

УДК 004.93'14

Разработка метода кластеризации снимков наноматериалов на основе алгоритма К-средних

Савельев М.Ю., Захаров. А.А.

В статье рассматривается применение метода k-средних и его улучшенных версий для кластеризации изображений наноматериалов. Целью исследования является разработка эффективного метода кластеризации, способного идентифицировать частицы наноматериалов на изображениях с высоким уровнем шума. Стандартный метод k-средних сравнивается с его модификациями, включая k-средних++, MiniBatch k-средних и Элькана, для оптимизации распределения пикселей. Подробно рассматриваются уникальные свойства этих модифицированных методов, в том числе их подходы к распределению пикселей по центроидам и формированию кластеров. Фильтры шумоподавления описаны как шаг предварительной обработки для улучшения кластеризации. Приведены практические рекомендации по оптимизации процесса кластеризации, которые могут повысить точность, надежность и помехоустойчивость. Предлагаемый метод основан на алгоритмах кластеризации, которые разбивают изображения на области, соответствующие средним значениям интенсивности в пределах этих областей.

Ключевые слова: сегментация, компьютерное зрение, наноматериалы, изображения, суперпиксели, метод k-средних.

Введение

В настоящее время наноматериалы широко используются в различных областях: машиностроении, энергетике, электронике, биологии, медицине и т.д. Анализ изображений, полученных с помощью различных видов микроскопии, является одной из важнейших задач для понимания характеристик наноматериалов в различных областях применения. Визуальная и структурная информация (размер частиц, морфология наноматериалов, наличие дефектов и т.д.) имеет решающее значение, поскольку эти характеристики существенно влияют на желаемые свойства наноматериала. Кроме того, полученная информация позволяет получить техническое и научное представление о процессе синтеза, фабрикации и производства наноматериалов. Автоматическое распознавание и количественный анализ изображений наноструктур с высокой пропускной способностью имеют решающее значение. Однако существуют проблемы, связанные со сложностью и разнообразием конфигураций изображений наноструктур.

Сегментация изображений является эффективным инструментом для выделения областей изображения, таких как наноматериалы. Эти сегменты охватывают все изображение и отличаются друг от друга различ-

ными параметрами, такими как яркость, цвет, текстура и т.д. Без сегментации обработка изображений была бы более сложной и менее эффективной [1].

Обзор алгоритма

Одним из распространенных подходов к сегментации является суперпиксельная сегментация [2], или кластеризация, которая включает в себя разделение изображения на фрагменты, называемые суперпикселями или кластерами [3-6].

Для решения этой проблемы в статье предлагается метод сегментации, основанный на кластеризации по k-среднему значению, и анализируется его эффективность для изображений из наноматериалов. Для предотвращения нежелательных результатов сегментации используются фильтры шумоподавления.

Подготовка к сегментации

Шум на изображении может привести к неправильному распределению пикселей. Для решения этой проблемы используются фильтры шумоподавления [7]. Эти фильтры устраняют нежелательный шум, сглаживая изображение и повышая производительность алгоритма сегментации [8].

Фильтр Гаусса основан на весовой функции Гаусса. Это линейный фильтр, который применяет размытие (сглаживание) к изображению [9, 10].

Медианный фильтр – это нелинейный фильтр, который заменяет значение пикселя средним значением всех пикселей в его окрестности [11].

Медиана делит отсортированный набор чисел на две части: одна часть содержит числа, меньшие или равные медиане, а другая часть содержит числа, большие или равные ей [12]. Пример медианного шума (соль и перец) показан на рисунке 1.

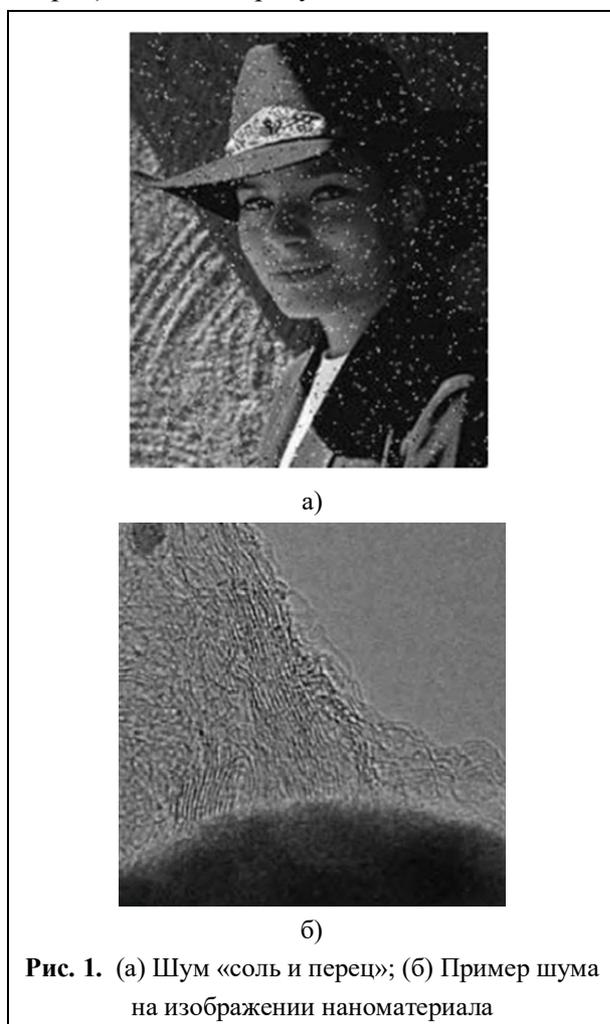


Рис. 1. (а) Шум «соль и перец»; (б) Пример шума на изображении наноматериала

Оригинальный алгоритм k-средних

Цель метода состоит в том, чтобы разбить изображение на k кластеров таким образом, чтобы каждый пиксель был отнесен к кластеру с ближайшим центром тяжести, точ-

кой, представляющей среднюю интенсивность всех пикселей в кластере [13].

Наиболее распространенным подходом является случайный выбор пикселей из набора всех пикселей изображения $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ в качестве начальных центроидов, а затем итеративный процесс кластеризации [14-16].

В целом, стандартному методу не хватает расширенных возможностей сегментации, что подчеркивает его простоту.

Алгоритм Элькана

Алгоритм Элькана использует неравенство треугольника для оценки расстояний между пикселями и центроидами.

Если известно, что пиксель находится далеко от одного центроида, а этот центроид близок к другому, то весьма вероятно, что пиксель не принадлежит ко второму кластеру [17, 18].

Основной проблемой этого метода является его высокая вычислительная сложность.

Алгоритм k-средних MiniBatch

MiniBatch k-средних использует мини-пакеты, или случайные подмножества данных, для обновления центроидов на каждой итерации [19].

В целом, метод MiniBatch k-средних является многообещающим в своей реализации, но он имеет ограничения при начальной инициализации центроидов и может столкнуться с проблемами при применении к изображениям со сложной структурой.

Алгоритм k-средних++

В отличие от случайного выбора, используемого в стандартном методе, в k-средних++ используется вероятностный подход, который обеспечивает более равномерное распределение начальных центроидов [20]. Этот подход способствует более быстрой сходимости алгоритма [21, 22].

Ключевым преимуществом этого алгоритма является его способность находить

решение, близкое к глобальному минимуму, а не к локальному минимуму функции ошибки [23].

Алгоритм локтя

Метод локтя (Elbow) основан на анализе графика суммы квадратов ошибок (SSE), который представляет собой сумму квадратов расстояний от пикселей до их центроидов, построенную в зависимости от количества кластеров k [24]. Оптимальное значение k определяется как точка, за пределами которой снижение SSE становится незначительным [25].

В отличие от стандартных алгоритмов оптимизации, метод локтя основан на определении точки перегиба на графике, где наклон резко меняется [26].

Несмотря на свою популярность, метод локтя не гарантирует, что выбранное значение k действительно является оптимальным.

В статье предлагается метод кластеризации изображений наноматериалов с использованием модифицированного алгоритма k -средних. Научная новизна заключается в сочетании метода Элькана с инициализацией центроидов с использованием k -средних++ и фильтра шумоподавления для повышения стабильности изображений с высоким уровнем шума.

Разработанный алгоритм

Основываясь на результатах исследования, алгоритм Элькана можно считать эффективным для сегментации изображений наноматериалов. Этот алгоритм отличается эффективной реализацией и опирается на прочную теоретическую базу, подтвержденную доказательствами его точности. Результаты могут быть дополнительно улучшены за счет применения методов фильтрации шума, интеграции метода k -средних++ в алгоритм и выделения сегментированных контуров с помощью оператора Кэнни (Canny) [27]. Далее мы опишем этапы реализации предлагаемого метода.

Шаг 1. Применяем фильтр шумоподавления к исходному изображению. В нашем случае используется медианный фильтр, который уменьшает влияние шума на процесс сегментации (рис. 2).



Рис. 2. (а) Исходное изображение; (б) Изображение с уменьшенным уровнем шума

Шаг 2. Используя алгоритм k -средних++ (на рис. 3), определяем начальные положения k центроидов.



Рис. 3. Последовательность действий алгоритма k -средних++

Первый центроид выбирается случайным образом, а остальные – на основе вероятности (1). Результат показан на рис. 4.

$$p(x) = \frac{D(x)^2}{\sum_{x_i \in X} D(x_i)^2} \quad (1)$$



Шаг 3. Для каждой пары центроидов c вычисляется ее евклидово расстояние $d(c, c')$ (2) [28, 29]. Для каждой центральной точки c вычисляется значение $s(c)$ (3), равное половине минимального расстояния от c до любого другого центроида c' .

$$d(c, c') = \sqrt{(c_1 - c_1')^2 + (c_2 - c_2')^2 + \dots + (c_n - c_n')^2} \quad (2)$$

$$s(c) = \frac{1}{2} \min_{c' \neq c} d(c, c') \quad (3)$$

Шаг 4. Проверяются условия для вычисления расстояния $d(x, c)$ между пикселем x и центроидом c , в противном случае это вычисление пропускается.

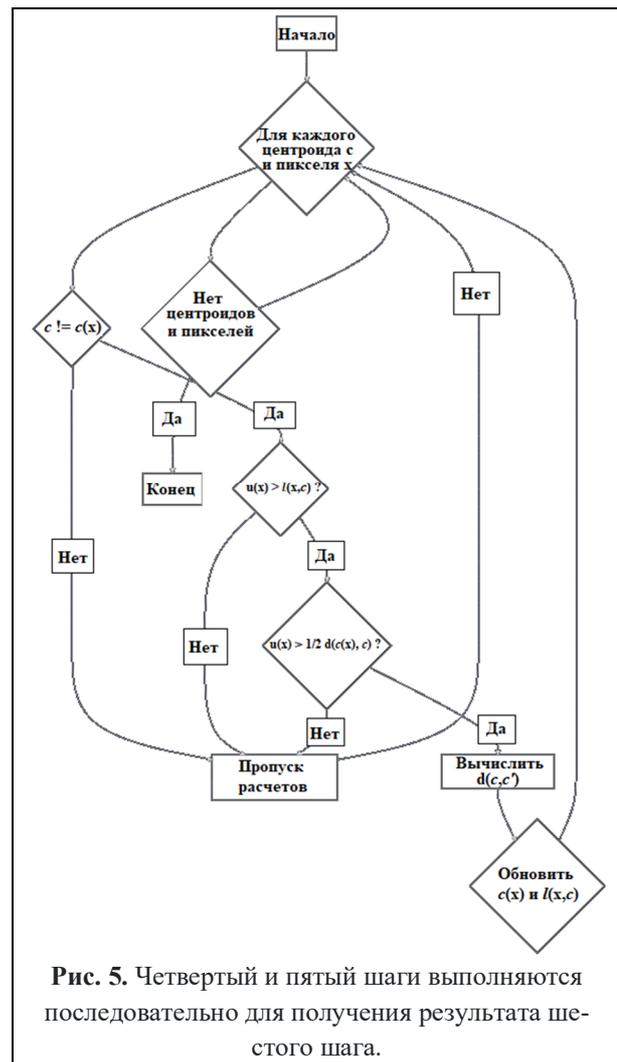
- $c \neq c(x)$ – проверяется, не совпадает ли центроид c с центроидом, к которому принадлежит пиксель $c(x)$.
- $u(x) > l(x, c)$ – проверяется, больше ли верхняя граница расстояния от пикселя до центроида c , чем его нижняя граница $l(x, c)$.
- $u(x) > 1/2 d(c(x), c)$ – проверяет, превышает ли верхняя граница расстояния от пикселя x половину расстояния между текущим центром $c(x)$ и точкой центроида c .

Шаг 5. Каждому пикселю присваивается ближайший центроид на основе расстояний (4).

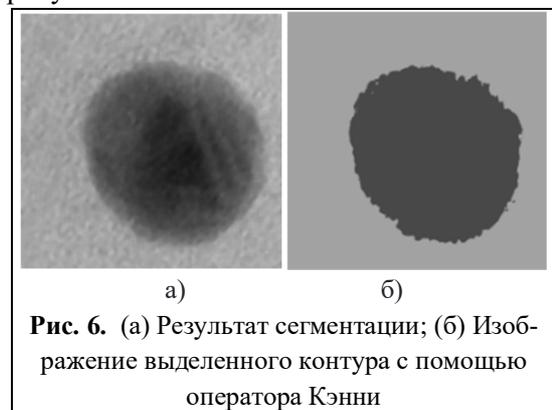
$$c(x) = \arg \min d(x, c), \quad (4)$$

Для каждого пикселя x и каждой центроида c обновляется нижняя оценка расстояния $l(x, c)$ (5). Все расчеты представлены в блок-схеме на рисунке 5.

$$l(x, c) = \max(l(x, c) - d(c, m)), \quad (5)$$



Шаг 6. После того, как алгоритм работает, пиксели будут сгруппированы в кластеры (суперпиксели), образуя сегментированное изображение. Результат сегментации показан на рисунке 6.



Шаг 7. После завершения процесса сегментации контур выбирается с помощью оператора Кэнни. Пример изображения до и после использования Кэнни оператор показан на рисунке 7.

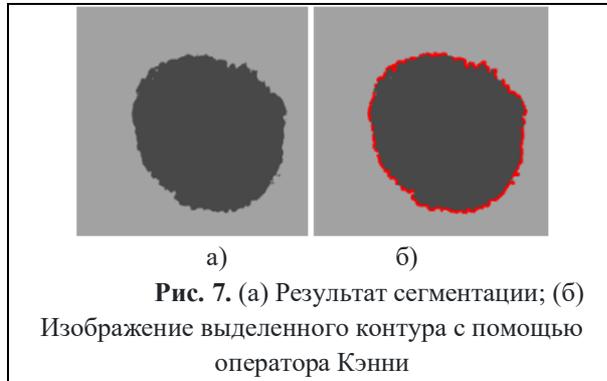


Рис. 7. (а) Результат сегментации; (б) Изображение выделенного контура с помощью оператора Кэнни

Результаты исследований

Для оценки качества результатов метода были использованы следующие показатели (6) точность и запоминаемость (7):

$$precision = \frac{|M \cap G|}{|M|}, \quad (6)$$

$$recall = \frac{|M \cap G|}{|G|}, \quad (7)$$

где M – двоичная маска; G – истинная двоичная маска изображения. Полученная двоичная маска сравнивается с истинной маской изображения. Изображения масок и результаты сравнения показаны на рисунке 8.

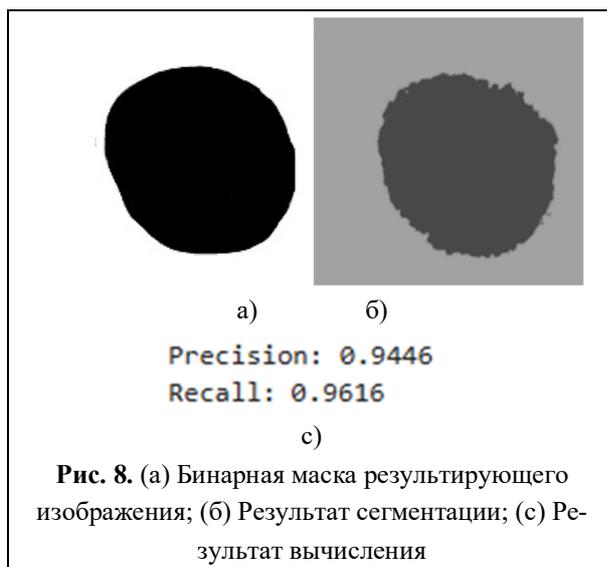


Рис. 8. (а) Бинарная маска результирующего изображения; (б) Результат сегментации; (в) Результат вычисления

В идеальном случае показатель точности и полноты достигает наивысшего значения,

близкого к единице [30]. Результаты разработанного метода представлены на рисунках 9-14.

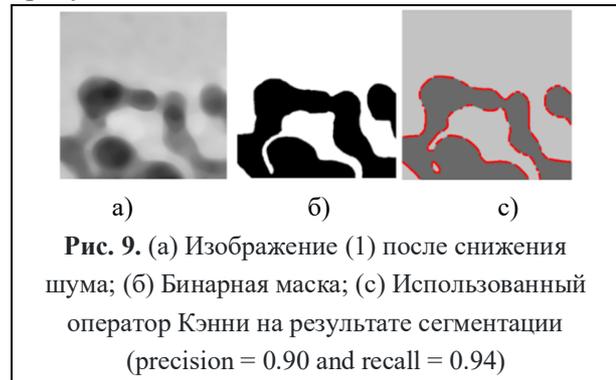


Рис. 9. (а) Изображение (1) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (в) Используемый оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.90 and recall = 0.94)

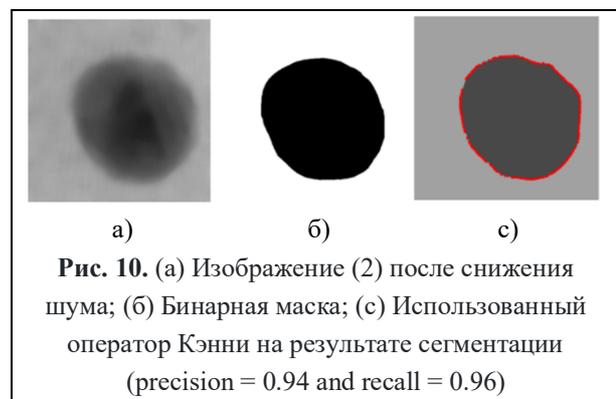


Рис. 10. (а) Изображение (2) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (в) Используемый оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.94 and recall = 0.96)

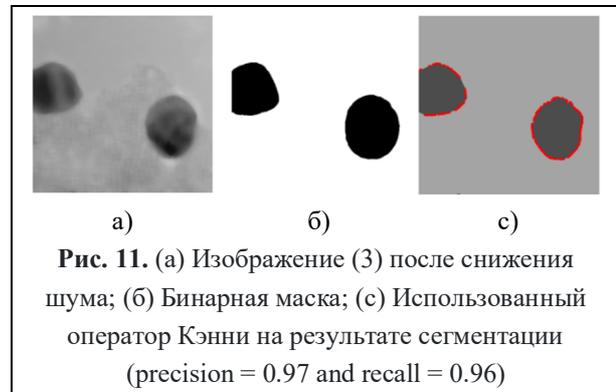


Рис. 11. (а) Изображение (3) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (в) Используемый оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.97 and recall = 0.96)

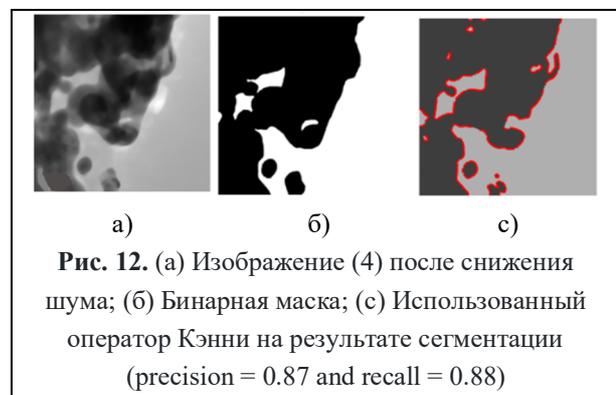


Рис. 12. (а) Изображение (4) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (в) Используемый оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.87 and recall = 0.88)

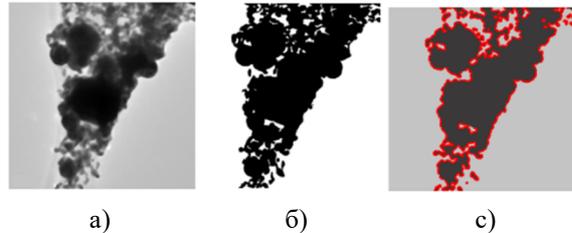


Рис. 13. (а) Изображение (5) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (с) Использованный оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.92 and 0.92)

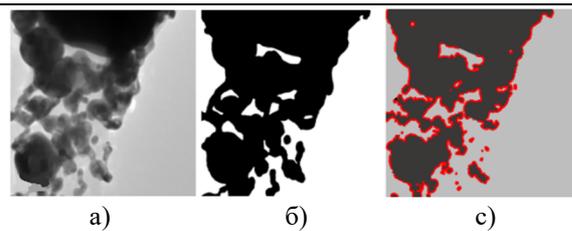


Рис. 14. (а) Изображение (6) после снижения шума; (б) Бинарная маска; (с) Использованный оператор Кэнни на результате сегментации (precision = 0.84 and recall = 0.9)

В целом, алгоритм демонстрирует хорошие результаты и точно определяет местоположение наноматериалов. Показатели точности и полноты близки к единице, что указывает на достоверность выделенных частиц.

Заключение

Предложенный метод позволяет достичь высоких результатов в сегментации изображений наноматериалов. Сочетание алгоритма Элькана с инициализацией k -средних++ позволяет использовать треугольное неравенство для эффективного вычисления расстояния и оптимального размещения центра. Это повышает точность и стабильность кластеризации, позволяя надежно идентифицировать области наноматериала даже в зашумленных данных.

Благодарности

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

Литература

1. Wu Z., Wu Z.-X. An enhanced regularized k -means type clustering algorithm with adaptive weights // *IEEE Access*. 2020. Vol. 8. Pp. 31171–31179.
2. Radhakrishna A., Shaji A., Smith K., Lucchi A. SLIC superpixels compared to state-of-the-art superpixel methods // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 2012. Pp. 2274–2282.
3. Zakharov A. A., Titov D. V., Zhiznyakov A. L., Titov V. S. Visual attention method based on vertex ranking of graphs by heterogeneous image attributes // *Computer Optics*. 2020. Vol. 44, № 3. Pp. 427–435.
4. Zakharov A., Tuzhilkin A., Zhiznyakov A. Automatic building detection from satellite images using spectral graph theory // *2015 International Conference on Mechanical Engineering, Automation and Control Systems (MEACS)*. Tomsk, Russia: IEEE, 2015.
5. Liu J., Aggarwal C., Han J. On integrating network and community discovery // *Proceedings of the 8th ACM International Conference on Web Search and Data Mining*. 2015. Pp. 117–126.
6. Liu G., Zhang Y., Wang A. Incorporating adaptive local information into fuzzy clustering for image segmentation // *IEEE Transactions on Image Processing*. 2015. Pp. 3990–4000.
7. Arulpandy P., Trinita M. P. Speckle noise reduction and image segmentation based on a modified mean filter // *Computer Assisted Methods in Engineering and Science*. 2020. Vol. 27, № 4. Pp. 221–239.
8. Rezaee A. Partition fuzzy median filter for image restoration // *Fuzzy Information and Engineering*. 2021. Vol. 13, № 2. Pp. 199–210. DOI: 10.1080/16168658.2021.1921377.
9. Nixon M. S., Aguado A. S. *Feature Extraction and Image Processing*. Academic Press, 2008. 360 p.
10. Krähenbühl P., Koltun V. Efficient Inference in fully connected CRFs with Gaussian edge potentials // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2011. Pp. 10.
11. Widyaningsih M., Priyambodo T. K., Wibowo M. E., Kamal M. Optimization contrast enhancement and noise reduction for semantic segmentation of oil palm aerial imagery // *International Journal of Intelligent Engineering and Systems*. 2023. Pp. 597–609.
12. Villar A., Torcida A. S., Acosta G. Median filtering: A new insight // *Journal of Mathematical Imaging and Vision*. 2017. Pp. 130–146.
13. Adams R. P. K -means clustering and related algorithms // *Elements of Machine Learning*. 2019. Pp. 18.
14. Kriegel H. P., Schubert E., Zimek A. The (black) art of runtime evaluation: Are we comparing algorithms or implementations? // *Knowledge and Information Systems*. 2016. Pp. 341–378.

15. Hamerly G., Elkan C. Alternatives to the k-means algorithm that find better clusterings // Proceedings of the Eleventh International Conference on Information and Knowledge Management. 2002. Pp. 600–607.
16. Barinov A. E., Zakharov A. A. Clustering using a random walk on graph for head pose estimation // 2015 International Conference on Mechanical Engineering, Automation and Control Systems (MEACS). Tomsk, Russia: IEEE, 2015.
17. Brijnes J., Obermayer K. Elkan's k-means algorithm for graphs // DBLP. 2010. Pp. 22–32.
18. Elkan C. Using the triangle inequality to accelerate k-means // ICML. 2003. Vol. 3. Pp. 147–153.
19. Ahmatshin F., Kazakovtsev L. Mini-batch k-means++ clustering initialization // Mathematical Optimization Theory and Operations Research: Recent Trends. 2024. Pp. 293–307.
20. Debelee T. G., Schwenker F., Rahimeto S., Ashenafi D. Y. Evaluation of modified adaptive k-means segmentation algorithm // Computational Visual Media. 2019. Pp. 15.
21. Makarychev K., Reddy A., Shan L. Improved guarantees for k-means++ and k-means++ parallel // Advances in Neural Information Processing Systems. 2020. Pp. 33.
22. Arthur D., Vassilvitskii S. k-means++: The advantages of careful seeding // Proceedings of the Eighteenth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. 2007. Pp. 1027–1035. DOI: 10.30871/jaic.v7i2.6476.
23. Kanungo T., Mount D., Netanyahu N., Piatko C., Silverman R., Wu A. A local search approximation algorithm for k-means clustering // Computational
- Geometry: Theory and Applications. 2004. Pp. 89–112.
24. Nainggolan R., Perangin-angin R., Simarmata R., Tarigan F. A. Improved the performance of the k-means cluster using the sum of squared error (SSE) optimized by using the Elbow method // Journal of Physics Conference Series. 2019. Pp. 7.
25. Umargono E., Suseno J. E., Gunawan V. K-means clustering optimization using the Elbow method and early centroid determination based on mean and median formula // Proceedings of the 2nd International Seminar on Science and Technology (CONRIST 2019). 2019. Pp. 234–240.
26. Schubert E. Stop using the elbow criterion for k-means and how to choose the number of clusters instead // ACM SIGKDD Explorations Newsletter. 2023. Pp. 36–42.
27. Agrawal H., Desai K. Canny edge detection: A comprehensive review // International Journal of Technical Research and Science. 2024. Vol. 9(Spl). Pp. 27–35.
28. Wang J., Tan Y. Efficient euclidean distance transform using perpendicular bisector segmentation // Proceedings / CVPR, IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2011. Pp. 1625–1632.
29. Cohen D. Precalculus: A Problems-Oriented Approach. 6th ed. Cengage Learning, 2004. 1184 p.
30. Borji A., Cheng M.-M., Jiang H., Li J. Salient object detection: A benchmark // IEEE Transactions on Image Processing. 2015. Vol. 24, № 12. Pp. 5706–5722. DOI: 10.1109/TIP.2015.2487833.

Поступила 10 сентября 2025 г.

The article discusses the application of the k-means method and its improved versions for clustering images of nanomaterials. The aim of the study is to develop an effective clustering method capable of identifying nanomaterial particles in images with high noise levels. The standard k-means method is compared with its modifications, including both k-means++, MiniBatch k-means and Elkan, to optimize pixel distribution. The unique properties of these modified methods are discussed in detail, including their approaches to pixel centroid distribution and cluster formation. Noise reduction filters are described as a preprocessing step to improve clustering. Practical recommendations for optimizing the clustering process are provided, which can improve accuracy, reliability, and noise immunity. The proposed method is based on clustering methods that divide images into areas corresponding to the average intensity values within these areas.

Key words: segmentation, computer vision, nanomaterials, images, superpixels, k-means.

Савельев Михаил Юрьевич – студент кафедры физики и прикладной математики Муромского института (филиала) ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

E-mail: s.michail2004@yandex.ru

Захаров Алексей Александрович – кандидат технических наук, доцент кафедры программной инженерии Муромского института (филиала) ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых».

E-mail: neuronetcv@gmail.com

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