



КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ В СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

А.Протопопова, Е.Дубровин, А.Филонов / protopopova@polly.phys.msu.ru*

В сканирующей туннельной микроскопии исследователи часто работают с высокоупорядоченными тонкими пленками или кристаллическими структурами органических веществ. Эти объекты прекрасно подходят для постановки амбициозных задач, например, для получения с эффективным молекулярным разрешением картинки поверхности. В ряде случаев подобные изображения допускают построение пространственной модели элементарной ячейки пленки или кристалла. Общая проблема таких изображений – зашумленность. Чтобы улучшить их качество, используются методы корреляционного анализа.

Корреляция – статистическая взаимосвязь двух или нескольких случайных величин (либо величин, которые можно с некоторой степенью точности считать таковыми). При этом изменения одной или нескольких из них соответствуют систематическому изменению другой или других величин. Например, можно измерять рост и вес разных людей, представляя каждое измерение точкой в двумерном пространстве. Несмотря на то что

эти величины носят случайный характер, между ними будет наблюдаться некоторая зависимость. Это и есть пример положительной корреляции.

Взаимосвязь между величинами необходимо охарактеризовать численно, например, чтобы различать два случая (рис.1а). Математической мерой корреляции двух случайных величин служит ее коэффициент. Для массива из n точек (x_i, y_i) он определяется следующим образом:

Для каждого параметра рассчитываются средние значения:

$$\bar{x}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}, \bar{y}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}.$$

Коэффициент корреляции составляет:

$$r = \frac{\sum (x_{i1} - \bar{x}_1)(y_{i1} - \bar{y}_1)}{\sqrt{\sum (x_{i1} - \bar{x}_1)^2} \sqrt{\sum (y_{i1} - \bar{y}_1)^2}}. \quad (1)$$

В обработке изображений чаще используют немного видоизмененное определение корреляции. Если в выражении (1) рассматривать не сами случайные величины, а их отклонение от средних значений, можно записать аналогичное выражение:

$$r_{xy} = \frac{\sum x_i y_i}{\sqrt{\sum x_i^2} \sqrt{\sum y_i^2}}. \quad (2)$$

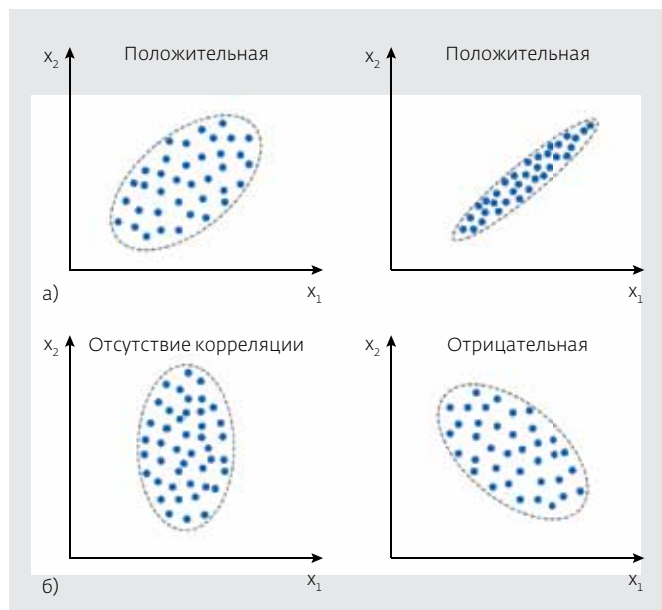


Рис.1. Две величины, связанные разными статистическими закономерностями

* Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, ЗАО "Центр перспективных технологий".

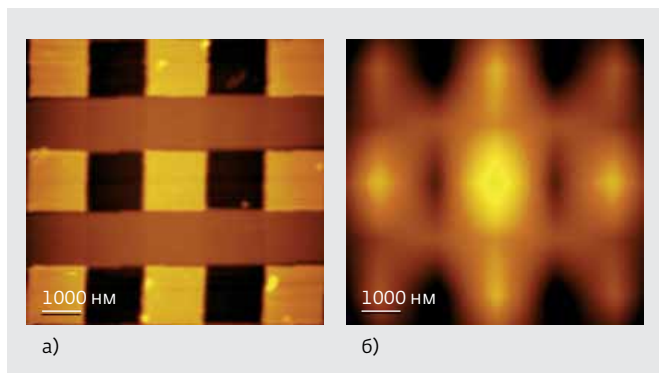


Рис.2. АСМ-изображение калибровочной решетки (а) и его автокорреляционная функция (б)

Для рассматриваемого случая корреляционная функция задает изменение корреляции в системах со случайными процессами, например, во времени или в пространстве.

ВЗАИМНАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ ДВУХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

До сих пор говорилось об одномерных случайных процессах или сигналах. Корреляционный анализ применим и к сигналам более высокой размерности, в том числе двумерным,

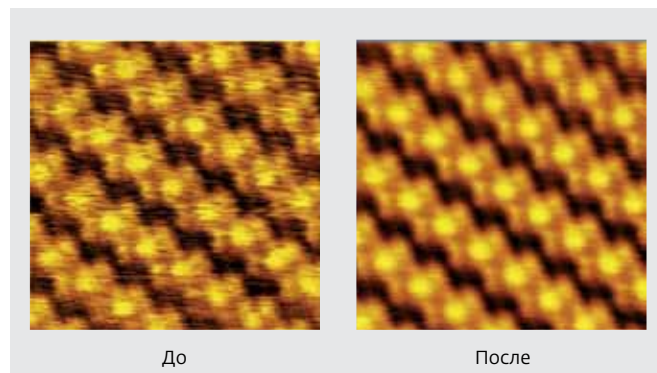


Рис.3. Пример применения функции "Найти структурный элемент"

т.е. к изображениям. Формулы в этом случае немного усложняются.

Имеются два изображения. Первое из них $z(x,y)$, а второе – $t(i,j)$ – можно назвать шаблоном. Обычно шаблон должен быть меньше, чем исследуемое изображение. Если обозначить его ширину через w , а длину как l , тогда значение функции корреляции с шаблоном в точке (x, y) исходного изображения будет определяться по формуле:

$$r_{tz}(x,y) = \sum_{i=0}^{w-1} \sum_{j=0}^{l-1} t(i,j) \cdot z(x+i-\frac{w}{2}, y+j-\frac{l}{2}). \quad (3)$$

НОВЫЕ КНИГИ ИЗДАТЕЛЬСТВА "ТЕХНОСФЕРА"



ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ

Под ред. Ю-Винг Май, Жонг-Жен Ю

Цена: 1188 р.

В книге приведен исчерпывающий обзор основных типов полимерных нанокompозитов. Часть I посвящена силикатам со слоистой структурой, рассмотрены их свойства: воспламеняемость и термостойкость, барьерные свойства, износостойкость и подверженность микробиологическому разрушению. В части II рассматриваются нанотрубки, наночастицы и неорганически-органические гибридные системы, анализируются их упругость и прочность, а также магнитные и светоиспускающие характеристики. Благодаря известным редакторам и международному авторскому коллективу книга "Полимерные нанокompозиты" станет настольным справочником по этому важному новому типу материалов для руководителей групп исследователей и разработчиков в автомобилестроении и гражданском строительстве.

МОСКВА:
ТЕХНОСФЕРА, 2011. –
688 с.
ISBN: 978-5-94836-203-8

КАК ЗАКАЗАТЬ НАШИ КНИГИ?

☎ 125319, Москва, а/я 91; ☎ (495) 956-3346, 234-0110; ✉ knigi@technosphaera.ru, sales@technosphaera.ru

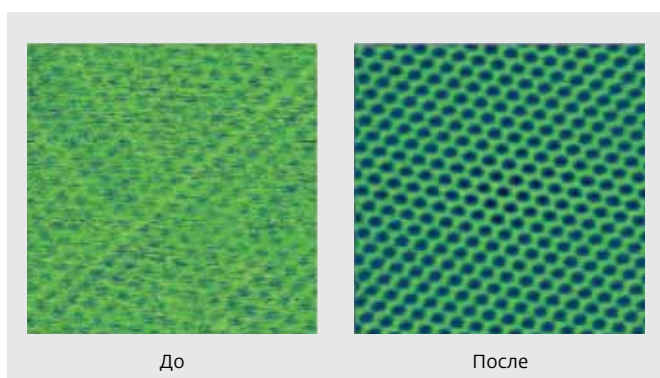


Рис. 4. СТМ-изображение муара на графите, улучшенное при помощи функции "Найти структурный элемент"

Нормализованное выражение, подобное (2), выглядит следующим образом:

$$\rho_{tz}(x, y) = \frac{R_{tz}(x, y)}{\sqrt{R_{zz}(x, y)R_{tt}\left(\frac{w}{2}, \frac{1}{2}\right)}}, \quad (4)$$

где R_{zz} и R_{tt} – автокорреляционные функции изображения и шаблона.

АВТОКОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ

Автокорреляционные функции R_{zz} и R_{tt} определяются по формулам:

$$R_{zz}(x, y) = \sum_{i=x-\frac{w}{2}}^{x+\frac{w}{2}} \sum_{j=y-\frac{1}{2}}^{y+\frac{1}{2}} Z^2(i, j),$$

$$R_{tt}\left(\frac{w}{2}, \frac{1}{2}\right) = \sum_{i=0}^{w-1} \sum_{j=0}^{l-1} t^2(i, j).$$

Автокорреляция представляет собой статистическую взаимосвязь случайных величин из одного ряда, взятых со сдвигом, например, по времени или в пространстве. В анализе изображений при автокорреляции шаблон совпадает с изображением, а сдвиг происходит по направлениям осей x, y . Важно, что при вычислении корреляционной функции вклад точек, выходящих за пределы изображения или шаблона, равен нулю.

УЛУЧШЕНИЕ РАЗРЕШЕНИЯ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

На основе корреляционного анализа могут быть построены различные алгоритмы обработки и улучшения АСМ-изображений. Одно из важнейших применений такого анализа – определение

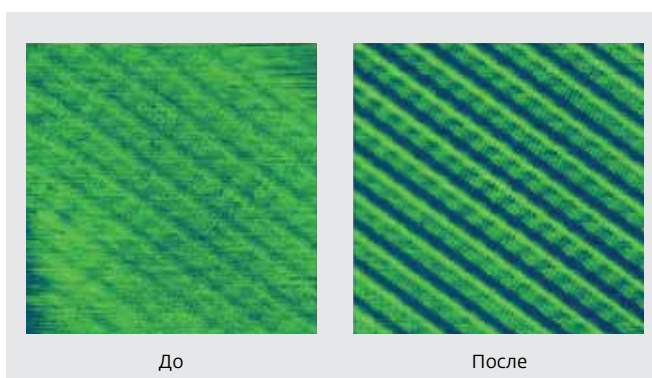


Рис. 5. СТМ-изображение пленки додециламина на поверхности графита, улучшенное при помощи функции "Найти структурный элемент"

характерного вида структурного элемента на изображениях периодических структур и их преобразование для более наглядной визуализации повторяющихся элементов.

Органические вещества, формирующие высокоупорядоченные тонкие пленки или кристаллические структуры, хорошо подходят для получения картинок с эффектным молекулярным разрешением, которое допускает построение пространственной модели элементарной ячейки пленки или кристалла. Однако общая и серьезная проблема таких изображений – их зашумленность.

Новая функция программы ФемтоСканОнлайн "Найти структурный элемент" позволяет средствами корреляционного анализа построить усредненное изображение структурного элемента и улучшить качество исходного изображения*.

Чтобы обработать при помощи этой функции изображение периодической структуры, необходимо выделить на нем небольшой фрагмент, содержащий изображение одного или нескольких элементов структуры и создать в новом окне его копию. Алгоритм основан на поиске максимумов взаимной корреляции между шаблоном и исходным изображением с усреднением данных в коррелирующих областях.

Последовательность работы с этой функцией подробно изложена в ее описании. При правильной настройке параметров можно добиться построения улучшенного изображения целиком, его фрагмента нужного размера или изображения усредненного элементарного элемента структуры. На рис. 3–5 приведены примеры успешного использования данной функции для обработки изображений различных объектов. ■

* <http://www.femtoscanonline.com>