

УДК 004.93

**Алгоритм работы программного комплекса выделения наночастиц на снимках с электронного микроскопа**

Жизняков А.Л., Кульков Я.Ю., Емельянов В.А.

В статье рассматривается актуальная задача автоматизации распознавания и анализа наночастиц на изображениях, получаемых с помощью электронных микроскопов. Подчеркивается важность использования наноструктур в различных областях, включая медицину, энергетику и информационные технологии, благодаря их уникальным свойствам. Основное внимание уделяется разработке плагина для программы ImageJ, который использует алгоритмы машинного обучения и компьютерного зрения для автоматической идентификации и классификации наночастиц. Описывается процесс обучения нейросети на данных, полученных от лаборатории физики и одномерных материалов Владимирского Государственного Университета, с применением архитектуры YOLO. Плагин обеспечивает высокую точность распознавания, пользовательский интерфейс и возможность обработки больших объемов данных, что значительно ускоряет процесс анализа изображений. Результаты тестирования подтверждают эффективность разработанного решения, позволяя исследователям сосредоточиться на более сложных задачах. В заключение, статья подчеркивает значимость автоматизации процессов в области нанотехнологий и материаловедения, открывая новые горизонты для научных исследований.

*Ключевые слова:* распознавание, обработка изображений, наночастицы, углеродные цепочки, карбин, плагин.

**Введение**

В настоящее время проводятся исследования, важным аспектом которых является изучение и анализ наноструктур, представляющих собой материалы с размерами порядка нанометров. Эти структуры обладают уникальными свойствами и характеристиками, которые делают их привлекательными для различных применений, включая создание новых материалов, развитие технологий в области медицины, энергетики, а также в области информационных технологий. Наноматериалы могут значительно улучшить характеристики существующих продуктов, например, увеличить их прочность, проводимость, термостойкость или изменить их оптические свойства.

Данные о распознавании частиц карбина находят применение в различных научных и технических сферах. Их можно использовать для разработки новых материалов, совершенствования существующих технологий и создания инновационных методов исследований. Кроме того, эти результаты помогут в изучении характеристик карбина и его взаимодействия с другими веществами. [1-3]

Разработка программного обеспечения, позволяющего в автоматическом режиме рас-

познавать наночастицы, является крайне актуальной задачей в современных исследованиях в области нанотехнологий и материаловедения. С учетом сложности и временных затрат, связанных с анализом изображений, получаемых с помощью электронных микроскопов, автоматизация этого процесса может значительно повысить эффективность и точность исследований. Использование алгоритмов машинного обучения и компьютерного зрения для идентификации и классификации наночастиц позволит ученым быстрее обрабатывать большие объемы данных, что, в свою очередь, ускорит процесс разработки новых материалов и технологий. Это особенно важно в условиях быстроразвивающегося научного прогресса, где каждая минута имеет значение.

Кроме того, автоматизация распознавания наночастиц не только повысит производительность, но и откроет новые горизонты для исследований. Разработка программного обеспечения, способного адаптироваться к различным условиям и типам наноматериалов, позволит создавать более универсальные решения для анализа. Это может привести к более глубокому пониманию свойств наноструктур и их взаимодействия с другими ве-

ществами, что в свою очередь окажет положительное влияние на такие области, как медицина, энергетика и информационные технологии. В итоге, автоматизация процесса распознавания наночастиц станет важным шагом к реализации инновационных идей и технологий, способствующих развитию науки и техники.

### Постановка задачи

Электронная микроскопия обеспечивает высокое разрешение и позволяет визуализировать структуры на наноуровне, что делает её незаменимым инструментом для изучения материалов на атомарном уровне. Тем не менее, анализ полученных изображений требует значительных временных затрат и высокой квалификации специалистов, что подчеркивает необходимость разработки автоматизированных методов обработки и анализа данных.

В современных исследованиях в области нанотехнологий и материаловедения важным аспектом является автоматизация процесса распознавания и анализа наночастиц, что позволит значительно повысить эффективность исследований и ускорить разработку новых материалов и технологий. В связи с этим возникает необходимость в разработке плагина для программы ImageJ, который будет использовать алгоритмы машинного обучения и компьютерного зрения для автоматической идентификации и классификации наночастиц на изображениях, получаемых с помощью электронных микроскопов. Этот плагин должен обеспечивать высокую точность распознавания, а также быть адаптированным к различным условиям и типам наноматериалов.

Современные подходы к распознаванию наноструктур включают использование алгоритмов машинного обучения и компьютерного зрения. Эти методы позволяют эффективно извлекать характеристики наночастиц, такие как размер, форма и распределение, а также классифицировать различные типы наноструктур. Исследователи разрабатывают как традиционные алгоритмы, так и методы глубокого обучения, которые демонстрируют высокую точность распознавания. Однако,

несмотря на достигнутые успехи, остаются нерешенные проблемы, такие как обработка изображений с низким контрастом и наличие шумов, что требует дальнейших исследований и оптимизации существующих алгоритмов. [4-12]

Основной задачей разработки плагина является создание инструмента, который сможет обрабатывать большие объемы данных и обеспечивать быструю и точную обработку изображений. Плагин должен включать в себя функции предобработки изображений, выделения признаков и машинного обучения для классификации наночастиц. Важно, чтобы разработанное решение было дружелюбным для пользователя, позволяя исследователям легко интегрировать его в свои рабочие процессы и получать необходимую информацию о характеристиках наноструктур и их взаимодействии с другими веществами.

Для эффективного решения поставленной задачи необходимо было применить нейронную сеть, способную выполнять задачи как обнаружения объектов (для выделения частиц), так и их сегментации (для определения связей между ними). В процессе исследования данной проблемы была выбрана архитектура YOLO, признанная одной из самых эффективных в настоящее время.

YOLO (You Only Look Once) представляет собой архитектуру одноэтапного обнаружения объектов, обрабатывающую изображение в целом за один проход, что существенно отличает её от двухэтапных подходов, таких как R-CNN. Эта нейронная сеть делит изображение на сетку, в каждой ячейке которой определяются вероятности присутствия объектов и координаты ограничивающих рамок. Такой подход обеспечивает высокую производительность и скорость, что позволяет YOLO работать с минимальными задержками даже при обработке изображений высокого разрешения.

Поскольку обученная нейросеть с данной архитектурой может функционировать только в одном из нужных режимов, в итоге были созданы две модели, каждая из которых была



Данная задача является более сложной, так как даже человеческий глаз не всегда способен заметить искомые объекты. Из показанных выше изображений видно, что модель выделяет не все связи, но достаточно многие, чтобы признать её работу успешной, так как даже такой результат значительно упростит работу исследователей. Кроме того, данный результат также может быть значительно улучшен путём увеличения обучающего набора.

### Описание алгоритма

#### 1. Получение изображения

Входные данные: Пользователь загружает изображение в формате, поддерживаемом ImageJ (например, TIFF, JPEG, PNG).

Действие: Плагин получает доступ к текущему изображению в ImageJ через API, обеспечивая возможность дальнейшей обработки.

#### 2. Конвертация изображения

Цель: Подготовка изображения к последующим этапам обработки.

Действие: Программа конвертирует изображение в формат, оптимальный для дальнейшей обработки. Например, может быть выполнена конвертация в градации серого, если изображение изначально цветное. Это позволяет уменьшить размер данных и упрощает анализ.

#### 3. Предварительная обработка

Цель: Улучшение качества изображения для повышения точности распознавания.

Действия:

Фильтрация: Применение фильтров (например, гауссов фильтр) для уменьшения шума и сглаживания изображения.

Устранение фона: Применение методов сегментации для удаления фона, что позволяет выделить области интереса (наночастицы).

Нормализация: Приведение яркости и контраста изображения к стандартным значениям для обеспечения однородности данных.

#### 4. Передача в нейросеть

Цель: Использование предварительно обученной нейросети для распознавания наночастиц.

Действие: Обработанное изображение передается в нейросеть, которая была обучена на аналогичных данных. Нейросеть анализирует изображение и выдает предсказания о местоположении наночастиц.

#### 5. Получение координат частиц

Цель: Определение точных координат распознанных наночастиц.

Действие: Нейросеть генерирует набор координат описывающего прямоугольника для каждой распознанной наночастицы. Эти координаты могут быть представлены в виде массива или списка.

#### 6. Выделение на изображении распознанных частиц

Цель: Визуализация распознанных наночастиц для дальнейшего анализа.

Действия:

Рисование контуров: На исходное изображение накладываются контуры или метки на основе полученных координат.

Цветовое кодирование: Частицы могут быть выделены различными цветами для улучшения визуализации и различения.

#### 7. Возврат обработанного изображения в ImageJ

Цель: Предоставление пользователю обработанного изображения с выделенными наночастицами.

Действие: Обработанное изображение возвращается в ImageJ, где пользователь может сохранить его, просмотреть или провести дальнейший анализ.

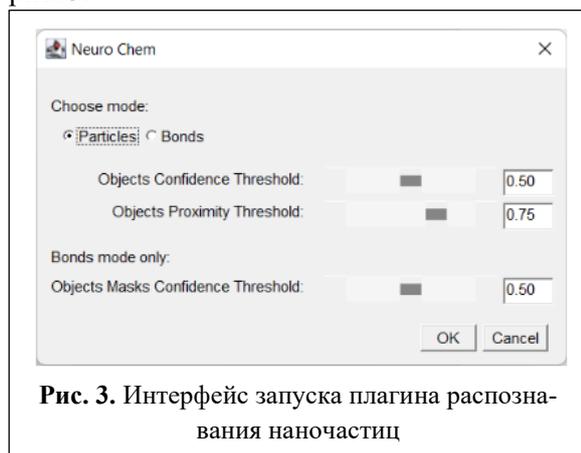
### Структура и интерфейс обмена разработанного плагина

Плагин содержит в себе два основных метода – для поиска частиц и связей между ними соответственно. Он может быть использован при помощи графического интерфейса программы ImageJ. Для обмена данными об изображении используются классы ImagePlus (получение изображения), Roi и RoiManager (вывод обнаруженных объектов) из библиотеки ImageJ API. Для вывода пользовательского интерфейса и получения из него данных используется класс GenericDialog той же библиотеки.

Плагин разработан для программы ImageJ на языке Java. Для работы с программой ImageJ используется библиотека ImageJ API. Библиотека ONNX Runtime отвечает за работу с нейросетевыми моделями, сконвертированными из формата YOLO в формат ONNX, так как для использования изначального формата не существует библиотек для языка Java. Для вычисления контуров масок связей используется библиотека OpenCV.

Для запуска плагина необходимо запустить ImageJ, открыть изображение, на котором будет производиться поиск объектов, после чего выбрать пункт «Neuro Chem» в меню Analyze/Tools. При запуске без открытого изображения будет выведена ошибка.

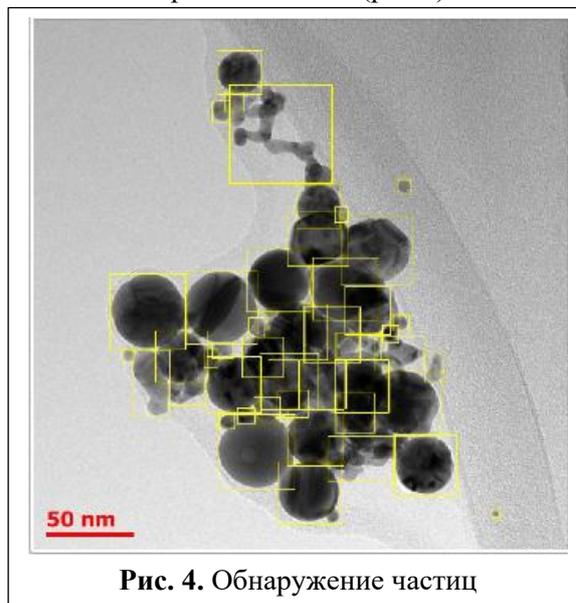
Изображение окна плагина показано на рис. 3.



В данном окне необходимо выбрать режим обнаружения: «Particles» (частицы) или «Bonds» (связи). Далее необходимо задать значения порогов (2 или 3 значения, в зависимости от выбранного режима) и нажать на кнопку «ОК». После этого плагин начнёт поиск объектов выбранного типа. Стоит заметить, что обработка сложных изображений может занять некоторое время. Прогресс выполнения можно отследить при помощи индикатора на панели инструментов программы.

Если программа ничего не обнаружит, будет выведено соответствующее сообщение. Если же объекты будут обнаружены, то выведется окно «ROI Manager», в котором будут отображены все объекты в порядке от большей вероятности соответствия искомому типу

к меньшей. При поиске связей для некоторых из найденных объектов может быть выведено несколько вариантов масок (рис.4).



### Заключение

Распознавание наночастиц на изображениях с электронного микроскопа необходимо для анализа их структуры и свойств, а также для определения их количественного содержания в исследуемом образце. Это позволяет изучать их, разрабатывать новые материалы и оптимизировать процессы получения и использования.

Применение нейронных сетей позволяет значительно улучшить и ускорить процесс обработки изображений, что заметно как при сравнении с ручными методами, так и с алгоритмическими. Разработанный плагин позволит учёным, работающим над проектами, в ходе которых необходимо изучать изображения с присутствующими на них наночастицами, экономить собственные усилия на отдельную работу с каждым изображением, а также время и деньги на разработку аналогичного решения.

Предложенный алгоритм демонстрирует эффективный подход к автоматизации процесса распознавания наночастиц с использованием ImageJ и нейросетевых технологий. Реализация данного плагина не только ускоряет процесс анализа, но и повышает его точ-

ность, открывая новые возможности для исследований в области нанотехнологий и материаловедения.

### Литература

1. Weiwei Cao, Huakai Xu, Pu Liu, Yan He, Guowei Yang. The kinked structure and interchain van der Waals interaction of carbyne nanocrystals. *Chemical Science*, Volume 14, Issue 2, 2023, Pages 338-344, ISSN 2041-6520.
2. Yan He, Huakai Xu, Gang Ouyang, Guowei Yang. Thermal properties of carbyne nanostructures, *Results in Physics*, Volume 34, 2022, 105311, ISSN 2211-3797.
3. Guowei Yang. Synthesis, properties, and applications of carbyne nanocrystals. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, Volume 151, 2022, 100692, ISSN 0927-796X.
4. Jonathan Y. C. Ting, George Opletal, Amanda S. Barnard. Unsupervised pattern recognition on the surface of simulated metal nanoparticles for catalytic applications. *Catalysis Science & Technology*, Volume 14, Issue 22, 2024, Pages 6651-6661, ISSN 2044-4753.
5. Gao, Y., et al. Automated Recognition of Carbon Nanostructures Using Deep Learning. *Scientific Reports* 8.1 (2018): 1-9.
6. Автоматизированный метод распознавания наночастиц алюминия, осажденных в вакууме на кремниевые подложки / В. К. Гончаров, А. А. Пехота, М. В. Пузырев, В. Ю. Ступакевич // *Материалы и структуры современной электроники : Материалы VIII Международной научной конференции, Минск, 10–12 октября 2018 года / Редколлегия В.Б. Оджаяв [и др.]*. – Минск: Белорусский государственный университет, 2018. – С. 331-334.
7. L. Zhao, R. He, K. T. P. Wang, and K. S. Choi, “Automated recognition of carbon nanotubes in transmission electron microscopy images,” *Nano Research* 3, 764-771 (2010).
8. H. Zheng, Z. Wang, Y. Liu, L. Yang, and H. Shen, “A novel method for automated recognition of carbon nanostructures in transmission electron microscope images,” *Carbon* 50, 181-192 (2012).
9. Моделирование эквивалентного радиуса эллипса распределения корреляционных рамановских спектров при распознавании наночастиц серебра на полиэфирных волокнах / К. В. Бутов, В. М. Емельянов, Т. А. Добровольская [и др.] // *Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов : труды XIII Международной конференции, Курск, 24–26 мая 2016 года / ответственный редактор Л.В. Кожитов. Том часть 1. – Курск: Юго-Западный государственный университет, 2016. – С. 277-281*
10. Преобразование Хоха как основа метода распознавания изображений и трекинга флуоресцирующих наночастиц / А. А. Баев, И. Ю. Еремчев, А. А. Роженцов, А. В. Наумов // *Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2018. – Т. 82, № 8. – С. 1140-1143. – DOI 10.1134/S0367676518080082.*
11. Автоматическое распознавание наночастиц на изображениях сканирующей зондовой микроскопии с помощью различных методов глубокого машинного обучения / А. Г. Окунев, А. В. Нартова, М. Ф. Лиз, А. В. Матвеев // *Робототехника и искусственный интеллект : Материалы XI Всероссийской научно-технической конференции с международным участием, Железногорск, 14 декабря 2019 года / Под научной редакцией В.А. Углева. – Железногорск: Литера-Принт, 2019. – С. 248-251.*
12. Gao, Y., et al. “Automated Recognition of Carbon Nanostructures Using Deep Learning.” *Scientific Reports* 8.1 (2018): 1-9.

*Работа выполнена в рамках государственного задания в сфере научной деятельности Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема FZUN-2024-0019, госзадание ВлГУ).*

**Поступила 03 мая 2024 г.**

The article addresses the current task of automating the recognition and analysis of nanoparticles in images obtained using electron microscopes. It emphasizes the importance of using nanostructures in various fields, including medicine, energy, and information technology, due to their unique properties. The main focus is on the development of a plugin for the ImageJ software that utilizes machine learning algorithms and computer vision for the automatic identification and classification of nanoparticles. The process of training the neural network on data obtained from the Physics and One-Dimensional Materials Laboratory of Vladimir State University is described, using the YOLO architecture. The plugin ensures high recognition accuracy, a user-friendly interface, and the ability to process large volumes of data, significantly speeding up the image analysis process. Testing results confirm the effectiveness of the developed solution, allowing researchers to focus on more complex tasks. In conclusion, the article highlights the significance of automating processes in the field of nanotechnology and materials science, opening new horizons for scientific research.

*Key words:* recognition, image processing, nanoparticles, carbon chains, carbyne, plugin.

*Жизняков Аркадий Львович* – д. т. н., профессор, заведующий кафедрой программной инженерии Муромского института (филиала) ФГОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых».

E-mail: lvovich1975@mail.ru.

*Кульков Ярослав Юрьевич* – кандидат технических наук, доцент кафедры программной инженерии Муромского института (филиала) ФГОУВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых».

E-mail: y\_mail@mail.ru.

*Емельянов Владислав Андреевич* – магистрант кафедры программной инженерии Муромского института (филиала) ФГОУВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых».

E-mail: vlademel2016@yandex.ru

Адрес: 602264, Муром, ул. Орловская, д. 23.