

# Новые возможности программы ФемтоСкан

## Советы и рекомендации

### Выпуск №003 Волшебство корреляционного анализа. Часть 1.

В сканирующей зондовой микроскопии, и в первую очередь в сканирующей туннельной микроскопии, исследователи не редко работают с органическими веществами, формирующими высоко упорядоченные тонкие пленки или кристаллические структуры.

Такие объекты прекрасно подходят для того, чтобы поставить перед собой амбициозную задачу: получить картинки поверхности с эффектным молекулярным разрешением. В ряде случаев такие изображения допускают построение пространственной модели элементарной ячейки пленки или кристалла. Общая проблема таких изображений – их зашумленность. Для того, чтобы улучшить их качество используются методы корреляционного анализа, о которых будет подробно рассказано в этом выпуске.

- **Взаимная корреляция двух изображений,**
- **Улучшение разрешения на изображениях периодической структуры.**

## Содержание

1. Что такое корреляционная функция?
2. Взаимная корреляция двух изображений
3. Автокорреляция
4. Улучшение разрешения на изображениях периодической структуры



## Что такое корреляционная функция?

**Корреляцией** называется статистическая взаимосвязь двух или нескольких случайных величин (либо величин, которые можно с некоторой допустимой степенью точности считать таковыми). При этом изменения значений одной или нескольких из этих величин сопутствуют систематическому изменению значений другой или других величин. Например, мы можем измерять рост и вес разных людей и каждое измерение представлять точкой в двухмерном пространстве. Несмотря на то, что величины носят случайный характер, некоторая зависимость между ними будет наблюдаться, это пример положительной корреляции.

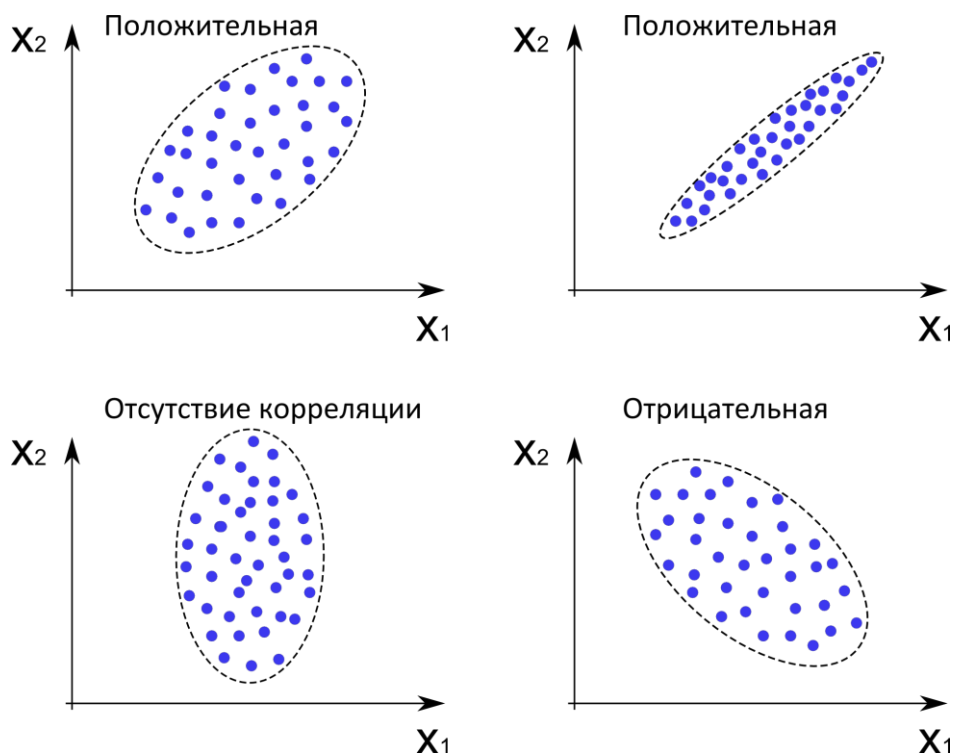


Рис. 1. Две величины, связанные разными статистическими закономерностями.

Взаимосвязь между величинами необходимо охарактеризовать численно, например, для того, чтобы различать два случая, показанных в верхней части рисунка 1. Математической мерой корреляции двух случайных величин служит **коэффициент корреляции**. Для массива из  $n$  точек  $(x_{1i}, y_{1i})$  он определяется следующим образом:

Рассчитываются средние значения для каждого из параметров:

$$\overline{x_1} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad \overline{y_1} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$$



И коэффициент корреляции составляет:

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

В обработке изображений чаще используют немного видоизмененное определение корреляции. Нетрудно видеть, что если в выражении (1) рассматривать не сами случайные величины, а их отклонение от средних значения, то можно записать аналогичное выражение:

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

**Корреляционная функция** — функция времени или пространственных координат, которая задает изменение корреляции в системах со случайными процессами, во времени или в пространстве, соответственно.

## Взаимная корреляция двух изображений

До сих пор мы говорили об одномерных случайных процессах, или сигналах. Методы корреляционного анализа применимы и к сигналам более высокой размерности, в том числе к двумерным, то есть к изображениям. Формулы в этом случае немного усложняются.

Теперь у нас есть два изображения, первое изображение  $z(x, y)$ , а второе —  $t(i, j)$  — назовем шаблоном. Обычно шаблон должен быть меньше размером, чем исследуемое изображение, ширину шаблона обозначим через  $w$ , длину  $l$ . Значение функции корреляции изображения с шаблоном в точке  $(x, y)$  исходного изображения определяется по формуле:

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

При этом нормализованное выражение, подобное (2) будет выглядеть следующим образом:

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

Где  $R_{zz}$  и  $R_{tt}$  — автокорреляционные функции изображения и шаблона.

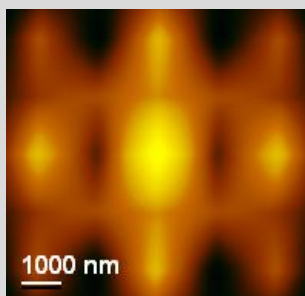
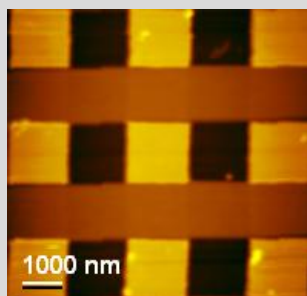


## Автокорреляционная функция изображения

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

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

Автокорреляция представляет собой статистическую взаимосвязь между случайными величинами из одного ряда, взятыми со сдвигом, например, со сдвигом по времени или по пространству. В анализе изображений при автокорреляции шаблон совпадает с изображением, а сдвиг происходит по направлениям осей XY. Не стоит забывать, что при вычислении значения корреляционной функции вклад тех точек, которые выходят за пределы изображения или шаблона, равен нулю.



Знаете ли Вы, что в программе ФемтоСкан реализованы алгоритмы построения автокорреляционной функции изображения, а так же взаимной корреляции двух изображений. Эти функции находятся в меню **Математика** -> **Корреляционный анализ**.

## Новое! Улучшение разрешения на изображениях периодической структуры

На основе корреляционного анализа могут быть построены различные алгоритмы обработки и улучшения АСМ-изображений. Одно из важнейших применений корреляционного анализа – определение характерного вида структурного элемента на изображениях периодических структур и преобразование исходного изображения для более наглядной визуализации повторяющихся структурных элементов.

В сканирующей зондовой микроскопии, и в первую очередь в сканирующей туннельной микроскопии, исследователи не редко работают с органическими веществами, формирующими высоко упорядоченные тонкие пленки или кристаллические структуры.



Такие объекты прекрасно подходят для получения картинок с эффектным молекулярным разрешением, которое в ряде случаев допускает построение пространственной модели элементарной ячейки пленки или кристалла. Общая проблема таких изображений – их зашумленность.

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

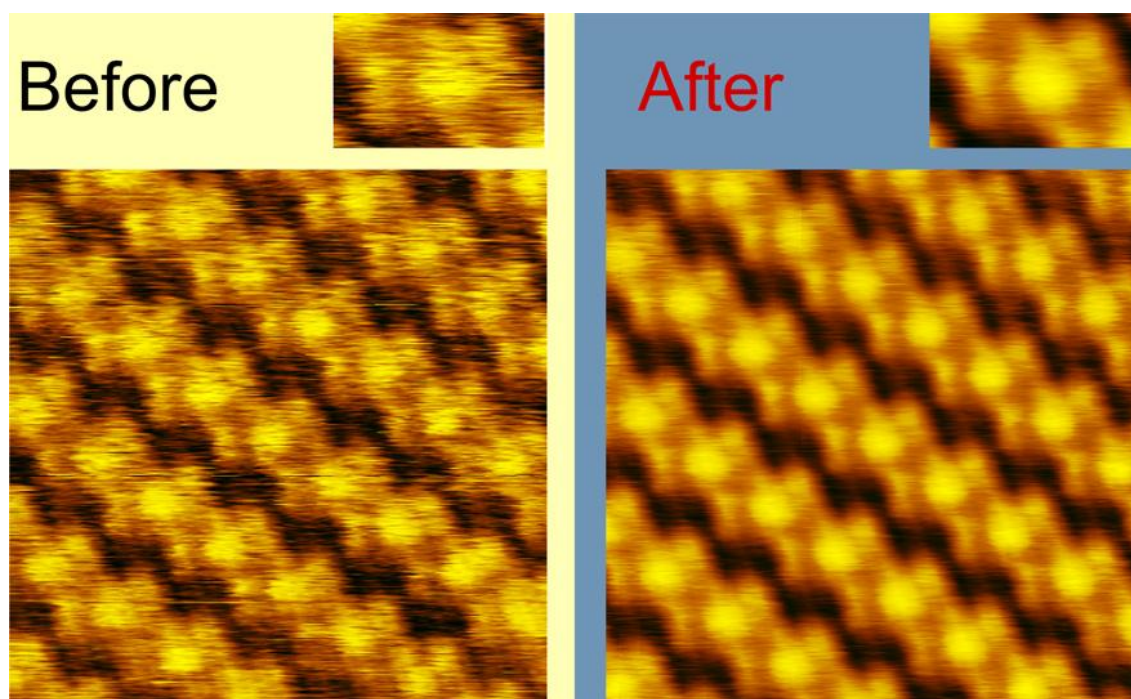


Рис. 2. Пример применения функции **Найти структурный элемент**.

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

Последовательность работы с данной функцией подробно изложена в ее [описании](#). При правильной настройке параметров Вы сможете добиться построения улучшенного изображения целиком, его фрагмента нужного размера или изображения одного усредненного элементарного элемента структуры. На рисунке 2 и ниже, на рисунках 3 и 4 приведены примеры успешного использования данной функции для обработки изображений различных объектов.



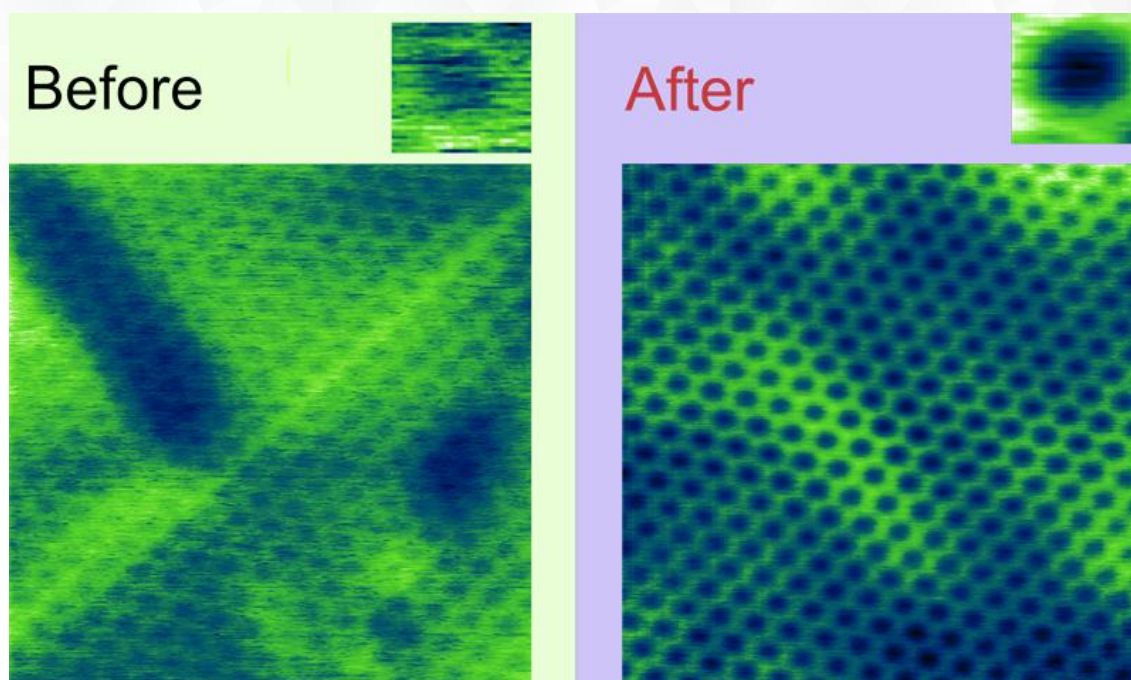


Рис. 3. Изображение муара на графите, полученное в СТМ и улучшенное при помощи функции **Найти структурный элемент**.

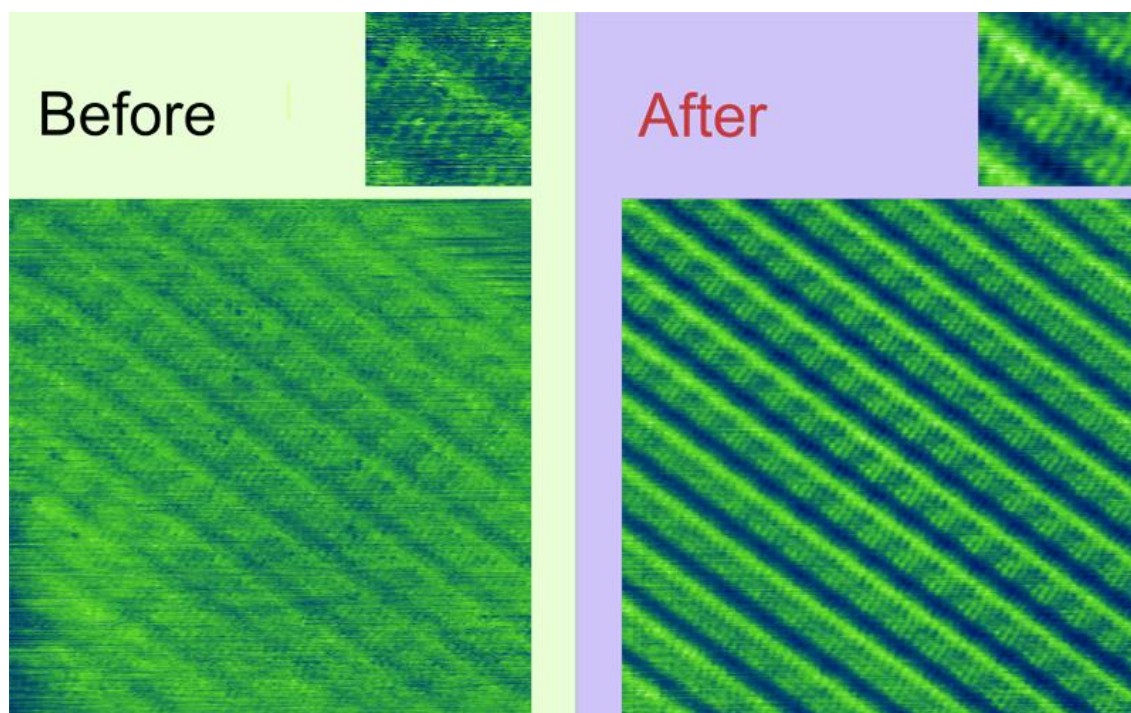


Рис. 4. Изображение пленки додециламина на поверхности графита, полученное в СТМ и улучшенное при помощи функции **Найти структурный элемент**.