

УДК: 544.77.023.55

Метод анализа геометрических параметров частиц и построения их распределений по данным сегментации микрофотографий с использованием параметризованных полигонов

А. В. Касьянов^{1,2,a}, К. А. Бабина^{1,2}, Е. В. Пархомчук^{1,2}

¹Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН,
Россия, 630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 5

²Новосибирский государственный университет,
Россия, 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, д. 1

E-mail: ^a a.kasyanov1@g.nsu.ru

Получено 25.02.2026, после доработки — 13.05.2026.

Принято к публикации 21.05.2026.

Точное определение размеров и морфологии частиц имеет ключевое значение для множества научных и промышленных областей. Микроскопия является мощным инструментом для изучения геометрии частиц, однако традиционный анализ изображений часто оперирует базовыми параметрами, такими как площадь или эквивалентный диаметр круга, что недостаточно для описания несферических или сложных по форме объектов. В данной работе представлена новая методика анализа частиц по микрофотографиям, основанная на сочетании глубокого обучения для сегментации и аппроксимации параметризованными полигонами. Изображения оптической микроскопии были получены для модельных систем различной сложности: монодисперсные сферы полистирола, кубические кристаллы SAPO-34, гексагональные призмы ZSM-5 и их многокомпонентная смесь. Сегментация изображений выполнялась с помощью облачного сервиса DLgram01, обученного на вручную размеченных данных. Для обработки полученных полигонов сегментации была разработана специализированная программа на языке Python. Ключевая идея метода заключается в подборе для контура каждой частицы параметризованного полигона. Оптимальные значения геометрических параметров для каждой частицы определяются путем минимизации функции «несходства», количественно оценивающей расхождение между сегментированным контуром и параметрической формой. Метод был валидирован на простой системе со сферами: полученное распределение по размерам совпало с результатами классического метода проекционного диаметра. Для более сложных кубических частиц SAPO-34 аппроксимация прямоугольниками выявила отклонение от идеальной формы, что дало более полное морфологическое описание, чем использование единственного параметра размера. При анализе смеси частиц разработанный подход успешно классифицировал частицы разных типов и извлек для каждого класса характерные распределения параметров. Полученные для смеси статистические характеристики каждого типа частиц совпали с результатами анализа однокомпонентных систем, что подтверждает надежность и точность методики. Предложенный подход является мощным инструментом для автоматизированного анализа частиц, позволяя извлекать детальные геометрические параметры и строить многомерные распределения по размерам и форме для сложных полидисперсных систем.

Ключевые слова: нейронные сети, сегментация изображений, микроскопия, анализ размера частиц

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института катализа им. Г. К. Борескова (проект № FWUR-2024-0036).

UDC: 544.77.023.55

Method for analyzing geometric parameters of particles and constructing their distributions based on micrograph segmentation data using parameterized polygons

A. V. Kasyanov^{1,2,a}, K. A. Babina^{1,2}, E. V. Parkhomchuk^{1,2}

¹Borekov Institute of Catalysis, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (BIC SB RAS),
5 Lavrentiev ave., Novosibirsk, 630090, Russia

²Novosibirsk State University,
1 Pirogova st., Novosibirsk, 630090, Russia

E-mail: ^a a.kasyanov1@g.nsu.ru

Received 25.02.2026, after completion — 13.05.2026.

Accepted for publication 21.05.2026.

The accurate characterization of particle size and morphology is crucial across numerous scientific and industrial fields. While microscopy is a powerful tool for visualizing particle geometry, traditional image analysis often relies on basic parameters like area and equivalent circular diameter, which are insufficient for describing non-spherical or complex particles. This paper presents a novel methodology for the analysis of particles from micrographs, combining deep learning-based segmentation with parametric polygon approximation. Optical microscopy images were obtained for model systems of increasing complexity: monodisperse polystyrene spheres, SAPO-34 cubes, ZSM-5 hexagonal prisms, and a multi-component mixture of all three. Neural network segmentation was performed using the DLgram01 cloud service, trained on manually annotated images. A custom Python program was developed to process the resulting segmentation polygons. The core of the method involves fitting a parameterized polygon to each segmented particle's contour. The optimal value of geometric parameters for each particle is determined by minimizing a “dissimilarity” function that measures the discrepancy between the segmentation and the parametric shape. This approach was validated on the simple spherical system, yielding a size distribution consistent with conventional projected diameter methods. For more complex cubic SAPO-34 particles, the rectangle fit revealed deviations from the ideal shape, providing a more complete morphological description than using a single size parameter. In the mixture of particles, the method successfully classified and extracted distinct parameter distributions for each particle type. The results for each class in the mixture were statistically consistent with those obtained from the single-component systems, demonstrating the method's robustness and accuracy. The proposed methodology provides a powerful and universal tool for automated, high-throughput particle analysis, enabling the extraction of detailed shape parameters and the construction of comprehensive size and morphology distributions for complex particulate systems.

Keywords: neural network, image segmentation, microscopy, particle size analysis

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2026, vol. 18, no. 4, pp. 837–853 (Russian).

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the governmental assignment for Borekov Institute of Catalysis (project FWUR-2024-0036).

1. Введение

Анализ размера и морфологии частиц важен для характеристики функциональных материалов, используемых в различных областях применения от катализа до фармацевтики [Gee, Or, 2002; Mudalige et al., 2019; Raval et al., 2019]. В настоящее время существует широкий спектр методов анализа распределения частиц по размерам, включая просеивание [ISO, 2024a; ASTM, 2017; ГОСТ, 2014; Allen, 2003], седиментацию [ISO, 2024a; ASTM, 2021a; ГОСТ, 2014], светорассеяние [ISO, 2017; ASTM, 2021b; ГОСТ, 2011a; ISO, 2024b; ASTM, 2022; ISO, 2020; ГОСТ, 2011b], метод Коултера [ISO, 2021a; Sivakumaran, Platt, 2016]. Однако эти методы основаны на предположении о сферической форме частиц и поэтому не позволяют определять морфологические параметры несферических частиц.

Микроскопические методы включают широкий спектр методик, в том числе оптическую микроскопию [Mertz, 2019], электронную микроскопию [ISO, 2021b; ISO, 2023; ГОСТ, 2007] и сканирующую зондовую микроскопию [Giessibl, 2003; Binnig, Rohrer, 1987]. Помимо упомянутых методов микроскопии, существует множество модификаций, которые не только визуализируют изучаемые системы, но и извлекают дополнительную информацию, например флуоресцентная микроскопия, используемая в биологии для наблюдения специфических структур клеток [Lichtman, Conchello, 2005], энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия в сканирующей электронной микроскопии для качественного химического анализа образцов [Goldstein et al., 2003] и сканирующая туннельная спектроскопия как модификация сканирующей электронной микроскопии для анализа электронной структуры поверхности [Zandvliet, van Houselt, 2009]. В отличие от других методов анализа распределения по размерам, микроскопические методы позволяют определять не только размеры частиц, но также их форму и геометрические параметры. Однако проблемой микроскопических методов является получение репрезентативной выборки.

Для увеличения размера выборки используется автоматизация анализа изображений. В настоящее время доступно разнообразное программное обеспечение для получения распределений частиц по размерам на основе фотографий микроскопии. Большая часть этого программного обеспечения для автоматического определения объектов использует пороговые методы, при которых выделяются части изображения с интенсивностью выше задаваемых пользователем значений. Примерами такого программного обеспечения являются WSxM, Gwyddion и ImageJ с расширением Fiji [Horcas et al., 2007; Nečas, Klapetek, 2012; Schindelin et al., 2012]. Несмотря на свою простоту, эти методы могут давать ненадежные результаты для изображений, содержащих шум, перекрывающиеся объекты и градиенты интенсивности.

В качестве альтернативы упомянутым методам могут использоваться подходы, основанные на искусственном интеллекте и машинном обучении. Эти подходы способны обеспечить распознавание и сегментацию объектов, близкие по качеству к тем, которые достигаются человеком. Помимо обеспечения высококачественной сегментации, нейросетевые подходы также могут обеспечить классификацию выявленных объектов, что полезно при изучении сложных систем с объектами разных классов, как, например, в биологии. В настоящее время исследователи самостоятельно разрабатывают нейронные сети для решения задач анализа изображений в микроскопии [Frei, Kruis, 2018; Rühle et al., 2021]. Кроме того, существуют сервисы, предоставляющие доступ к нейросетевому анализу, такие как Cellpose, DeepCell Kiosk, ParticlesNN и DLgram01 [Stringer et al., 2021; Bannon et al., 2021; Okunev et al., 2020; Матвеев и др., 2021; Matveev et al., 2024].

Как пороговые, так и нейросетевые методы характеризуют выявленные объекты аналогичным набором параметров, таких как площадь частицы, периметр, проекционный диаметр,

коэффициент удлинения. Хотя этот набор параметров обеспечивает более точное представление морфологических характеристик несферических частиц по сравнению с ранее упомянутыми методами, он не всегда точно описывает размер и геометрические свойства сложных объектов.

Чтобы получить комплексную информацию о размере и геометрических свойствах объектов разной формы, мы предлагаем новый подход, предполагающий использование аппроксимации параметризованными полигонами для определения морфологических характеристик объектов, сегментированных нейронной сетью.

2. Экспериментальная часть

2.1. Получение изображений оптической микроскопии модельных объектов, имеющих различную форму

Для проведения проверки метода, сочетающего нейросетевую сегментацию микрофотографий и последующий анализ полученной сегментации, использовался ряд материалов с различной формой частиц: цеолит ZSM-5 (гексагональные призмы), силикоалюмофосфат SAPO-34 (кубы) и полистирол (сферы). Суспензии для получения микрофотографий готовили суспендированием 0,1 г сухих порошков в 1 мл этанол-водного раствора (объемное соотношение 1 : 1). Дополнительно был приготовлен образец, содержащий частицы разной формы, путем смешивания одинаковых объемов приготовленных суспензий.

Образец цеолита ZSM-5 был получен гидротермальным методом [Bragina et al., 2024]. Образец силикоалюмофосфата был предоставлен Юй Чжичао и И. А. Шаманаевой и синтезирован гидротермальным методом [Shamanaeva et al., 2023; Shamanaeva et al., 2020]. Образец полистирольных микросфер был предоставлен Н. Н. Саньковой и получен методом дисперсионной полимеризации [Sankova et al., 2022].

Микрофотографии образцов были сделаны с использованием микроскопа Биомед-5, оснащенного камерой Levenhuk M1000.

2.2. Процедура нейросетевой сегментации

Для автоматической нейросетевой сегментации использовался сервис DLgram01, предоставляемый командой Института интеллектуальной робототехники НГУ [Матвеев и др., 2021; Matveev et al., 2024; Okunev, 2024]. Этот сервис позволяет пользователям без опыта программирования и машинного обучения относительно легко обучить нейронную сеть с использованием вручную сегментированного изображения, а затем использовать обученную нейронную сеть для автоматической сегментации других изображений тех же или аналогичных систем. Сервис основан на нейронной сети Cascade Mask-RCNN с базовой архитектурой X-101-64×4d-FPN, вычисления выполняются на графическом сервере HPE Apollo 6500 Gen10 с восемью GPU NVIDIA Tesla V-100. Процедура и руководство по сегментации с использованием этого сервиса описаны в других работах [Матвеев и др., 2021; Matveev et al., 2024].

На первом этапе подготавливались обучающие данные для нейронной сети. Для ручной сегментации изображений использовалась программа LabelMe. Объекты обводились полигонами и им присваивались метки классов, что позволило учитывать различные типы объектов. Для сегментации использовался метод *crop*, при котором выделялись все интересующие объекты в области *crop*. Результаты ручной сегментации сохранялись в файле формата JSON.

Второй этап включал в себя обучение нейронной сети. Файл сегментации загружался в сервис DLgram01, параметры обучения, такие как количество эпох, аугментация и порог срабатывания, устанавливался на значениях по умолчанию: 100, 4 и 0,3 соответственно. По завершении обучения сервис предоставлял файл сегментации в формате JSON и сохранял обученную нейронную сеть в своей памяти.

На третьем этапе новые изображения сегментировались с использованием обученной нейронной сети. Чтобы использовать уже обученную нейронную сеть для сегментации, указывалось название нейронной сети при загрузке самого изображения. По завершении процесса сегментации сервис возвращал файлы сегментации JSON. Эти файлы возможно открыть в программе LabelMe и при необходимости внести корректировки.

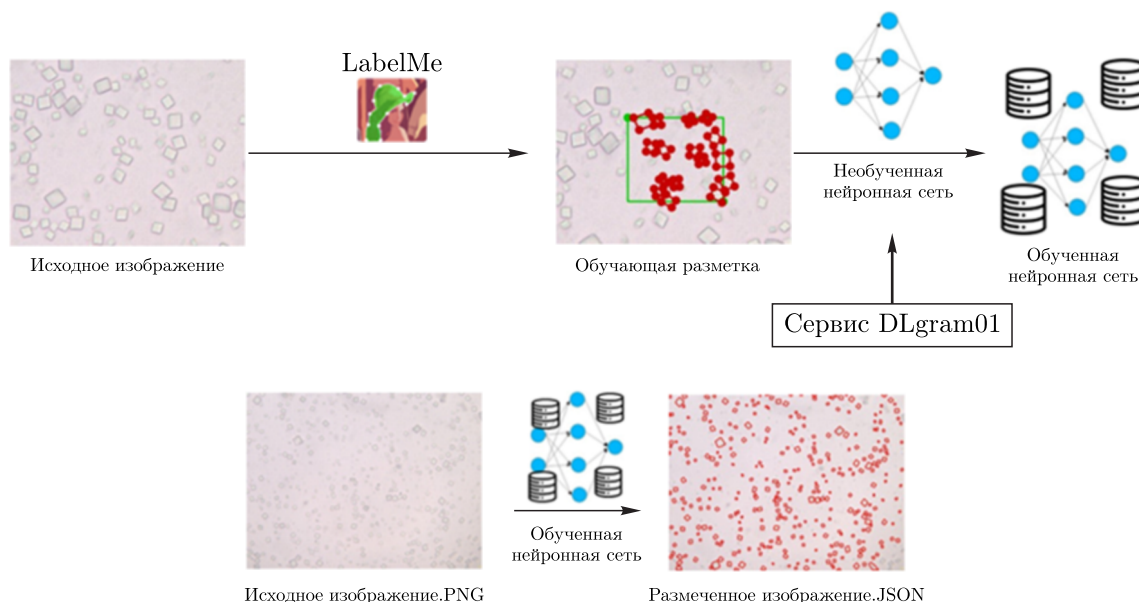


Рис. 1. Общая процедура сегментации микроскопических изображений

2.3. Процедура обработки сегментации

Программа LabelMe позволяет анализировать полученные сегментации с помощью функции Calculate stat, которая создает CSV-файл, содержащий информацию о сегментированных объектах, такую как метка класса объекта, координаты его центра (X и Y), площадь и проекционный диаметр, т.е. диаметр круга с площадью, равной площади объекта. Эта функция наиболее полезна для анализа объектов со сферической формой или с проекциями в виде правильных многоугольников. Однако для объектов с более сложной формой данная функция не может точно описать размер и морфологические характеристики. Чтобы получить подробные геометрические характеристики, необходим дополнительный анализ полигонов сегментации. Эти полигоны содержатся в файлах сегментации JSON в виде пар координат вершин.

В настоящей работе мы разработали программу на языке Python для извлечения геометрических параметров частиц и построения их распределений по размерам путем сравнения полигонов сегментации и параметризованных полигонов [PSPAScript, 2025]. Процесс анализа сегментированных объектов с помощью программы состоит из нескольких этапов.

На первом этапе производится поиск центров полигонов сегментации путем разделения полигона на треугольники (рис. 2). Разделение на треугольники выполняется методом триангуляции Делоне, реализованным с помощью функции `scipy.spatial.Delaunay`, которая является частью модуля SciPy в Python. Эта функция принимает в качестве входных данных координаты вершин полигона и возвращает набор троек координат вершин для треугольников, на которые он разделен. Однако возможно, что некоторые треугольники из триангуляции могут лежать вне контура исходного полигона. Поэтому после получения набора разделяющих треугольников удаляются все треугольники, лежащие вне полигона. Зная координаты вершин треугольника, их

центры и площади можно определить с помощью следующих уравнений:

$$X_C^i = \frac{X_1^i + X_2^i + X_3^i}{3}, \quad (1)$$

$$Y_C^i = \frac{Y_1^i + Y_2^i + Y_3^i}{3}, \quad (2)$$

$$S^i = \frac{1}{2} [X_1^i (Y_2^i - Y_3^i) + X_2^i (Y_3^i - Y_1^i) + X_3^i (Y_1^i - Y_2^i)], \quad (3)$$

где X_C^i, Y_C^i — координаты центра i -го треугольника, $X_1^i, Y_1^i, X_2^i, Y_2^i, X_3^i, Y_3^i$ — координаты вершин i -го треугольника, а S^i — площадь i -го треугольника.

На основе рассчитанных площадей и координат центр полигона можно определить с помощью следующих уравнений:

$$X_C = \frac{\sum S^i \cdot X_C^i}{\sum S^i}, \quad (4)$$

$$Y_C = \frac{\sum S^i \cdot Y_C^i}{\sum S^i}, \quad (5)$$

где X_C, Y_C — координаты центра полигона.

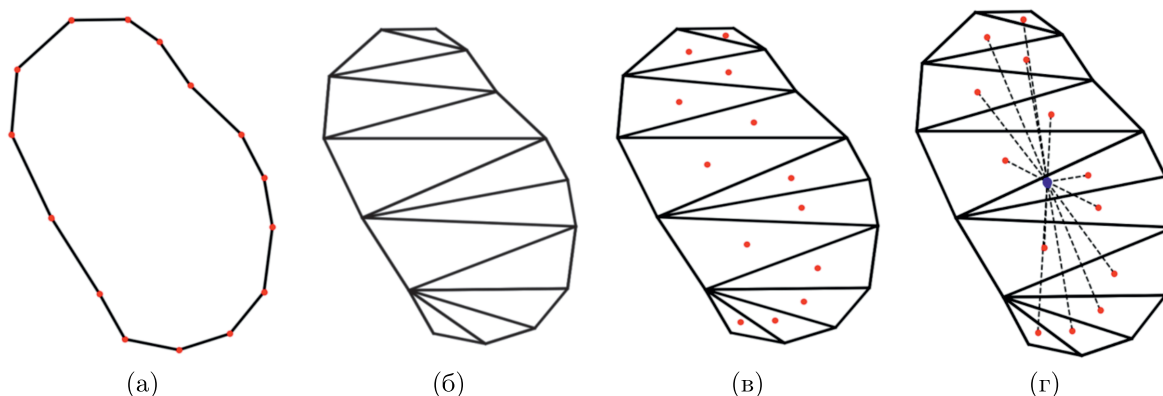


Рис. 2. Процедура нахождения центра полигона: а) получение координат вершин полигона; б) триангуляция полигона; в) нахождение центров треугольников; г) нахождение центра полигона

На втором этапе строятся параметризованные полигоны. Параметризованные полигоны вводятся на основе предположения, что их форма может быть описана набором параметров, через варьирование которых можно получить все разнообразие форм объектов (рис. 3). Для объектов с круглыми и квадратными формами достаточно одного параметра, для прямоугольных и эллиптических объектов требуются значения для больших и малых осей, а для шестиугольных объектов становятся необходимыми три параметра. Набор параметров также можно определить для более сложных объектов для описания их формы. Полигоны могут быть построены либо путем указания координат отдельных вершин, либо аналитически с использованием уравнений. Кроме того, для всех форм, кроме круга, возникает дополнительный параметр, соответствующий углу поворота всей фигуры (φ).

На третьем этапе параметризованный полигон сопоставляется с полигоном сегментации. Для сопоставления полигонов их центры накладываются друг на друга, и из них испускаются лучи (рис. 4). Чтобы определить точку пересечения луча, испущенного под углом θ от центра,

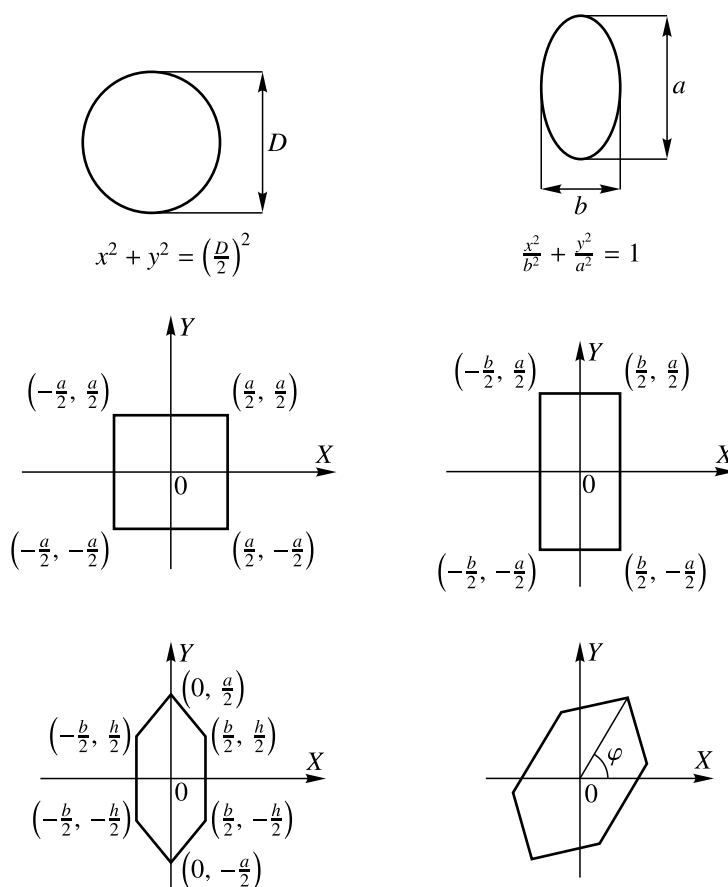


Рис. 3. Параметризованные полигоны и их представление

со стороной полигона, начинающейся в точке (X_1, Y_1) и заканчивающейся в точке (X_2, Y_2) , необходимо решить систему уравнений, образованную параметрическими уравнениями линии для луча и стороны полигона:

$$\begin{cases} X_1 + (X_2 - X_1) \cdot \tau = t \cdot \cos \theta, \\ Y_1 + (Y_2 - Y_1) \cdot \tau = t \cdot \sin \theta. \end{cases} \quad (6)$$

На основе решения T можно найти точку пересечения (X_{int}, Y_{int}) по следующим формулам:

$$X_{int} = T \cdot \cos \theta, \quad (7)$$

$$Y_{int} = T \cdot \sin \theta. \quad (8)$$

Зная точку пересечения для полигона сегментации (X_{int}^L, Y_{int}^L) и точку пересечения для параметризованного полигона (X_{int}^P, Y_{int}^P) , можно вычислить расстояние l между этой парой точек по формуле

$$l = \sqrt{(X_{int}^L - X_{int}^P)^2 + (Y_{int}^L - Y_{int}^P)^2}. \quad (9)$$

Суммируя расстояния l между точками пересечения для всех углов испускания лучей, можно получить функцию «несходства» E двух полигонов:

$$E = \sum_i l_i. \quad (10)$$

Изменяя параметры, можно найти минимальное «несходство», то есть набор параметров, при котором параметризованный полигон наиболее схож с сегментационным полигоном. Наряду с предложенной мерой для обеспечения гибкости метода в программном обеспечении реализована поддержка метрик Хаусдорфа и Фреше. В данной работе используется авторский подход, продемонстрировавший более высокую точность для исследуемых систем. На последнем этапе программа объединяет найденные параметры для всех объектов в CSV-файл, который доступен для дальнейшего статистического анализа.

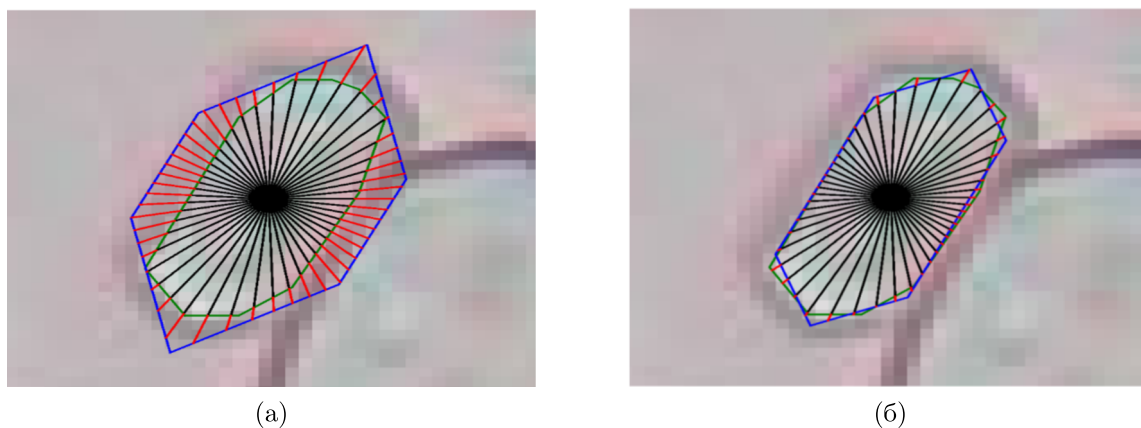


Рис. 4. Сравнение полигона сегментации (зеленый) и параметризованного полигона (синий): а) до минимизации функции «несходства»; б) после минимизации функции «несходства»

3. Результаты и обсуждения

Первыми были проанализированы изображения оптической микроскопии полистирольных микросфер, поскольку эта система является самой простой. На рис. 5 показаны исходное изображение, результат сегментации и сегментация с наложенными параметризованными полигонами. Как можно наблюдать, в случае системы, состоящей из сферических частиц, автоматическая нейросетевая сегментация точно обнаруживает и выделяет изучаемые объекты.

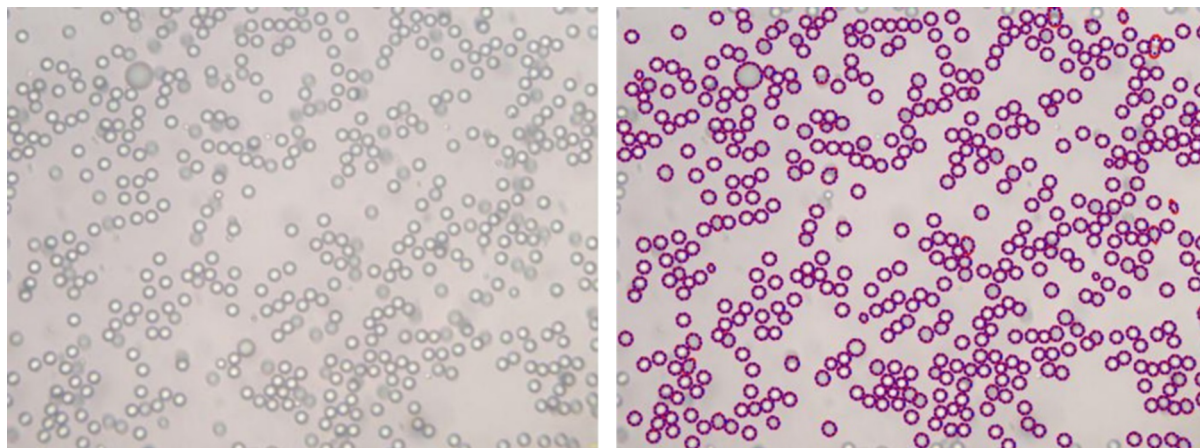


Рис. 5. Исходные и сегментированные микрофотографии системы, содержащей полистирольные микросферы. Сплошным красным цветом показана нейросетевая сегментация, а пунктирным синим — параметризованные полигоны

На рис. 6 показаны распределения частиц по размерам, визуализированные в виде гистограмм относительных частот для наглядности представления данных. Они получены как с использованием методологии, предлагаемой в данной работе, так и с помощью функции Calculate stat программы LabelMe. Средний диаметр сфер, рассчитанный на основе исходных данных, полученных с помощью нашей программы, составляет 4,3 мкм, со стандартным отклонением 0,7 мкм. Средний диаметр и стандартное отклонение, полученные с помощью LabelMe, равны 4,5 мкм и 0,8 мкм соответственно. Всего было обработано 2777 частиц. Значения, полученные двумя методами, близки, что указывает на схожую применимость обоих подходов для систем, состоящих из сферических частиц. Близость этих значений также говорит о том, что предложенный нами метод может использоваться наряду со стандартным анализом сегментаций изображений микроскопии в случае сферических частиц.

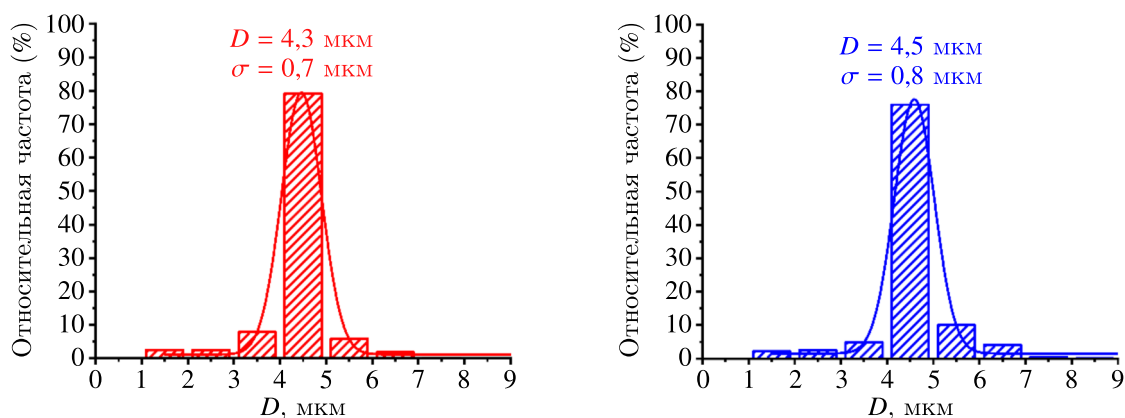


Рис. 6. Распределение по размерам частиц среди 2777 полистирольных микросфер, полученное с помощью метода параметризованных полигонов (красный) и LabelMe (синий)

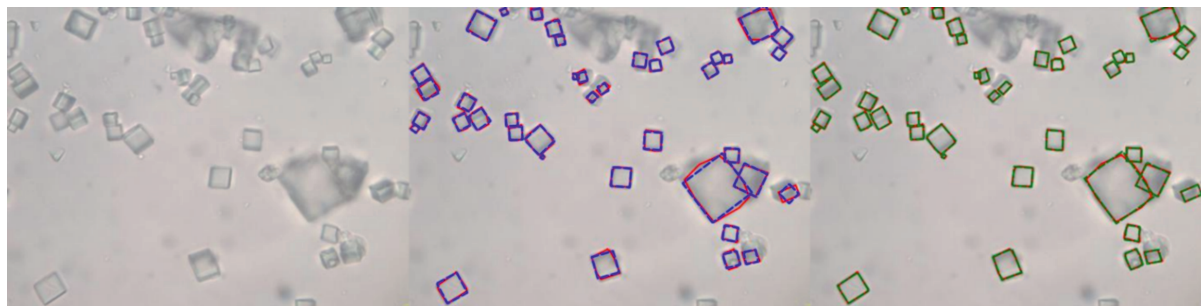


Рис. 7. Исходные и сегментированные микрофотографии системы, содержащей SAPO-34. Сплошной красный — сегментация, пунктирный синий — наложение параметризованных квадратов, пунктирный зеленый — наложение параметризованных прямоугольников

Следующей изучалась более сложная система, содержащая SAPO-34. Кристаллы этого вещества имеют форму, близкую к кубической, поэтому в качестве параметризованного полигона используется квадрат. Дополнительно в качестве параметризованного полигона использовался прямоугольник как обобщение формы квадрата. На рис. 7 показаны исходное изображение, результат сегментации и наложение квадратов и прямоугольников на результат сегментации. Как видно, использование прямоугольников обеспечивает лучшее соответствие с контурами сегментации. Всего сегментировано и обработано 740 объектов.

Аналогично системе, содержащей полистирольные микросферы, средние размеры и стандартные отклонения для распределений, полученных с помощью предложенного метода пара-

метризованных полигонов и LabelMe, близки, как показано на распределениях на рис. 8. Стоит отметить, что в случае распределения, построенного с помощью LabelMe, значения размеров умножены на коэффициент $\sqrt{\frac{\pi}{4}}$, который возникает из особенностей расчета проекционного диаметра.

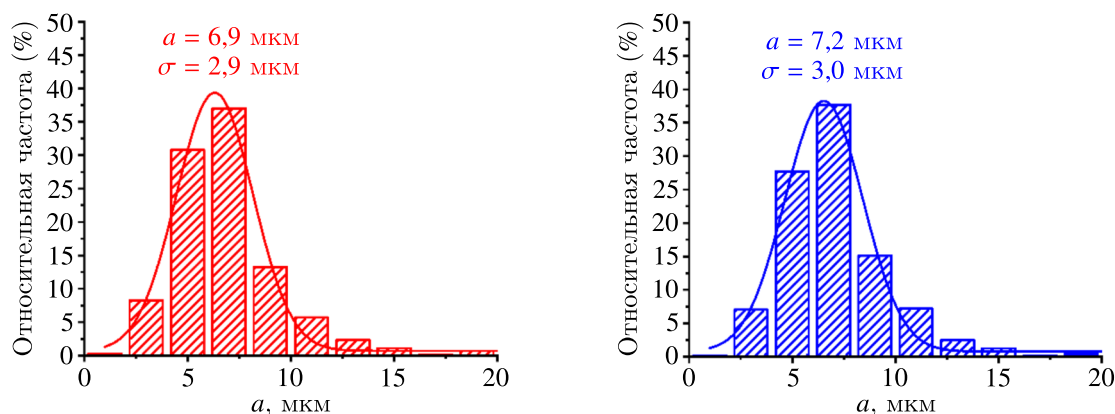


Рис. 8. Распределение по размерам частиц среди 740 кристаллов SAPO-34, полученное с помощью метода параметризованных полигонов с использованием квадрата в качестве параметризованного полигона (красный) и LabelMe (синий)

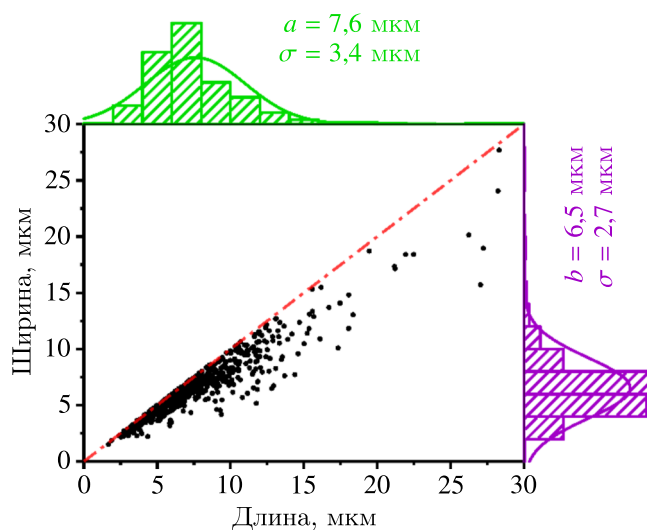


Рис. 9. Распределение размеров частиц среди 740 кристаллов SAPO-34, полученное с помощью метода параметризованных полигонов, использующего прямоугольники в качестве параметризованного полигона. Зеленый — распределение по длине; фиолетовый — распределение по ширине

Анализ распределения по размерам с использованием прямоугольников в качестве параметризованного полигона предоставляет два параметра для каждого объекта: длину и ширину прямоугольника. Распределение каждого из этих параметров отдельно, а также их совместное распределение показаны на рис. 9. Как видно из этих распределений, не все объекты имеют чисто квадратную форму, о чем свидетельствуют несовпадение средних значений для длины и ширины прямоугольников и наличие значительного количества объектов, не лежащих на линии в совместном распределении. Среднее отношение длины и ширины составляет 1,16, что дополнительно указывает на то, что частицы в системе не являются идеально квадратными. Это демонстрирует, что более полное описание морфологических и размерных характеристик частиц

SAPO-34 можно получить, используя прямоугольник в качестве параметризованного полигона, тогда как использование квадратов или проекционных диаметров может скрыть некоторую полезную информацию и, таким образом, дать неполную картину.

Затем были исследованы кристаллы ZSM-5, имеющие форму гексагональной призмы, что приводит к появлению как прямоугольных, так и гексагональных проекций на микрофотографиях. Из-за наличия двух классов объектов на изображениях сегментация и анализ проводятся соответственно для двух классов. На рис. 10 показаны примеры исходного изображения, результата сегментации и наложения параметризованных полигонов на сегментацию. Как видно, нейросетевая сегментация и наложение параметризованных полигонов также дали хорошие результаты. Всего обработан 861 объект, из которых 675 — гексагональные и 186 — прямоугольные.

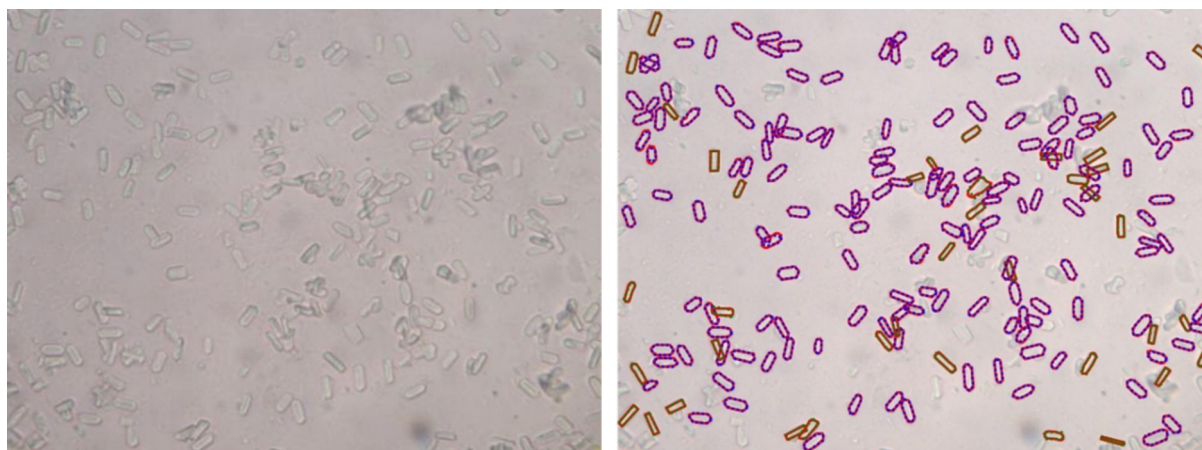


Рис. 10. Исходные и сегментированные микрофотографии системы, содержащей ZSM-5. Сплошным красным цветом показана нейросетевая сегментация, пунктирным синим — наложение параметризованных шестиугольников, пунктирным зеленым — наложение параметризованных прямоугольников

Гексагональные частицы описываются тремя параметрами, тогда как прямоугольные объекты, как упоминалось ранее, могут быть описаны двумя параметрами. Поскольку параметр длины в гексагональных и прямоугольных частицах описывает одну и ту же геометрическую характеристику трехмерного объекта (рис. 11), их распределения можно объединить в единое для более полного описания системы. На рис. 12 представлено распределение параметров, описывающих гексагональные кристаллы ZSM-5.

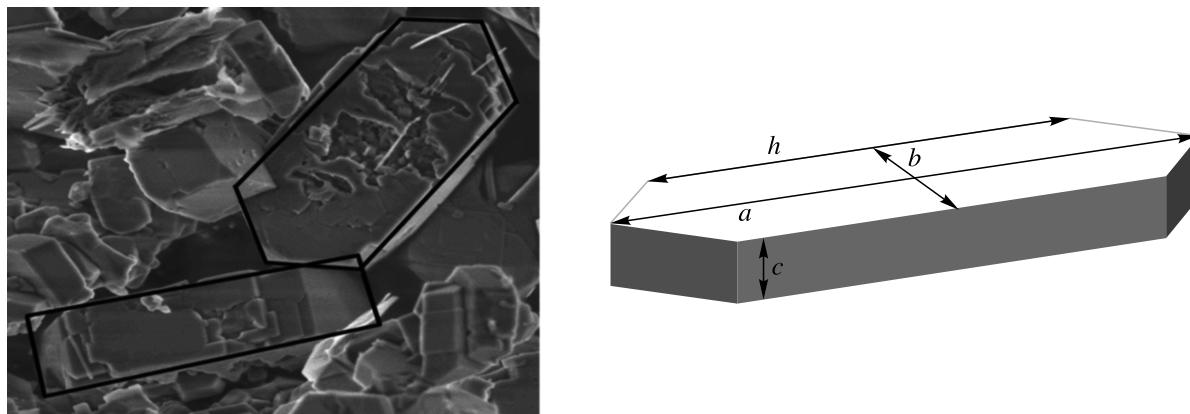


Рис. 11. Форма гексагональной призмы частиц ZSM-5 и соответствующие прямоугольная и гексагональная проекции

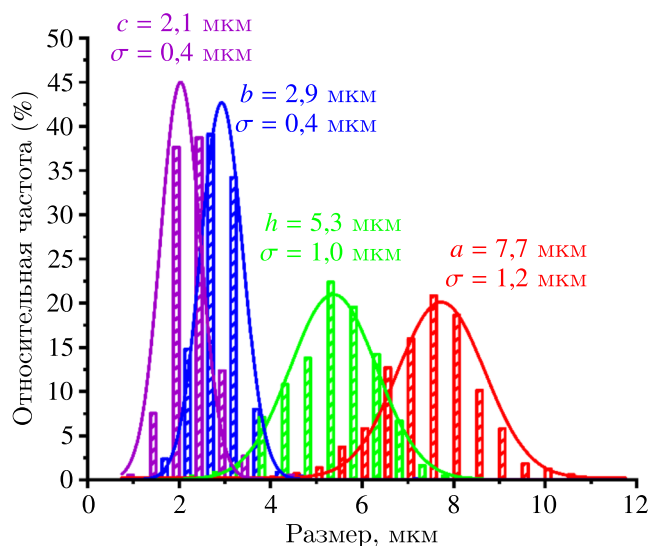


Рис. 12. Распределение параметров частиц среди 861 кристалла ZSM-5

Наиболее сложной из изученных систем является смесь, содержащая полистирольные микросферы, частицы SAPO-34 и частицы ZSM-5. Соответственно, сегментация выполняется с использованием кругов, шестиугольников и прямоугольников. Как и в случае системы, содержащей только SAPO-34, использование квадратов в качестве параметризованных полигонов не обеспечило наилучшего соответствия с контурами сегментации, поэтому эти частицы также анализировались с использованием прямоугольников в качестве параметризованных полигонов. На рис. 13 показаны исходное изображение, его сегментация и наложение параметризованных форм на сегментацию. Всего обработано 3642 объекта, из которых 2633 — полистирольные микросферы, 860 — частицы ZSM-5 (из которых 607 имеют гексагональную грань и 253 — прямоугольную грань) и 149 — SAPO-34.

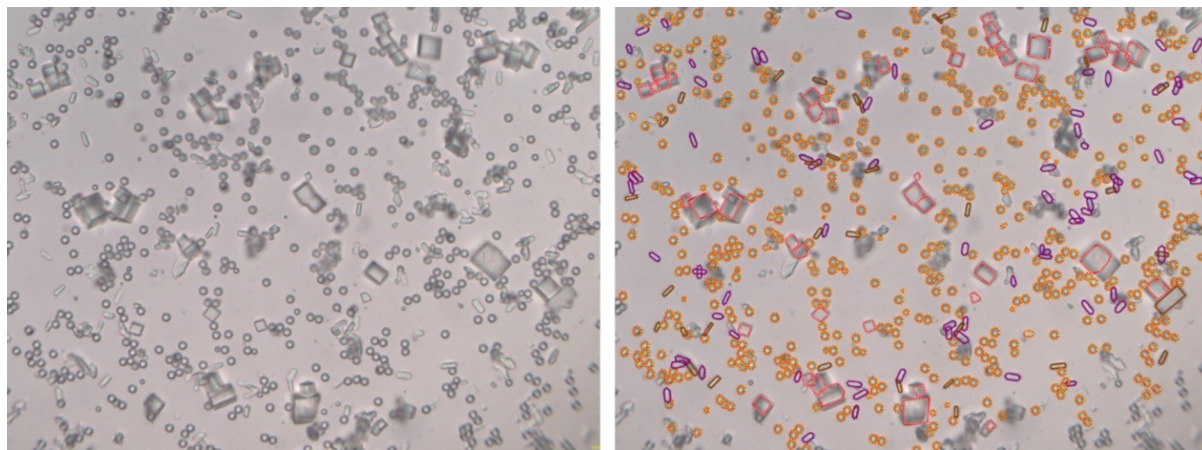


Рис. 13. Исходные и сегментированные микрофотографии смешанной системы. Сплошной красный — сегментация, пунктирный синий — наложение параметризованных шестиугольников для частиц ZSM-5, пунктирный зеленый — наложение параметризованных прямоугольников для частиц ZSM-5, пунктирный розовый — наложение параметризованных прямоугольников для частиц SAPO-34, пунктирный желтый — наложение параметризованных кругов для полистирольных микросфер

На рис. 14 показаны распределения для каждого класса объектов. Как можно наблюдать из представленных распределений, средние размеры и стандартные отклонения полученных рас-

пределений близки к значениям, ранее полученным для систем, содержащих только один тип частиц, о чем свидетельствуют перекрывающиеся области нормальных распределений с этими параметрами (таблица 1). Это указывает на применимость данного метода анализа распределения частиц по размерам для анализа сложных смесей.

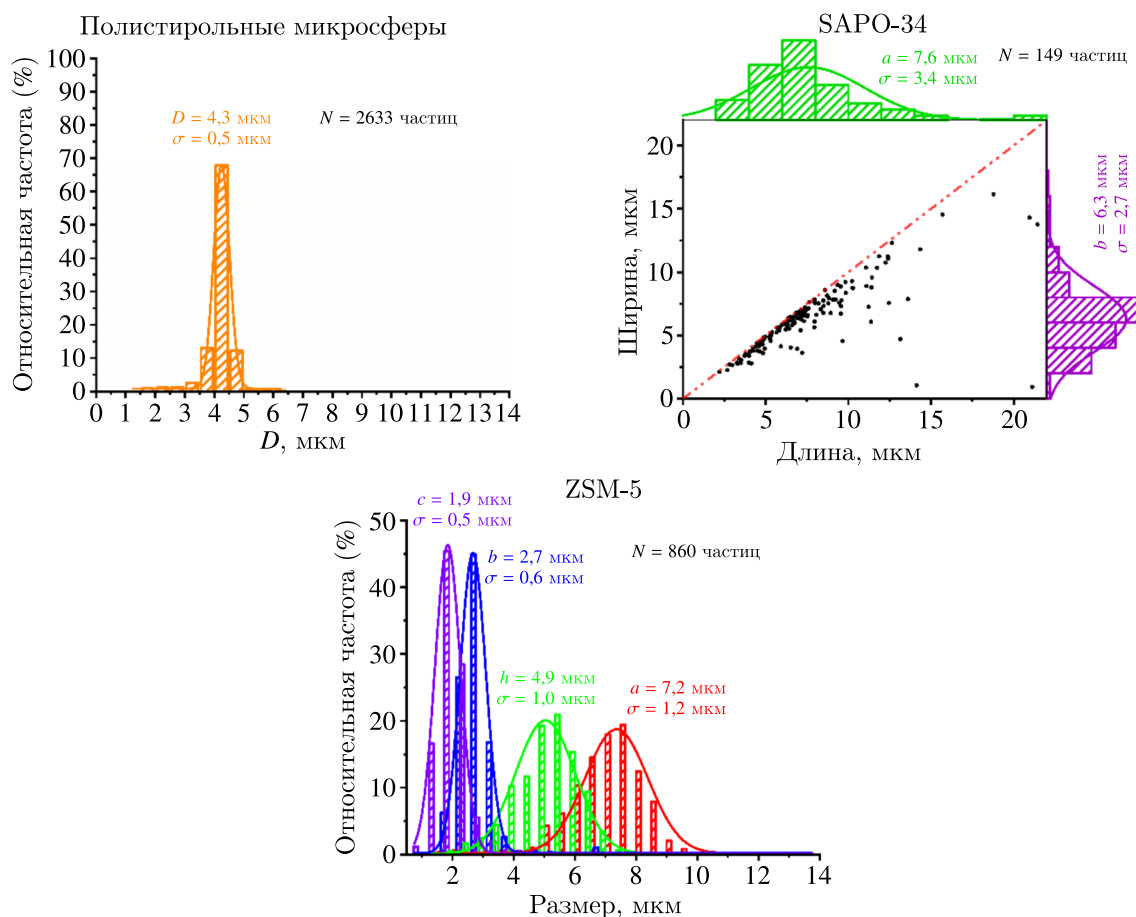


Рис. 14. Распределения по размерам частиц для смешанной системы

Таблица 1. Сравнительная таблица результатов для смешанной системы и систем, состоящих только из одного типа частиц

	Однокомпонентная система	Смешанная система	Площадь перекрытия
Полистирольные микросферы	$d = 4,3 \text{ мкм}, \sigma_d = 0,7 \text{ мкм}$	$d = 4,2 \text{ мкм}, \sigma_d = 0,5 \text{ мкм}$	$S_d \approx 0,83$
SAPO-34	$a = 7,6 \text{ мкм}, \sigma_a = 3,4 \text{ мкм},$ $b = 6,5 \text{ мкм}, \sigma_b = 2,7 \text{ мкм}$	$a = 7,6 \text{ мкм}, \sigma_a = 3,4 \text{ мкм},$ $b = 6,3 \text{ мкм}, \sigma_b = 2,6 \text{ мкм}$	$S_a \approx 1,$ $S_b \approx 0,97$
ZSM-5	$a = 7,7 \text{ мкм}, \sigma_a = 1,2 \text{ мкм},$ $b = 2,9 \text{ мкм}, \sigma_b = 0,5 \text{ мкм},$ $c = 2,1 \text{ мкм}, \sigma_c = 0,4 \text{ мкм},$ $h = 5,3 \text{ мкм}, \sigma_h = 1,0 \text{ мкм}$	$a = 7,2 \text{ мкм}, \sigma_a = 1,2 \text{ мкм},$ $b = 2,7 \text{ мкм}, \sigma_b = 0,6 \text{ мкм},$ $c = 1,9 \text{ мкм}, \sigma_c = 0,5 \text{ мкм},$ $h = 4,9 \text{ мкм}, \sigma_h = 1,0 \text{ мкм}$	$S_a \approx 0,83,$ $S_b \approx 0,84,$ $S_c \approx 0,80,$ $S_h \approx 0,84$

Заключение

В данной работе предложен новый подход для определения размерных и морфологических характеристик частиц. Метод основан на сочетании сегментации с использованием нейронных сетей и последующего анализа ее результатов с помощью специально разработанной программы на языке Python. Определение морфологических параметров достигается путем наложения параметризованных полигонов на контуры сегментации и нахождения оптимальных параметров, обеспечивающих наилучшее совпадение.

Предложенный подход был протестирован на системах различной сложности: от простых, состоящих из сферических частиц, до сложных смесей с частицами разных форм. В системах с полистирольными микросферами и кубическими частицами SAPO-34 результаты, полученные с использованием предложенного метода, близки к результатам, основанным на расчете проекционного диаметра. Анализ многокомпонентных систем показал, что метод эффективно идентифицирует и характеризует частицы различных типов (сферы, кубы, шестиугольные призмы), предоставляя надежные данные о распределении частиц по размерам и их морфологических характеристиках, что позволяет выводить распределения для отдельных параметров.

Эффективное применение предложенного подхода предполагает соблюдение ряда условий, стандартных для задач анализа микрофотографий: высокое качество исходных изображений, минимальное количество шумов, артефактов и перекрытий частиц, а также расположение объектов в устойчивых проекциях, обеспечивающих однозначную интерпретацию их формы. Следует отметить, что использование нейросетевой сегментации позволяет нивелировать часть ограничений, характерных для классических методов пороговой обработки.

Научная новизна работы заключается в реализации метода определения морфологических параметров частиц на основе результатов их сегментации. Классические методы анализа изображений микроскопии позволяют обнаруживать и выделять частицы, но не дают детальной морфологической информации. Использование нейронных сетей, являясь логичным развитием классических методов, позволяет получать более точные результаты за счет эффективной фильтрации шумов и возможности сегментации перекрывающихся объектов. Кроме того, нейросети обеспечивают классификацию исследуемых объектов. Однако как классические, так и нейросетевые методы выдают лишь контуры объектов и набор общих дескрипторов формы, не описывающих непосредственно морфологические характеристики частицы. Наш подход позволяет проводить более детальный анализ контуров для получения информации, связанной с морфологией объектов. Хотя приведенные в работе системы относительно просты, сам подход может быть расширен: параметризованные полигоны применимы и для анализа объектов более сложной формы. Применение нейросетевой сегментации к изображениям высокого разрешения дает возможность количественно анализировать морфологические дефекты частиц при условии их формальной параметризации.

Таким образом, предложенная методология представляет собой универсальный и полезный инструмент для автоматизированного анализа частиц сложной формы, что делает ее перспективной для применения в широком диапазоне научных и технологических задач.

Список литературы (References)

- ГОСТ 12536-2014. Грунты. Методы лабораторного определения гранулометрического (зернового) и микроагрегатного состава. — М.: Стандартинформ, 2014.
GOST 12536-2014. Grunty. Metody laboratornogo opredeleniya granulometricheskogo (zernovogo) i mikroagregatnogo sostava [Soils. Laboratory methods for determining particle size distribution (grain size) and microaggregate composition]. — Moscow: Standartinform, 2014 (in Russian).

- ГОСТ Р 8.636-2007. Государственная система обеспечения единства измерений. Микроскопы электронные растровые. Методика калибровки. — М.: Стандартинформ, 2007.
GOST R 8.636-2007. Gosudarstvennaya sistema obespecheniya edinstva izmerenii. Mikroskopy elektronnye rastrovye. Metodika kalibrovki [State system for ensuring the uniformity of measurements. Scanning electron microscopes. Calibration procedures]. — Moscow: Standartinform, 2007 (in Russian).
- ГОСТ Р 8.774-2011. Государственная система обеспечения единства измерений. Дисперсный состав жидких сред. Определение размеров частиц по динамическому рассеянию света. — М.: Стандартинформ, 2011a.
GOST R 8.774-2011. Gosudarstvennaya sistema obespecheniya edinstva izmerenii. Dispersnyi sostav zhidkikh sred. Opredelenie razmerov chastits po dinamicheskomu rasseyaniyu sveta [State system for ensuring the uniformity of measurements. Dispersion composition of liquid media. Particle size determination by dynamic light scattering]. — Moscow: Standartinform, 2011a (in Russian).
- ГОСТ Р 8.777-2011. Государственная система обеспечения единства измерений. Дисперсный состав аэрозолей и взвесей. Определение размеров частиц по дифракции лазерного излучения. — М.: Стандартинформ, 2011b.
GOST R 8.777-2011. Gosudarstvennaya sistema obespecheniya edinstva izmerenii. Dispersnyi sostav aerozolei i vzvesei. Opredelenie razmerov chastits po difraktsii lazernogo izlucheniya [State system for ensuring the uniformity of measurements. Dispersed composition of aerosols and suspensions. Particle sizing by laser diffraction]. — Moscow: Standartinform, 2011b (in Russian).
- Матвеев А. В., Машуков М. Ю., Нартова А. В., Санькова Н. Н., Окунев А. Г. Автоматический анализ изображений микроскопии с применением облачного сервиса DLgram01 // Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials. — 2021. — С. 300–311. — <https://doi.org/10.26456/PCASCNN/2021.13.300>
Matveev A. V., Mashukov M. Yu., Nartova A. V., Sankova N. N., Okunev A. G. Avtomaticheskii analiz izobrazheniy mikroskopii s primeneniem oblachnogo servisa DLgram01 [Automatic analysis of microscopy images using the cloud service DLgram01] // Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials. — 2021. — P. 300–311. — <https://doi.org/10.26456/PCASCNN/2021.13.300> (in Russian).
- Allen T. Particle size analysis by sieving // Allen T. (Ed.) Powder sampling and particle size determination. — Amsterdam: Elsevier, 2003. — P. 208–250. — DOI: 10.1016/B978-044451564-3/50006-1
- ASTM International. ASTM D6913-04(2009)e1. Standard test methods for particle-size distribution (gradation) of soils using sieve analysis. — 2017.
- ASTM International. ASTM D7928-21e1. Standard test method for particle-size distribution (gradation) of fine-grained soils using the sedimentation (hydrometer) analysis. — 2021a.
- ASTM International. ASTM E2490-09(2021). Standard guide for measurement of particle size distribution of nanomaterials in suspension by photon correlation spectroscopy (PCS). — 2021b.
- ASTM International. ASTM E2834-12(2022). Standard guide for measurement of particle size distribution of nanomaterials in suspension by nanoparticle tracking analysis (NTA). — 2022.
- Bannon D., Moen E., Schwartz M., Borba E., Kudo T., Greenwald N., Vijayakumar V., Chang B., Pao E., Osterman E., Graf W., Van Valen D. DeepCell Kiosk: scaling deep learning – enabled cellular image analysis with Kubernetes // Nature Methods. — 2021. — Vol. 18. — P. 43–45. — DOI: 10.1038/s41592-020-01023-0
- Binnig G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy — from birth to adolescence // Reviews of Modern Physics. — 1987. — Vol. 59. — P. 615–625. — DOI: 10.1103/RevModPhys.59.615
- Bragina A. A., Babina K. A., Kasyanov A. V., Parkhomchuk E. V. Template-free synthesis of ZSM-5: effect of precursor composition on the crystallinity and crystal morphology // Petroleum Chemistry. — 2024. — Vol. 64. — P. 1063–1069. — DOI: 10.1134/S0965544124060033
- Frei M., Kruis F. E. Fully automated primary particle size analysis of agglomerates on transmission electron microscopy images via artificial neural networks // Powder Technology. — 2018. — Vol. 332. — P. 120–130. — DOI: 10.1016/j.powtec.2018.03.032
- Gee G. W., Or D. Particle-size analysis // Methods of soil analysis. — John Wiley & Sons, Ltd, 2002. — P. 255–293. — DOI: 10.2136/sssabookser5.4.c12

- Giessibl F.J.* Advances in atomic force microscopy // *Reviews of Modern Physics*. — 2003. — Vol. 75. — P. 949–983. — DOI: 10.1103/RevModPhys.75.949
- Goldstein J.I., Newbury D.E., Echlin P., Joy D.C., Lyman C.E., Lifshin E., Sawyer L., Michael J.R.* X-ray spectral measurement: EDS and WDS // Goldstein J.I. et al. (Eds.) *Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis: Third edition*. — Boston, MA: Springer US, 2003. — P. 297–353. — DOI: 10.1007/978-1-4615-0215-9_7
- Horcas I., Fernández R., Gómez-Rodríguez J.M., Colchero J., Gómez-Herrero J., Baro A.M.* WSXM: A software for scanning probe microscopy and a tool for nanotechnology // *Review of Scientific Instruments*. — 2007. — Vol. 78. — 013705. — DOI: 10.1063/1.2432410
- ISO. ISO 11277:2020/Amd 1:2024. Soil quality. Determination of particle size distribution in mineral soil material. Method by sieving and sedimentation. — 2024a.
- ISO. ISO 13319-1:2021. Determination of particle size distribution. Electrical sensing zone method Part 1: Aperture/orifice tube method. — 2021a.
- ISO. ISO 13320:2020. Particle size analysis. Laser diffraction methods. — 2020.
- ISO. ISO 19430:2024. Determination of particle size distribution and number concentration by particle tracking analysis (PTA). — 2024b.
- ISO. ISO 22412:2017. Particle size analysis. Dynamic light scattering (DLS). — 2017.
- ISO. ISO 29301:2023. Microbeam analysis. Analytical electron microscopy. Methods for calibrating image magnification by using reference materials with periodic structures. — 2023.
- ISO. ISO/TS 21383:2021. Microbeam analysis. Scanning electron microscopy. Qualification of the scanning electron microscope for quantitative measurements. — 2021b.
- Lichtman J.W., Conchello J.-A.* Fluorescence microscopy // *Nature Methods*. — 2005. — Vol. 2. — P. 910–919. — DOI: 10.1038/nmeth817
- Matveev A.V., Nartova A.V., Sankova N.N., Okunev A.G.* DLgram cloud service for deep-learning analysis of microscopy images // *Microscopy Research and Technique*. — 2024. — Vol. 87. — P. 991–998. — DOI: 10.1002/JEMT.24480
- Mertz J.* Introduction to optical microscopy. — 2nd ed. — Cambridge: Cambridge University Press, 2019. — DOI: 10.1017/9781108552660
- Mudalige T., Qu H., Van Haute D., Ansar S.M., Paredes A., Ingle T.* Characterization of nanomaterials: tools and challenges // *Lopez Rubio A., Fabra Rovira M.J., Martínez Sanz M., Gómez-Mascaraque L.G. (Eds.) Micro- and nanotechnologies*. — Elsevier, 2019. — P. 313–353. — DOI: 10.1016/B978-0-12-814130-4.00011-7
- Nečas D., Klapetek P.* Gwyddion: an open-source software for SPM data analysis // *Central European Journal of Physics*. — 2012. — Vol. 10. — P. 181–188. — DOI: 10.2478/s11534-011-0096-2
- Okunev A.G.* Nanoparticles. — [Electronic resource]. — https://t.me/nanoparticles_nsk (accessed: 08.12.2024).
- Okunev A.G., Mashukov M.Yu., Nartova A.V., Matveev A.V.* Nanoparticle recognition on scanning probe microscopy images using computer vision and deep learning // *Nanomaterials*. — 2020. — Vol. 10, No. 7. — 1285. — DOI: 10.3390/nano10071285
- PSPAScript. Post-Segmentation Particles Analysis Script. — [Electronic resource]. — <https://github.com/dalita2221/PSPAScript> (accessed: 05.02.2025).
- Raval N., Maheshwari R., Kalyane D., Youngren-Ortiz S.R., Chougule M.B., Tekade R.K.* Importance of physicochemical characterization of nanoparticles in pharmaceutical product development // *Tekade R.K. (Ed.) Basic fundamentals of drug delivery*. — Academic Press, 2019. — P. 369–400. — DOI: 10.1016/B978-0-12-817909-3.00010-8
- Rühle B., Krumrey J.F., Hodoroaba V.-D.* Workflow towards automated segmentation of agglomerated, non-spherical particles from electron microscopy images using artificial neural networks // *Scientific Reports*. — 2021. — Vol. 11. — 4942. — DOI: 10.1038/s41598-021-84287-6

- Sankova N., Vyvdenko D., Luzina E., Shestakova D., Babina K., Malakhova Y., Yakush E., Parkhomchuk E.* Polymer particle growth and morphology evolution during dispersion polymerization through optical microscopy // *Colloid and Polymer Science*. — 2022. — Vol. 300. — P. 625–640. — DOI: 10.1007/S00396-022-04972-4
- Schindelin J., Arganda-Carreras I., Frise E., Kaynig V., Longair M., Pietzsch T., Preibisch S., Rueden C., Saalfeld S., Schmid B., Tinevez J.-Y., White D.J., Hartenstein V., Eliceiri K., Tomancak P., Cardona A.* Fiji: an open-source platform for biological-image analysis // *Nature Methods*. — 2012. — Vol. 9. — P. 676–682. — DOI: 10.1038/nmeth.2019
- Shamanaeva I. A., Yu Z., Golodnova D. A., Sladkovskiy D. A., Babina K. A., Parkhomchuk E. V.* The way to enhance SAPO-34 activity and stability in methanol-to-olefin conversion // *Journal of Porous Materials*. — 2023. — Vol. 30. — P. 787–796. — DOI: 10.1007/S10934-022-01383-2
- Shamanaeva I. A., Yu Z., Utemov A. V., Wu W., Sladkovskiy D. A., Parkhomchuk E. V.* Role of texture and acidity of SAPO-34 in methanol to olefins conversion // *Petroleum Chemistry*. — 2020. — Vol. 60. — P. 471–478. — DOI: 10.1134/S0965544120040167
- Sivakumaran M., Platt M.* Tunable resistive pulse sensing: potential applications in nanomedicine // *Nanomedicine*. — 2016. — Vol. 11. — P. 2197–2214. — DOI: 10.2217/nnm-2016-0097
- Stringer C., Wang T., Michaelos M., Pachitariu M.* Cellpose: a generalist algorithm for cellular segmentation // *Nature Methods*. — 2021. — Vol. 18. — P. 100–106. — DOI: 10.1038/s41592-020-01018-x
- Zandvliet H. J. W., van Houselt A.* Scanning tunneling spectroscopy // *Annual Review of Analytical Chemistry*. — 2009. — Vol. 2. — P. 37–55. — DOI: 10.1146/annurev-anchem-060908-155213