

АВТОМАТИЗАЦИЯ АНАЛИЗА КРИСТАЛЛООБРАЗОВАНИЯ В ЛЕВИТИРУЮЩЕМ МИКРОКЛАСТЕРЕ ЧЕРЕЗ НЕЙРОСЕТЬ

Нейросети как инструмент научного исследования плотно вошли в мировую науку в целом. Однако, в частности, их применение на местах ограничивается временными и ресурсными факторами. Иначе говоря, наука предлагает много больше задач, чем учёные успевают писать нейросетей. Так, в ходе нашего исследования кристаллообразования в процессе взаимодействия меламина (1,3,5-триазин-2,4,6-триамин) и циануровой кислоты¹⁻³ (2,4,6-тригидрокси-1,3,5-триазин) в условиях парящего микрокластера⁴ мы получили порядка 20 тыс. кадров только входе первых нескольких экспериментов. Положив на вдумчивый анализ одной картинке пять минут, получим 208 рабочих дней. Дополнительные пояснения избыточны.

Таким образом, для продолжения исследования возникла необходимость создания автоматического анализатора на основе нейросети для множественного анализа фотографий микрокластера, рисунок 1, а.

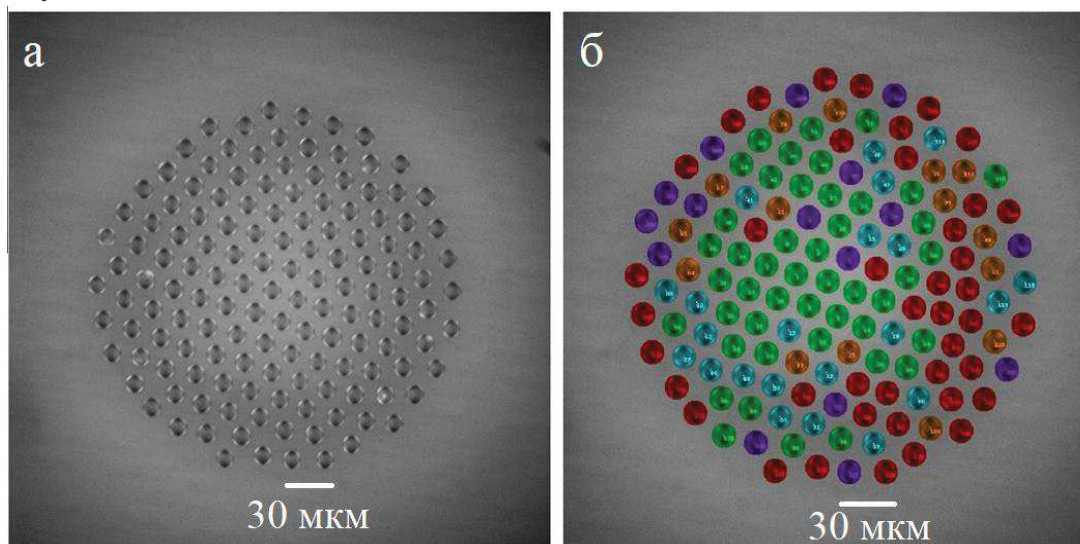


Рисунок 1 - Фотография левитирующего микрокластера.

А. Выходное изображение левитирующих микрокапель хода эксперимента.

Б. Стабилизированное изображение проиндексированных капель, кластеризованных по типам световых колебаний (цвет соответствует отдельному типу колебаний)

Анализатор, состоящий из натренированной на распознавание капель нейросети, попиксельного счётчика интенсивности и кластеризатора значений (рисунок 1б), является итогом нашего научного поиска.

В сотрудничестве с Тюменским государственным университетом нами был поставлен эксперимент: в установку левитации микрокапель золем вводятся растворы сначала меламина, а затем циануровой кислоты. Таким образом, мы превратили левитирующие капли диаметром порядка 3-10 микрон, стабилизированные насыщенными парами воды, в химические реакторы. Ход эксперимента записывается на чёрно-белую камеру с частотой 10 кадров в секунду, и данные фотографии являются на данный момент единственным источником информации о протекающих в каплях процессах. Зёрна кристаллов, растущие в каплях, по-разному отражают свет, и по-разному флуоресцируют в зависимости от размера зерна и положения кристалла в капле. Соответственно, интенсивность и характер свечения служит источником информации о формирующихся кристаллах так же, как блеск удалённых космических тел говорит нам об их размерах и свойствах. Однако, на выходе из эксперимента у нас есть тысячи фотографий, на которых расположены капли в никак не отслеживаемом порядке. При этом мелкие технические вибрации здания постоянно смещают картинку, при этом капли периодически меняют своё положение ввиду неравномерности потоков воздуха. Поэтому для анализа светимости нам нужно знать точное положение капель в каждом кадре.

Таким образом структура алгоритма видится как (i) найти исходное положение капель, (ii) отследить положение капель на протяжении эксперимента, (iii) рассчитать интенсивности свечения капли, (iv) собрать данные анализа в репрезентативном виде.

Анализ нейросетью построен на данный момент на принципе скользящего окна, сам анализ разбит на две принципиальные части. В первой происходит сканирование всей картинке, которая является представителем череды фотографий данного эксперимента. Алгоритм последовательно разбивает картинку на «окна» заданной величины (обычно 40-60 пикселей, т.е. примерно 110% от среднего диаметра анализируемой капли), и, обрабатывая «окно» нейросетью, принимает решения о соответствии или не соответствии объекта капле. Таким образом находятся центры всех капель. Во второй части алгоритм проходит по всем предоставленным фотографиям, совершая поиск нового положения капель в окрестностях центра капли предыдущей фотографии, что значительно экономит время по сравнению со скольжением по всей картинке. Итогом работы алгоритма является набор координат центров капель, который в сочетании с исходными

картинками является исчерпывающим описанием данного эксперимента.

В процессе разработки были испробованы простейшая полносвязная нейронная сеть, простейшая свёрточная, а также свёрточная типа U-net. Простейшая свёрточная сеть давала низкую точность, что, в целом, ожидаемо для данной архитектуры нейронной сети. U-net давали прирост точности определения по сравнению с просто свёрточной, однако значительно, в разы, замедляла процесс анализа, в то время как простейшая свёрточная сеть показала достаточную для безошибочной работы алгоритма точность. Таким образом, итоговая нейронная сеть представляет собой три свёрточных слоя с техникой MaxPool (ядра свёрточных слоёв 3x3 пикселя, ядра двухмерного MaxPool – 2x2 пикселя) и нормализацией значений по группам (Batch_norm), один полносвязный и один классифицирующий. Функция активации leaky ReLU. Входной канал исходного изображения является одномерным, первый свёрточный слой имеет выход 8-канальный, второй слой – 16, третий – 32.

Анализ интенсивности свечения капель производился по формуле $I = \sum(I_{\text{pixel}} - \text{const}) \times n^{-2}$, где I_{pixel} – интенсивность пикселя от 0 до 255, const – усреднение значений фона по четырём угловым пикселям окна, n – размер в пикселях квадратного окна, содержащего изображение капли. Таким образом, мы считаем сумму значений пикселей, отображающих каплю, вычитаем фон и нормируем на значение одного пикселя. Для удобства формула могла иметь дополнительный множитель.

Для кластеризации капель по типу поведения наибольшую эффективность показала комбинация кластеризации K средних с использованием метода главных компонент в сочетании с использованием признаков, полученных из нейронной сети. Значения интенсивности, полученные на предыдущем шагу, сокращались до «квадратного» значения, то есть симметрично с начала и конца эксперимента отбрасывались значения до получения квадрата какого-либо числа (например, 200 → 196, $196 = 14^2$), значения интенсивности переписывались в матрицу. Фактически, мы получали чёрно-белое изображение. Данная графическая репрезентация экстраполировалась («ап-скейлилась») до размера 224 на 224 пикселя и трёх одинаковых каналов. Никакой ошибки или упрощения это не даёт, а требуется исключительно для соответствия входу нейронной сети VGG16. Последний, классифицирующий слой нейронной сети отбрасывался, таким образом на выходе из неё мы получали 4096 признаков, описывающих данный график. Что явно избыточно, и сокращение признаков для кластеризации про-

водилось по методу главных компонент. Кластеризация показала высокую чувствительность, в частности обнаружив и сгруппировав в отдельное поведение капли с крайне малозаметными глазу колебаниями.

Таким образом, нами разработан простой, но достаточный для ряда задач автоматический анализатор процесса роста кристаллов в левитирующем микрокластере. Основой алгоритма является нейросетевой анализ изображений.

При общем успехе алгоритма отметим, что он является первой ступенью, и главным следствием его работы будет создание массива данных, на которых можно будет обучить более сложную архитектуру нейронной сети, использующуюся в машинном зрении. Более совершенные нейронные сети способны анализировать картинку целиком без скользящего окна. Такая модификация значительно ускорит обработку эксперимента с 2 часов до примерно 3 минут, а так же позволит относительно легко доучить нейросеть различать другие режимы съёмки, например – флюоресцентный.

ЛИТЕРАТУРА

1. Cafferty, B. Efficient self-assembly in water of long noncovalent polymers by nucleobase analogues. / B. Cafferty, I. Gallego, M.C. Chen, K.I. Farley, R. Eritja, N.V. Hud // *Journal of the American Chemical Society* – 2013. – 135, 7. – С. 2447 – 2450.
2. Lagzi, I. Liesegang rings engineered from charged nanoparticles / I. Lagzi, B. Kowalczyk, B. Grzybowski // *J. AM. CHEM. SOC.* – 2010. – 3113, 132. – С. 1-6.
3. Orekhov N. Insights into the Early Stages of Melamine Cyanurate Nucleation / N. Orekhov, N. Kondratyuk, M. Logunov, A. Timralieva, V. Shilovskikh, E.V. Skorb // *Cryst. Growth Des.* – 2021. – 21, 4. – С. 1984-1992.
4. Fedorets A.A. Symmetry of small clusters of levitating water droplets / A.A. Fedorets, E. Bormashenko, L.A. Dombrovsky, M. Nosonovsky // *Physical Chemistry Chemical Physics.* – 2020. – 22. – С. 12239-12244.