

# Информационная система для сегментации наночастиц на СТМ-изображениях

С.Ф. Егоров<sup>1</sup>, И.О. Архипов<sup>2</sup>, Т.Е. Шелковникова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт Механики, Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр Уральского отделения РАН, Т. Барамзиной 34, Ижевск, Россия, 426067

<sup>2</sup>Ижевский Государственный Технический Университет имени М.Т. Калашникова, Студенческая 7, Ижевск, Россия, 426069

**Аннотация.** В работе предложен комплексный подход к решению задачи сегментации СТМ-изображений наночастиц, заключающийся в использовании детекторов кривизны, а также сверточных нейросетей различных архитектур. Разработанная информационная система реализована с применением современных методов машинного обучения, компьютерного зрения и визуального программирования. Выполнена оценка предложенных ранее алгоритмов сегментации, заключающаяся в подсчете количества найденных частиц на сегментированных изображениях и вычислении метрики IoU. Также приведены результаты их работы при обработке реальных СТМ-изображений.

## 1. Введение

Несмотря на существенные достижения в области создания алгоритмов и программ для обработки СТМ-изображений, разработка новых эффективных подходов к их обработке по-прежнему остается актуальной задачей. В настоящее время уровень СТМ-исследований заметно прогрессировал – от простой визуализации поверхностей с нанометровым разрешением исследователи преступили к серьезному анализу данных, полученных с применением сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) и более полному изучению поверхности образцов [1-4]. При этом предъявляются повышенные требования к цифровой обработке измерительной информации.

В качестве программного обеспечения для сканирования и фильтрации СТМ-изображений используются приложения: Callisto, Gwyddion, n-Surf, SPIP, Nova. Анализ существующего программного обеспечения (ПО) для обработки и визуализации измерительной информации сканирующего туннельного микроскопа выявил, что главным недостатком всех рассмотренных программных средств (за исключением SPIP) является недостаточно высокая детализация визуализации изображений в трехмерном пространстве по причине использования технологии OpenGL. Общим же недостатком ПО является отсутствие возможности использовать несколько ветвей обработки изображения с возможным простым изменением параметров фильтров на разных этапах. Такие инструменты могут предоставить программы, использующие инструменты визуального программирования. В работе рассмотрен программный комплекс GraphMIS для обработки медицинских изображений, использующий такие инструменты. Интерактивные компоненты пользовательского интерфейса позволяют изменять настройки (например, переупорядочивать последовательность фильтров для обработки или управлять их параметрами). GraphMIS лучше всего подходит для обработки экспериментальных данных и

составления индивидуальных конвейеров для обработки изображений. В целом, анализ существующего ПО выявил необходимость создания программы, сочетающей в себе все положительные свойства существующего программного обеспечения для обработки STM-изображений.

## 2. Выделение наночастиц на STM-изображениях с применением методов машинного обучения, компьютерного зрения и детекторов кривизны поверхности

В разработанной информационной системе для обеспечения возможности сегментировать STM-изображение разными методами предлагается применять несколько способов. На рисунке 1 представлена схема сегментации наночастиц в предложенной информационной системе.

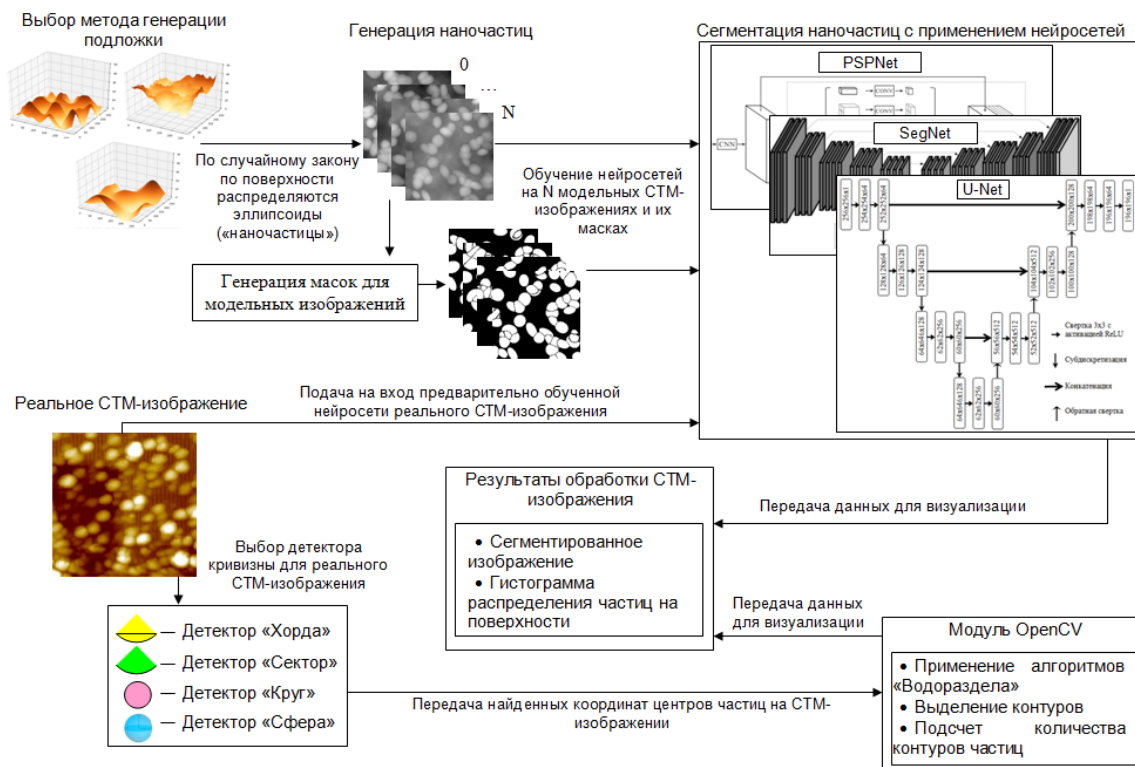


Рисунок 1. Схема сегментации наночастиц на STM-изображении в информационной системе.

Во-первых, для сегментации применяются нейросетевые методы, для реализации которых необходимо обладать большой базой данных для обучения сетей. Поэтому был осуществлен поэтапный способ моделирования STM-изображения. На первом этапе в качестве алгоритмов генерации подложки применяются различные методы (такие, как шум Перлина, Diamond-Square, шум Уорли, фрактальное броуновское движение). Далее на подложке по случайному закону располагаются эллипсоиды разных диаметров. База полученных изображений служит тренировочным датасетом для нейросетей. Кроме STM-изображения необходимо создать маску, которую будет стремиться воссоздать сеть. Алгоритм, используемый для их генерации, был разработан на основе вычисления приближенного значения градиента яркости с помощью оператора Собеля с ядрами  $G_x$  и  $G_y$ :

$$G_x = \begin{bmatrix} +1 & +2 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -2 & -1 \end{bmatrix}; G_y = \begin{bmatrix} +1 & 0 & -1 \\ +2 & 0 & -2 \\ +1 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где  $G_x$  и  $G_y$  – две матрицы, свертка с которыми дает приближенные производные по осям  $x$  и  $y$ . По значениям  $G_x$  и  $G_y$  вычисляется модуль градиента

$$|G| = \sqrt{(G_x)^2 + (G_y)^2}, \quad (2)$$

и направление градиента

$$\theta = \arctg\left(\frac{G_y}{G_x}\right). \quad (3)$$

Более подробно алгоритм генерации описан в [5]. В результате анализа сверточных сетей выбрано несколько современных архитектур [6-18], которые хорошо зарекомендовали себя в задачах сегментации изображений и были адаптированы для разработанной информационной системы. Далее на вход обученной сети подается реальное СТМ-изображение, и на выходе формируется сегментированное СТМ-изображение. Результаты работы сети отображаются в виде сегментированного изображения и численного значения количества найденных наночастиц на изображении.

Во-вторых, для задачи сегментации применяется комбинированный метод, который включает в себя несколько этапов. Сначала при помощи детектора кривизны [19] определяются центры ядер частиц. Работа детектора основана на понятиях выпуклости и вогнутости поверхности, функции локальной кривизны и ее экстремумов, то есть на базе смысловых характеристик его структурных элементов. Далее полученные координаты частиц передаются в блок обработки алгоритма «Водораздела» библиотеки OpenCV. Затем в этот блок передаются центры «впадин», с которых нужно начать «заливать» области. Сегментированное таким образом изображение подается на вход алгоритма findContours, который рисует и подсчитывает количество найденных частиц.

### 3. Информационная система для автоматической сегментации СТМ-изображений

Структурная схема информационной системы представлена на рисунке 2. Информационная система сегментации наночастиц на СТМ-изображении реализована в виде программного комплекса и включает в себя следующие структурные элементы:

- подсистема ввода/вывода;
- подключаемые внешние модули;
- подсистема первичной обработки;
- подсистема генерации модельных СТМ-изображений;
- блок пользователя;
- карта связей блоков пользователя.

Для работы с данными, полученными с разных микроскопов, часто оказывается необходимым для системы «уметь» работать с разными типами данных, полученных с СТМ. Поэтому создана подсистема для чтения распространенных форматов, используемых в данных исследованиях (.mdt, .pc).

Подключение внешних модулей к информационной системе является важным дополнением, позволяющим получить:

- упрощенное расширение функциональных возможностей комплекса другими разработчиками, так как не требуется изучение исходного кода комплекса для внесения в него изменений;
- возможность использования ранее написанного, отлаженного и протестированного программного кода на различных языках программирования с небольшими изменениями (C#, Python, Java, Delphi);
- использование возможностей различных языков программирования, библиотек и средств разработки для них (OpenCV, Keras);
- повышение стабильности работы комплекса за счет локализации неисправностей внутри модуля;
- создание библиотек модулей, применяемых в работе отдельного пользователя.

Подсистема первичной обработки отвечает за фильтрацию входного изображения, она важна для исключения помех на СТМ-изображении. Методы классификации, кластеризации,

сегментации применяются для анализа данных после первичной обработки и извлечения полезной информации об исследуемом материале.

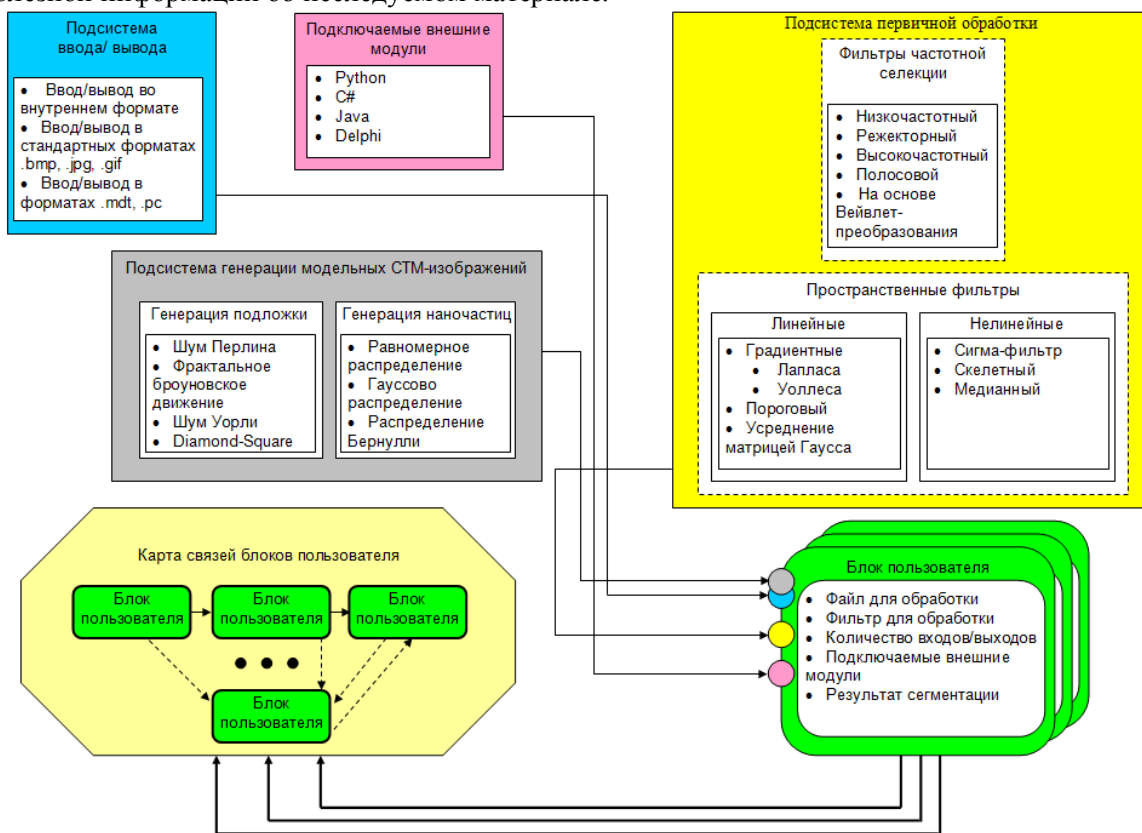


Рисунок 2. Структурная схема информационной системы.

Подсистема генерации модельных изображений состоит из двух блоков. Во-первых, осуществляется моделирование подложки. Её реализация в виде полиномиальной функции не отражает случайный характер поверхности на реальном изображении. Поэтому для получения модели, приближенной к реальным условиям, используются различные способы генерации фрактальной поверхности. Карта высот, полученная в результате работы таких алгоритмов, создает такой «шум», который достаточно сложно отфильтровать классическими методами компьютерной фильтрации. Во-вторых, в этом же блоке осуществляется моделирование наночастиц. На полученной поверхности подложки распределяются по равномерному закону эллипсоиды, отличающиеся друг от друга размерами и высотой расположения, которые накладываются друг на друга и, тем самым, усложняют процесс сегментации. Также происходит формирование масок для полученных модельных СТМ-изображений.

Блок пользователя представляет собой multifunctionalную структуру. Для каждого создаваемого блока есть поле с изображением и полями, которые необходимы для работы внутреннего алгоритма блока. Реализована возможность выбора входного файла, фильтра первичной обработки и его параметров, количество входов и выходов (количество изображений, подаваемых на вход, и необходимое количество выходов для дальнейших цепочек обработки), подключения внешних модулей, в которых проводилась сегментация СТМ-изображения, и контроля конечного результата обработки (сегментированного СТМ-изображения).

Блок первичной обработки изображений реализует удобные методы для фильтрации, сегментации и манипуляции с контурами изображения, также есть возможность для работы с данными на разных языках программирования (C, C++, C#, Python и т.д.).

Карта связей блоков пользователя представлена на рисунке 3 более подробно, в виде реализованного программного модуля с применением библиотеки NodeEditor. Она

осуществляет несколько функций: управления, установления связей между блоками пользователя и визуализации результатов каждого шага обработки изображения.

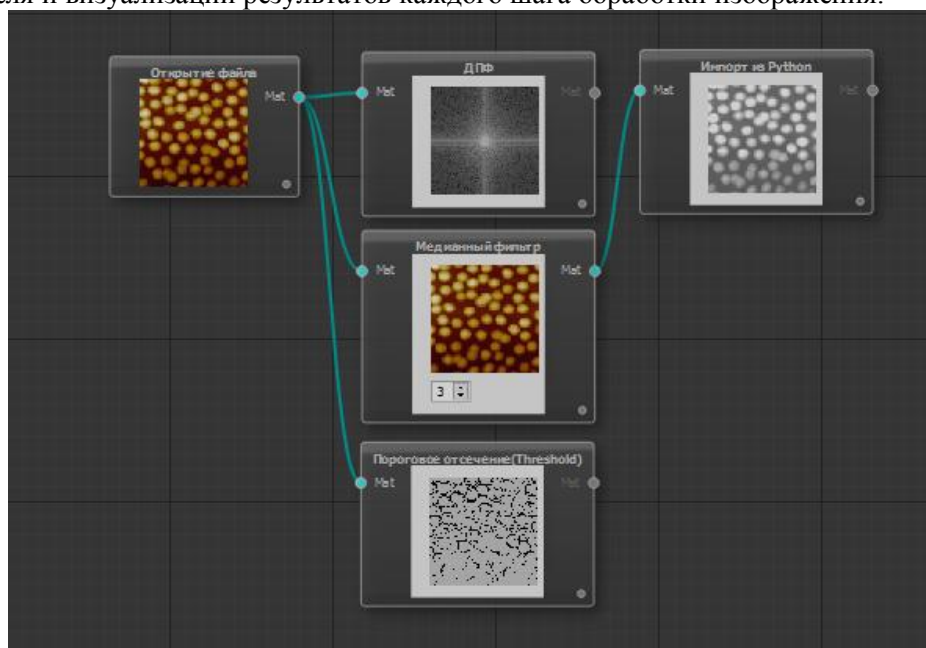


Рисунок 3. Карта связей блоков в информационной системе.

Таким образом, созданная информационная система обладает следующими достоинствами:

- удобный интерфейс для работы исследователя, видна цепочка обработки изображения, возможность изменить параметры того или иного фильтра на любом шаге;
- поддержка различных фильтров для первичной обработки изображений;
- моделирование СТМ-изображений с разными параметрами (количество частиц, шум для генерации подложки)
- возможность добавления программных модулей с других языков программирования (Python, C#, Java, Delphi );
- поддержка методов детектирования.

#### 4. Результаты и их обсуждение

В ходе проведенных исследований был получен большой массив информации и проведена оценка работы предлагаемых методов. Для оценки качества сегментации использовалась метрика IoU (Intersection over Union), которая вычислялась по формуле:

$$IoU = \frac{TP}{(TF + FP + FN)}, \quad (4)$$

где TP, TF, FP, FN - количество пикселей, правильно отнесенных к классу «частица»; правильно отнесенных к классу «фон»; неправильно отнесенных к классу «частица» и неправильно отнесенных к классу «фон», соответственно. В таблице 1 представлены результаты сегментации различными методами.

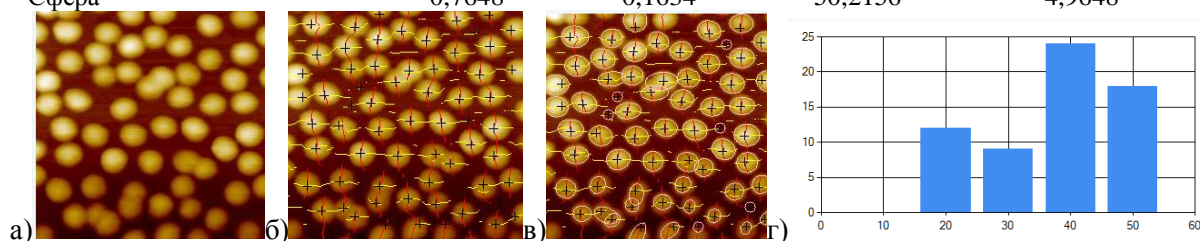
Выполнена оценка алгоритмов сегментации, которая показала, что методы, использующие детекторы кривизны, лучше определяют количество частиц на сканируемой поверхности. Однако, нейросети, обученные на модельных изображениях с применением метода DiamondSquare, более устойчивы к различным искажениям и артефактам на СТМ-изображении и точнее обнаруживают границы частиц, а также способны отделять «слипшиеся» частицы друг от друга.

Результат совместной работы алгоритма Watershed и детектора «Хорда» представлен на рисунке 4. На рисунке 5 представлены результаты сегментации реального СТМ-изображения после обучения сетей на базе модельных СТМ-изображений (генерация подложки методом

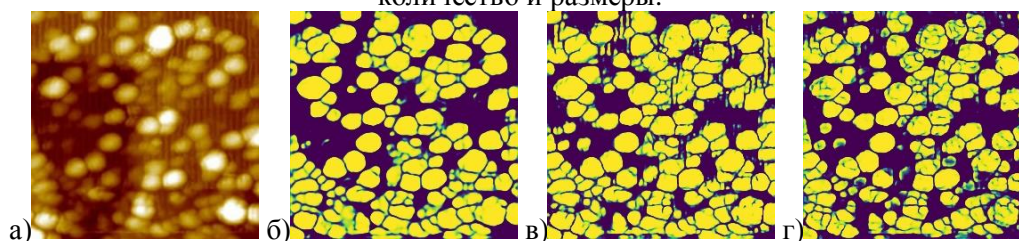
DiamondSquare). Сети обучались методом стохастического градиентного спуска на основе входных изображений и соответствующих им масок. На вход сетей подавалось 512 тренировочных изображений 256x256 пикселей. В общей сложности сети обучались около 12-и часов на видеокарте GeForce GTX 1070.

**Таблица 1.** Результаты сегментации на основе предлагаемых в информационной системе нейросетевых и комбинированных методов на 100 модельных СТМ-изображениях с количеством частиц, равным 50, с генерацией подложки разными методами. Рассчитывается метрика IoU, её среднеквадратическое отклонение (СКО) и математическое ожидание (МО).

Метод сегментации нейросетевыми методами	Метрика IoU		Количество частиц	
	МО	СКО	МО	СКО
U-Net	0,9047	0,0112	50,1156	5,3675
SegNet	0,9112	0,0156	53,6353	6,5744
PSPNet	0,9202	0,0101	52,1156	5,9822
Метод сегментации комбинированными методами				
Хорда	0,6724	0,1314	50,0221	4,9564
Сектор	0,7268	0,2217	51,4215	5,2156
Круг	0,7255	0,1514	50,8899	5,5958
Сфера	0,7648	0,1634	50,2156	4,9648



**Рисунок 4.** Результаты сегментации реального СТМ-изображения: а) реальное СТМ-изображение; б) выделение центров частиц с применением детектора кривизны «Хорда» (представлены траектории локальных минимумов, вычисленных по множествам функций); в) выделенные алгоритмом Watershed частицы; г) гистограмма найденных наночастиц, их количество и размеры.



**Рисунок 5.** Результаты сегментации реального СТМ-изображения: а) реальное СТМ-изображение; б) результат сегментации U-Net; в) результат сегментации SegNet; г) результат сегментации PSPNet.

Осуществлена агрегация нейросетевых методов и методов, основанных на применении детекторов кривизны, создан на основе метода анализа иерархий новый комплексный подход. Метод анализа иерархий (предложенный Т.Л. Саати) [20, 21] заключается в использовании иерархической структуры объединяющей цель выбора, критерии, альтернативы и другие факторы, влияющие на выбор решения. Построение такой структуры помогает проанализировать все аспекты проблемы и глубже проникнуть в суть задачи. Вершиной иерархии является главная цель – сегментация наночастиц; элементы нижнего уровня представляют множество вариантов достижения цели (альтернатив) – методы сегментации; элементы промежуточных уровней – узлы, соответствуют критериям или факторам, которые связывают цель с альтернативами. Цель – это родительский узел для всех критериальных узлов.

## 5. Выводы

В результате проведенных исследований разработана информационная система с применением современных методов машинного обучения, компьютерного зрения и визуального программирования. Предложен новый комплексный подход к решению задачи сегментации наночастиц на СТМ-изображениях, позволяющий повысить достоверность контроля частиц на поверхности, заключающийся в использовании детекторов кривизны, а также сверточных нейросетей различных архитектур. Выполнена оценка предложенных алгоритмов сегментации, которая показала высокую эффективность их работы.

## 6. Литература

- [1] Fukuma, T. Atomic-resolution imaging in liquid by frequency modulation atomic force microscopy using small cantilevers with megahertz-order resonance frequencies / T. Fukuma, K. Onishi, N. Kobayashi, A. Matsuki and H. Asakawa // *Nanotechnology*. – 2012. – Vol. 23. – P. 12. DOI: 10.1088/0957-4484/23/13/135706.
- [2] Gerber, C. How the doors to the nanoworld were opened / C. Gerber, H.P. Lang // *Nature Nanotechnology*. – 2006. – Vol. 1(1). – P. 3-5. DOI: 10.1038/nnano.2006.70.
- [3] Шелковников, Е.Ю. Гибридный туннельный микроскоп с интегрированным бипотенциостатом для изучения наночастиц / Е.Ю. Шелковников, А.В. Тюрников, П.В. Гуляев, А.С. Суворов, М.Р. Гафаров, С.И. Липанов // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 448-451.
- [4] Bui, K. Segmentation of scanning tunneling microscopy images using variational methods and empirical wavelets / K. Bui, J. Fauman, D. Kes // *Pattern Analysis and Applications*, 2018. – 20 p. DOI: 10.1007/s10044-019-00824-0.
- [5] Шелковников, Е.Ю. Применение нейронной сети архитектуры U-Net для сегментации СТМ-изображений / Е.Ю. Шелковников, К.А. Шляхтин, Т.Е. Шелковникова, С.Ф. Егоров // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2019. – Т. 21, № 2. – С. 330-336. DOI: 10.15350/17270529.2019.2.36.
- [6] Goldsborough, P. Cytogan: Generative modeling of cell images / P. Goldsborough, N. Pawlowski, J.C. Caicedo, S. Singh, A. Carpenter // *bioRxiv*, 2017. – 6 p. DOI: 10.1101/227645.
- [7] Ronneberger, O. U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation / O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox // *International conference on medical image computing and computer-assisted intervention*, 2015. – P. 234-241. DOI: 10.1007/978-3-319-24574-4\_28.
- [8] LeCun, Y. Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition / Y. LeCun, B. Boser, J.S. Denker, D. Henderson, R.E. Howard, W. Hubbard, L.D. Jackel // *Neural Computation*. – 1989. – Vol. 1(4). – P. 541-551. DOI: 10.1162/neco.1989.1.4.541.
- [9] Hu, J. A Comparison and Strategy of Semantic Segmentation on Remote Sensing Images / J. Hu, L. Li, Y. Lin, F. Wu, J. Zhao // *Published in ArXiv*, 2019. – 8 p. DOI: 10.1007/978-3-030-32456-8\_3.
- [10] Badrinarayanan, V. SegNet: A Deep Convolutional Encoder-Decoder Architecture for Image Segmentation / V. Badrinarayanan, A. Kendall, R. Cipolla // *PAMI*, 2017. – 14 p. DOI: 10.1109/TPAMI.2016.2644615.
- [11] Zhao, H. Pyramid scene parsing network / H. Zhao, J. Shi, X. Qi, X. Wang, J. Jia // *CVPR*, 2017. – 11 p. DOI: 10.1109/CVPR.2017.660.
- [12] LeCun, Y. Deep learning / Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton // *Nature*. – 2015. – Vol. 521. – P. 436-444. DOI: 10.1038/nature14539.
- [13] Jesse, S. Big data analytics for scanning transmission electron microscopy ptychography / S. Jesse, M. Chi, A. Belianinov, C. Beekman, S.V. Kalinin, A.Y. Borisevich, A.R. Lupini // *Sci. Rep.* – 2016. – Vol. 6. – P. 26348. DOI: 10.1038/srep26348.
- [14] Lubbers, N. Inferring low-dimensional microstructure representations using convolutional neural networks / N. Lubbers, T. Lookman, K. Barros // *Phys. Rev. E*. – 2017. – Vol. 96. – P. 052111. DOI: 10.1103/PhysRevE.96.052111.

- [15] Belianinov, A. Big data and deep data in scanning and electron microscopies: deriving functionality from multidimensional data sets / A. Belianinov // *Adv. Struct. Chem. Imaging.* – 2015. – Vol. 1(6). – P. 25. DOI: 10.1186/s40679-015-0011-9.
- [16] Chowdhury, A. Image driven machine learning methods for microstructure recognition / A. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, D. Lewis // *Comput. Mater. Sci.* – 2016. – Vol. 123. – P. 176-187. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.05.034.
- [17] Li, W. Automated defect analysis in electron microscopic images / W. Li, K.G. Field, D. Morgan // *Comput Mater.* – 2018. – Vol. 4. – P. 36. DOI: 10.1038/s41524-018-0093-8.
- [18] Шелковникова, Т.Е. Анализ сверточных нейросетей для сегментации наночастиц на СТМ-изображении / Т.Е. Шелковникова, К.А. Шляхтин, С.Ф. Егоров // *Ползуновский альманах.* – 2019. – № 4. – С. 10-13.
- [19] Гуляев, П.В. Применение детекторов кривизны для координатной привязки перекрывающихся изображений в зондовой микроскопии / П.В. Гуляев, Ю.К. Шелковников, А.В. Тюриков, С.Р. Кизнерцев // *Ползуновский вестник.* – 2016. – № 2. – С. 122-125.
- [20] Саати, Т.Л. Принятие решений при зависимостях и обратных связях: Аналитические сети / Т.Л. Саати – М.: Издательство ЛКИ, 2008. – 360 с.
- [21] Saaty, T.L. *The Hierarchon: A Dictionary of Hierarchies* / T.L. Saaty – Pittsburgh, Pennsylvania: RWS Publications, 1992. – 496 p.

## Information system for segmentation of nanoparticles in STM images

S.F. Egorov<sup>1</sup>, I.O. Arhipov<sup>2</sup>, T.E. Shelkovnikova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Mechanics, Udmurt Federal Research Center, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Baramzinoi 34, Izhevsk, Russia, 426067

<sup>2</sup>Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Studencheskaya street 7, Izhevsk, Russia, 426069

**Abstract.** The paper suggests a complex approach to solving the problem of segmentation of STM-images for the detection of nanoparticles, which consists in the use of curvature detectors, as well as convolution neural networks of different architectures. The developed information system is implemented using modern methods of machine learning, computer vision and visual programming. Evaluation of the proposed segmentation algorithms is performed, which consists in calculation of the number of found particles on segmented images and calculation of IoU metric. Also the results of their work at processing real STM-images are given.