УДК 004.93

Разработка алгоритма распознавания наночастиц на снимках с электронного микроскопа

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

Распознавание наноструктур является сложной задачей, требующей применения современных методов и алгоритмов. В статье рассматривается актуальная задача распознавания наночастиц карбина с использованием электронного микроскопа. Карбин, линейная аллотропная форма углерода, демонстрирует уникальные свойства, такие как высокая прочность и электропроводность, что делает его перспективным для применения в электронике и нанотехнологиях. Описанные методы анализа изображений позволяют эффективно выделять наночастицы на высокодетализированных изображениях. Применение метода Хафа для обнаружения окружностей обеспечивает автоматизацию процесса распознавания, что значительно ускоряет анализ. Результаты исследования имеют важное значение для разработки новых материалов и оптимизации технологий в области материаловедения и наноинженерии, а также способствуют более глубокому пониманию структурных характеристик карбина. Также представлены результаты экспериментальных исследований, которые подтверждают эффективность предложенных методов.

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

Введение

Одним из ключевых аспектов исследований является изучение и анализ наноструктур, которые представляют собой материалы с размерами порядка нанометров. Эти структуры обладают уникальными свойствами и характеристиками, которые делают их привлекательными для различных применений. Задача распознавания частиц карбина является актуальной задачей в области материаловедения и нанотехнологий.

Карбин - это химическое соединение, состоящее из атомов углерода, связанных в одну линейную цепочку. Это одно из аллотропных форм углерода, наряду с графитом и алмазом. Он был открыт в 1960-х годах и имеет уникальные свойства, такие как высокая прочность и жесткость, что делает его перспективным материалом для использования в различных областях, таких как электроника, оптика и наноинженерия.

Одним из методов исследования структуры и свойств наночастиц является электронный микроскоп. Изображения, полученные с помощью электронного микроскопа, позволяют получить подробную информацию о структуре и свойствах частиц. Однако, анализ таких изображений требует значительных усилий и времени, так как наночастицы имеют малые размеры и могут быть трудно различимы на фоне других частиц и дефектов.

Результаты распознавания частиц карбина используются в различных областях науки и техники. Они могут использоваться для создания новых материалов, улучшения существующих технологий и разработки новых методов исследования. Также они могут быть использованы для изучения свойств карбина и его влияния на другие материалы [1-8].

Линейные углеродные цепи представляют собой одномерные структуры, состоящие из атомов углерода, соединенных между собой в одну линию. Они обладают уникальными свойствами, такими как высокая прочность, электропроводность и химическая стабильность, что делает их перспективными для использования в различных областях, включая электронику, химическую промышленность и биомедицину.

Постановка задачи

При лазерном облучении в жидких средах карбиновые цепочки могут стабилизироваться за счет лазерной абляции в присутствии наночастиц золота, что приводит к закреплению концов линейных цепей на поверхности наночастиц золота и предотвращает их дальнейшее скручивание в кольца [3].

На рис. 1 представлено одно из таких изображений. Для контроля закрепления наночастиц необходимо провести их обнаружение и подсчет.

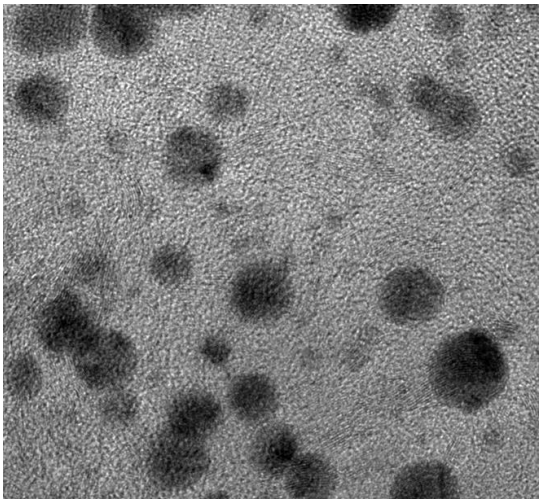

Рис. 1. Изображение с электронного микроскопа с наночастицами золота

Однако, распознавание наночастиц золота на полученных изображениях является сложной задачей, так как они могут иметь различные конфигурации и размеры.

Во-первых, изображения, полученные с помощью электронного микроскопа, имеют очень высокое разрешение и могут содержать большое количество деталей, которые могут затруднить процесс распознавания. Во-вторых, частицы могут иметь различные формы, размеры и свойства, что также усложняет задачу их идентификации. В-третьих, на изображениях могут присутствовать различные артефакты, такие как шумы, искажения и тени, которые также необходимо учитывать при распознавании частиц. Для решения этих проблем используются различные методы и алгоритмы, такие как машинное обучение, статистический анализ и обработка изображений [9-12].

Описание решения

Для решения задачи обнаружения, необходимо разработать алгоритм, который в автоматическом режиме будет выделять фрагменты наночастиц на изображении. Задача состоит в разработке метода, который способен определить и выделить области на изображении, где присутствуют данные элементы, и отделить их от остальных структур и фонового шума. Автоматическое выделение наночастиц на изображении позволит ускорить процесс анализа и облегчить работу исследователей и специалистов в области материаловедения.

В связи с высокой зашумлённостью схожими по цвету элементами, первым делом применяется размытие по Гауссу. Для двух измерений оно описывается формулой 1. Размер используемого ядра – 101x101.

$$G(x,y) = \frac{1}{2\pi r^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2r^2}} \quad (1)$$

Далее, изображение необходимо бинаризовать. Используется бинаризация по методу Оцу. Данный метод отличается от обычной пороговой бинаризации тем, что порог не задаётся, а вычисляется по формуле 2 автоматически. При вычислении порога важно сделать так, чтобы внутриклассовая дисперсия была минимальной.

$$\sigma_\omega^2(t) = \omega_1(t)\sigma_1^2(t) + \omega_2(t)\sigma_2^2(t) \quad (2)$$

Следующим шагом необходимо выделить границы обнаруженных объектов. Для этого используется детектор границ Кэнни.

Детектор границ Кэнни (Canny Edge Detector) использует формулу (3) для определения градиента изображения:

$$G_x = -(I_x^2 - I_y^2)/(I_x^2 + I_y^2)$$
$$G_y = 2I_xI_y/(I_x^2 + I_y^2), \quad (3)$$

где I_x и I^y - первые производные интенсивности изображения по горизонтали и вертикали соответственно, а G_x и G_y – градиенты интенсивности в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно.

Затем детектор Кэнни использует эту информацию для определения границ на изображении. Он вычисляет пороги для верхней и нижней границ градиента, а затем выделяет пиксели, которые превышают эти пороги.

В результате выполнения данных операций, на изображении остаются только границы объектов, что отображено на рис. 2.

Последним выполняется преобразование Хафа. Оно, при помощи голосования (чем больше совпадений с определёнными параметрами (в случае с кругами – с градиентами рёбер) – тем больше вероятность, что это и

есть искомый объект), обнаруживает окружности на ранее обработанном изображении.

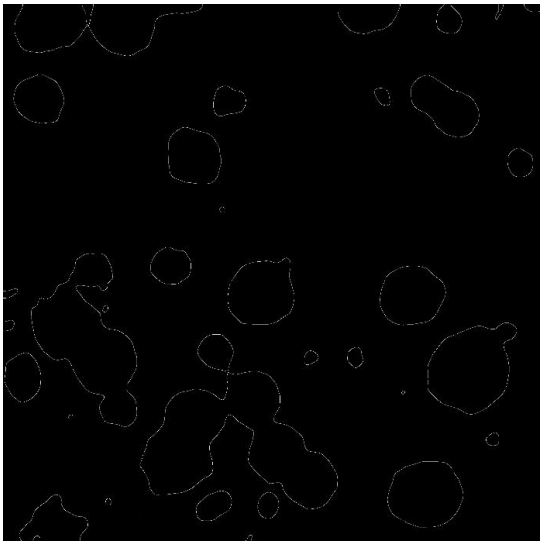

Рис. 2. Выделенные границы областей наночастиц

Метод Хафа (Hough Transform) используется для обнаружения объектов на изображении, которые имеют форму круга. Для этого используется формула (4).

$H(\rho, \theta) = \Sigma(I(x, y)*\rho* \theta(\rho(x - \rho), \theta + \theta(y - \rho))),(4)$

где $H(\rho, \theta)$ - функция Хафа, которая представляет собой сумму интенсивностей пикселей на изображении I, которые соответствуют окружности с центром в точке (ρ, θ).

Функция $\theta(x, y)$ определяется как:

$\theta(x, y) = 1$, если $(x \wedge 2) + (y \wedge 2) <= 1$

$\theta(x, y) = 0$, иначе

Для работы с методом использовались следующие параметры: минимальное расстояние между центрами – 50, суммирующее пороговое значение детектирования центров – 20, минимальный радиус – 0, максимальный радиус – 235. В результате работы метода получается список, в котором каждый круг задаётся координатами его центра и радиусом. Для наглядности окружности были отрисованы, результат можно увидеть на рис. 3.

Полученные окружности для удобства дальнейшей работы с ними должны быть выведены на исходное изображение. Итог работы показан на рис. 4.

Заключение

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

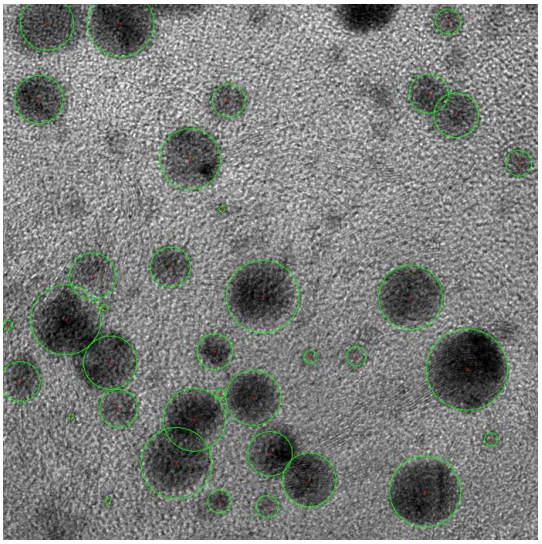

Рис. 4. Результат работы алгоритма обнаружения

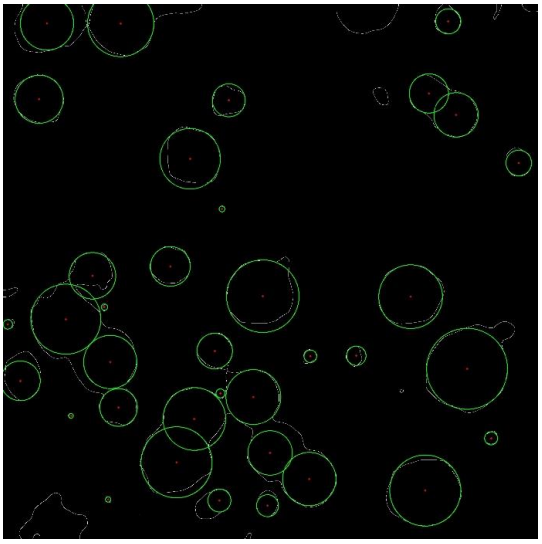

Рис.3. Распознанные круглые объекты на изображении

Литература

1. *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).

2. 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).

3. Автоматизированный метод распознавания наночастиц алюминия, осажденных в вакууме на кремниевые подложки / В. К. Гончаров, А. А. Пехота, М. В. Пузырев, В. Ю. Ступакевич // Матери-

алы и структуры современной электроники : Материалы VIII Международной научной конференции, Минск, 10–12 октября 2018 года / Редколлегия В.Б. Оджаев [и др.]. – Минск: Белорусский государственный университет, 2018. – С. 331-334.

4. Sampathkumar Jeevanandham, Dakshi Kochhar, Omnarayan Agrawal, Siddhartha Pahari, Chirantan Kar, Tamal Goswami, Indra Sulania, Monalisa Mukherjee. Unravelling the formation of carbyne nanocrystals from graphene nanoconstrictions through the hydrothermal treatment of agro-industrial waste molasses. Nanoscale Advances, Volume 6, Issue 9, 2024, Pages 2390-2406, ISSN 2516-0230.

5. J. Jesus Velazquez Salazar, Daniel Bahena, Alexander Lehr, Pilarisetty Tarakeshwar, John Sanchez, Blake Rogers, Roman Caudillo, Guowu Lin, Guillermo Calero, Miguel Jose Yacaman. Fabrication of carbon chains (pseudo carbynes) by stabilization with gold-thiol complex, Carbon, Volume 225, 2024, 119118, ISSN 0008-6223.

6. 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.

7. Yan He, Huakai Xu, Gang Ouyang, Guowei Yang. Thermal properties of carbyne nanostructures, Results in Physics, Volume 34, 2022, 105311, ISSN 2211-3797.

8. Guowei Yang. Synthesis, properties, and applications of carbyne nanocrystals. Materials Science and Engineering: R: Reports, Volume 151, 2022, 100692, ISSN 0927-796X.

9. 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.

10. Liu, X., et al. “Detection of Carbon Nanotubes Based on Improved Hough Transform and Gray Level Co-Occurrence Matrix.” Applied Sciences 9.15 (2019): 3111.

11. T. Hu, C. Cai, P. A. R. Adeogun, Y. Chen, and H.-J. Qin, “Automated characterization of carbon nanomaterials using deep learning,” Nanotechnology 28, 444001 (2017).

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.

Recognition of nanostructures is a complex task that requires the application of modern methods and algorithms. This article discusses the relevant task of recognizing carbon nanoparticles using an electron microscope. Carbyne, a linear allotrope of carbon, demonstrates unique properties such as high strength and electrical conductivity, making it promising for applications in electronics and nanotechnology. The described image analysis methods allow for the effective identification of nanoparticles in high-resolution images. The application of the Hough transform method for circle detection facilitates the automation of the recognition process, significantly speeding up the analysis. The results of the study are of great importance for the development of new materials and the optimization of technologies in the field of materials science and nanoengineering, as well as contributing to a deeper understanding of the structural characteristics of carbyne. Experimental research results are also presented, confirming the effectiveness of the proposed methods.

Key words: recognition, image processing, nanoparticles, carbon chains, carbine.

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.