $e_t = (0,\ 0,\ 1)$。对于矩阵 A，$\mathrm{tr}(A)$ 表示其迹，A^+ 表示其 Moore-Penrose 广义逆。算子 x_+ 对任意标量 x计算 $\max(x,\ 0)$。对于维度相同的两个向量 a和 b，我们将它们的点积记为 $\langle a,\ b \rangle$

，余弦相似度记为 $\cos(a, b) = \frac{\langle a, b \rangle}{\|a\| \cdot \|b\|}$。若陈述 X 为真（或假），指示函数 $\mathbb{1}(X)$ 的取值为 1（或 0）。

我们将脊线 γ 定义为三维映射 f 上的连续点集，其图形形状类似于图2所示的管状物体。这里，我们对一些类似定义（例如Porteous 2001）稍作扩展，见下文的条件2，以允许出现退化特征值。因此，在我们的TEM应用中，当原子柱缺失时，轨迹曲线不会在这些特殊图像帧处中断。

定义1。给定一个二阶可微映射 $f\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$，分别以 $\nabla f(p) \in \mathbb{R}^3$ 和 $\Delta_f(p) \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ 表示该映射 f 在点 $p \in \mathbb{R}^3$ 处的梯度向量和海森矩阵。此外，假设海森矩阵 $\Delta_f(p)$ 具有特征值 $\lambda_{f,1}(p)$，$\lambda_{f,2}(p)$，$\lambda_{f,3}(p)$ 及其对应的单位特征向量 $v_{f,1}(p)$，$v_{f,2}(p)$，$v_{f,3}(p) \in \mathbb{R}^3$。那么，若点 p 位于 f 的脊线上，记作 $\gamma \subset \mathbb{R}^3$，则

1. $\langle \nabla f(p), v_{f,2}(p) \rangle = \langle \nabla f(p), v_{f,3}(p) \rangle = 0$，即梯度 $\nabla f(p)$ 与海森矩阵的特征向量 $v_{f,1}(p)$ 平行。因此，γ 处于 p 的脊线的切线方向由 $v_{f,1}(p)$ 刻画；2. $0 \geqslant \lambda_{f,2}(p) \geqslant \lambda_{f,3}(p)$；3. 此外，沿方向 $v_{f,1}(p)$ 的映射 f 曲率较小或相对较小，即对于 $i = 2$ 和 3，$|\lambda_{f,i}(p)| \gg |\lambda_{f,1}(p)|$ 或 $\left|\frac{\lambda_{f,i}(p)}{\lambda_f}\right| \gg 1$，其中 $\gg$ 表示远大于。

备注 1. (a) 图3 以图示方式说明了定义 1。一般而言，如果我们在点 p 处引入一个不同于经典笛卡尔 (x, y, t) 表示法的局部坐标系，并使用局部海森矩阵特征向量指定各轴 $\{v_{f,1}(p), v_{f,2}(p), v_{f,3}(p)\}$，那么 p 若映射 f 在 p 处沿三个轴方向中的两个达到局部最大值，则该点位于脊线上；参见图3中的后两个子图。在透射电子显微镜视频应用中，这两个轴构成的平面通常接近图像帧。

(b) 谷的定义与定义 1 的区别仅在于条件2 中所有不等号均反向，即映射 p 的脊点 f 自然也是映射 $-f$ 的谷点。通过后续推导中引入的平移与尺度不变性质，我们的方法可以直接将取反后的透射电子显微镜视频作为输入来实现。

(c) 在后续分析中，尤其是涉及 TEM应用 时，视频映射 f 由离散像素值表征，并保持固定。为简洁起见，我们省略下标 f。

接下来，我们提出一项基本设定假设，将时间轴固定为脊线 γ 的主要延展方向。

假设1。T 视频区域 $[0, M) \times [0, N) \times$内存在一条唯一的连续脊线曲线 γ

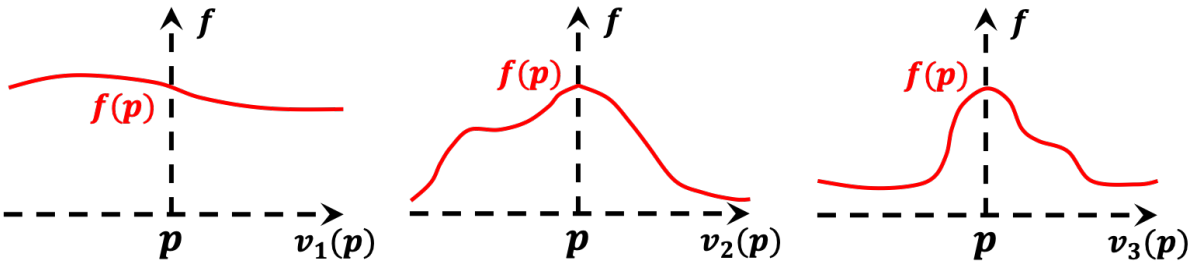

图3：映射 f 在脊点 $p \in \gamma$ 处沿局部坐标系各轴的投影行为。新坐标系的基由正交归一的海森特征向量集合 $\{v_1(p)$、$v_2(p)$、$v_3(p)\}$构成。

$[0,T)$ 可以按时间参数化，即 $\forall t \in [0,T)$，存在唯一的脊映射

$$\gamma(t) = (u(t), w(t), t) \in [0, M) \times [0, N) \times [0, T), \tag{1}$$

其中 $u(t)$ 和 $w(t)$ 是相应的空间坐标函数。此外，该脊线的切向量为

$\gamma'(t) = (u'(t), w'(t), 1).$

备注 2。 在 假设 1中，我们对存在性和唯一性作出限制，因为这些限制符合我们提出的 TEM应用：给定裁剪后的透射电子显微镜视频，一次处理一根原子柱。参数化（1）的设计源于透射电子显微镜视频应用；如 图2所示，透射电子显微镜视频中的原子柱球体随时间相对稳定地堆叠，形成管状结构。此外，（1）也有利于后续分析。例如，给定任意帧索引 $\tau \in [T]$，脊函数 γ 便可直接返回特定帧内所选原子柱对应的空间位置。

一阶和二阶导数的计算对于定义 1至关重要，特别是考虑到像素晶格 Ω 的离散特性。我们提出使用高斯函数进行卷积，不仅可以平滑含噪声数据，还能使微分运算表现得更好。

定义 2。记三维高斯函数为

$$G(x, y, t; \sigma, \delta) = \frac{1}{2\pi\sigma^2 \cdot \sqrt{2\pi\delta^2}} \exp(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2} - \frac{t^2}{2\delta^2}),$$

其中 σ 和 δ 分别表示空间尺度和时间尺度。然后，给定 $p \in \Omega$，缩放梯度向量和海森矩阵

$$\widetilde{\nabla}(p) = (\sigma\widetilde{\nabla}_x(p), \sigma\widetilde{\nabla}_y(p), \delta\widetilde{\nabla}_t(p))' \quad \& \quad \widetilde{\Delta}(p) = \begin{pmatrix} \sigma^2\widetilde{\Delta}_{xx}(p) & \sigma^2\widetilde{\Delta}_{xy}(p) & \sigma\delta\widetilde{\Delta}_{xt}(p) \\ \sigma^2\widetilde{\Delta}_{yx}(p) & \sigma^2\widetilde{\Delta}_{yy}(p) & \sigma\delta\widetilde{\Delta}_{yt}(p) \\ \sigma\delta\widetilde{\Delta}_{tx}(p) & \sigma\delta\widetilde{\Delta}_{ty}(p) & \delta^2\widetilde{\Delta}_{tt}(p) \end{pmatrix} \tag{2}$$

映射的 f 通过离散卷积计算偏导数的各个元素来近似

类似于

$$\widetilde{\nabla}_x(p) = \frac{\partial}{\partial x}\Big(\sum_{(m,n,\tau)\in\Omega} f_{m,n,\tau} G(x-m, y-n, t-\tau; \sigma, \delta)\Big)_{(x,y,t)=p},$$
$$\widetilde{\Delta}_{xx}(p) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\sum_{(m,n,\tau)\in\Omega} f_{m,n,\tau} G(x-m, y-n, t-\tau; \sigma, \delta)\Big)_{(x,y,t)=p}.$$

备注3。尽管尺度空间导数（2）（Lindeberg，1998）中两者都经过了相乘，但沿时间轴的尺度 δ仅通过卷积充当去噪参数，而其空间尺度对应项 σ 还承担自动尺度自适应的作用（Lindeberg，1996）。实际应用中，空间尺度 σ 通常表示透射电子显微镜图像中原子柱的大小，其取值会参考图2中管状物体的横截面半径进行调整。另一方面，时间尺度 δ 通常设得较小，以尽可能保留细微的动力学，从而准确恢复脊线的局部曲率；这些曲率对应于TEM应用中所关注原子柱的微小移动。

~假设2。梯度向量 $\nabla(p)$ 非奇异。

备注4。假设2 旨在避免计算中出现奇异导数。鉴于图像数据集中的噪声以及预处理中应用的卷积，这一假设并不构成限制。它仅限制存在噪声时的估计量，因此不会排除我们旨在处理的潜在奇异情形。

~下一个定义对估计的海森矩阵 $\Delta(p)$ 进行标准化和更新，以提高我们方法的普适性。

~定义 3。 令 μ 为梯度范数 $\{\|\nabla(p)\|$ 的中位数： $p \in\Omega\}$。海森矩阵更新为

$$\widetilde{\Delta}(p) \mapsto \widetilde{\Delta}(p)/\mu. \tag{3}$$

备注 5。 (a) 对海森矩阵进行更新（3）是为了确保我们方法的无尺度特性，从而使所开发的算法能够普遍应用于具有不同像素强度水平的各种图像序列。

~(b) 为简便起见，以下海森矩阵 $\Delta(p)$ <style id='5'}及其近似矩阵 $\Delta(p)$ 在（3）中将使用相同的特征值记号 $\lambda_i(p)$ 和特征向量记号 $v_i(p)$ ，除非另有说明。

3. 方法论

在第3.1节中，我们首先探究几何意义下脊线上各点的一些解析性质。接着，第3.2节对每个网格点满足这些性质的程度进行量化，并据此提出脊线得分。最后，第3.3节介绍了针对连续脊线曲线提出的非参数算法。

此外，附录A讨论了一种可选但推荐使用的补充模式。在附录所述的特定情形下，它有可能提升算法的效能。

请注意，为便于后续推导，我们采用假设 1，即从输入视频中估计出且仅估计出一条脊线曲线。就透射电子显微镜应用而言，这意味着算法将在手动裁剪的视频上运行，每次提取一条原子柱的轨迹。

3.1. 性质

我们从命题1 开始，总结脊线上各点的一些性质。其证明见附录B。

命题1。 若映射 f 的脊线 γ 经过晶格点 $p \in \Omega$附近，则

1. 根据条件 *1* 和定义 *1*，脊线局部方向由估计得到的海森矩阵$\tilde{}$的特征向量近似表示 $\Delta(p)$:

$$v(p) = v_1(p). \tag{4}$$

此外，向量 $v(p)$ 会被重新定向，使得 $\langle v(p), e_t \rangle \geqslant 0$。

$\tilde{}$*2.* 脊线局部曲率的代理量由估计得到的海森矩阵 $\Delta(p)$ 的特征值给出：

$$\lambda(p) = \lambda_1(p). \tag{5}$$

3. 曲线的空间扰动程度可通过脊线局部方向 (4) 与时间指示向量 e_t之间的余弦相似度来衡量：

$$\rho(p) = \left|\cos\left(v(p), e_t\right)\right|. \tag{6}$$

4. 定义 *1* 中的 条件 *1* 是否满足，可通过余弦相似度进行量化；余弦相似度衡量脊线局部方向 (4) 与映射底层景观梯度之间的角度差：

$$\theta(p) = \left|\cos\left(v(p), \tilde{\nabla}(p)\right)\right|. \tag{7}$$

5. 关于 定义 *1*的条件 *2* 和 *3*，以下量可近似概括海森特征值的一些行为：

$$\begin{cases} \eta(p) = \dfrac{2\lambda_2(p)\lambda_3(p)}{\lambda_2^2(p) + \lambda_3^2(p)} \\ \kappa(p) = \lambda_2(p)\lambda_3(p) - \lambda^2(p) \end{cases}. \tag{8}$$

在附录A中，推论1针对命题1中表示的上述量提出了并行近似。在特定条件下，这些近似在理论解释和实际性能方面都可能带来益处。更多详情请参阅附录A。

以下性质及其后续评述基于命题1总结而成，作为筛选时间堆叠图像序列中脊线轨迹的初始参考准则。性质1（帧内）。网格点 $p \in \Omega$ 可能位于脊线上 γ，条件是：

1. 脊线局部方向 $v(p)$ 满足以下任一条件：

   a. $v(p)$ 与时间指示向量 e_t 的平行程度最大，即 $\rho(p) \approx 1$。 b. $v(p)$ 对映射梯度的近似效果最佳，即 $\theta(p) \approx 1$。

2. 两个海森特征值 $\lambda_2(p)$ 和 $\lambda_3(p)$ 符号相同且大小相近，即 $\eta(p) \approx 1$。此外，与沿脊线的曲率代理量 $\lambda(p)$ 相比，它们的绝对值相对较大，因此 $\kappa(p)$ 为正且绝对值相对较大。

注释 6. (a) 条件1a 的性质1 基于我们这样的理解：平滑的脊线曲线往往具有相对稳定的空间切向方向，而且这些方向很可能位于时间轴上。换言之，脊线曲线（或原子柱的位置）在空间中几乎保持不变。在 TEM 应用的退化情形附近，这种情况确实很有可能发生；正如人们所预期的，消失的原子柱可能会在一段时间后于其消失的位置重新出现。

(b) 性质1的由（7）及其相关论断概括而来，见命题1。注意，条件1a和条件1b从两个不同角度提出判据，并且在大多数近脊线像素处，两者都可能近乎最优。同时，两者各有检测偏好，因此其精确最优状态可能无法同时实现。例如：

(i) 条件1a在遇到近乎奇异的梯度时占主导，即 $\|\nabla(p)\| \approx 0$。在透射电子显微镜应用中，这种情况最可能发生在原子柱缺失时；

(ii) 条件1b在脊线出现明显空间运动时占主导。在透射电子显微镜应用中，这种情况发生在原子柱发生漂移时。

(c) $\lambda_2(p)$ 与 $\lambda_3(p)$的大小相近，如性质1中的条件2所述，会使脊线管的横截面呈现近乎球形的椭圆，其两条对称轴由相应的特征向量表征。这种横截面椭圆模式通常与透射电子显微镜图像中原子柱的形状相似。

（d）总体而言，性质1关注单帧内受限的各个像素的局部梯度与海森行为，因此标记为帧内。

虽然性质1更擅长描绘纯脊线像素的行为，但我们预计，对于TEM应用中的一般情况或偶尔缺失的原子柱，我们的方法会更加有效。事实上，除了条件1a之外，还可以通过沿曲线明确施加连续性约束，进一步提高其在这些极端情况下的适用性。在实践中，我们利用方向

向量 $v(p)$ （式4）并对沿曲线的函数二阶粗糙度进行惩罚（Green andSilverman，1994）。

在 惩罚之前，我们先引入以下候选脊线切向量的定义。

定义 4. 对于 $p \in \Omega$，定义候选脊线切向量估计量

$$v_\gamma(p) = \frac{v(p)}{\langle v(p), e_t \rangle}, \tag{9}$$

其中，我们将其坐标记为 $v_\gamma(p) = (u'_\gamma(p), w'_\gamma(p), 1)$。

说明 7. (a) 我们将式 ($v_\gamma(p)$ in (9) 中的向量命名为候选脊线切向量，因为它被视为从任意 $p \in \Omega$ 向外指向的脊线切向量，仿佛像素 p 位于脊线曲线上γ，依据定义 1 和假设 1。对于 TEM 应用，如果感兴趣的原子柱位于第 p 个 τ帧 $\Omega(\tau)$，那么 $v_\gamma(p)$ 的空间分量表示所选原子柱在该时刻可能的移动方向。

(b) 变换 (9) 将候选脊线切向量的最后一个元素重新缩放为 1，因此 $v_\gamma(p)$与 $\gamma'(t)$ 在假设 1 中关于时间元素的规定相符。

下面我们展示第二个性质陈述，该陈述支持对曲线粗糙度进行惩罚这一理念。

性质2（帧间）。给定帧索引 $\tau \in [T]$，若网格点 $p = (m、\ n、\ \tau) \in \Omega(\tau)$和$p^* = (m^*、\ n^*、\ \tau^*) \in \Omega(\tau)$、$\tau^* = \tau + 1$是两个在时间上连续且靠近脊线曲线 γ的网格点，并且其候选切向量 $v_\gamma(p)$ 和 $v_\gamma(p^*)$ 分别由定义4导出，则以下条件成立：

1. 脊线经过 p 附近，且切向量几乎平行，即 $\gamma(\tau) \approx p$、 $\gamma'(\tau) \approx v_\gamma(p)$；对于 p^*同理，即 $\gamma(\tau^*) \approx p^*$、$\gamma'(\tau^*) \approx v_\gamma(p^*)$；
2. 将脊线的函数二阶粗糙度表示为积分

$$\int_\tau^{\tau^*} \|\gamma''(t)\|^2 dt = \int_\tau^{\tau^*} \left(|u''(t)|^2 + |w''(t)|^2\right) dt,$$

且其数值较小。

注释 8。 请注意，粗糙度值越小，曲线段的平滑性越好。之所以赋予 帧间 这一标签，是因为 性质2 关注的是连续帧中像素之间的交互式连续性约束。在 TEM应用的设置下，粗糙度的设计旨在惩罚所选原子柱的极端剧烈运动。

3.2. 脊线量化

本节介绍基于性质1和2 的度量，用于判断网格点 $p \in \Omega$是否位于脊线上 γ。具体而言，第3.2.1节设计了一种帧内权重，用于汇总

性质1中的度量，结合逐像素梯度和海森矩阵信息，而第3.2.2节则根据性质2提出了包含粗糙度惩罚的最终帧间权重。

3.2.1. 帧内逐像素显著性度量

为了解某个像素在图像帧中的突出程度，以及因此被赋予更高权重、成为脊线曲线上的一个点的可能性，我们将以下术语定义为帧内度量，以便直接量化性质1。

定义 5（帧内度量）。对于 $p \in \Omega$，定义以下度量以考量：

1. 空间稳定性（条件1a，属于性质1）：

$$L_\rho(p) = 2\rho(p); \tag{10}$$

2. 一阶极值（条件1b，属于性质1）：

$$L_\theta(p) = 2\theta(p); \tag{11}$$

3. 二阶凹性（条件2，属于性质1）：

$$L_{\eta,\kappa}(p) = 2\eta(p) + 2\eta(p)\log(1 + \kappa_+(p)). \tag{12}$$

根据我们的构造，可以证明这些度量指标能够有效地从像素网格中筛选出脊线点。具体而言，作为对定义5的补充，以下命题概述了这些度量指标的表现，并为这些选择提供了依据。简而言之，度量值较高的网格点 p 更可能位于脊线上，这一结论在定量上与性质1一致。相应的证明见附录B。

命题2。定义*5*中的度量指标满足以下陈述：

1. 脊线局部方向 $v(p)$ 与时间指示向量e_t之间的角度差越小，$L_\rho(p)$ 的度量值（*10*）越大。此外，当且仅当角度差为零时，$L_\rho(p)$ 达到最大值。*2.* 脊线局部方向 $v(p)$ 与梯度估计器$\widetilde{\nabla}(p)$之间的角度差越小，$L_\theta(p)$ 的度量值（*11*）越大。此外，当且仅当角度差为零时，$L_\theta(p)$ 达到最大值，即近似满足定义 *1* 的条件 *1*。*3.* 度量指标 $L_{\eta,\kappa}(p)$（*12*）偏好符号相同、幅值相近的特征值对 $(\lambda_2(p), \lambda_3(p))$，同时也偏好其幅值相较于 $\lambda_1(p)$更大。

以下定义将定义5中的帧内度量结合起来，形成逐像素权重，并对命题2进行定量概括。

定义6。给定一帧 $\Omega(\tau)$ 对于 $\tau \in [T]$，定义5 中的局部度量共同给出 $p \in \Omega(\tau)$的初始脊线权重。

$$\Phi(p) = \exp\big(L_\rho(p) + L_\theta(p) + L_{\eta,\kappa}(p)\big).$$

在附录A中，推论2 作为对定义6的可选更新提出，利用推论1中的并行近似；在特定条件下还可能改进算法；详情请参阅附录A 。

3.2.2. 帧间连续性惩罚

除了考虑帧内量化之外，我们的性质2 还提倡曲线平滑性，尤其是为了增强其在透射电子显微镜应用中的兼容性。我们给出以下度量定义，用于量化连续帧中像素之间的连续性。

定义7（帧间度量）。给定 $\tau \in [T]$，考虑两个时间上连续的点 $p \in \Omega(\tau)$ 和 $p^* \in \Omega(\tau^*)$，其中 $\tau^* = \tau + 1$。假设三次函数 $\zeta_{p,\,p^*}(t) = (u_{p,\,p^*}(t),\ w_{p,\,p^*}(t))$ 在局部对两个像素的空间坐标进行插值，则定义该像素对的粗糙度度量为

$$\psi(p, p^*) = \exp\Big(-\frac{1}{2}\int_{\tau}^{\tau^*} \|\zeta''_{p,p^*}(t)\|^2 dt\Big), \tag{13}$$

其中 $\|\zeta''_{p,\,p^*}(t)\|^2 = \big(u''_{p,\,p^*}(t)\big)^2 + \big(w''_{p,\,p^*}(t)\big)^2$。

注 9。 （a）图4说明了定义 7中的插值思想。总而言之，三次函数 $\zeta_{p,\,p^*}$ 不仅连接了两个像素 p 和 p^*，而且其切线方向与它们的候选脊线切向量的空间分量 $v_\gamma(p) = (u'_\gamma(p),\ w'_\gamma(p),\ 1)$ 和$v_\gamma(p^*) = (u'_\gamma(p^*),\ w'_\gamma(p^*),\ 1)$ 在 p和 p^*处分别重合。候选脊线切向量根据定义4由局部方向 $v(p)$ 变换而来。

（b）在实 践中，假设 $p = (m,\ n,\ \tau)$，$p^* = (m^*,\ n^*,\ \tau^*)$，以及 $\zeta_{p,\,p^*}(t) = (u_{p,\,p^*}(t),\ w_{p,\,p^*}(t))$，其中 re

$$u_{p,p^*}(t) = a^u_{p,p^*}t^3 + b^u_{p,p^*}t^2 + c^u_{p,p^*}t + d^u_{p,p^*}, \qquad w_{p,p^*}(t) = a^w_{p,p^*}t^3 + b^w_{p,p^*}t^2 + c^w_{p,p^*}t + d^w_{p,p^*}.$$

不失一般性，令 $\tau = 0$ 和 $\tau^* = 1$，则

- $\zeta_{p,p^*}(0) = (d^u_{p,p^*}, d^w_{p,p^*}) = (m, n)$;
- $\zeta_{p,p^*}(1) = (a^u_{p,p^*} + b^u_{p,p^*} + c^u_{p,p^*} + d^u_{p,p^*}, a^w_{p,p^*} + b^w_{p,p^*} + c^w_{p,p^*} + d^w_{p,p^*}) = (m^*, n^*)$;
- $\zeta'_{p,p^*}(0) = (c^u_{p,p^*}, c^w_{p,p^*}) = \big(u'_\gamma(p), w'_\gamma(p)\big)$;
- $\zeta'_{p,p^*}(1) = (3a^u_{p,p^*} + 2b^u_{p,p^*} + c^u_{p,p^*}, 3a^w_{p,p^*} + 2b^w_{p,p^*} + c^w_{p,p^*}) = \big(u'_\gamma(p^*), w'_\gamma(p^*)\big)$.

可通过线性系统求解这些系数。

（c）通过对二阶导数的平方范数进行积分，度量（13）衡量插值的扰动程度$\zeta_{p,\ p*}$。具体而言，度量值越高，局部函数段之间的连接越平滑，因此所选原子柱在TEM应用中的空间移动越不突兀。

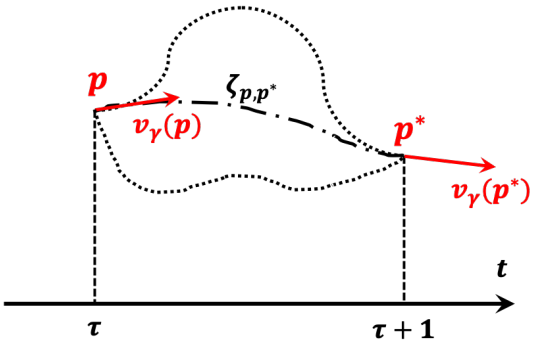

图 4：插值和粗糙度惩罚的定义 7 示意图。

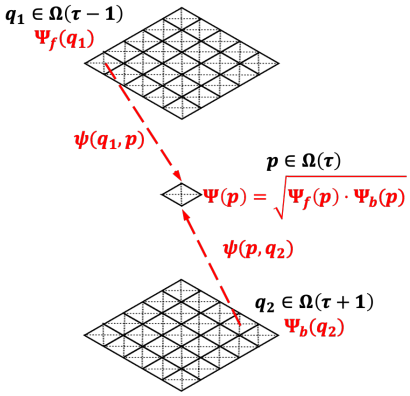

图 5：定义 8中前向和后向度量指标的示意图。

后续定义结合了定义 6中的逐像素权重，并通过定义 7中的平滑度惩罚最终确定脊线得分；示意图见图 5。

定义 8。给定 $p \in \Omega(\tau)$, $\tau \in [T]$，我们递归定义前向和后向累积度量指标 $\big(\Psi_f(p), \Psi_b(p)\big)$，如下所示

$$\Psi_f(p) = \Phi(p)\cdot\Big(\sum_{q_1\in\Omega(\tau-1)} \Psi_f(q_1)\psi(q_1,p)\Big), \qquad \Psi_b(p) = \Phi(p)\cdot\Big(\sum_{q_2\in\Omega(\tau+1)} \Psi_b(q_2)\psi(p,q_2)\Big).$$

然后，几何平均数得出最终度量

$$\Psi(p) \propto \sqrt{\Psi_f(p)\cdot\Psi_b(p)}. \tag{14}$$

此外，对度量指标进行归一化，使其满足 $\sum_{p\in\Omega(\tau)} \Psi(p) = 1$.

备注 10。 在设计上述前向（后向）度量指标时，我们将脊线沿图像帧（逆序）序列的轨迹视为马尔可夫过程。例如，脊线曲线（或原子柱的轨迹）可能通过一次前向转移，从上一帧 Ω $p \in \Omega(\tau)$ 中的任意像素 q_1 到达像素 $(\tau-1)$。因此，前向度量 $\Psi_f(p)$ 通过累加所有从 Ω 出发的可能前向转移的概率来计算$(\tau-1)$。定义 7 中的粗糙度度量（13）被用作两个像素之间的转移概率。与普通的算术平均数相比，几何平均数（14）能更好地降低那些前向和后向累积度量表现不一致的像素的权重。

3.3. 非参数曲线连接

正如假设 1所示，曲线轨迹参数化如下：

$$\gamma(t) = (u(t), w(t), t) \in \mathbb{R}^3.$$

为以非参数方式连接脊线曲线，我们将每个图像帧 $\Omega(\tau)$ 中的像素视为一个集成，并利用集成汇总进行脊线估计。具体而言，对于每个帧 $\Omega(\tau)$，像素 $p \in \Omega(\tau)$ 及其对应的方向向量 $v(p)$ 可得出帧特定泛函元素的聚合估计量。以下定义和备注将详细说明其实现及直观解释。

定义 9. 在时间帧 $\Omega(\tau)$ 中，对于 $\tau \in [T]$，定义加权平均值 es

$$\bar{p}(\tau) = \sum_{p \in \Omega(\tau)} p\Psi(p), \qquad \bar{v}_\gamma(\tau) = (\bar{u}(\tau), \bar{w}(\tau), 1) \propto \sum_{p \in \Omega(\tau)} v(p)\Psi(p), \tag{15}$$

以及帧局部线性泛函元素

$$\bar{\gamma}_\tau(t) = \bar{p}(\tau) + \bar{v}_\gamma(\tau) \cdot (t - \tau). \tag{16}$$

那么，给定核函数 $K(t)$ 和带宽 h，曲线可通过非参数方式估计为

$$\bar{\gamma}(t) = \frac{\sum_{\tau \in [T]} \bar{\gamma}_\tau(t) \cdot K\left(\frac{t-\tau}{h}\right)}{\sum_{\tau \in [T]} K\left(\frac{t-\tau}{h}\right)}. \tag{17}$$

备注 11. (a) 对于式（15）中的加权平均值：

(i) $\bar{p}(\tau)$ 被视为图像帧 $\Omega(\tau)$ 与脊线 γ之间的候选交点；在 TEM 设置下，它对应于时刻 τ所选原子柱的帧聚合位置估计量；

(ii) $\bar{v}_\gamma(\tau)$ 被处理为上述交点 $\bar{p}(\tau)$处 γ的候选导数，在 TEM 应用中，它表示时刻 τ 原子柱漂移方向的估计量。

(b) 与 Cheng、Hall 和 Turlach (1999年) 相比，我们的方法采用了更简单的构件，即线性泛函元素 (16)。为满足要求，(16) 的构造旨在满足 $t = \tau$ 处的局部要求，即 $\bar{\gamma}_\tau(\tau) = \bar{p}(\tau)$ 和 $\bar{\gamma}'_\tau(\tau) = \bar{v}_\gamma(\tau)$.

(c) 核函数 $K(t)$ 和带宽 h 在 (17) 中已在核密度估计 (KDE) 和核回归等相关非参数主题下得到了深入研究；例如参见 Fan 和 Yao (2008)。

(d) 在后续实践中，只要标准高斯核能取得合理的效果，我们就直接使用它，并通过经验调整带宽。一些典型的有效取值为 $h \in \{.5、1、2、 \ldots\}$。

4. 不确定性量化

不确定性量化有助于了解恢复出的 $\gamma(t)$ 的准确性，尤其是在与每个图像帧 $\Omega(\tau)$ 离散相交的位置。此处我们只考虑中间估计 $\bar{p}(\tau)$ ，并使用离散化的逐帧结果。

事实上，若将权重 $\Psi(p)$ 视为 $p \in \Omega(\tau)$ 上的离散分布的概率(τ)，那么除了式（ $\bar{p}(\tau)$15）中的均值外，该分布的协方差也可以通过经验计算得到：

$$\bar{\Sigma}(\tau) = \sum_{p \in \Omega(\tau)} \Psi(p)\big(p - \bar{p}(\tau)\big)\big(p - \bar{p}(\tau)\big)'. \tag{18}$$

因此，类似于正态分布，我们可以利用椭圆二次型推导出经典的 $1-\alpha$ $\bar{p}(\tau)$ 的置信区域，将其作为 $\gamma(\tau)$置信区域的代理量：

$$CI_\alpha(\tau) = \{p \in \mathbb{R}^3 : \big(p - \bar{p}(\tau)\big)'\bar{\Sigma}^+(\tau)\big(p - \bar{p}(\tau)\big) \leqslant Q_{\chi,\alpha}\},$$

其中 $Q_{\chi.\ \alpha}$ 是自由度为 2 的卡方分布的 $(1-\alpha)$ 分位数。

5. 模拟研究

为评估该算法的性能，我们针对具有不同脊线（谷）模式和噪声水平的图像序列开展了模拟研究。我们从一组尺寸为$M = N = 41$、 $T = 100$的短图像序列开始，并生成与透射电子显微镜图像相似的谷样本，如下所示

$$f(m, n; \tau) = C - A(\tau) \cdot \exp\Big(-\frac{\big(m - u(\tau)\big)^2 + \big(n - w(\tau)\big)^2}{2R(\tau)^2}\Big),$$

对于 $(m,\ n,\ \tau) \in \Omega$，其中常值 $C = 140$ 设为基准像素强度，用于近似实验透射电子显微镜图像的真空背景水平（例如，图1）， $A(t)$ 为非负振幅函数，用于编码谷深， $\gamma(t) = (u(t),\ w(t),\ t)$ 为曲线轨迹，而 $R(t)$ 为（管状）曲线随时间演化的半径函数 $\gamma(t)$。

事实上，由于该算法旨在适用于潜在的推广，因此有必要改变振幅函数 $A(t)$。最终将其设定为三角函数与常值函数的连续组合，例如，

$$A(t) = \begin{cases} 60 & t \in [0, 20) \\ 30 + 30\cos(\frac{2\pi t}{10}) & t \in [20, 55) \\ 0 & t \in [55, 65) \\ 30 + 30\cos(\frac{2\pi t}{10}) & t \in [65, 100) \end{cases},$$

其中三角函数项的周期性为 10。特别是，周期 $t \in [55,\ 65)$ 其中 $A(t) = 0$旨在模拟 TEM应用中缺少原子柱时的退化情形。曲线半径也设定为具有一定的振荡，如 $R(\tau) = 6 + 3\sin(\tau)$。

我们还改变了曲线轨迹 $\gamma(t)$ ，以确保模拟的完整性。具体而言，我们研究了以下三种情况。

1. 常值，例如，$\gamma_1(t) = (20,\ 20,\ t)$。 2. 不连续，例如，
$\gamma_2(t) = (18 + 4 \cdot \mathbb{1}(t \geqslant 60),\ 17 + 6 \cdot \mathbb{1}(t \geqslant 30),\ t)$。 3. 连续振荡，例如，
$\gamma_3(t) = (20 + 3\,\text{正弦}(\frac{2\pi t}{50}),\ 20 + 2\,\text{正弦}(\frac{2\pi t}{40}),\ t)$。

对模拟图像样本施加泊松型噪声，这与整数值透射电子显微镜图像的合成过程相当（Levin、Lawrence 和 Crozier，2020年；Manzorro 等人，2022年）。

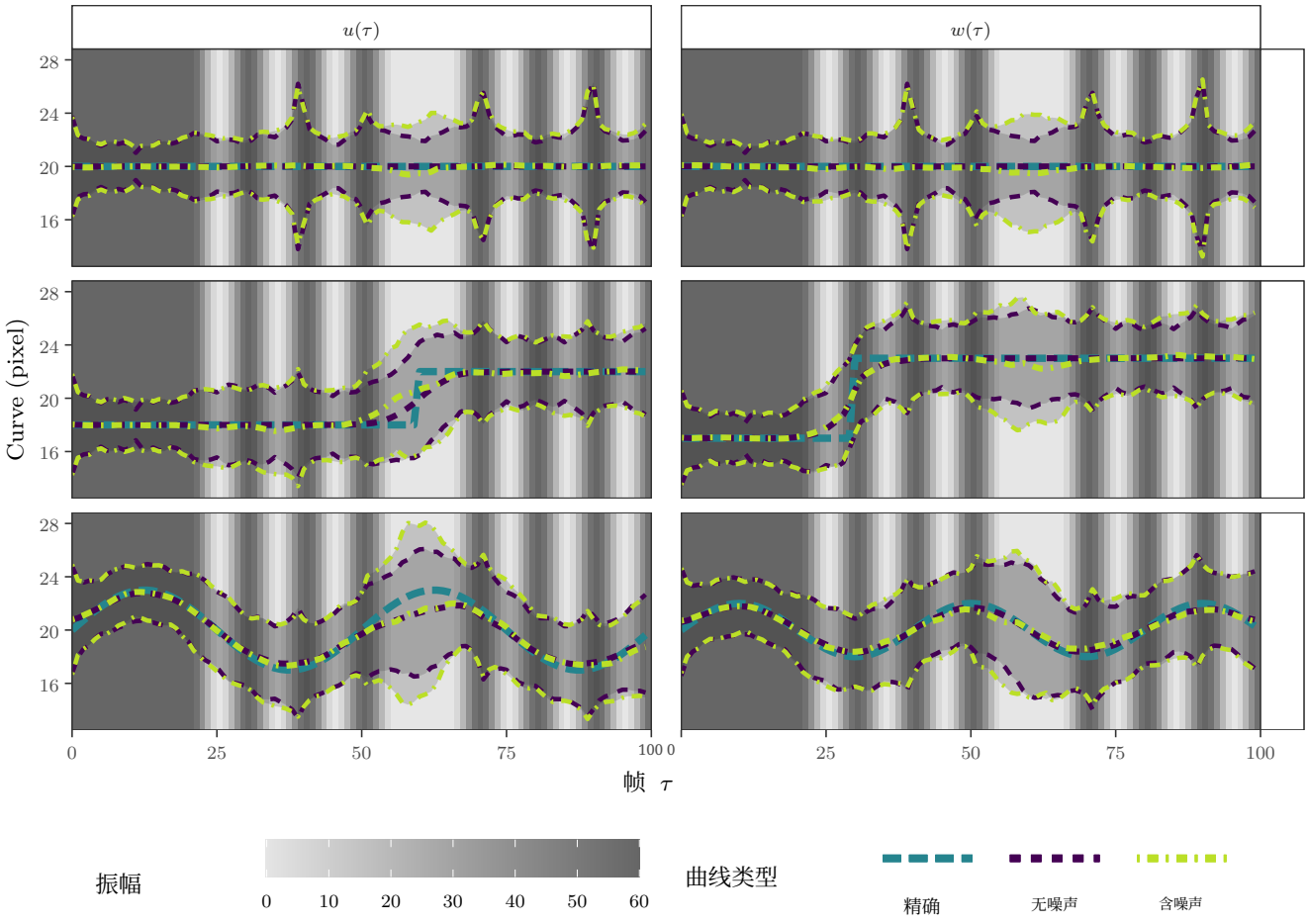

图 6：展示了三种底层脊线定义对应的检测曲线及其替代边际置信区域（阴影带），这些区域由协方差（18）给出。较深的背景表示谷值振幅更明显。以 $\gamma_i\ (i = 1,2,3)$ 中的解析“精确”曲线为参照，可以看出，从无噪声图像（“无噪声”）或含噪图像（“含噪声”）中恢复的轨迹都接近真实值。

将模拟含噪视频取反后作为脊线检测的输入。该算法在恢复底层曲线特征的动力学方面表现尚可，但在缺乏连续性，或图案在一段时间内完全消失的情况下，有时会受到限制。鉴于图 6中的模拟结果，我们有信心进一步开展透射电子显微镜视频的更真实应用。为避免物理纳米粒子模型与模拟/采集的透射电子显微镜图像之间可能存在的任何隐含差异，后续分析将主要关注测量误差以作比较，即无噪声图像与含噪声透射电子显微镜图像之间的输出差异。

6. 应用

在TEM应用中，将合成样本输入算法。我们将算法在位置估计方面的表现与材料科学界的其他基准方法进行比较。

所研究的CeO_2 纳米颗粒基准结构如图7所示，合成样本则以此为基础扩展而来。如前所述，处理透射电子显微镜视频的主要挑战在于，部分原子柱可能表现出特殊的潜在行为。这类行为常导致异常现象，例如微弱对比度、非标准形状，甚至完全缺失。我们研究了静态和动态的底层配置，以评估算法的性能，并探究其对这些极端情况的兼容性。

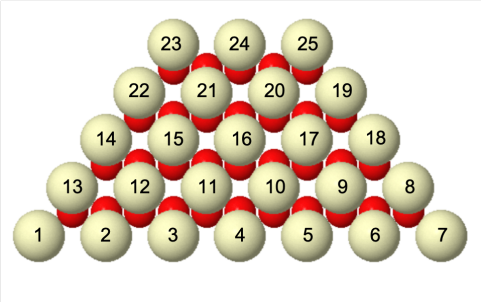

图7：基准纳米颗粒结构，数字标示了各原子柱。

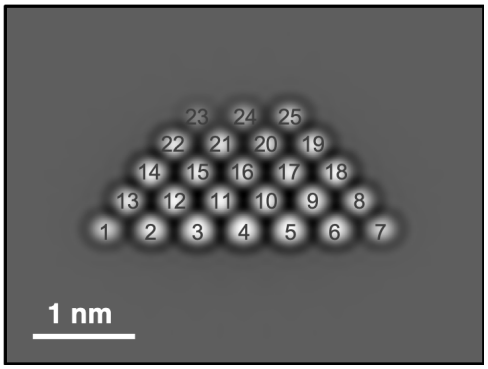

图8：静态框架下的无噪声参考图像，编号规则与图7相同。

对于静态情况，以图8所示的无噪声合成TEM帧为基础，我们应用10种不同的泊松噪声实现来生成图像序列，并从准确性和一致性两方面，将所提出的算法与其他基准方法进行比较。具体而言，图10所示的误差箱线图表明，我们的RD算法在大多数方面（如果不是所有方面）都具有更优的误差表现。

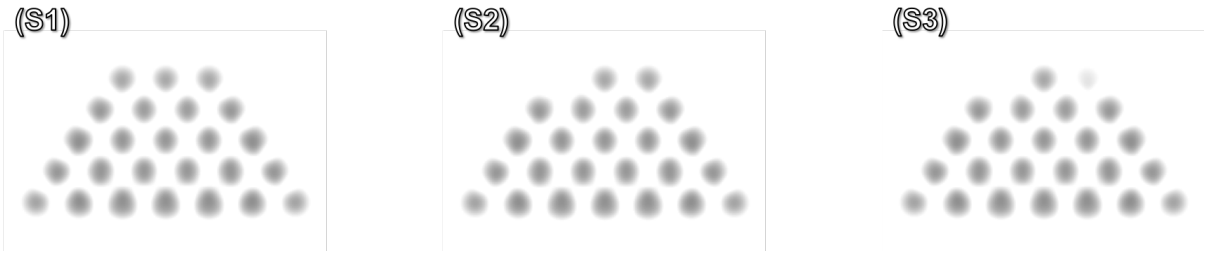

图 9：生成 200 帧含噪声透射电子显微镜视频的三种候选配置，具有动态 s.

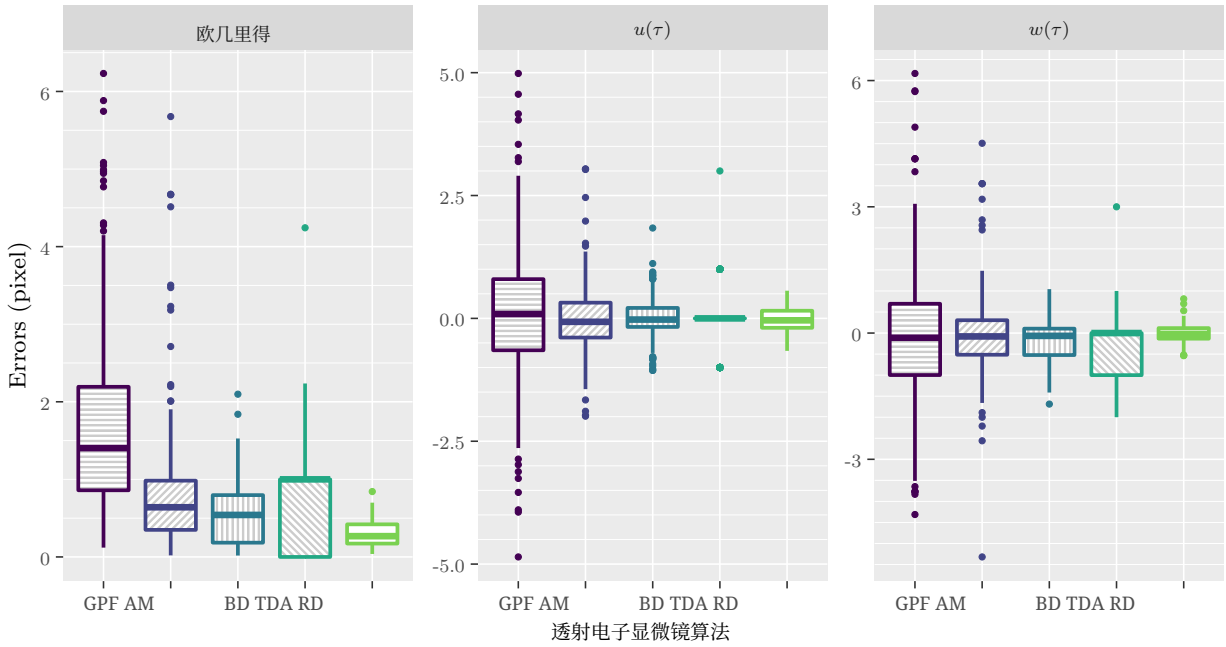

图 10：静态设置下的误差分析。比较 RD 与包括 GPF 在内的Levin、Lawrence 和 Crozier，2020年）、AM（Nord 等人，2017年）、BD（Manzorro 等人，2022年）和 TDA（Thomas 等人，2022年）。

接下来，我们转向动态情形，并构建具有图9中三种结构构型的纳米颗粒透射电子显微镜视频。底层构型序列通过模拟马尔可夫过程获得，转移概率矩阵由人工指定。

$$\begin{array}{c} \\ \text{From S1} \\ \text{From S2} \\ \text{From S3} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \text{To S1} & \text{To S2} & \text{To S3} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.85 & 0.10 & 0.05 \\ 0.30 & 0.55 & 0.15 \\ 0.25 & 0.30 & 0.45 \end{pmatrix} \end{array}.$$

编号为23和25的表面原子柱在视频中可能会消失或发生强度变化。我们固定底层构型序列的一次模拟实现，并在无噪声图像和含噪图像上运行该算法。对两组输出得到的脊线点 $\check{\gamma}(\tau)\,(\tau \in [T])$ 之间的欧几里得距离进行了分析。考虑到图像的离散像素分辨率，图11 所示结果令人满意，尤其是变化最剧烈的原子柱23的误差几乎始终低于一个像素。

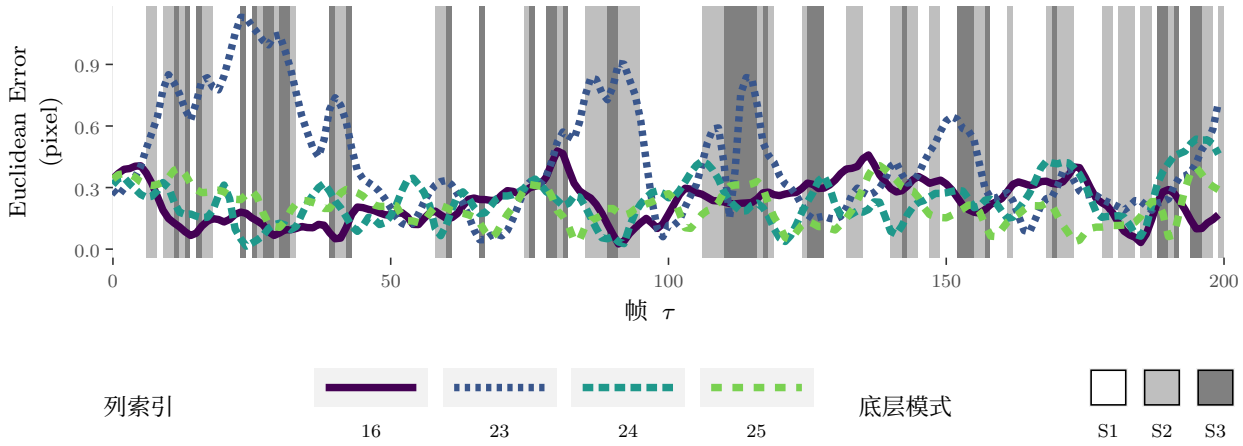

图11：该算法在动态设定下的性能。三种不同的底层构型（图9）以背景灰度级编码。绘出了选定原子柱（包括内部原子柱（第16列）和表面原子柱（第23、24、25列））拟合得到的欧几里得偏差，以便进行全面比较。

7. 结论

在本研究中，我们提出了一种非参数方法，用于从（TEM）视频中连续恢复脊线模式，前提是脊线按时间参数化。我们的算法利用几何局部性质和连续性约束，并为像素位于脊线上的可能性设定评分。我们采用基于核的函数估计量来输出脊线曲线，并针对

TEM应用特别定制了该算法，以应对原子柱消失和重新出现的情况。我们还纳入了不确定性量化分析。最后，我们通过精心设计的模拟评估了该算法，并将其应用于TEM应用的合成图像示例。

除了合成材料科学应用外，将该算法用于一些真实的原始透射电子显微镜图像时，或许最能体现其价值。目前，该方法的泛化能力仍然有限，因为它只能恢复脊线（或谷）曲线，并且仅适用于某些边缘退化情形。其他未来研究方向包括扩展其适用范围，以检测连接曲线，即脊线与谷之间的中间线段（Damon，1999年）。在时间序列分析或信号处理框架下，扩展到连接曲线有助于提取信息传播模式，尤其是在脉冲响应分析和变点检测等主题中。

附录A：梯度导出的替代近似

这里，我们介绍一种采用梯度导出的近似进行的替代分析，作为对正文所提出方法中间步骤的一种可选补充更新。文中总结了一些额外定义及相关推论。随后各节的论述从定性角度进一步阐述了此类梯度导出的近似的优势。

为概述起见，本节主要介绍推论1 导出的梯度量。这些量在位于非退化脊段邻域内的像素处具有特别强的估计能力。具体而言，为简洁起见，以下将这些像素称为非退化邻域像素 。

我们首先给出以下定义，以引入归一化梯度向量。~定义 10。 将梯度向量 $\nabla(p)$ 的归一化定义为

$$\widehat{\nabla}(p) = \widetilde{\Delta}^{+}(p)\widetilde{\nabla}(p). \tag{19}$$

注 12。 (a) 这种归一化的动机来自优化中的牛顿法（Nocedal 和 Wright，2006）。它有助于提高非退化邻域像素处估计所得梯度方向的稳健性；更详细的论证见注 13 和14 。

(b) 对于 p 中的任意非退化邻域像素，（估计得到的）海森矩阵通常是可逆的。此外，^定义 1 的条件 1 还保证定义 1 也保证了 $\nabla(p)$ 作为 $\Delta^{+}(p)\nabla(p)$ 的近似，与 $v_1(p)$几乎平行。

根据定义10给出的归一化梯度估计器，我们可以得到以下推论，它为命题1 中提出的量在这些非退化邻域像素处引入了近似。证明见附录B。

推论1. 如果脊线 γ 的一段非退化部分经过格点 $p \in \Omega$附近，那么

1. 将 $\widehat{\nabla}(p)$ 重定向，使得 $\langle \widehat{\nabla}(p), e_t \rangle \geqslant 0$,

$$\hat{v}(p) = \frac{\widehat{\nabla}(p)}{\|\widehat{\nabla}(p)\|} \approx v(p). \tag{20}$$

2.

$$\hat{\lambda}(p) = \operatorname*{argmin}_{\ell \in \mathbb{R}} \|\widetilde{\Delta}(p)\hat{v}(p) - \ell \hat{v}(p)\| = \hat{v}'(p)\widetilde{\Delta}(p)\hat{v}(p) \approx \lambda(p). \tag{21}$$

3.

$$\hat{\rho}(p) = \left|\cos\left(\hat{v}(p), e_t\right)\right| \approx \rho(p). \tag{22}$$

4.

$$\hat{\theta}(p) = \left|\cos\left(\hat{v}(p), \widetilde{\nabla}(p)\right)\right| \approx \theta(p). \tag{23}$$

5.

$$\begin{cases} \hat{\eta}(p) = \dfrac{2\hat{\xi}_2(p)}{\hat{\xi}_1^2(p) - 2\hat{\xi}_2(p)} \approx \eta(p) \\ \hat{\kappa}(p) = \hat{\xi}_2(p) - \hat{\lambda}^2(p) \approx \kappa(p) \end{cases} \tag{24}$$

其中

$$\hat{\xi}_1(p) = \operatorname{tr}\left[\widetilde{\Delta}(p)\right] - \hat{\lambda}(p) \approx \lambda_2(p) + \lambda_3(p),$$
$$\hat{\xi}_2(p) = \frac{1}{2}\left[\hat{\xi}_1^2(p) - \left(\|\widetilde{\Delta}(p)\|_F^2 - \hat{\lambda}^2(p)\right)\right] \approx \lambda_2(p)\lambda_3(p).$$

ˆ备注13。 定理推论1中带帽的记号，例如 $\hat{}v(p)$ 和 $\lambda(p)$，始终表示特征值相关项的梯度导出的近似。为简洁起见，我们可能不会在正文中为每个命题或定义都给出类似的推论，但这些陈述的梯度导出的对应量可以直接推导出来，相关项的记号也会相应地沿用上标帽。两种版本的量各具特色，在实践中强调不同的视角：

(a) 不带帽的量，或命题命题1中原本给出的量，对缩放海森估计量（3）的经验特征值分解进行处理，旨在普遍适用。它们在退化情形下尤其有效。然而，在非退化脊段附近，它们的表现通常较为一般。

(b) 如推论1所提出的特征值项的梯度导出的近似，会增强曲线局部方向的聚集。具体而言，这些近似会施加更强的作用力，引导非退化脊段附近的像素在一定邻域内朝真实曲线移动。与注释12 以及优化中发展牛顿法的论证类似，这归因于该映射内在的景观结构。

随后，我们可以定义与定义5 类似的帧内度量，其采用来自推论1的带帽近似，并提出以下推论，作为对定义-

第 6 节。

推论2. 给定一帧 $\Omega(\tau)$ 对于 $\tau \in [T]$，定义*5* 中的度量指标的梯度导出的对应量给出了 $p \in \Omega(\tau)$的近似权重

$$\hat{\Phi}(p) = \exp\left(\hat{L}_\rho(p) + \hat{L}_\theta(p) + \hat{L}_{\eta,\kappa}(p)\right).$$

因此，按如下方式更新权重和局部方向

$$v(p) \mapsto \frac{\Phi(p)v(p) + \hat{\Phi}(p)\hat{v}(p)}{\Phi(p) + \hat{\Phi}(p)}. \tag{25}$$

$$\Phi(p) \mapsto \Phi(p) + \hat{\Phi}(p), \tag{26}$$

备注 14。 (a) 推论2 将（带帽的）梯度导出的度量设计与（不带帽的）定义6相结合，并融合了注13中列出的两个系统各自的优势，以增强估计。特别是，在退化情形下，（不带帽的）项 $v(p)$ 和 $\Phi(p)$ 预计将在（25）和（26）中占主导地位，而在考虑非退化邻域像素时，带帽项则会发挥更重要的作用。

(b) 更新（25）部分继承了梯度导出的近似 $\hat{}v(p)$ 的优势，正如注13中所述，尤其是在非退化邻域像素处。具体而言，由于映射的梯度分布，更新后的向量很可能指向脊线曲线。

(c) 如适用，对25）中 $v(p)$ 的更新会影响候选脊线切向量 $v_\gamma(p)$ (9)，该向量用于粗糙度惩罚（定义 7）和曲线连接（定义 9）。类似地，对26）中 $\Phi(p)$ 的更新会影响帧间权重（定义 8）、曲线连接（定义 9）以及第 4 节中的不确定性陈述。

附录B：证明

本文将对全文中若干选定陈述给出详细论证。命题*1*的证明和推论*1*。在此证明中，我们始终考虑噪声水平趋近于零、导数计算的卷积效应趋于消失这一极限条件。为简洁起见，我们仅展示普通收敛结果。推广至随机收敛是显而易见的。

首先，如果网格点 p 恰好位于脊线上，则证明的推导可直接由

定义 1。

相反，假设网格点 $p \in \Omega$与某个脊点 $q \in \gamma$相对接近，我们将证明这些近似具有较高的质量。此外，此处点q的特征值相关量，即 $\{\lambda_1(q),\ \lambda_2(q),\ \lambda_3(q),\ v_1(q),\ v_2(q),\ v_3(q)\}$，始终指由精确海森矩阵 $\Delta(q)$通过解析分解得到的量。由于对可微映射的海森矩阵进行特征分解也是连续的，因此无帽项估计的近似质量可以直接得到保证

，依据连续性论证。因此，我们将主要关注推论1中由梯度导出的（带帽）量的行为，其中 $\Delta(q)$ 和 $\nabla(q)$ 均为非奇异矩阵。

不失一般性，我们可以假设单位长度向量 $\hat{v}(p) = \frac{\hat{\nabla}(p)}{\|\hat{\nabla}(p)\|}$ 可表示为以下线性组合

$$\hat{v}(p) = \sum_{i=1}^{3} k_i v_i(p), \qquad \text{where} \qquad \sum_{i=1}^{3} k_i^2 = 1.$$

注意 $\hat{\nabla}(p) = \tilde{\Delta}^+(p)\tilde{\nabla}(p)$ 很好地近似了 $\Delta^+(q)\nabla(q) \propto v_1(q)$，因为 $q \in \gamma$ 且 p 接近 q。

1. 由于$\hat{v}(p) = \frac{\hat{\nabla}(p)}{\|\hat{\nabla}(p)\|}$关于非奇异 $\hat{\nabla}(p)$连续，且已知 $\hat{\nabla}(p) \approx \|\Delta^+(q)\nabla(q)\| \cdot v_1(q)$，由连续性可得$\hat{v}(p) \approx v_1(q)$。

2. 关于$\hat{\rho}(p)$ 的结论可直接由余弦相似度的定义得出。

3. 根据上述结论，我们有 $k_1 = \langle \hat{v}(p), \ v_1(p) \rangle \approx \langle v_1(q), \ v_1(p) \rangle \approx 1$, $k_2 \approx 0$ 和$k_3 \approx 0$。由于$\hat{\lambda}(p) = \sum_{i=1}^{3} k_i^2 \lambda_i(p)$ 关于 k_i连续，且 $\lambda_1(p) \approx \lambda_1(q)$，我们得出$\hat{}$that $\lambda(p) \approx \lambda_1(q)$。

4. 根据连续性，可直接由上述第一点得出。

$\hat{}$ $\hat{}$ 5. 只需证明 $\xi_1(p) \approx \lambda_2(q) + \lambda_3(q)$ 和 $\xi_2(p) \approx \lambda_2(q)\lambda_3(q)$。经过一些计算可得

$$\hat{\xi}_1(p) = \sum_{i=1}^{3} (1 - k_i)\lambda_i(p), \qquad \hat{\xi}_2(p) = \lambda_2(p)\lambda_3(p) + \big(\lambda_1(p) - \hat{\lambda}(p)\big)\big(\lambda_2(p) + \lambda_3(p) - \hat{\lambda}(p)\big).$$

再根据连续性即可得出收敛性结论。

另一方面，在退化情况下，梯度导出的近似效果可能相当差，但仍能给出有界量，并且会由原始的未加帽项进行补偿，见推论2，该推论基于我们的算法设计。

□

命题2的证明。 1. 根据余弦相似度的定义，单调性结论成立。由于 $\max L_\rho(p) = 2$，因此 $L_\rho(p) = 2 \Leftrightarrow \rho(p) = 1 \Leftrightarrow v(p)$ 与时间指示向量 e_t平行。

2. 根据余弦相似度的定义，单调性结论成立。由于 $\max L_\theta(p) = \tilde{} \quad \hat{} \quad \tilde{}2$，因此 $L_\theta(p) = 2 \Leftrightarrow \theta(p) = 1 \Leftrightarrow v(p)$ 与 $\Delta(p)\nabla(p) = \nabla(p)$平行。

3. 通过简单的代数运算可以证明

$$\frac{2}{\eta(p)} = \frac{\lambda_2(p)}{\lambda_3(p)} + \frac{\lambda_3(p)}{\lambda_2(p)} \in (-\infty, -2] \bigcup [2, \infty).$$

这意味着，只有当 $\lambda_2(p)$ 和 $\lambda_3(p)$ 符号相同时，$\eta(p)$ 才为正；且当且仅当 $\lambda_2(p)/\lambda_3(p) = 1$ 时，$\eta(p) = 1$ 取得最大值。此外，由于 $L_{\eta,\ \kappa}(p)$ 分别关于 $\eta(p)$ 和乘积 $\lambda_2(p)\lambda_3(p)$ 单调，这是因为 $\kappa(p)$ 的单调性得以保持，因此该子命题成立。

梯度导出版本的类似推导也可以用同样的方法获得。 □

致谢

作者感谢 RamonManzorro（C´adiz 大学）以及 Peter A. Crozier 教授实验室的成员在成像模拟、数据处理和材料科学背景知识培训方面提供的帮助。

资金支持

作者衷心感谢美国国家科学基金会项目编号 2114143、1934985、1940124 和 1940276 提供的经费支持。

参考文献

Alhasson, H. F., Willcocks, C. G., Alharbi, S. S., Kasim, A. 和 Obara, B.(2021). 曲线结构增强与脊线检测方法之间的关系。《The Visual Computer》37 2263–2283。Ameli, S., Desai, Y. 和 Shadden, S. C. (2014). 拉格朗日相干结构计算的高效灵活流程开发。载于《数据分析与可视化中的拓扑方法 III》（P.-T. Bremer, I. Hotz, V. Pascucci和 R. Peikert, 编）。《数学与可视化》201–215。施普林格国际出版，Cham。Beyeler, M., Mirus, F. 和 Verl, A. (2014). 城市环境中基于视觉的鲁棒道路车道检测。载于2014年IEEE机器人与自动化国际会议（ICRA）4920–4925。Cheng, M.-Y., Hall, P. 和 Turlach, B. A.(1999). 非参数曲线估计量的高阶导数参数增强。《Biometrika》86 417–428。Colominas, M. A., Meignen, S. 和 Pham, D.-H. (2020). 基于短时傅里叶变换相位信息的完全自适应脊线检测。《IEEE信号处理快报》27 620–624。Damon, J. (1999). 二维图像中脊线与核心的性质。《数学成像与视觉杂志》10 163–174。Egerton, R. F. (2013). 透射电子显微镜中的辐射损伤控制。《Ultramicroscopy》127 100–108。Egerton, R. F. (2019). 透射电子显微镜中有机与无机样品的辐射损伤。《Micron》119 72–87。Egerton, R. F., Li, P. 和 Malac, M. (2004). 透射电子显微镜和扫描电子显微镜中的辐射损伤。《Micron》35 399–409。Fan, J. 和 Yao, Q. (2008). 非线性时间序列：非参数与参数方法。施普林格科学与商业媒体。

Faruqi, A. R. 和 McMullan, G. (2018). 用于电子显微镜的直接成像探测器。《核仪器与方法物理研究A辑：加速器、谱仪、探测器及相关设备》878 180–190。Frangi, A. F., Niessen, W. J., Vincken, K. L. 和 Viergever, M. A.(1998). 多尺度血管增强滤波。载于《医学图像计算与计算机辅助干预——MIC-CAI'98》（W. M. Wells、A. Colchester 和 S. Delp 编）1496 130–137。S pringer Berlin Heidelberg，柏林，海德堡。Green, P. J.和 Silverman, B. W. (1994). 非参数回归与广义线性模型：粗糙度惩罚方法，第1版。《统计学与应用概率专著》（丛书）。Chapman & Hall，伦敦。Haller, G. (2002). 基于近似速度数据的拉格朗日相干结构。《流体物理学》14 1851–1861。Haller, G. 和 Yuan, G. (2000). 二维湍流中的拉格朗日相干结构与混合。《物理学D：非线性现象》147 352–370。Kasten, J., Petz, C., Hotz, I., Noack, B. R.和 Hege, H.-C. (2009). 用于非定常流动分析的局部有限时间李雅普诺夫指数。载于《视觉建模与可视化》265–276。Laurent, N. 和 Meignen, S. (2022). 非平稳多分量信号的新型脊线检测器：开发及其在鲁棒模态提取中的应用。arXiv预印本 arXiv:2009.13123。Lawrence, E. L., Levin, B. D. A., Miller, B. K. 和 Crozier, P. A.(2020). 利用原位透射电子显微镜探索纳米颗粒时空表面动力学的方法。《显微镜学与微量分析》26 86–94。Lawrence, E. L., Levin, B. D. A., Boland, T., Chang, S. L. Y. 和 Crozier, P. A.(2021). 纳米颗粒表面动态阳离子行为的原子尺度表征：探测表面位点处氧空位的生成与消除。《ACS纳米》15 2624–2634。Levin, B. D. A.(2021). 用于材料科学电子显微镜的直接探测器及其应用。《物理学杂志：材料》4 042005。Levin, B. D. A., Lawrence, E. L. 和 Crozier, P. A. (2020). 动态结构变化期间原子柱皮米尺度空间运动的跟踪。《Ultramicroscopy》213 112978。Lin, R., Zhang, R., Wang, C., Yang, X.-Q. 和 Xin, H. L. (2021). TEMImageNet训练库及AtomSegNet深度学习模型：用于原子分辨率图像的高精度原子分割、定位、去噪和去模糊。《科学报告》11 5386。Lindeberg, T. (1996). 结合自动尺度选择的边缘检测与脊线检测。载于《CVPR论文集：IEEE计算机学会计算机视觉与模式识别会议》465–470。

Lindeberg, T. (1998). 采用自动尺度选择的特征检测。《国际计算机视觉杂志》30 79–116.
Lindeberg, T. 和 Almansa, A. (2000). 通过尺度空间算子的形状自适应与自动尺度选择增强指纹。IEEE图像处理汇刊 9 2027– 2042.Lopez, A. M., Lumbreras, F., Serrat, J. 和 Villanueva, J. J. (1999). 脊线与谷线检测方法的评估。IEEE模式分析与机器智能汇刊 21 327–335.Lopez-Molina, C., Vidal-Diez de Ulzurrun, G., Baetens, J. M., Van den Bulcke, J. 和De Baets, B. (2015). 使用二阶各向异性高斯核进行无监督脊线检测。《信号处理》116 55–67.Manzorro, R., Xu, Y., Vincent, J. L., Rivera, R., Matteson, D. S.和 Crozier, P. A. (2022). 探索斑点检测，以确定超低信噪比时间分辨透射电子显微镜图像中的原子柱位置和强度。《显微镜学与微量分析》1–14.Mathur, M., Haller, G., Peacock, T., Ruppert-Felsot, J. E. 和 Swinney, H. L. (2007). 揭示湍流的拉格朗日骨架。《物理评论快报》98 144502.Meijering, E., Jacob, M., Sarria, J. C. F., Steiner, P., Hirling, H.和 Unser, M. (2004). 荧光显微图像中神经突起追踪与分析工具的设计和验证。《细胞计量学》58A 167–176.Ng, C.-C., Yap, M. H., Costen, N. 和 Li, B. (2015). 使用混合海森滤波器自动检测皱纹。载于《计算机视觉——ACCV 2014》，（D. Cremers、I. Reid、H. Saito 和 M.-H. Yang 编）9005 609–622。施普林格国际出版，Cham.Nocedal, J. 和 Wright, S. (2006). 数值优化。施普林格科学与商业媒体。Nord, M., Vullum, P. E., MacLaren, I., Tybell, T. 和 Holmestad, R. (2017). Atomap：一种利用二维高斯拟合自动分析原子分辨率图像的新软件工具。《先进结构与化学成像》3 9.Norgard, G. 和 Bremer, P.-T. (2013). 脊线—谷线图：基于雅可比集的组合脊线检测。《计算机辅助几何设计》30 597–608.Pham, L. T., Oksum, E., Vu, M. D., Vo, Q. T., Du Le-Viet, K. 和 Eldosouky, A. M. (2021). 改进脊线位置检测方法，以更准确地解释位场数据并进行构造制图：弗里德堡穹隆地区（南非）案例研究。《非洲地球科学杂志》175 104099.Porteous, I. R. (2001). 几何微分：曲线与曲面的智能。剑桥大学出版社。

Reisenhofer, R. 和 King, E. J.(2019). 利用对称分子进行边缘、脊线和斑点检测。SIAM 成像科学杂志 12 1585–1626.Ruskin, R. S., Yu, Z. 和 Grigorieff, N. (2013). 透射电子显微镜电子探测器的定量表征。结构生物学杂志 184 385–393.Sato, Y., Nakajima, S., Shiraga, N., Atsumi, H., Yoshida, S., Koller, T., Gerig, G.和Kikinis, R. (1998). 用于医学图像中曲线结构分割与可视化的三维多尺度线滤波器。医学图像分析 2 143–168.Schindler, B., Peikert, R., Fuchs, R. 和 Theisel, H. (2012). 用于可视化拉格朗日相干结构的脊线概念。载于《数据分析与可视化中的拓扑方法 II：理论、算法与应用》，（R. Peikert、H. Hauser、H. Carr 和 R. Fuchs 编）。数学与可视化丛书 221–235。施普林格，柏林，海德堡。Senatore, C. 和 Ross, S. D. (2011). 通过提取有限时间李雅普诺夫指数场的脊线，检测并表征复杂流动中的传输屏障。《国际工程数值方法杂志》86 1163–1174.Shokouh, G.-S., Magnier, B., Xu, B. 和 Montesinos, P. (2021). 基于图像滤波技术的脊线检测：综述与客观分析。《模式识别与图像分析》31 551–570.Thomas, A. M., Crozier, P. A., Xu, Y. 和 Matteson, D. S. (2022). 使用拓扑数据分析检测并检验极高噪声图像序列中的特征，并应用于纳米颗粒视频。arXiv 预印本 arXiv:2209.13854.van der Walt, S., Schönberger, J. L., Nunez-Iglesias, J., Boulogne, F., Warner, J. D.,Yager, N., Gouillart, E. 和 Yu, T. (2014). Scikit-Image：Python 中的图像处理。PeerJ 2 e453.Vincent, J. L. 和 Crozier, P. A. (2021). 原子层面的动态行为及其对活性的影响：CeO_2负载的 Pt 催化剂上的一氧化碳氧化。arXiv 预印本 arXiv:2104.00821。