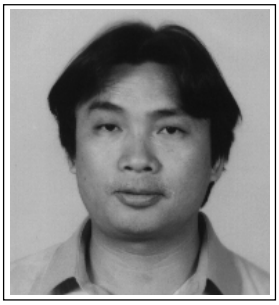
次後表面就可以恢復較平整的狀態，LEED繞射點也隨之恢復。然而要重覆取得相同的表面狀態仍然很困難。

由於C(100)表面的不穩定性，實驗上無法掌握完全相同的起始狀態以供一連串熱脫附實驗之進行，傳統TPD方法（即改變不同加熱速率或不同起始氫濃度）及對來自該表面熱脫附之D_2之動力學分析面臨相當大的考驗。本研究採取嘗試錯誤(try by error)分析法，對得自不同C(100)表面的TPD圖譜作動力學參數的猜測及模擬(simulation)直到合理的參數值被發現爲止。分析結果顯示D_2自C(100)表面之熱脫附爲一級反應，活化能(E_a)爲3.5電子伏特(eV)。詳細的脫附反應機構仍繼續在探討中。

以上所述總括本研究群這三年來在鑽石表面上的部份主要成果，在此略爲表述，以期引發更多在此方面的研究。



林景泉

學經歷：

國立清華大學化學系學士(1976)

美國芝加哥大學化學博士(1989)

本院原子與分子研究所助研究員(1991-94)、副研究員（1994-迄今）

張煥正

學經歷：

國立台灣大學農業化學系學士(1981)、碩士(1983)

美國印第安那大學化學博士(1990)

美國哈佛大學化學系博士後研究(1990-93)

本院原子與分子研究所副研究員（1994-迄今）

以波元轉換為基礎之影像分析

廖弘源

資訊研究所副研究員

一、研究動機

傳統影像處理及分析其實已有三十年以上的歷史，這期間各家各派無不卯足全力冀望有所突破，也的確隨著電腦軟硬體的日新月異影像處理的技術在三十年間有了長足的進步。傳統影像處理所探討或研發的對象不外乎針對兩樣東西：影像本身及作用在影像上的運算子(operator)。傳統影像處理的研究工作者爲了使影像分析能正確及快速，需要對上述兩樣東西做最精確及有效率的描述。對於影像本身，傳統的描述方式不外乎用一組基底(basis)，不管是二元三次或二元二次多項式，去與未知影像做交互作用；當每個組成基底成員與未知影像作用且都得到對應係數後，吾人就可用線性組合(linear combination)的方式將未知影像逼近出來。傳統影像處理的運算子部份，則是被設計用來與影像做交互作用，並藉以攫取或分析影像的內含。譬如說，一次微分原始影像，取其極值(extrema)即可得到重要的邊緣信息(edge information)。因此，運算子所做的動作（ex.微分）到底確實與否，關係著所測得資料的正確性，所以運算子的描述工作也影響傳統影像處理的精確度甚鉅。波元理論(wavelet

theory)在1940年代即在應用數學的領域被廣泛運用，但被用來做影像分析(image analysis)方面的研究則是80年代晚期由Univ. of Penn.的Stephane Mallat開始。因爲波元基底具有較複雜的本質，當它整組被用來描述或逼近一些函數變數(function variables)時，通常都能發揮既準確(accurate)而且高效率(efficient)的逼近效果。基本上，它能夠準確及有效地表達各種事物，這些事物可能是一個信號(signal)、影像(image)、系統(system)或一些物理現象(physical phenomena)。通常，事物能正確地被表達出來代表它可以被分析(Analytic)。因爲波元理論具有這樣的好處，我們因此想到利用它來從事影像分析的工作。我們前面提到如果要做好影像分析的工作，正確及有效地逼近影像本身及將作用於其上的運算子是十分重要的，下面我們將探討如何有效的運用波元理論於影像分析上，並藉以提昇影像處理的品質及效率。

二、波元理論能用在什麼地方？

瞭解波元的特質及用處之後，下一個值得思量的問題是：到底它能運用在什麼樣的影像處理相關問題上。當然我們不希望無的放矢隨便挑一些不相關的問題來解，因爲這樣做就不能彰顯波元理論的運用廣度及深度。因此，我們冀望挑一個系列相關連的問題來探討。在影像分析中，一個重要的問題就是如何從二維的影像中去重建三維物面的資料，有了三維物面的資料就可作物體辨認及物體檢測等等應用。在這重建的過程中，會牽扯到許多問題：第一、如何從影像中攫取有用的特徵，以做物面重建；第二、在影像擷取的過程中如果相機間有很大的相對運動，則這些影像必須先做校準(registration)，否則在二維物面的重建過程中，會遭遇到很大的因難；第三、要用什麼方法才能有效率地把想要的物面重建起來。

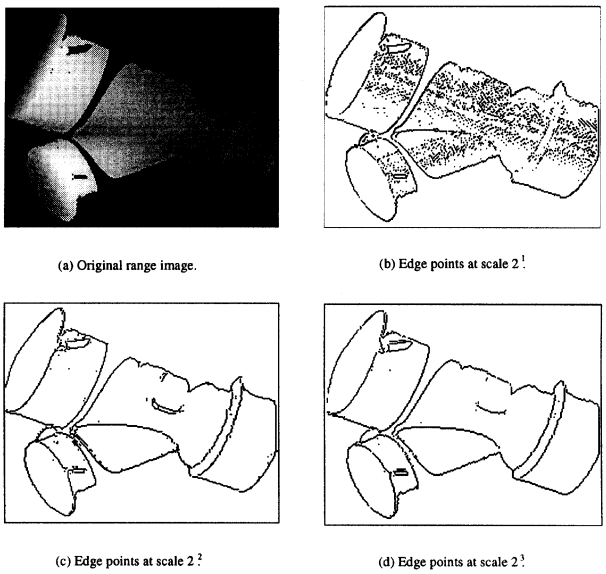
要解上述一系列的問題有許多不同的方式，但因爲這整個過程中牽涉到許多運算及問題本身的瓶頸有待克服，因此我們在五年前著手嘗試用波元轉換的特性來解此問題。因爲這個嘗試以前沒有人做過，因此就顯得特別有意義了。以下，我們將針對上述三個相關連的問題一一利用波元理論尋求解決之道，茲分段略述於后。

三、特徵攫取(edge feature detection)

特徵攫取泛指由影像中抓取最具意義的特徵值而言。基本上，它的目的在將極大的影像濃縮成較少的資料量，並且能保持原有影像的特點。其中，一項深具意義的特徵就是物體的邊緣資料(edge)。邊緣偵測的工作已被研究了二十年以上，但研究深度影像的邊緣偵測則是近十年的事。傳統上偵測深度影像(range image)的邊緣(edges)大都利用深度的變化或物面曲率的變化。利用深度變化偵測邊緣的方法基本上會受觀測方位的影響。因此，對於傳統的階梯邊緣(step edge)，此種方式可以偵測的很好。但是，當我們改變觀測點使得階梯邊緣變成屋頂邊緣(roof edge)時，偵測的效果將會大打折扣。如果我們使用偵測物面曲率變化(curvature change)的方法來偵測物體邊緣時，則需要很複雜的計算過程。同時，因爲曲率的計算需要二次微分，誤差較易放大及較易受雜訊影響，這些都是折損邊緣偵測的重要因素。因此我們提出了利用物面垂直的向量變化來偵測邊緣的新方法。理論上來說，因爲物面垂直向量的變化是一相對量而非絕對量，所以可以

不受觀測點變化的影響。在另一方面，因爲垂直向量變化只需微分一次，因此不像曲率變化般易受雜訊影響及需冗長的計算。問題是：如何將此問題轉化成可用波元轉換來解的形式呢？

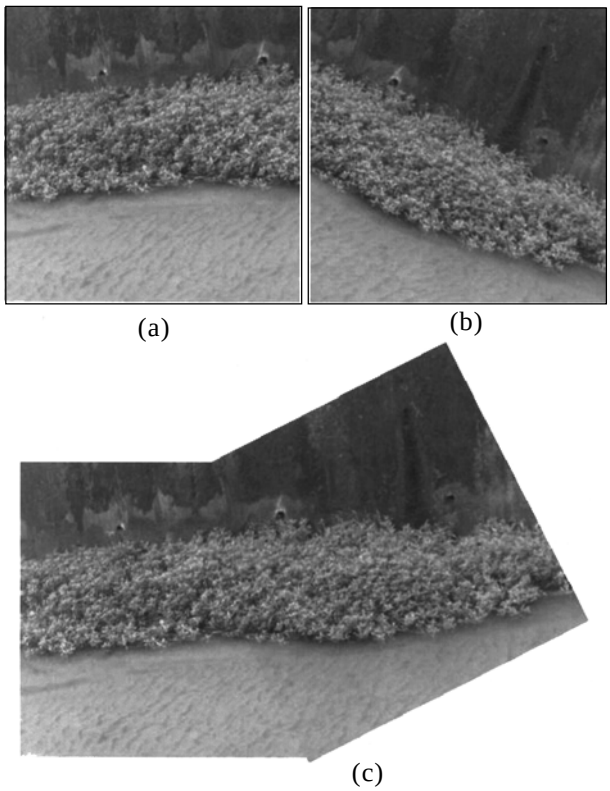
所有從事影像處理的人都知道，深度影像中的每個點都是離散點(discrete point)，這是使用電腦離散化必然的結果。但是這裏就產生了一個問題，因爲求取物面垂直向量變化必須先算出物面垂直向量的值。對一個離散的物面點而言，它與鄰近的點因不連續而不可微，解決這個問題在數值分析中有許多方法，我們則採用了三種方式做比較。第一種是利用二次曲面先將鄰近離散點逼近，再藉著這近似的連續曲面做微分求取物面垂直向量的動作。第二種方式則是利用正交波元基底去逼近鄰近離散點使之形成可微的連續物面，再求取垂直向量。第三種方式我們利用非正交波元基底去逼近物面。結果我們發現第三種方式得到的物面最精確，我們也因此採用非正交波元基底去從事所有的實驗。圖一所示爲我們利用非正交波元基底在不同尺度所測得的邊緣結果。



圖一　在不同尺度下所測得的邊緣結果

四、影像註記(image registration)

影像註記，顧名思義，就是由兩張部份重疊的影像中去找出相對應的關係，然後將之黏合起來。這種影像註記的技術在工業上及國家地理資訊系統的建立上均十分重要。以往的文獻在處理這方面的問題通常遭遇幾個困難點。首先，旋轉的問題一直是個大困難，因爲影像註記必須找到對應的一組點，如果有旋轉存在兩張影像間，則會產生極大的困難。另外，傳統的模版(template)比對對於如空照圖這麼大張的影像而言，將會耗費極大的計算量。我們這個研究的最主要貢獻在利用波元轉換的方式擷取可靠的特徵點，因爲這些點皆位於物體的

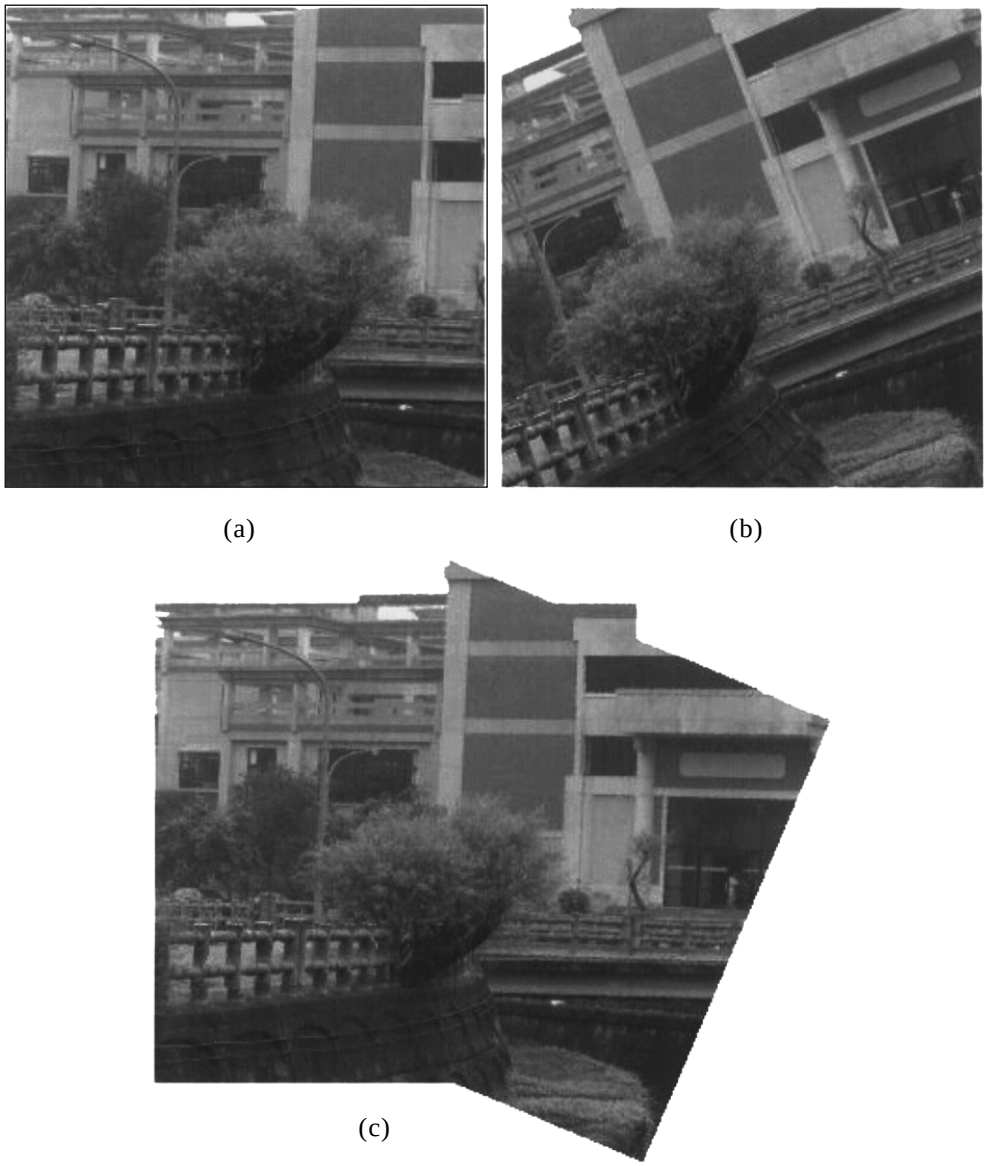


圖二　胡適紀念圖書館前花圃的影像註記結果

邊或凸凹處，因此每個點均有其方向性。透過波元轉換的方式，我們除了將原有影像(ex. 512×512)從約26萬個像素(pixels)減至100個左右的特徵點，同時因爲每一個特徵點均具有方向性，使得比對的工作能正確且快速的進行，不僅結果正確率高（實驗正確率約爲93%），而且速度比文獻上記載的結果均快速100倍以上，同時本方法亦可同時解決前述因旋轉所造成的困難。圖二及圖三所示分別爲胡適紀念圖書館前花圃及統計所的影像註記結果。

五、物面重建(shape-from-shading)

傳統在解物面重建的問題時因爲成像過程所採用的物理量不同而有不同的解法。其中一種方式稱爲shape from shading。在這個領域



圖三　本院統計所的影像註記結果

的研究者在解此問題時，通常遭遇的問題就是計算上收斂地太慢。因此，我們想到要用波元理論中的一些特質來解決此一問題。Shape from shading的問題基本上就是利用三維物體表面明暗度的變化，以及光源的位置來求算出物體的三維資料（例如：深度）。三維物體資料對電腦視覺研究非常重要的原因是它能提供物體所在的位置及方向，有了這些資料後不論對自動化生產線，導航系統，或者許多應用領域均有莫大的幫助。

傳統上在解shape from shading問題時通常有兩種方式，一種是求closed-form的解，另一種則是使用限制最佳化(constrained optimization)方式。前者因較難求得通解，因此大部份的researcher使用後者來求解。1989年，在MIT的Horn及Brooks出的一本書"shape from shading"中，他們用限制最佳化的方式來求解。他們定義一個cost function，第一項規範所求得的物面與預估的物面必須越接近越好，第二項及第三項則限制所求得的物面必須平滑以及具整體性。他們的方法經由電腦實驗需要花費數千次的遞迴運算，而且求出的物面非常粗糙且不精確。由於上述的缺點剛好可由波元基底的特性來彌補，於是我們產生了以波元來解此問題的念頭。但是，Horn Brooks的原始公式中，因爲需要求取最佳化，所以必須牽涉一些微分的運算。如果單純的使用一組波元基底來逼近所需解的函數變數，則我們所需做的只是將對應的係數求出即可。但是如果有微分運算時，原來的函數及微分後函數之間關係則必須加以推導，這部份將是以波元爲基底來解shape from shading時必須面對的主要瓶頸。另外，Horn及Brooks在他們所定義的cost function中，限制物面的條件並不

圖四　利用波元基底的方式所重建的物面

夠健全(robust)；因此，我們必須設法添加新的限制使求出的物面更完整健全。

因此我們提出一個以波元爲基礎的方法來解shape from shading的問題。這個新方法利用波元能有效且準確表達事物的特性來發展一個新的演算法則，藉以重建更好的三維物面。爲了推導此演算法則，我們以Horn及Brooks的cost function爲基礎，並且定兩個新的限制使重建的物面能更加健全。與傳統上使用Euler方程式或者數值方法來求解迥然不同的是，我們先將cost function轉換爲以波元逼近各函數變數的型式。爲了解決在最佳化過程中必須微分所造成的問題，我們使用Daubechies基底所定義的連結函數(connection coefficients)來連結微分前與微分後函數變數的關係。有了以上的關係式後，我們可以直接求取最佳化的遞迴式(iterative equations)。所求得的遞迴式中每一個遞迴(iteration)均會使cost function的值下降最多，當上述的遞迴式被求出後，shape from shading的問題也就迎刃而

解了。與傳統的解法來比較，我們所提出的方法不僅在準確度方面大大提昇，同時也在收斂速度（效率）方面增快了許多。上述的說法由我們的實驗得到了確切的印證。圖四爲兩組利用我們的方法所求得的三維物面結果。

廖弘源

學經歷：

國立清華大學物理系(1981)

美國西北大學電機電腦系碩士(1985)、博士(1990)

本院資訊研究所助研究員(1991-95)、副研究員（1995-迄今）

蛋白質輸入葉綠體機制的研究

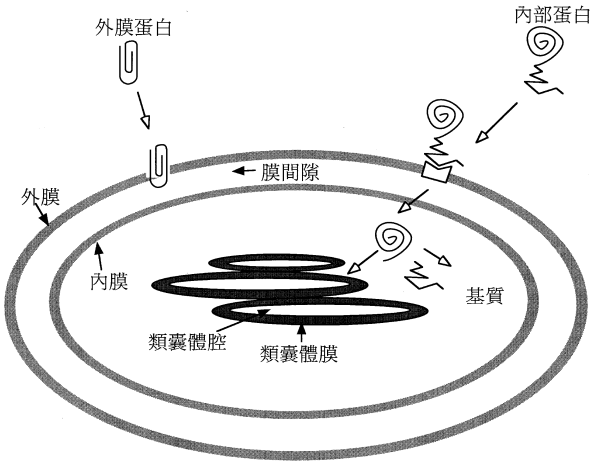
李秀敏

分子生物研究所助研究員

高等生物細胞與低等生物細胞最大的差別之一是，高等生物細胞除了細胞最外面的一層細胞膜外，細胞內又有另外一些膜，分隔出一個個的胞器。每一類的胞器內部皆含有不同的蛋白質，使得它們可以執行不同的功能，例如有的胞器負責產生能量，有的胞器負責分解廢物。這樣的“分區制度”，使得細胞能在最小的空間內做最有效率的運作。然而這樣的分區制度也產生了一個問題，亦即各胞器所含的蛋白質雖不同，但這些蛋白質卻是在同一個地方，即細胞質中，製造出來。因此一個蛋白質在被製造出來後，細胞必須要有一套系統，辨識出這個蛋白質是屬於哪一個胞器，然後正確地將這個蛋白質運送至該胞器，如此這個蛋白質，以至於這個胞器，才能發揮它們的功能。我們實驗室便是研究這個蛋白質辨識與運輸的過程，而我們研究的胞器是植物細胞特有的葉綠體。

葉綠體是植物行光合作用的地方。光合作用是植物利用陽光的能量將無機的二氧化碳及水，轉換成有機的碳水化合物，如醣類及澱粉。這些碳水化合物除了供植物本身生長所需外，也是人類食物的主要來源。而對於研究蛋白質運輸的人來說，研究葉綠體除了因爲它的重要性之外，葉綠體另一個吸引人的地方在於它結構的複雜性。葉綠體由三層膜包圍三個液態空間，總共分爲六個部份（圖一）：分別是外膜、膜間隙、內膜、基質、類囊體膜及類囊體腔。因此一個葉綠體蛋白在細胞質合成好之後，不但要能正確地被送到葉綠體，還要能被送到葉綠體的六個部分中正確的一個，這個蛋白質才能執行它的功用。

所有要運往葉綠體的蛋白，依它們運送的方法可大概分爲兩大類（圖一）。第一類爲運



圖一　葉綠體結構簡圖及兩類葉綠體蛋白