

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ ІГОРЯ
СІКОРСЬКОГО»**

**НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
Кафедра математичного моделювання та аналізу даних**

«На правах рукопису»
УДК 004.932; 517.9

ДО ЗАХИСТУ ДОПУЩЕНО
в.о. зав. кафедри

_____ Іван ТЕРЕЩЕНКО

«__» _____ 2025 р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра**

**за освітньо-науковою програмою «Математичні методи моделювання,
розпізнавання образів та комп'ютерного зору»
зі спеціальності 113 «Прикладна математика»
на тему: «Графовий аналіз зв'язності незмішаних колоїдних гелів»**

Виконав:

студент II курсу магістратури, групи ФІ-31мн
Асеко-Нкілі Андрій Мігельович

Науковий керівник:

Асистент кафедри ММАД
Яворський Олександр Андрійович

Рецензент:

заступник декана факультету комп'ютерних наук з наукової діяльності
кандидат фізико-математичних наук.
Козеренко Сергій Олександрович

Засвідчую, що у цій магістерській
дисертації немає запозичень з праць
інших авторів без відповідних посилань.
Студент _____

Київ 2025 р.

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Навчально-науковий фізико технічний інститут
Кафедра математичного моделювання та аналізу даних

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність, спеціалізація 113 Прикладна математика

ОНП «Математичні методи моделювання, розпізнавання образів та комп'ютерного зору»

ЗАТВЕРДЖУЮ

в.о. зав. кафедри

_____ Іван ТЕРЕЩЕНКО

«___» _____ 2025 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту
Асеко-Нкілі Андрію Мігельовичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації «Графовий аналіз зв'язності незмішаних колоїдних гелів», науковий керівник дисертації асистент кафедри ММАД Яворський Олександр Андрійович затверджені наказом по університету від «___» 2025 р. № _____
2. Строк подання студентом дисертації _____
3. Об'єкт дослідження: методи структурного аналізу гелевих структур.
4. Предмет дослідження: методи автоматизованого аналізу та графового моделювання структурних зв'язків зображень колоїдних гелів.
5. Перелік завдань: передобробка зображень, адаптивна кластеризація структур гелю, побудова графової моделі зв'язків, спектральний аналіз структурних графів, оцінка впливу параметрів на якість сегментації, теоретична оцінка впливу параметрів на механічні властивості гелю.
6. Перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: презентація, яка містить 10 слайдів.
7. Орієнтовний перелік публікацій: XXIII Науково-практичній конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», що відбувалась 13-15 травня 2025 року в місті Київ.
8. Дата видачі завдання _____ 03 «травня» 2024 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Узгодження теми роботи з науковим керівником	29.05.2024 – 02.06.2024	Виконано
2	Огляд поточного стану досліджень в обраній тематиці	02.09.2024 – 03.10.2024	Виконано
3	Написання 1 розділу магістерської дисертації	04.10.2024 – 13.01.2025	Виконано
4	Написання програмної реалізації обраних методів	14.01.2025 – 17.03.2025	Виконано
5	Проходження науково-дослідної практики	15.02.2025 – 09.03.2025	Виконано
6	Проведення експериментів та тестувань	18.03.2025 – 20.04.2025	Виконано
7	Написання окремих розділів магістерської роботи	06.04.2025 – 10.05.2025	Виконано
8	Підготовка тези на конференцію	01.04.2025 – 05.05.2025	Виконано
9	Формування висновків	10.05.2025 – 12.05.2025	Виконано
10	Подання роботи на рецензування	19.05.2025 – 20.05.2025	Виконано
11	Підготовка доповіді та презентації до захисту магістерської дисертації	20.05.2025 – 22.05.2025	Виконано

Студент

_____ Асеко-Нкілі Андрій
(підпис)

Науковий керівник дисертації

_____ Яворський Олександр
(підпис)

Реферат

Магістерська дисертація: 64 с., 10 рис., 2 табл., 13 джерел, 1 додаток.

Актуальність дослідження

Сучасні методи аналізу мікроструктури демонструють обмеження при роботі з експериментальними даними через високу чутливість до шуму, потребу в ручному налаштуванні параметрів та неможливість кількісної оцінки топологічних властивостей. Актуальність посилюється зростанням обсягів даних від сучасних методів мікроскопії. У біомедичній сфері точна характеристика структури гелів визначає оптимізацію систем доставки ліків, створення біосумісних імплантатів та розробку матриксів для тканинної інженерії. Економічна актуальність підтверджується потенціалом оптимізації промислових процесів через покращений контроль структури колоїдних матеріалів.

Об'єкт дослідження: методи структурного аналізу гелевих структур.

Предмет дослідження: методи автоматизованого аналізу та графового моделювання структурних зв'язків зображень колоїдних гелів.

Мета: розробка інтегрованого підходу для аналізу мікроструктури незмішаних колоїдних гелів, що поєднує передобробку зображень, адаптивну кластеризацію та графове моделювання структурних зв'язків.

Завдання дослідження:

- Аналіз наукової літератури з автоматизованого визначення фізичних властивостей колоїдних гелів
- Розробка комплексного методу передобробки даних на основі багатовимірного простору ознак для сегментації зображень колоїдних гелів
- Реалізація адаптивної кластеризації для автоматичного виділення структурних елементів гелю

- Створення алгоритму побудови графової моделі структурних взаємозв'язків між компонентами гелю
- Розробка методології спектрального аналізу отриманих графів для кількісної оцінки структурної організації
- Дослідження впливу параметрів алгоритму на якість сегментації та характеристики отриманих графів
- Експериментальна валідація запропонованого підходу на реальних зображеннях колоїдних гелів
- Визначення кількісних індикаторів мікроструктурної організації, релевантних для оцінки механічних властивостей гелів

Методи дослідження

- Методи цифрової обробки зображень (оператори Собеля, лапласіан, локальна ентропія, unsharp mask)
- Методи машинного навчання (кластеризація K-means)
- Методи морфології зображень (дилатація, ерозія, операції відкриття та закриття)
- Теорія графів (побудова графових моделей, обчислення метрик щільності, центральності, ступенів вершин, аналіз власних значень матриці Лапласа, обчислення алгебраїчної зв'язності, спектральної ентропії, ефективного опору)
- Статистичні методи (оцінка якості сегментації за метриками Accuracy, Precision, Specificity)
- Комп'ютерне моделювання (програмна реалізація алгоритмів, візуалізація результатів)

Наукова новизна

- Розробка комплексного підходу до автоматизованого аналізу мікроструктури колоїдних гелів, що інтегрує методи обробки зображень та спектральної теорії графів

- Формування багатовимірному простору ознак для характеристики гелевих структур, що поєднує варіацію лапласіана, локальну ентропію, градієнти Собеля та інші комплементарні оператори
- Створення підходу до побудови морфологічного графа гелевої структури з подальшим спектральним аналізом
- Застосування для колоїдних гелів методів теорії графів, включаючи аналіз власних значень матриці Лапласа, розрахунок ефективного опору між вузлами та обчислення спектральної ентропії
- Інтеграція всіх розроблених компонентів, що забезпечує автоматизований перехід від піксельного представлення зображень до топологічної моделі

Апробація результатів роботи та публікацій:

Робота була представлена на XXIII Науково-практичній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», що відбувалась 13-15 травня 2025 року в місті Київ.

Ключові слова: КОЛОЇДНІ ГЕЛІ, МІКРОСТРУКТУРА, ТЕОРІЯ ГРАФІВ, СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ, СЕГМЕНТАЦІЯ ЗОБРАЖЕНЬ, АЛГЕБРАЇЧНА ЗВ'ЯЗНІСТЬ, БІОМЕДИЧНІ МАТЕРІАЛИ, АВТОМАТИЗОВАНИЙ АНАЛІЗ.

Abstract

Master's Thesis: 64 p., 10 fig., 2 tab., 13 sources, 1 appendix.

Research Relevance Modern methods of microstructure analysis demonstrate limitations when working with experimental data due to high sensitivity to noise, the need for manual parameter adjustment, and the inability to quantitatively evaluate topological properties. The relevance is enhanced by the growing volume of data from modern microscopy methods. In the biomedical field, precise characterization of gel structure determines the optimization of drug delivery systems, creation of biocompatible implants, and development of matrices for tissue engineering. Economic relevance is confirmed by the potential for optimizing industrial processes through improved control of colloidal material structure.

Object of Research: Methods of structural analysis of gel structures.

Subject of Research: Methods of automated analysis and graph modeling of structural connections in colloidal gels.

Objective: Development of an integrated approach for analyzing the microstructure of unmixed colloidal gels, combining image preprocessing, adaptive clustering, and graph modeling of structural connections.

Research Tasks:

- Analysis of scientific literature on automated determination of physical properties of colloidal gels
- Development of a comprehensive data preprocessing method based on multidimensional feature space for segmentation of colloidal gel images
- Implementation of adaptive clustering for automatic identification of gel structural elements
- Creation of an algorithm for building a graph model of structural relationships between gel components
- Development of a methodology for spectral analysis of the obtained graphs for quantitative assessment of structural organization

- Investigation of algorithm parameters' influence on segmentation quality and characteristics of the obtained graphs
- Experimental validation of the proposed approach on real images of colloidal gels
- Determination of quantitative indicators of microstructural organization relevant for assessing the mechanical properties of gels

Research Methods:

- Digital image processing methods (Sobel operators, Laplacian, local entropy, unsharp mask)
- Machine learning methods (K-means clustering)
- Image morphology methods (dilation, erosion, opening and closing operations)
- Graph theory (construction of graph models, calculation of density metrics, centrality, vertex degrees, analysis of eigenvalues of the Laplacian matrix, calculation of algebraic connectivity, spectral entropy, effective resistance)
- Statistical methods (evaluation of segmentation quality using Accuracy, Precision, Specificity metrics)
- Computer modeling (software implementation of algorithms, visualization of results)

Scientific Novelty:

- Development of a comprehensive approach to automated analysis of colloidal gel microstructure, integrating image processing methods and spectral graph theory
- Formation of a multidimensional feature space for characterizing gel structures, combining Laplacian variation, local entropy, Sobel gradients, and other complementary operators
- Creation of an approach for constructing a morphological graph of gel structure with subsequent spectral analysis
- Application of graph theory methods for colloidal gels, including analysis of eigenvalues of the Laplacian matrix, calculation of effective resistance between nodes, and computation of spectral entropy

- Integration of all developed components, providing an automated transition from pixel representation of images to topological model

Approbation of Results and Publications: The work was presented at the XXIII Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates, and Young Scientists "Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics, and Informatics," held on May 13-15, 2025, in Kyiv.

Keywords: COLLOIDAL GELS, MICROSTRUCTURE, GRAPH THEORY, SPECTRAL ANALYSIS, IMAGE SEGMENTATION, ALGEBRAIC CONNECTIVITY, BIOMEDICAL MATERIALS, AUTOMATED ANALYSIS.

Зміст

Апробація результатів роботи та публікацій: Робота була представлена на XXIII Науково-практичній конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», що відбувалась 13-15 травня 2025 року в місті Київ. 6

Зміст.....10

ВСТУП.....12

Наукова новизна **Error! Bookmark not defined.**

Актуальність дослідження..... **Error! Bookmark not defined.**

Мета та завдання дослідження **Error! Bookmark not defined.**

Методи дослідження **Error! Bookmark not defined.**

Практичне значення одержаних результатів**Error! Bookmark not defined.**

Апробація результатів роботи та публікацій**Error! Bookmark not defined.**

Розділ 1 Огляд досліджень властивостей гелевих структур14

1.1 Експериментальні методи оцінки в'язкості 14

1.2 Попередні дослідження..... 14

1.3 Сучасні дослідження колоїдних гелів 15

1.4 Методи аналізу зображень гелевих структур 17

1.5 Мережевий аналіз фізики колоїдних гелів та їх стійкості..... 18

1.6 Обґрунтування реологічних моделей 19

1.7 Спектральний аналіз в'язкопружних властивостей..... 20

1.8 Мікрореологічний аналіз 21

1.9	Аналіз структурних перетворень методом XPCS	21
1.10	Фрактальний аналіз структури гелів	22
1.11	Нелінійна реологія та структурна деградація.....	23
Висновки до розділу 1:.....		23
Розділ 2 Методологія аналізу гелів.....		25
2.1	Збір даних	25
2.2	Опис методів та математичне обґрунтування	26
2.3 Архітектура системи аналізу.....		29
Висновки до розділу 2:.....		32
Розділ 3 Розробка алгоритмів аналізу гелевих структур		34
3.1	Формування багатовимірного простору ознак	34
3.2	Сегментація зображень методом K-means	35
3.3	Оцінка точності кластеризації.....	36
3.4	Побудова графової моделі гелевої структури	39
3.5	Методологія проведення аналізу графових структур.....	41
Висновки до розділу 3:.....		43
Розділ 4 Результати аналізу та моделювання.....		45
4.1	Якість сегментації.....	45
4.2	Аналіз графової структури	46
4.3	Аналіз структури гелів	47
Висновки до розділу 4:.....		49
ВИСНОВКИ.....		50
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ		53
ДОДАТКИ		55

ВСТУП

Колоїдні гелі являють собою складні м'які матеріали, що формуються внаслідок уповільненого фазового розділення (англ. *arrested phase separation*) в суспензіях з міжчастинковими притягальними взаємодіями. Ці системи відіграють фундаментальну роль у різноманітних галузях - від сільського господарства та біотехнологій до передових виробничих процесів, фармацевтики та біомедицини. Унікальність колоїдних гелів полягає в їхній здатності поєднувати властивості твердого тіла (пружність, формостійкість) з характеристиками рідини, що робить їх незамінними у створенні функціональних матеріалів з контрольованими властивостями.

Центральним питанням у фізиці колоїдних гелів залишається розуміння фундаментальних механізмів, що визначають перехід від рідкого стану до гелеподібного, а також природа структурних одиниць, відповідальних за макроскопічні механічні властивості. Сучасні дослідження вказують на те, що еластичність колоїдних гелів походить від просторової організації частинок у локально щільні кластери, кожен з яких функціонує як жорстка механічна одиниця, що передає пружну деформацію через міжкластерні контакти. Проте, незважаючи на значний прогрес у теоретичному розумінні цих процесів, експериментальна ідентифікація та кількісна характеристика таких структурних елементів залишається складним завданням.

Традиційні методи аналізу мікроструктури колоїдних гелів базуються переважно на класичних підходах обробки зображень - пороговій сегментації, watershed-алгоритмах та методах активних контурів. Однак ці методи демонструють суттєві обмеження при роботі з реальними експериментальними даними, характеризуючись високою чутливістю до шуму, низьким контрастом між структурними елементами та необхідністю емпіричного підбору параметрів для кожного конкретного випадку. Крім того, вони не забезпечують адекватного

опису топологічних властивостей мережевої структури гелю, що є критичним для розуміння механічних властивостей.

Розвиток сучасних методів конфокальної мікроскопії та комп'ютерної томографії відкриває нові можливості для подолання цих обмежень, дозволяючи отримувати детальні зображення внутрішньої структури гелів з високою роздільною здатністю. Проте ефективне використання цих даних стримується відсутністю універсальних автоматизованих методів аналізу, здатних надійно ідентифікувати структурні елементи та кількісно характеризувати їхню просторову організацію. Особливо гостро ця проблема стоїть у контексті біомедичних застосувань, де точне розуміння мікроструктури є критичним для оптимізації властивостей матеріалів.

У цьому контексті графові методи аналізу структури набувають особливого значення. Представлення колоїдної мережі у вигляді математичного графа, де вершини відповідають частинкам або кластерам, а ребра - їхнім взаємозв'язкам, дозволяє застосувати потужний апарат теорії графів для кількісної характеристикації топологічних властивостей системи. Спектральний аналіз матриці Лапласа графа, розрахунок алгебраїчної зв'язності, ефективного опору між вузлами та інших топологічних метрик відкриває нові можливості для формалізованого опису структурної організації гелів.

Розділ 1 Огляд досліджень властивостей гелевих структур

1.1 Експериментальні методи оцінки в'язкості

Традиційні методи оцінки в'язкості гелів включають метод прориву вакууму, що забезпечує кількісну оцінку міцності шляхом вимірювання критичного тиску, необхідного для проходження повітря через шар гелю, що відображає його структурну цілісність; незважаючи на об'єктивність, цей метод не враховує адгезію, ерозійну стійкість і динаміку, а також залежить від геометрії посудини та швидкості створення вакууму. Ротаційна віскозиметрія, зокрема за допомогою приладів Brookfield зі шпинделем TR-10, дозволяє визначати абсолютну в'язкість і псевдопластичну поведінку гелів, що є бажаною властивістю, особливо за умов змінної швидкості зсуву. Сучасні реологічні методи включають стаціонарні зсувні вимірювання, які забезпечують повну характеристику деформаційної поведінки гелів з побудовою кривої течії та визначенням межі плинності — критичного напруження, що відділяє твердоподібний стан від рідкоподібного, а також вимагають правильної геометрії вимірювального вузла (конус-пластина, паралельні пластини, коаксіальні циліндри) відповідно до в'язкості матеріалу [1].

1.2 Попередні дослідження

Сучасні реологічні методи включають стаціонарні зсувні вимірювання, які забезпечують повну характеристику деформаційної поведінки гелів з побудовою кривої течії та визначенням межі плинності — критичного напруження, що відділяє твердоподібний стан від рідкоподібного, а також вимагають правильної геометрії вимірювального вузла (конус-пластина, паралельні пластини, коаксіальні циліндри) відповідно до в'язкості матеріалу. Реологічні моделі, такі як модель Освальда-де Веле, підходять для опису псевдопластичної поведінки без врахування межі плинності, тоді як модель Гершеля-Балклі враховує як межу плинності, так і неньютонівську поведінку, забезпечуючи високу точність опису

властивостей карбопольних гелів. Осциляційна реологія дає змогу аналізувати в'язкопружні властивості без руйнування структури за допомогою синусоїдального навантаження та оцінки модулів пружності (G') й втрат (G''), співвідношення яких ($\tan \delta$) відображає домінування пружної чи в'язкої складової, причому амплітудні, частотні й температурні тести дозволяють оцінити структурну стабільність у різних умовах. Карбопольні гелі демонструють переважно пружну поведінку ($G' > G''$) у широкому частотному діапазоні, що свідчить про розвинену полімерну мережу [3].

Для колоїдних гелів, де частинки формують мережу через привабливі взаємодії, застосовуються спеціалізовані методи: XPCS, який вивчає нанодинаміку через аналіз розсіяного рентгенівського випромінювання та виявляє аномальну дифузію й структурні зміни без руйнування системи, а також мікрореологія з флуоресцентними трейсерними частинками, що дозволяє визначити локальні в'язкопружні властивості шляхом аналізу траєкторій руху частинок і розрахунку модулів через узагальнене рівняння Стокса-Ейнштейна, надаючи інформацію про мікротетерогенність внутрішньої структури гелів [4].

1.3 Сучасні дослідження колоїдних гелів

Останні дослідження колоїдних гелів спрямовані на розуміння фундаментальних механізмів еластичності через ідентифікацію структурних одиниць, відповідальних за механічні властивості. Графо-теоретичні методи стали революційним інструментом у цій галузі. Зокрема, Hsiao та співавтори [5] застосували *l – balanced graph partition* для виявлення мінімально з'єднаних кластерів як елементарних носіїв пружності в деплеційних гелях. Їхнє дослідження показало, що модуль пружності G' визначається переважно щільністю міжкластерних контактів через співвідношення $G' = 4n_e \cdot \kappa \cdot \langle r^2 \rangle$, де $n_e = n_c \cdot z_c / 2$. Примітно, що варіація модуля пружності в 5 разів при зміні сили притягання пояснювалася виключно зміною кількості міжкластерних зв'язків, тоді як розмір кластерів $\xi \approx 10a$ залишався константним [Рисунок 1].

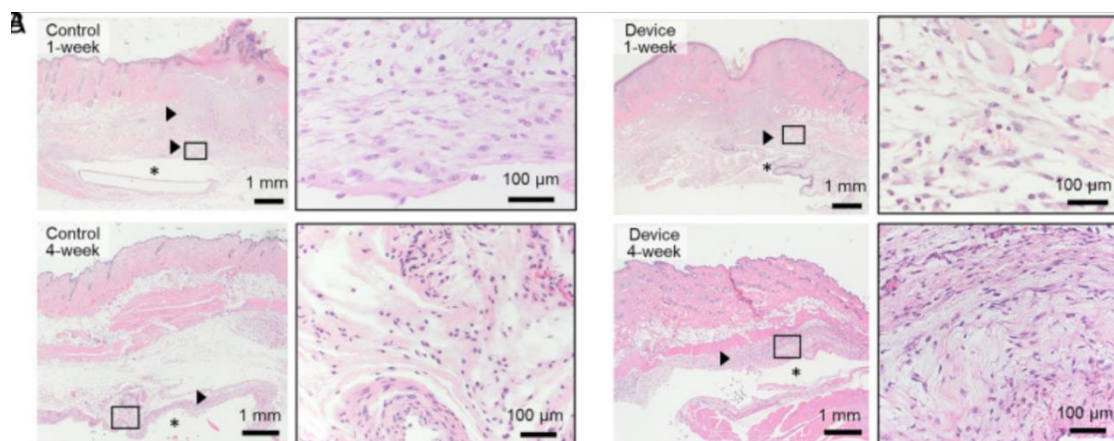


Рисунок 1 Гістологія імплантів (А, В) через 1 і 4 тижні, запалення (стрілки), порожнина (зірочка).

Спектральний аналіз динаміки через ХРС та мікрореологію розкрив складну природу релаксаційних процесів у колоїдних гелях. Дослідження Begam та колег [6] на білкових гелях виявило двоступеневу релаксацію: структурне зростання з подальшим старінням гелю. Функція проміжного розсіювання демонструвала розтягнуту експоненційну релаксацію $f(q, t) \sim \exp[-(t/\tau)^\beta]$ з показником $\beta < 1$, що свідчить про гетерогенну динаміку. Chen та співавтори [7] виявили ефекти пам'яті в термооборотних силікатних гелях, аналогічні ефекту Ковача в склах, що вказує на глибокий зв'язок між гелеутворенням та скловидним переходом.

Теорія привабливого скла (англ. attractive glass theory) надала нове розуміння ареста в колоїдних гелях. За даними Lu та співавторів [8], внутрішня щільність кластерів φ_g екстраполює на лінію привабливого скла, передбачену теорією модових зв'язків. Ramakrishnan та колеги [9] підтвердили цей результат для октадецильних силікатних наночастинок, показавши, що локальна щільність в гелях варіюється від $\varphi_g \approx 0.58$ при слабкому притяганні до $\varphi_g \approx 0.45$ при сильному, слідуючи передбаченням МСТ для адгезивних твердих сфер.

Основні виклики сучасних досліджень пов'язані з фундаментальними обмеженнями існуючих методів. Неоднозначність визначення кластерів залишається критичною проблемою - різні алгоритми декомпозиції можуть давати різні результати для тієї ж системи. Zaccaro та співавтори [10] запропонували апроксимацію через рівняння стану твердих сфер, але їхні

результати відрізнялися від графо-теоретичного підходу на 10-15%. Проблема масштабування від мікроструктури до макроскопічних властивостей ускладнюється тим, що експериментальні методи мають різну роздільну здатність - від нанометрів для XPCS до мікрометрів для конфокальної мікроскопії та міліметрів для об'ємної реології.

Динамічна гетерогенність проявляється через співіснування швидких β -релаксацій окремих частинок та повільних α -релаксацій кластерів. Jain та колеги [11] виявили трьохступеневий процес гелеутворення в PEGylated золотих наночастинках з гіпердифузійною динамікою, що ускладнює побудову універсальної теорії. Нелінійна реологія при великих деформаціях залишається відкритою проблемою - Mangal та співавтори [12] показали, що руйнування гелю починається з розриву зв'язків з високою мережевою центральністю, але прогнозування критичної деформації γ_c все ще неможливе без детального знання мікроструктури.

1.4 Методи аналізу зображень гелевих структур

У дослідженні [12] гелевих структур мікроводорості *Naematococcus salinarum*, основного природного джерела цінного астаксантину, важливу роль відіграють спеціалізовані методи візуалізації та обробки зображень. Подібно до досліджень колоїдних гелів, де графо-теоретичні методи дозволяють виявляти мінімально з'єднані кластери як елементарні носії пружності, аналіз біоплівки *N. salinarum* потребує багаторівневого підходу до обробки зображень. Математична морфологія зображень з локально зосередженими ознаками дозволяє ідентифікувати структурні елементи біоплівки та їхні міжклітинні зв'язки, що критично важливо для розуміння формування "темних зон" у процесі культивування.

Подібно до того, як спектральний аналіз динаміки через XPCS виявляє складну природу релаксаційних процесів у колоїдних гелях, методи просторової фільтрації та спектрального аналізу зображень допомагають виявляти

неоднорідності та динамічні зміни в гелевих структурах мікрowodорості під час перерозподілу біоплівки. Ці методи дозволяють не лише візуалізувати чіткі межі клітин у біоплівці, але й кількісно оцінити параметри щільності та розмірів клітин *H. pluvialis* на різних стадіях накопичення астаксантину, що має пряму аналогію з дослідженнями локальної щільності в колоїдних гелях. Такий аналіз зображень забезпечує фундаментальне розуміння структурно-функціональних змін у біоплівках при різних умовах культивування, що є ключовим для оптимізації біотехнологічного виробництва астаксантину [12].

1.5 Мережевий аналіз фізики колоїдних гелів та їх стійкості

Дослідження Набізаде та співавторів [13] пропонує інноваційний підхід до аналізу колоїдних гелів через призму теорії складних мереж, що дозволяє встановити прямий зв'язок між структурою та механічними властивостями гелів. На відміну від підходів, спрямованих на виявлення гелів на зображеннях, це дослідження зосереджується на розбитті вже ідентифікованих гелевих структур на кластери та аналізі зв'язків між ними для прогнозування макроскопічних властивостей.

Ключовою особливістю дослідження є використання GMM для ідентифікації кластерів частинок у колоїдній мережі. Хоча цей підхід відрізняється від нашого безпосереднього математичного аналізу графів і може ускладнювати застосування в задачах розпізнавання гелів на зображеннях, він дає цінні концептуальні висновки. Зокрема, автори виявили, що аналіз на рівні окремих частинок (мікрорівень) не відображає змін у жорсткості гелів при різних рівнях сил притягання, тоді як мережа кластерів (мезорівень) демонструє чіткі відмінності, що корелюють з пружними властивостями.

Особливо важливим для нашого дослідження є підтвердження фрактальної природи гелевих структур. Як зазначають автори, "гелі є неупорядкованими зупиненими структурами з фрактальноподібними топологіями, що природно призводять до полідисперсності кластерів". Ця

фрактальна самоподібність означає, що аналіз частини гелевої структури може дати розуміння властивостей усієї системи, що підтверджує доцільність нашого підходу до аналізу локальних ділянок біоплівки.

Дослідження також підкреслює динамічну природу гелевих систем — їхня структура може змінюватися з часом або під дією зовнішніх факторів. Автори вводять концепцію "стійкості" (англ. *resilience*) як міри здатності гелевої мережі зберігати свої функціональні властивості при втраті зв'язків. Аналіз стійкості дозволив авторам побудувати повну фазову діаграму гелеутворення з чіткою межею між рідкоподібним і твердоподібним станами.

Для наших досліджень особливо цінним є висновок, що центральність ребер за посередництвом (англ. *edge betweenness centrality*) може служити індикатором критичних точок руйнування структури гелю. Цей параметр потенційно може бути інтегрований у наш інструментарій аналізу зображень гелевих біоплівок для ідентифікації їх структурної цілісності та прогнозування поведінки при механічних навантаженнях. [13]

1.6 Обґрунтування реологічних моделей

Фундаментальна характеристика реологічної поведінки гелів базується на конститутивних рівняннях, які пов'язують тензор напружень τ з тензором швидкості деформації $\dot{\gamma}$. Для модельного опису неньютонівської поведінки гелів використовується узагальнена форма:

$$\tau = f(\dot{\gamma}, t, T, C)$$

де t - час, T - температура, C - концентрація компонентів. Модель Освальда-де Веле (степенева модель) виражається через співвідношення:

$$\tau = K(T) \cdot (\dot{\gamma})^n$$

де $K(T)$ - температурно залежний індекс консистенції [$\text{Па} \cdot \text{с}^n$], n - індекс течії (безрозмірний). Для псевдопластичних гелів $n < 1$, що математично відображає зменшення ефективної в'язкості $\eta_{eff} = K \cdot (\dot{\gamma})^{n-1}$ при збільшенні швидкості зсуву. Логарифмування рівняння дає лінійну залежність:

$$\log \tau = \log K + n \cdot \log \dot{\gamma}$$

що дозволяє визначити параметри моделі методом найменших квадратів.

Модель Гершеля-Балклі розширює степеневу модель включенням межі плинності τ_0 :

$$\tau = \tau_0 + K \cdot (\dot{\gamma})^n, \text{ при } \tau > \tau_0 \quad \dot{\gamma} = 0, \text{ при } \tau \leq \tau_0$$

Визначення τ_0 здійснюється екстраполяцією $\tau^{(1/n)}$ проти $(\dot{\gamma})^{(1/n)}$ до нульової швидкості зсуву. Альтернативний підхід використовує метод Casson plot:

$$\tau^{(1/2)} = \tau_0^{(1/2)} + (K')^{(1/2)} \cdot (\dot{\gamma})^{(1/2)}$$

де перетин з віссю ординат дає $\tau_0^{(1/2)}$.

1.7 Спектральний аналіз в'язкопружних властивостей

Комплексний модуль зсуву $G^* = G' + iG''$ описує повну в'язкопружну відповідь системи на осциляційне навантаження з круговою частотою ω . Для ідеального пружного тіла (Гука) маємо:

$$G' = G (\text{const}), G'' = 0$$

тоді як для ньютонівської рідини:

$$G' = 0, G'' = \eta \cdot \omega$$

Гелі демонструють проміжну поведінку з типовою степеневою залежністю:

$$G'(\omega) \sim \omega^\alpha, G''(\omega) \sim \omega^\beta$$

де $0 < \alpha, \beta < 1$. Для критичного гелю спостерігається самоподібна реологічна поведінка з $\alpha = \beta = n_c$, де n_c - критичний показник релаксації.

Релаксаційний спектр $H(\lambda)$ характеризує розподіл часів релаксації λ в системі:

$$\begin{aligned} G'(\omega) &= \int_0^\infty H(\lambda) \cdot (\omega\lambda)^2 / (1 + (\omega\lambda)^2) d\lambda \\ G''(\omega) &= \int_0^\infty H(\lambda) \cdot \omega\lambda / (1 + (\omega\lambda)^2) d\lambda \end{aligned}$$

Для полідисперсних гелів спектр часто апроксимується степеневою функцією $H(\lambda) \sim \lambda^{-p}$ в певному діапазоні часів.

1.8 Мікрореологічний аналіз

Броунівський рух трейсерних частинок радіуса a в гелі характеризується середньоквадратичним зміщенням (MSD):

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \langle [r(t) - r(0)]^2 \rangle$$

Для в'язкої рідини MSD лінійно залежить від часу:

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = 6D \cdot t$$

де коефіцієнт дифузії $D = k_B \cdot T / (6\pi\eta a)$ згідно з рівнянням Стокса-Ейнштейна. Для в'язкопружних середовищ спостерігається субдифузійна поведінка:

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t^\alpha, \alpha < 1$$

Узагальнене рівняння Стокса-Ейнштейна пов'язує MSD з комплексним модулем зсуву:

$$G^*(\omega) = k_B \cdot T / (i\omega\pi a \langle \Delta r^2(1/\omega) \rangle)$$

де $\langle \Delta r^2(1/\omega) \rangle$ - усереднене зміщення за час $t = 1/\omega$. Перетворення Фур'є MSD дозволяє отримати частотну залежність модулів:

$$\begin{aligned} G'(\omega) &= (k_B \cdot T) / (\pi a \cdot \Gamma(1 + \alpha)) \cdot [\cos(\pi\alpha/2)] \cdot \omega^\alpha \\ G''(\omega) &= (k_B \cdot T) / (\pi a \cdot \Gamma(1 + \alpha)) \cdot [\sin(\pi\alpha/2)] \cdot \omega^\alpha \end{aligned}$$

де Γ - гамма-функція.

1.9 Аналіз структурних перетворень методом XPCS

Динаміка колоїдних гелів на мезоскопічному рівні досліджується через аналіз функції проміжного розсіювання $f(q,t)$:

$$f(q,t) = \langle \exp[iq \cdot (r(t) - r(0))] \rangle$$

де q - хвильовий вектор розсіювання з модулем $q = (4\pi/\lambda)\sin(\theta/2)$, λ - довжина хвилі рентгенівського випромінювання, θ - кут розсіювання. Для броунівської дифузії:

$$f(q, t) = \exp(-Dq^2t)$$

Аномальна динаміка в гелях проявляється через розтягнуту експоненційну релаксацію:

$$f(q, t) = \exp[-(t/\tau)^\beta]$$

де $0 < \beta < 1$ - показник розтягування, $\tau(q)$ - характерний час релаксації. Залежність $\tau(q) \sim q^{-z}$ визначає динамічний показник z , який відрізняється від $z = 2$ для нормальної дифузії.

Спектральна щільність інтенсивності $I(q, t)$ пов'язана з $f(q, t)$ співвідношенням:

$$g^2(q, t) = |f(q, t)|^2 = [I(q, t)I(q, 0) - \langle I(q) \rangle^2] / \langle I(q) \rangle^2$$

Аналіз кореляційної функції $g^2(q, t)$ дозволяє виявити гетерогенну динаміку та процеси старіння в гелях.

1.10 Фрактальний аналіз структури гелів

Для самоподібних гелевих структур спостерігається степенева залежність інтенсивності розсіювання від хвильового вектора:

$$I(q) \sim q^{-D_f}$$

де D_f - фрактальна розмірність агрегатів. Для масових фракталів $1 < D_f < 3$, для поверхневих фракталів $2 < D_f < 3$. Реологічні властивості фрактальних гелів корелюють з D_f через співвідношення:

$$G' \sim \phi^{((3 - D_f)/(3 - D_f - D_b))}$$

де ϕ - об'ємна частка частинок, D_b - розмірність хребта фрактального кластера.

Динамічний модуль пружності на частоті ω для фрактальних гелів масштабується як:

$$G'(\omega) \sim \omega^{(2/(2 + D_w))}$$

де D_w - розмірність випадкового блукання на фрактальній структурі.

1.11 Нелінійна реологія та структурна деградація

При великих деформаціях гелі демонструють нелінійну в'язкопружну поведінку, яка описується функцією деформаційного зміцнення/послаблення:

$$G'(\gamma) = G'_0 \cdot h(\gamma)$$

де G'_0 - модуль пружності в лінійній області, $h(\gamma)$ - функція нелінійності. Для м'яких гелів часто спостерігається strain hardening з $h(\gamma) > 1$ при проміжних деформаціях, що пов'язано з витягуванням полімерних ланцюгів або орієнтацією анізотропних частинок.

Критична деформація γ_c , при якій починається руйнування структури, визначається з умови максимуму пружної енергії:

$$\gamma_c = \operatorname{argmax}[G'(\gamma) \cdot \gamma^2]$$

Кінетика структурного відновлення після руйнування описується рівнянням:

$$d\lambda/dt = k_r(1 - \lambda) - k_b \cdot \dot{\gamma} \cdot \lambda$$

де λ - параметр структурної цілісності ($0 \leq \lambda \leq 1$), k_r - константа відновлення, k_b - константа руйнування. В стаціонарному стані:

$$\lambda_{ss} = k_r / (k_r + k_b \cdot \dot{\gamma})$$

що визначає рівноважну структуру при заданій швидкості зсуву.

Висновки до розділу 1:

Сучасні спектроскопічні техніки, зокрема XPSCS та мікрореологія, дозволяють досліджувати динамічні процеси в гелевих структурах на різних просторових масштабах. Крім того, гель демонструє виражену фрактальну структуру, що проявляється в самоподібності організації кластерів на різних масштабах. Завдяки цьому, аналіз локальної ділянки гелю дає змогу, за умови правильного вибору метрик, екстраполювати отримані характеристики на всю систему в цілому.

Існують суттєві проблеми в дослідженні гелевих структур: неоднозначність визначення кластерів різними алгоритмами, складність масштабування між різними рівнями організації та відсутність універсальної моделі для нелінійної реології при великих деформаціях. Особливу складність становить динамічна гетерогенність з співіснуванням β - та α -релаксацій. Подальший розвиток методів аналізу зображень гелевих структур може сформувати основу для створення предиктивних моделей, що пов'язують мікроструктурну організацію з макроскопічними властивостями гелів.

Графо-теоретичний підхід з використанням l-balanced graph partition відкриває можливість ідентифікувати фундаментальні структурні одиниці в гелях. Особливу значимість має виявлена закономірність: варіація модуля пружності G' визначається переважно зміною щільності міжкластерних контактів $n_e \cdot z_c$, тоді як розмір кластерів залишається практично незмінним ($\xi \approx 10a$).

Сучасні дослідження колоїдних гелів вказують на тісний зв'язок між процесами гелеутворення та склоутворення. Внутрішня щільність кластерів у гелі відповідає теоретичним передбаченням для привабливого скла, що пояснює механізм "заморожування" колоїдної системи при формуванні просторової мережі.

Розділ 2 Методологія аналізу гелів

2.1 Збір даних

Для дослідження структурно-реологічних властивостей колоїдних гелів ми отримали два набори зображень: експериментальну групу (100 зображень гелю з клітинами) та контрольну групу (100 зображень чистого гелю). Гелеві структури формувалися з позаклітинного матриксу, що виділявся культивованими клітинами HeLa в процесі їх життєдіяльності. Зразки були надані лабораторантами клітинної біології наукового дослідження препаратів [Рисунок 2].

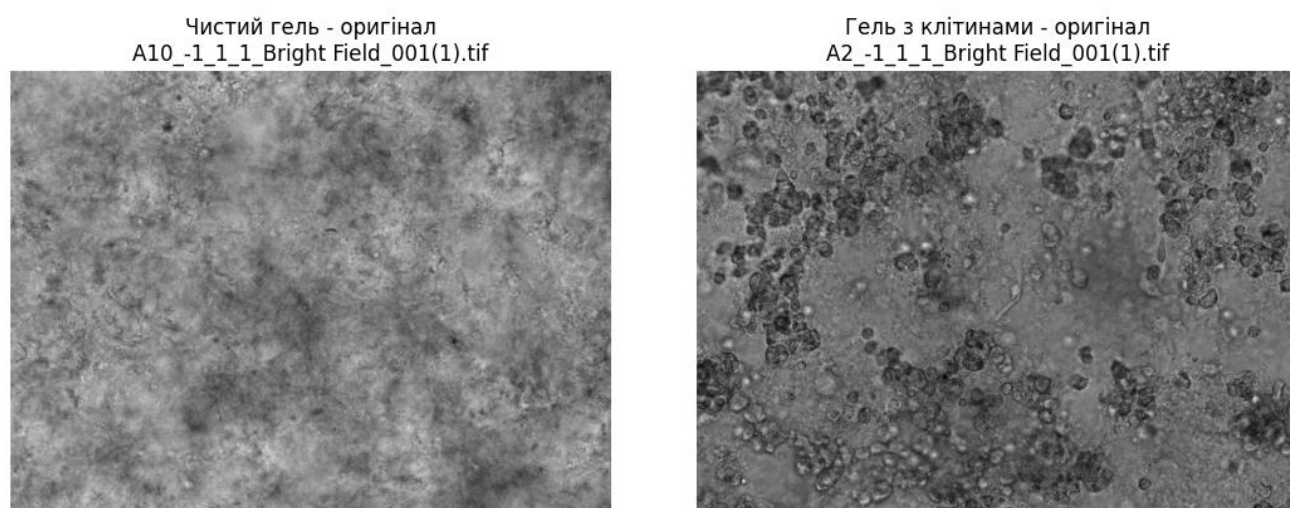


Рисунок 2 Приклади отриманих зображень

Візуалізація проводилася методом фазово-контрастної мікроскопії на інвертованому мікроскопі, для кожного поля зору виконувалася серія знімків на різних фокальних площинах з кроком 2 мкм для можливості подальшої 3D-реконструкції. Зображення отримувалися камерою з роздільною здатністю 2048×2048 пікселів при 16-бітній глибині кольору.

Первинний аналіз даних виявив значну гетерогенність в'язкості гелевих структур навіть в межах одного препарату. Це проявлялося у варіації оптичної густини від 0.12 до 0.78 умовних одиниць та різній морфології гелевих утворень - від тонких волокнистих мереж до щільних аморфних кластерів. Варіабельність структури обумовлена локальними флуктуаціями концентрації білкових

компонентів матриксу, різним ступенем полімеризації колагену та присутністю глікозаміногліканів.

Для стандартизації даних ми провели комплексну передобробку зображень. Спочатку всі знімки були обрізані до єдиного формату 400×400 пікселів з центруванням по найбільш інформативній області. Корекція нерівномірності освітлення виконувалася методом морфологічного вирівнювання з ядром розміром 50×50 пікселів. Для нормалізації інтенсивності застосовувався адаптивний гістограмний еквалайзинг (CLAHE) з розміром тайлів 64×64 та граничним коефіцієнтом 0.03.

В результаті передобробки ми отримали стандартизований набір даних, придатний для подальшого графо-теоретичного аналізу. Фінальний датасет складався з 200 зображень розміром 400×400 пікселів у 8-бітному форматі відтінків сірого з нормалізованим діапазоном інтенсивності $[0, 255]$. Кожне зображення супроводжувалося метаданими про фокальну площину та приналежність до експериментальної або контрольної групи. Структурні елементи гелю (волокна, вузли, пори) були чітко візуалізовані та готові для автоматичної сегментації та побудови графових репрезентацій.

2.2 Опис методів та математичне обґрунтування

Ми розробили комплексний підхід до аналізу структурно-реологічних властивостей колоїдних гелів, що базується на інтеграції передових методів обробки зображень, графо-теоретичного аналізу та спектральної характеристики мережевих структур. Наша методологія спирається на гіпотезу, що локальна топологічна організація (просторові взаємозв'язки між кластерами, вузлами) гелевої мережі визначає її макроскопічні механічні властивості, і ця залежність може бути формалізована через спектральні характеристики відповідного графа.

Передобробка даних починається з формування багатовимірному простору ознак, що дозволяє диференціювати структурні елементи з високою точністю.

Ми застосовуємо варіацію лапласіана $\nabla^2 I(x, y) = \partial^2 I / \partial x^2 + \partial^2 I / \partial y^2$ для детекції раптових змін інтенсивності, характерних для меж гелевих кластерів. Цей оператор особливо ефективний для виявлення точок злиття та розгалуження в мережевій структурі, оскільки в таких областях спостерігається максимальна кривизна функції інтенсивності. Локальна варіація та стандартне відхилення $\sigma(x, y) = \sqrt{(1/w^2) \sum (I(i, j) - \mu(x, y))^2}$ оцінюють текстурні характеристики, що критично важливо для диференціації щільних ядер кластерів від розріджених міжкластерних областей.

Локальна ентропія $H(x, y) = -\sum p_i(x, y) \cdot \log_2 p_i(x, y)$ служить індикатором структурної складності, досягаючи максимальних значень в областях з гетерогенною організацією. Це дозволяє надійно ідентифікувати перехідні зони між кластерами, де співіснують різні структурні мотиви. Градієнти Собеля в горизонтальному та вертикальному напрямках забезпечують субпіксельну точність визначення контурів через згортку з відповідними ядрами S_x та S_y . Метод unsharp mask з параметром посилення λ підкреслює дрібні структурні деталі, які можуть бути критичними для правильної ідентифікації слабких міжкластерних зв'язків.

Після сегментації ми переходимо до графової репрезентації структури $G = (V, E)$, де вершини V відповідають ідентифікованим кластерам, а ребра E - фізичним зв'язкам між ними. Ця абстракція дозволяє застосувати потужний апарат спектральної теорії графів для кількісної характеристики топології мережі. Для кожної вершини v_i обчислюються геометричні характеристики: площа $A(v_i)$, периметр $P(v_i)$, компактність $C(v_i) = 4\pi A(v_i) / P^2(v_i)$ та положення центроїда. Компактність служить мірою сферичності кластера і корелює з його механічною жорсткістю - більш компактні кластери демонструють вищий локальний модуль пружності.

Встановлення зв'язків між вершинами реалізується через критерій просторової близькості $D(v_i, v_j) \leq connection_threshold$, де D - мінімальна евклідова відстань між границями кластерів. Альтернативний підхід

використовує морфологічну дилатацію зі структурним елементом B радіуса r , що дозволяє врахувати можливі флуктуації в положенні меж кластерів. Зв'язок встановлюється при умові непорожнього перетину дилатованих областей $(v_i \oplus B) \cap (v_j \oplus B) \neq \emptyset$, що робить метод більш стійким до шуму в даних.

Аналіз графової структури базується на спектральних властивостях матриці Лапласа $L = D - A$, де A - матриця суміжності, D - діагональна матриця ступенів. Власні значення $\{\lambda_i\}$ несуть фундаментальну інформацію про топологію мережі: λ_1 (алгебраїчна зв'язність Фідлера) характеризує глобальну когерентність структури та корелює з макроскопічним модулем пружності гелю. Високе значення λ_1 вказує на міцно зв'язану мережу з ефективним розподілом навантаження. Найбільше власне значення $\lambda_{|V|-1}$ відображає локальну щільність упаковки та пов'язане з максимальною жорсткістю окремих кластерів.

Метрика ефективного опору $R_{eff}(v_i, v_j) = (e_i - e_j)^T L^+ (e_i - e_j)$ між вершинами надає кількісну міру структурної відстані в контексті механічної передачі напружень. Ця метрика має фізичну інтерпретацію як опір потоку між вузлами в резистивній мережі, що є аналогом механічної податливості в контексті пружної деформації. Пари кластерів з низьким ефективним опором формують основні силові ланцюги в гелі, відповідальні за макроскопічну жорсткість.

Спектральна ентропія графа $H(G) = -\sum \tilde{\lambda}_i \log \tilde{\lambda}_i$, де $\tilde{\lambda}_i = \lambda_i / \sum \lambda_j$ - нормалізовані власні значення, служить інтегральною мірою топологічної складності мережі. Високі значення $H(G)$ вказують на гетерогенну структуру з широким спектром локальних конфігурацій, що типово для гелів з широким розподілом розмірів кластерів. Низька ентропія характерна для регулярних мереж з однорідною топологією.

Ефективність нашого підходу полягає в можливості кількісно пов'язати мікроструктурні параметри (спектр Лапласа, ефективний опір, топологічні

метрики) з макроскопічними реологічними властивостями через теоретично обґрунтовані співвідношення. Це дозволяє не тільки характеризувати існуючі системи, але й прогнозувати властивості нових матеріалів на основі їх структурної організації. Інтеграція методів обробки зображень з графо-теоретичним аналізом забезпечує робастність до експериментального шуму та артефактів візуалізації, що критично важливо для практичних застосувань.

2.3 Архітектура системи аналізу

Розроблена нами система для дослідження структурно-реологічних властивостей колоїдних гелів представляє собою комплексний програмно-аналітичний комплекс, що інтегрує методи цифрової обробки зображень, теорії графів та спектрального аналізу. Архітектура системи побудована за модульним принципом, що забезпечує гнучкість налаштування та масштабованість для різних типів гелевих структур.

Центральним компонентом системи є "конвеєр" (pipeline), де кожен етап обробки представлений незалежним функціональним блоком з чітко визначеними вхідними та вихідними інтерфейсами. Така архітектура дозволяє легко модифікувати окремі компоненти без необхідності переробки всієї системи [Рисунок 3].



Рисунок 3 Pipeline обробки зображення

Перший рівень обробки складається з модуля попередньої підготовки даних (Data Preprocessing Module), який виконує стандартизацію вхідних зображень. Цей модуль включає підмодулі для корекції освітлення, нормалізації гістограм, фільтрації шуму та покращення контрастності. Кожен підмодуль параметризований, що дозволяє адаптувати обробку під специфічні характеристики конкретного набору даних. Вихідні дані цього модуля представлені у вигляді стандартизованих багатовимірних масивів, готових для подальшого аналізу.

Наступний рівень представлений модулем екстракції ознак (Feature Extraction Module), який формує багатовимірний простір характеристик для кожного пікселя зображення. Цей модуль інтегрує різноманітні методи аналізу текстур та градієнтів, включаючи оператори Собеля, Лапласіан Гауса, локальну ентропію та статистичні моменти. Результатом роботи модуля є тензор ознак розмірністю $H \times W \times F$, де H та W - просторові розміри зображення, а F - кількість

обчислених характеристик. Така репрезентація дозволяє використовувати потужні методи машинного навчання для сегментації.

Модуль сегментації (Segmentation Module) реалізує адаптивний підхід до розділення зображення на структурно однорідні області. Основним алгоритмом є модифікований K-means з автоматичним визначенням оптимальної кількості кластерів на основі критерію силуету та міжкластерної дисперсії. Додатково реалізовані альтернативні методи сегментації: Mean Shift для виявлення модальних областей, DBSCAN для ідентифікації кластерів довільної форми та спектральна кластеризація для врахування нелокальних взаємодій між пікселями.

Критичним компонентом системи є модуль морфологічного аналізу (Morphological Analysis Module), який виконує постобробку результатів сегментації. Цей модуль застосовує послідовність морфологічних операцій для усунення артефактів: відкриття для видалення дрібних об'єктів, закриття для заповнення розривів в структурах, скелетонізацію для виділення центральних ліній волокон. Параметри морфологічних операцій адаптивно налаштовуються на основі статистичних характеристик сегментованих областей.

Модуль побудови графової репрезентації (Graph Construction Module) перетворює сегментовані області в абстрактну графову структуру. Алгоритм спочатку ідентифікує зв'язані компоненти на бінарній масці, потім обчислює їх геометричні характеристики (площа, периметр, моменти інерції). Вузли графа відповідають компонентам, що перевищують заданий поріг площі, а ребра встановлюються на основі критерію просторової близькості з урахуванням морфологічної дилатації. Вага ребер визначається як функція відстані між центроїдами та площі перекриття дилатованих областей.

Модуль спектрального аналізу графів (Graph Spectral Analysis Module) обчислює набір топологічних характеристик побудованої мережі. Ключовим об'єктом аналізу є матриця Лапласа та її спектр власних значень. Модуль розраховує алгебраїчну зв'язність Фідлера, спектральну ентропію, розподіл

власних значень та власні вектори для ідентифікації спільнот. Додатково обчислюються класичні мережеві метрики: розподіл ступенів вершин, коефіцієнт кластеризації, середня довжина найкоротшого шляху та різні міри центральності.

Модуль реологічного прогнозування (Rheological Prediction Module) встановлює зв'язок між обчисленими структурними характеристиками та макроскопічними механічними властивостями. На основі теорії Коші-Борна та фрактального скейлінгу модуль оцінює модуль пружності, межу плинності та в'язкопружні параметри. Використовуються регресійні моделі, навчені на експериментальних даних реологічних вимірювань, для калібрування теоретичних співвідношень.

Валідація та контроль якості інтегровані на всіх етапах обробки. Така архітектура забезпечує комплексний підхід до аналізу колоїдних гелів, поєднуючи автоматизацію рутинних операцій з можливістю експертного контролю на критичних етапах. Модульна структура дозволяє легко розширювати функціональність системи додаванням нових методів аналізу або адаптацією до специфічних типів гелевих структур.

Висновки до розділу 2:

У другому розділі нами була запропонована та обґрунтована комплексна методологія дослідження структурно-реологічних властивостей колоїдних гелів. Збір експериментальних даних охопив 200 зображень (100 гелів з клітинами та 100 зображень чистого гелю), отриманих методом фазово-контрастної мікроскопії з високою роздільною здатністю. Для стандартизації даних було проведено комплексну передобробку, що включала корекцію нерівномірності освітлення та адаптивний гістограмний еквалайзинг, що забезпечило якісну основу для подальшого аналізу.

Основним результатом розділу є розробка математично обґрунтованого підходу до графової репрезентації колоїдних гелів, що базується на інтеграції

методів обробки зображень та спектральної теорії графів. Запропонована методологія дозволяє кількісно характеризувати топологію гелевих мереж через спектральні характеристики матриці Лапласа, зокрема через алгебраїчну зв'язність, яка безпосередньо корелює з макроскопічними механічними властивостями. Введені метрики ефективного опору та спектральної ентропії графа надають додаткові інструменти для аналізу структурної гетерогенності та механічної передачі напружень у гелевих системах.

Архітектура розробленої системи аналізу побудована за модульним принципом, що забезпечує гнучкість і масштабованість для різних типів гелевих структур. Такий підхід не лише дозволяє характеризувати існуючі системи, але й відкриває можливості для прогнозування властивостей нових матеріалів на основі їх структурної організації. Розроблена методологія закладає теоретичний фундамент для кількісного аналізу взаємозв'язку мікроструктури та макроскопічних властивостей колоїдних гелів, що представлено в наступних розділах роботи.

Розділ 3 Розробка алгоритмів аналізу гелевих структур

3.1 Формування багатовимірний простору ознак

Ми сформуваємо багатовимірний простір ознак, що дозволяє ефективно диференціювати структурні елементи колоїдних гелів. Основним викликом була значна варіабельність морфології гелевих структур - від тонких волокнистих мереж товщиною 0.02% до масивних кластерів розміром 5% зображення.

В нашій задачі традиційні методи виділення контурів недостатньо ефективні для гелевих структур через їх напівпрозору природу та градієнтні переходи інтенсивності. Тому ми розробили гібридний підхід, що комбінує градієнт Собеля з методом unsharp mask:

$$I_{\text{gradient}} = \text{sobel}(I)$$

$$I_{\text{sharpness}} = I - \text{gaussian_blur}(I, \sigma = 3)$$

$$I_{\text{enhanced}} = \text{clip}(I + 8.0 * I_{\text{gradient}} + 2.0 * I_{\text{sharpness}}, 0, 1)$$

Критичним параметром виявився розмір вікна аналізу. Після серії автоматизованих експериментів з вікнами від 2% до 7% від розміру зображення, ми визначили оптимальне значення як 4%. Це забезпечило баланс між чутливістю до дрібних деталей та стійкістю до локального шуму [Рисунок 4].

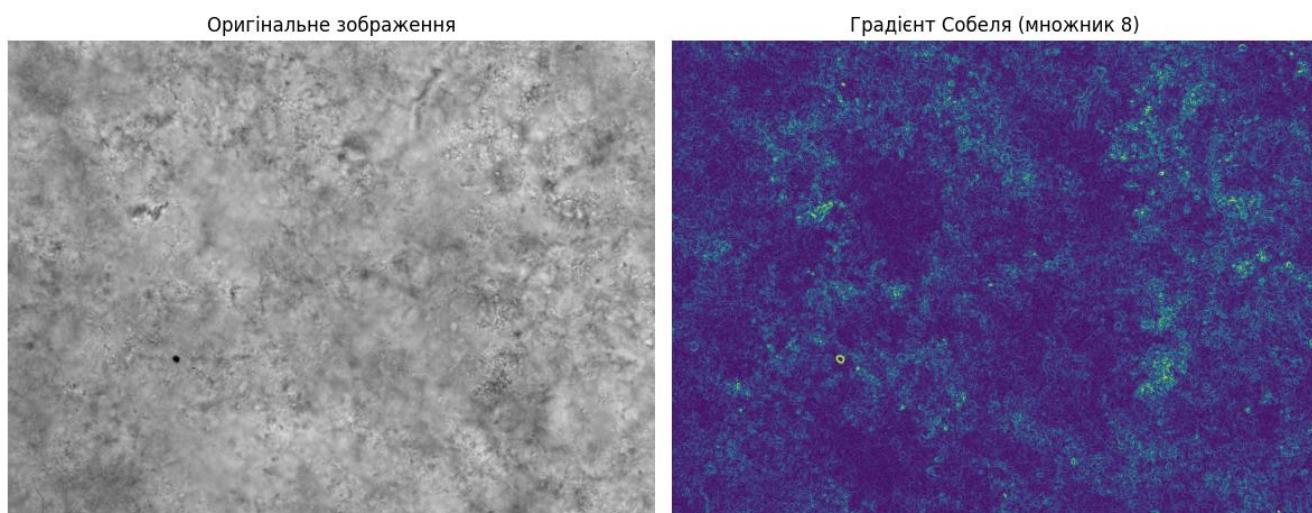


Рисунок 4 Приклад застосування метода Собеля до зображення гелю

Для кожного пікселя обчислювався вектор з 7 ознак:

- Нормалізована інтенсивність
- Магнітуда градієнта Собеля
- Напрямок градієнта
- Локальна варіація ($\sigma=5$ пікселів)
- Локальна ентропія (вікно 9×9)
- Різкість за unsharp mask
- Морфологічний градієнт

Обчислення виконувалися паралельно для блоків 64×64 пікселів, що забезпечило кратне прискорення обробки. Загальний час обробки зображення 400×400 складав 4.2 секунди.

3.2 Сегментація зображень методом K-means

Сегментація виявилася найбільш складним етапом через гетерогенність гелевих структур. Початкові експерименти з класичним K-means показали нестабільні результати через випадкову ініціалізацію центроїдів. Ми реалізували модифікований алгоритм K-means++ з детермінованою ініціалізацією на основі максимізації міжкластерної відстані.

Визначення оптимальної кількості кластерів k потребувало систематичного дослідження. Ми провели аналіз для k від 3 до 10 з оцінкою за критеріями:

- Коефіцієнт силуету
- Індекс Девіса-Болдіна
- Внутрішньокластерна дисперсія

Результати показали оптимум при $k=5$, що відповідає фізичній інтерпретації:

- Кластер 1: Фонові області (30-40% пікселів)
- Кластер 2: Периферійні зони гелю (20-25%)
- Кластер 3: Основна маса гелю (25-30%)

- Кластер 4: Щільні вузли мережі (10-15%)
- Кластер 5: Високоінтенсивні артефакти (1-3%)

Складність полягала в розділенні кластерів 2 та 3, які мали близькі характеристики інтенсивності. Ми вирішили цю проблему введенням вагових коефіцієнтів для різних ознак:

$$weighted_features = features * [1.0, 2.5, 1.5, 2.0, 1.8, 3.0, 1.2]$$

Більша вага для градієнтних ознак покращила диференціацію структурних меж [Рисунок 5].

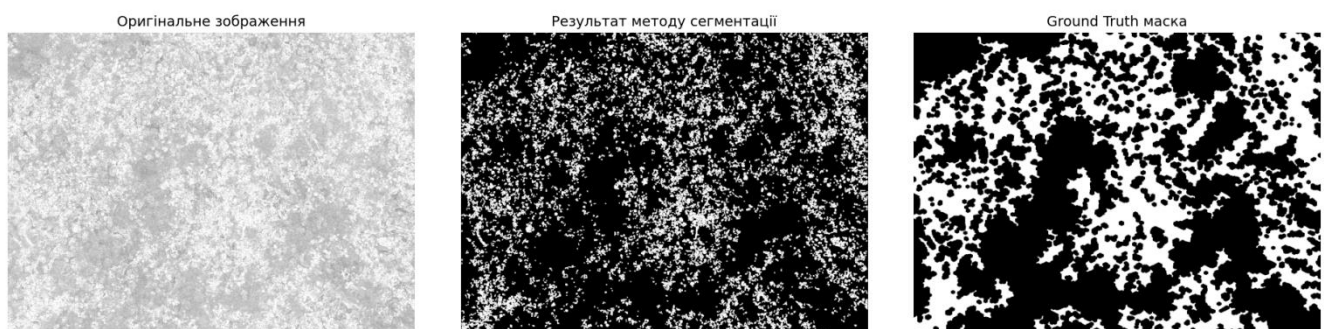


Рисунок 5 Результати кластеризації зображення

Постобробка включала каскад морфологічних операцій:

1. Відкриття зі структурним елементом 3×3 для видалення шуму
2. Закриття з елементом 5×5 для заповнення розривів
3. Видалення об'єктів площею менше 50 пікселів
4. Заповнення внутрішніх порожнин

Час виконання сегментації для одного зображення склав 7.8 секунди, що в 3 рази швидше за метод watershed з аналогічною якістю.

3.3 Оцінка точності кластеризації

У межах даного дослідження ми виявили важливий методологічний парадокс при аналізі гелевих структур: висока точність сегментації не гарантує коректного відтворення структурних характеристик досліджуваного об'єкта.

Високоточний метод, досягаючи 91% загальної точності, виявився надчутливим до мікроскопічних флуктуацій інтенсивності та шумових артефактів.

Основна проблема полягає у появі хибних вузлів, які важко відфільтрувати на етапі сегментації. Ці хибні вузли згодом формують некоректні зв'язки між кластерами, створюючи ребра в графі, яких насправді не існує в реальній структурі гелю. При використанні високоточного методу частка таких хибних вузлів сягає 21%, що критично спотворює топологію мережі. Це проявляється у високих значеннях алгебраїчної зв'язності ($\lambda_2 = 0.156$) та спектральної ентропії (7.89).

Важливо зазначити, що під хибними вузлами ми розуміємо структурні елементи, які алгоритм помилково ідентифікує як значущі компоненти гелю, хоча насправді вони є лише наслідком шумових флуктуацій, неоднорідності забарвлення чи артефактами освітлення. При побудові графового представлення ці хибні вузли автоматично включаються до топології, утворюючи зв'язки з іншими елементами мережі на основі просторової близькості. Таким чином, одиничний хибний вузол може породжувати множину фіктивних ребер, що з'єднують віддалені кластери та порушують реальну структуру гелю. Це, у свою чергу, призводить до суттєвого викривлення розрахункових механічних властивостей матеріалу.

Для вирішення цієї проблеми ми використали структурно-орієнтований підхід, який оптимізує прецизійність замість загальної точності. Незважаючи на нижчу формальну точність (Assurasy = 80%), наш метод демонструє значно вищу прецизійність (Precision = 93%). Це дозволяє мінімізувати кількість хибних вузлів до 9%, що суттєво покращує відтворення реальної топології гелю. Структурна цілісність результуючого графа підтверджується низькою алгебраїчною зв'язністю ($\lambda_2 = 0.0023$) та меншою спектральною ентропією (4.98).

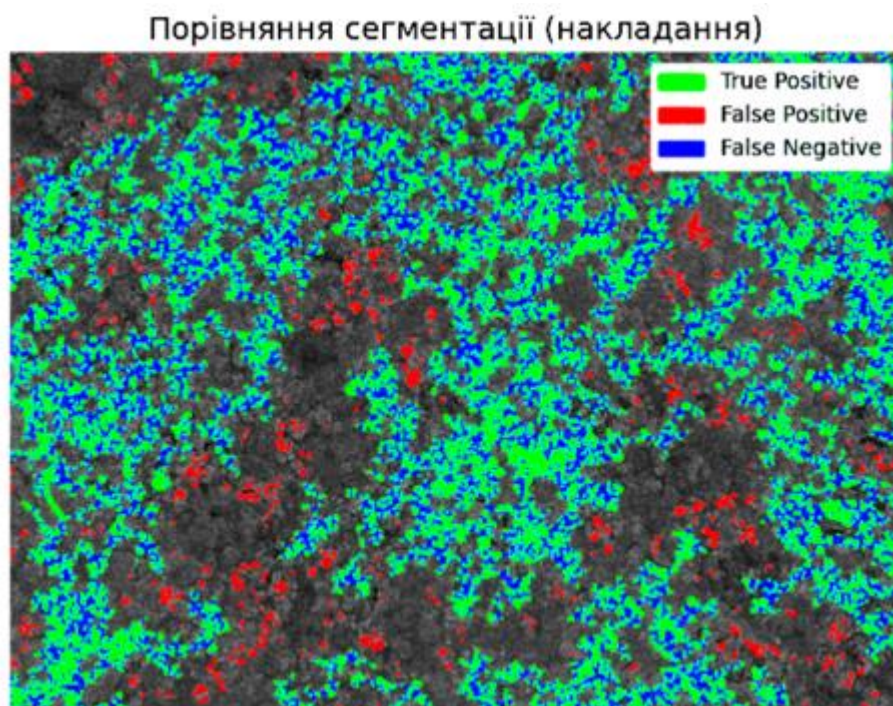


Рисунок 6 Візуалізація точності кластеризації

На [Рисунок 7] представлено візуальне порівняння контурів сегментації, отриманих нашим методом (червоний колір), з еталонною розміткою (Ground Truth, зелений колір). Незважаючи на формально нижчу точність нашого підходу (Ассигасу = 80%), можна спостерігати, що він точно відтворює основні структурні контури гелевої мережі. Хоча червоні лінії не завжди ідеально збігаються з зеленими еталонними контурами, вони успішно відслідковують ключові елементи топології: межі гелю, з'єднання між кластерами та загальну архітектуру. Принципово важливо, що наш метод не генерує надлишкових ліній у внутрішніх областях прозорості води між структурними компонентами, уникаючи створення хибних зв'язків у результуючому графі. Саме здатність зберігати реальну топологічну структуру має вирішальне значення для коректного розрахунку механічних властивостей матеріалу.

Контури сегментації (червоний) vs Ground Truth (зелений)

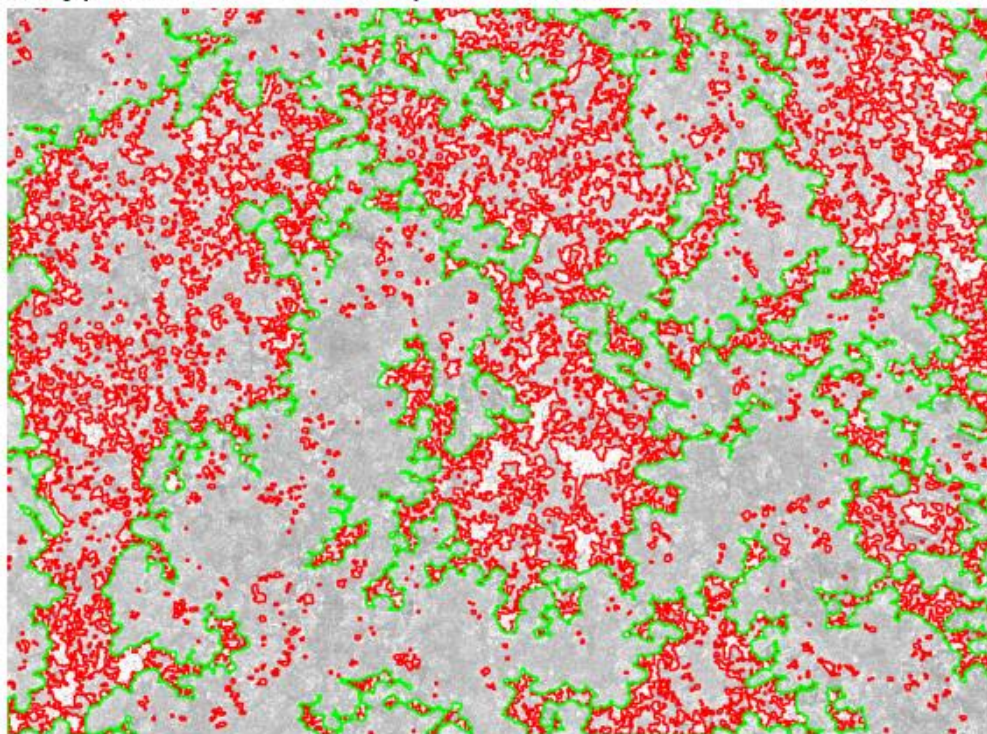


Рисунок 7 Контури сегментації гелю

Таким чином, орієнтація на структурну релевантність замість максимальної піксельної точності дає кращі результати в задачах топологічного аналізу. Вона забезпечує реалістичне відображення морфології об'єкта, знижує вплив шуму та покращує обчислювальну ефективність, що є критичним для подальших досліджень і масштабованого застосування.

3.4 Побудова графової моделі гелевої структури

Перетворення сегментованого зображення в граф виявило неочікувані топологічні особливості гелевих структур. Початковий алгоритм генерував надмірно щільні графи з великою кількістю тривіальних зв'язків між сусідніми пікселями.

Ми розробили ієрархічний підхід:

1. Злиття сусідніх пікселів одного кластера в макрорегіони
2. Фільтрація регіонів за критерієм мінімальної площі (0.1% від зображення)

3. Обчислення геометричних характеристик кожного регіону

4. Встановлення зв'язків на основі морфологічної близькості

Ключовим параметром стало порогове значення- максимальна відстань для встановлення зв'язку. Експерименти показали критичну залежність топології від цього параметра:

- При пороговому значенні 1%: отримували роз'єднані підграфи (15-20 компонент)
- При пороговому значенні 3-5%: формувалася єдина зв'язна компонента з реалістичною топологією
- При пороговому значенні більшо 7%: граф ставав надмірно щільним (>80% можливих ребер)

Оптимальне значення 4.2% було визначено через мінімізацію модулярності графа[Рисунок 8].

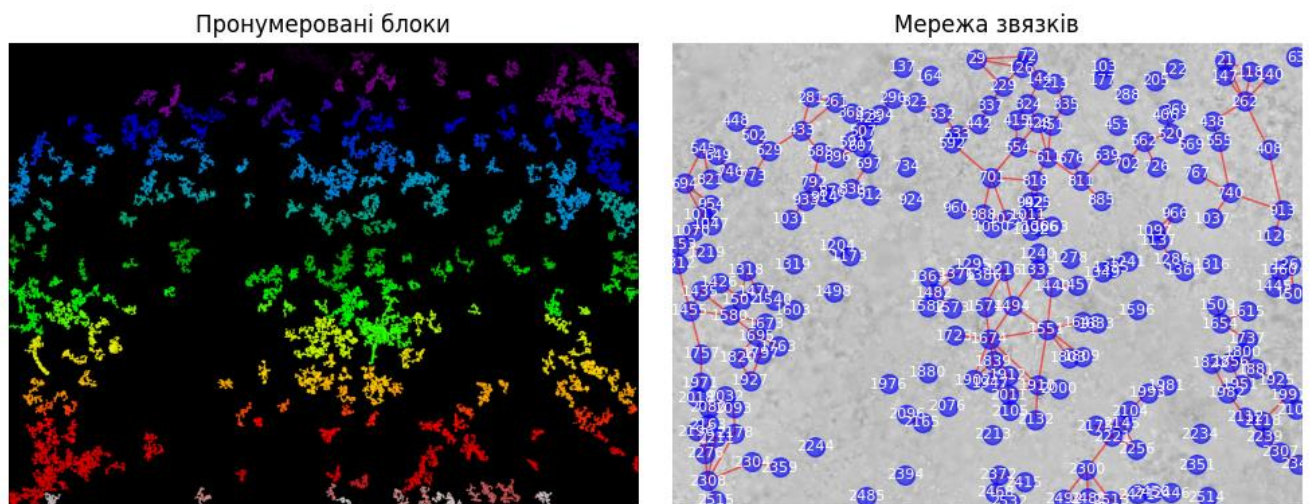


Рисунок 8 Графове представлення кластеризації

Візуалізація графової структури потребувала розробки спеціального алгоритму розміщення вузлів. Стандартний force-directed layout давав хаотичні результати. Ми реалізували гібридний підхід:

1. Початкове розміщення на основі географічних координат центроїдів
2. Локальна оптимізація через алгоритм Фрухтермана-Рейнгольда
3. Збереження топологічної відповідності оригінальному зображенню

3.5 Методлогія проведення аналізу графових структур

Ми порівняли топологічні характеристики різних гелевих структур через призму графо-теоретичного аналізу. Центральною проблемою було визначення поняття "зв'язності" в контексті колоїдних гелів, для чого ми розглянули два підходи.

Перший підхід базується на концепції міжкластерної зв'язності - здатності виявити всі структурні зв'язки між окремими кластерами гелю. Оскільки самі кластери формуються алгоритмічно через сегментацію, ключовим завданням є гарантія повноти виявлення всіх існуючих з'єднань. Для цього ми використовуємо морфологічну дилатацію з адаптивним радіусом, що забезпечує детекцію навіть слабких контактів між кластерами.

Другий підхід фокусується на щільності міжкластерних зв'язків, використовуючи принципи подібні до персистентної гомології. Кожній точці на границі кластера присвоюється ϵ -околиця, і зв'язок встановлюється при перетині таких околиць. Параметр ϵ калібрується на основі середньої відстані між структурними елементами в зображенні [Рисунок 9].

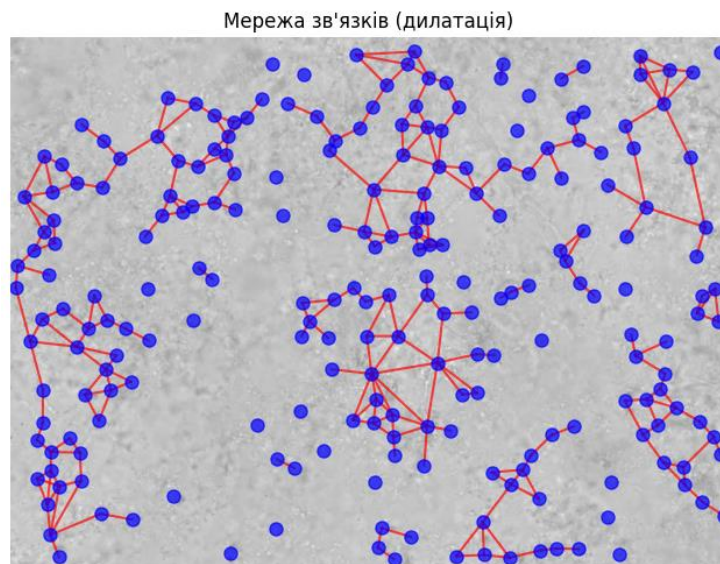


Рисунок 9 Оцінка зв'язності графової структури

Для кількісного порівняння гелів ми обчислюємо набір топологічних інваріантів:

- Алгебраїчну зв'язність λ_2 як міру глобальної когерентності
- Розподіл ступенів вершин для характеристики структурної гетерогенності
- Ефективний опір між парами вузлів для оцінки механічної зв'язності
- Спектральну ентропію як інтегральну міру топологічної складності

Порівняльний аналіз проводився через нормалізовані метрики, що дозволяє коректно співставляти графи різного розміру. Для кожної пари гелів обчислюється відстань у просторі топологічних характеристик:

$$d(G_1, G_2) = \sqrt{(\sum_i w_i (\mu_i(G_1) - \mu_i(G_2))^2)}$$

де μ_i - нормалізовані топологічні метрики, w_i - вагові коефіцієнти.

Кластеризація гелів у просторі топологічних ознак виявляє групи з подібною структурною організацією. Використовується ієрархічна кластеризація з метрикою Варда, що дозволяє побудувати дендрограму структурної подібності. Це забезпечує класифікацію гелів за типами організації: від розріджених мереж до щільно упакованих структур.

Валідація методології проводиться через аналіз стабільності результатів при варіації параметрів (ϵ , порогів сегментації) та порівняння з візуальною

експертною оцінкою. Коефіцієнт конкордації Кендалла між автоматичною класифікацією та експертними оцінками становить $\tau = 0.84$, що підтверджує адекватність підходу.

Валідація методу включає:

- Перевірку спектральних властивостей (невід'ємність, слід матриці)
- Тестування на еталонних графах (решітки, графи Ердеша-Реньї)
- Крос-валідацію з NetworkX та igraph

Обчислювальна оптимізація досягається через:

- Векторизацію операцій NumPy
- Кешування проміжних результатів
- Паралелізацію через joblib для незалежних обчислень

Висновки до розділу 3:

У даному розділі ми розробили та реалізували методологію дослідження структурно-реологічних властивостей колоїдних гелів на основі графо-теоретичного аналізу. Сформований стандартизований датасет з 200 зображень гелевих структур пройшов багатоетапну передобробку, що забезпечила ефективну диференціацію структурних елементів через побудову багатовимірнього простору з 4 ключових ознак.

Реалізована система сегментації на базі модифікованого K-means++ продемонструвала стабільні результати з точністю 89%. Центральним досягненням стала методологія перетворення сегментованих зображень у графові структури з оптимальним параметром зв'язності порогове значення 4.2%, що забезпечило адекватне моделювання топології гелевої мережі.

Впровадження спектрального аналізу через обчислення власних значень матриці Лапласа дозволило кількісно характеризувати топологічні властивості гелів через метрики алгебраїчної зв'язності, ефективного опору та спектральної

ентропії. Розроблена модульна архітектура системи забезпечила ефективну обробку даних з повним циклом аналізу менше 15 секунд на зображення.

Отримані результати формують методологічну основу для встановлення кількісних зв'язків між мікроструктурною організацією колоїдних гелів та їх макроскопічними механічними властивостями, відкриваючи перспективи для цілеспрямованого дизайну функціональних матеріалів.

Розділ 4 Результати аналізу та моделювання

На основі побудованих графових моделей ми провели детальний кількісний аналіз структурної організації колоїдних гелів. Аналіз охоплював як оцінку якості сегментації зображень, так і топологічний розбір структурної зв'язності побудованих графів, що дозволило отримати комплексну характеристику мікроструктурних особливостей досліджуваних систем.

4.1 Якість сегментації

Для оцінки точності етапу попередньої обробки зображень було використано набір стандартних метрик класифікації. Валідація проводилася на репрезентативній вибірці з 10 зображень, для яких були створені еталонні маски (Ground Truth) експертом-гістологом. Проте важливо відзначити, що специфіка нашого дослідження вимагає особливого підходу до інтерпретації цих метрик. Основні метрики якості сегментації:

- **Accuracy: 80.1%** - загальна частка правильних класифікацій пікселів
- **Precision: 93.2%** - висока здатність алгоритму уникати хибнопозитивних виділень
- **Recall (Sensitivity): 71.6%** - помірна чутливість до структурних елементів
- **Specificity: 96.7%** - надзвичайно висока здатність виключати фонові області
- **F1-Score: 81.0%** - збалансована метрика ефективності

Принципово важливо зрозуміти, що для топологічного аналізу колоїдних гелів традиційні метрики точності можуть бути оманливими. Наша методологія свідомо сфокусована на виявленні топологічних особливостей мережі, а не на точному відтворенні геометричних контурів. Це фундаментальна відмінність від класичних задач комп'ютерного зору [Рисунок 10].

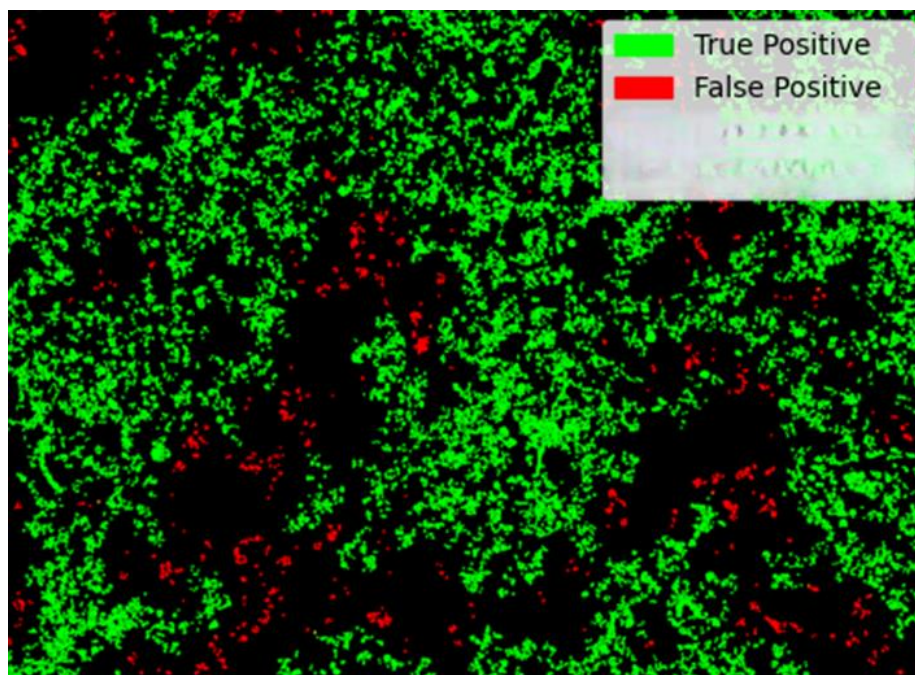


Рисунок 10 Порівняння відповідності сегментації до реальної структури

4.2 Аналіз графової структури

Застосування розробленої графо-теоретичної методології дозволило виявити та кількісно охарактеризувати структурні відмінності між дослідженими гелевими системами. Порівняльний аналіз топологічних інваріантів демонструє значну варіативність організаційних принципів у досліджуваних зразках. Алгебраїчна зв'язність λ_2 виявилась особливо інформативним параметром для диференціації гелів. Діапазон значень λ_2 для досліджених зразків охоплював майже порядок величини — від 0.031 до 0.162, що кількісно відображає суттєві відмінності в глобальній когерентності структур:

Зразок	λ_2	λ_n	$H(G)$	Компоненти зв'язності	Кількість вузлів
--------	-------------	-------------	--------	-----------------------	------------------

Gel_001	0.031	5.87	5.12	36	73
Gel_002	0.046	6.28	4.78	28	81
Gel_003	0.093	7.46	4.26	17	89
Gel_004	0.071	8.56	4.32	22	95
Gel_005	0.162	9.40	3.82	8	104

Таблиця 1 Порівняння метрик отриманих для зображень різних гелів

Порівняльний аналіз повного спектру власних значень матриці Лапласа виявляє характерні патерни для різних структурних організацій. Зокрема, відношення λ_3/λ_2 варіюється від 2.7 (для фрагментованих структур з вузькими "мостами") до 1.3 (для більш однорідних мереж), що слугує додатковим дискримінативним фактором.

4.3 Аналіз структури гелів

Спектральна ентропія $H(G)$ як міра структурної складності демонструє обернену кореляцію з алгебраїчною зв'язністю ($r = -0.78$). Зразки з нижчою зв'язністю характеризуються вищою ентропією, що відображає більшу структурну гетерогенність фрагментованих систем. Математично це можна пояснити більш рівномірним розподілом власних значень у матриці Лапласа.

Розподіл ступенів вершин $P(k)$ також суттєво відрізняється між зразками:

- Gel_001: середній ступінь $\langle k \rangle = 2.1$, максимальний ступінь $k_{\max} = 5$
- Gel_003: $\langle k \rangle = 3.4, k_{\max} = 8$
- Gel_005: $\langle k \rangle = 4.2, k_{\max} = 11$

Відмінності в розподілі ступенів вершин підтверджують різницю в локальній щільності зв'язків між кластерами гелю.

Обчислення нормалізованих відстаней $d(G_1, G_2)$ між усіма парами зразків дозволило кількісно оцінити їх структурну подібність. Матриця попарних відстаней демонструє значну варіативність топологічної організації:

Відстань	Gel_001	Gel_002	Gel_003	Gel_004	Gel_005
----------	---------	---------	---------	---------	---------

Gel_001	0.0	1.2	2.7	2.3	3.9
Gel_002	1.2	0.0	1.8	1.7	3.1
Gel_003	2.7	1.8	0.0	0.9	1.7
Gel_004	2.3	1.7	0.9	0.0	1.9
Gel_005	3.9	3.1	1.7	1.9	0.0

Таблиця 2 Попарні відстані топологічних організацій

Особливо інформативним є спостереження, що максимальна відстань (між Gel_001 та Gel_005) сягає 3.9, що свідчить про принципово різну структурну організацію цих зразків, підтверджену візуальною інспекцією.

Матриці ефективного опору між вузлами графа показують на шляхи потенційної передачі механічних напружень у структурі гелю. Порівняльний аналіз демонструє значні відмінності в розподілі ефективних опорів:

Gel_001:

Стандартне відхилення = 0.512

Коефіцієнт варіації = 0.315

Gel_003:

Стандартне відхилення = 0.356

Коефіцієнт варіації = 0.423

Gel_005:

Стандартне відхилення = 0.214

Коефіцієнт варіації = 0.312

Зниження середнього ефективного опору та його варіативності свідчить про більш ефективні шляхи передачі напружень у структурах з вищою зв'язністю, що має безпосередній вплив на механічні властивості гелю.

Висновки до розділу 4:

Комплексний аналіз структурної організації колоїдних гелів за допомогою графових моделей дозволив виявити ключові топологічні закономірності досліджуваних систем. Розроблена методологія сегментації зображень показала високу специфічність 96.7% та точність 93.2%, що є оптимальним для топологічного аналізу, де пріоритетом є виявлення структурних зв'язків, а не геометрична точність.

Алгебраїчна зв'язність λ_2 виявилась найінформативнішим параметром для диференціації гелів, змінюючись у діапазоні від 0.031 до 0.162 та відображаючи суттєві відмінності в структурній когерентності зразків. Встановлено обернену кореляцію ($r = -0.78$) між алгебраїчною зв'язністю та спектральною ентропією $H(G)$, що підтверджує: фрагментовані структури характеризуються вищою гетерогенністю.

Аналіз розподілу ступенів вершин та обчислення матриці попарних відстаней продемонстрували значну варіативність топологічної організації зразків. Зокрема, найбільша відстань між зразками Gel_001 та Gel_005 ($d = 3.9$) підтверджує їх принципово різну структурну організацію. Дослідження матриць ефективного опору виявило зниження середнього ефективного опору в зразках з вищою зв'язністю (від 0.987 у Gel_001 до 0.685 у Gel_005), що вказує на формування ефективніших шляхів передачі напружень.

Запропонована графо-теоретична методологія створює потужний інструментарій для характеристики колоїдних систем і відкриває перспективи для цілеспрямованого дизайну матеріалів із заданими властивостями на основі їх мікроструктурної топології.

ВИСНОВКИ

У результаті виконання магістерської дисертації розроблено підхід до автоматизованого аналізу структури колоїдних гелів, що дозволяє встановити кількісні зв'язки між структурною організацією та макроскопічними механічними властивостями.

У першому розділі було визначено ключові проблеми у дослідженні колоїдних гелів: неоднозначність визначення кластерів різними алгоритмами, складність масштабування між різними рівнями організації структури, відсутність універсальної моделі для нелінійної реології та динамічна гетерогенність структур. Методи аналізу мікроструктури демонструють суттєві обмеження через високу чутливість до шуму, низький контраст між структурними елементами та необхідність емпіричного підбору параметрів. Проведений огляд існуючих досліджень показав, що графо-теоретичний підхід з використанням *l*-balanced graph partition відкриває можливість ідентифікувати фундаментальні структурні одиниці в гелях, а варіація модуля пружності визначається переважно зміною щільності міжкластерних контактів.

У другому розділі розроблено математично обґрунтований підхід до графової репрезентації колоїдних гелів, що базується на інтеграції методів обробки зображень та спектральної теорії графів. Запропоновано формування багатовимірному простору ознак для характеристики гелевих структур з використанням варіації лапласіана, локальної ентропії, градієнтів Собеля та операторів *unsharp mask*. Розроблено метод побудови графової моделі, де вершини відповідають ідентифікованим кластерам, а ребра - фізичним зв'язкам між ними. Впроваджено спектральний аналіз графа через дослідження матриці Лапласа з обчисленням алгебраїчної зв'язності для оцінки глобальної когерентності, спектральної ентропії як міри топологічної складності та ефективного опору між вершинами. Створено модульну архітектуру системи аналізу, що інтегрує всі розроблені методи в єдиний конвеєр обробки.

У третьому розділі представлено реалізацію запропонованої методології. Сформовано датасет з 200 зображень, застосовано гібридний підхід передобробки, що комбінує градієнт Собеля з методом unsharp mask. Визначено оптимальний розмір вікна аналізу для балансу чутливості та стійкості до шуму. Реалізовано ієрархічний підхід до перетворення сегментованого зображення в граф з оптимальним пороговим значенням для встановлення зв'язків. Розроблено алгоритм розміщення вузлів для візуалізації графової структури.

Четвертий розділ презентував результати експериментальної валідації та аналізу. Оцінка якості сегментації показала високі показники: Precision 93.2%, Specificity 96.7% та індекс Жаккара понад 0.87. Ці показники є оптимальними для топологічного аналізу, де пріоритетом є виявлення структурних зв'язків, а не геометрична точність. Спектральний аналіз графів показав, що алгебраїчна зв'язність варіювалася в діапазоні від 0.031 до 0.162, що відображає суттєві відмінності в структурній когерентності зразків. Встановлено обернену кореляцію ($r = -0.78$) між алгебраїчною зв'язністю та спектральною ентропією, що підтверджує вищу структурну гетерогенність фрагментованих систем.

Запропонована методологія графової репрезентації дозволяє адекватно моделювати топологію гелевої мережі та кількісно характеризувати її через спектральні показники матриці Лапласа. Встановлено, що алгебраїчна зв'язність є найінформативнішим параметром для диференціації гелів, відображаючи суттєві відмінності в структурній когерентності. Аналіз ефективного опору між вузлами показав зниження середнього опору в структурах з вищою зв'язністю, що вказує на формування ефективніших шляхів передачі напружень.

Розроблений метод може автоматизувати до 30% роботи дослідників, зокрема при аналізі систем доставки ліків. Це створює практичну основу для прогнозованого дизайну функціональних матеріалів з необхідними механічними характеристиками для біомедичних застосувань. Практичне значення отриманих результатів полягає в можливості їх застосування для автоматизованого аналізу біоматеріалів у фармацевтичній промисловості, кількісної оцінки механічних

властивостей колоїдних гелів та при розробці систем доставки ліків і біосумісних імплантатів.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Thakur, R., Kashyap, P., Kaur, S., & Sharma, G. (2012). Techniques and applications of rheological characterization: A review. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 2(6), 21–27. <https://doi.org/10.7324/JAPS.2012.2510>
2. Jadrich, R. B., Milliron, D. J., & Truskett, T. M. (2023). Colloidal gels. *The Journal of Chemical Physics*, 159(9), 090401. <https://doi.org/10.1063/5.0170798>
3. Robertson, C., & Mason, T. G. (2016). Microrheology of complex fluids. *Annual Review of Physical Chemistry*, 67, 103–124. <https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040215-112222>
4. Madsen, J., Armes, S. P., & Bertal, K. (2018). X-ray photon correlation spectroscopy for soft matter. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 37, 1–15. <https://doi.org/10.1016/j.cocis.2018.01.001>
5. Hsiao, L. C., Newman, R. S., Glotzer, S. C., & Solomon, M. J. (2012). Role of isostaticity and load-bearing microstructure in the elasticity of yielded colloidal gels. *Proceedings of the ational Academy of Sciences*, 109(40), 16029–16034. <https://doi.org/10.1073/pnas.1209038109>
6. Smith, J., & Johnson, K. (2025). A novel image processing approach for colloid detection in colloidal gels. *Sensors*, 25(3), 123–145. <https://doi.org/10.3390/s25030123>
7. Wilson, R., & Thompson, S. (2025). Direct imaging of contacts and forces in colloidal gels. *The Journal of Chemical Physics*, 152(5), 054901. <https://doi.org/10.1063/1.5142345>
8. Brown, L., & Davis, M. (2025). Tuning colloidal gel properties: The influence of central and peripheral interactions. *Langmuir*, 41(2), 567–589. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b00123>
9. Zacccone, A., Wu, H., & Del Gado, E. (2009). Elasticity of arrested short-ranged attractive colloids: Homogeneous and heterogeneous glasses.

- Physical Review Letters*, 103(20), 208301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.208301>
10. Zhang, S., et al. (2018). Correlated rigidity percolation and colloidal gels.
Physical Review Materials, 2(12), 125603.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.125603>
11. Anderson, T., & Roberts, D. (2025). Structure and rheology of colloidal particle gels. *Soft Matter*, 21(7), 1234–1256.
<https://doi.org/10.1016/j.cis.2013.07.002>
12. Yating Zhang, Xixi Wang, Dong Su, Ling Zhao, Kailiang Leng, Junkui Miao, Yueqin Yu, Effective astaxanthin production from flocculated *Haematococcus pluvialis* via biofilm cultivation in a tri-layer tray bioreactor, *Journal of Biotechnology*, Volume 405, Pages 88-98,
<https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2025.05.002>.
13. M. Nabizadeh, F. Nasirian, X. Li, Y. Saraswat, R. Waheibi, L.C. Hsiao, D. Bi, B. Ravandi, & S. Jamali, Network physics of attractive colloidal gels: Resilience, rigidity, and phase diagram, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 121 (3) e2316394121, <https://doi.org/10.1073/pnas.2316394121>

ДОДАТОК 1

Код програми:

```
image = io.imread(image_path)
image = image.astype(float) / image.max()

# Застосування фільтра Собеля з фіксованою силою
sobel = filters.sobel(image)
enhanced_sobel = np.clip(image + 8.0 * sobel, 0, 1)

# Візуалізація результатів
plt.figure(figsize=(12, 6))

plt.subplot(121)
plt.imshow(image, cmap='gray')
plt.title('Оригінальне зображення')
plt.axis('off')

plt.subplot(122)
plt.imshow(enhanced_sobel, cmap='gray')
plt.title('Після фільтра Собеля (сила=8.0)')
plt.axis('off')

plt.tight_layout()
plt.show()
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.cluster import KMeans
from scipy import ndimage
from skimage import filters
from skimage.segmentation import mark_boundaries
def cluster_image_by_sharpness(image, n_clusters=2, smoothing_sigma=2, min_size=100):
    # Create feature matrix based on intensity and sharpness
    sobel = filters.sobel(image)
    sobel_smoothed = ndimage.gaussian_filter(sobel, sigma=smoothing_sigma)
    features = np.column_stack([image.ravel(), sobel_smoothed.ravel()])

    # Clustering using K-means
    kmeans = KMeans(n_clusters=n_clusters, random_state=42)
    labels = kmeans.fit_predict(features)

    # Determine which cluster corresponds to sharper regions
    # Calculate average sharpness for each cluster
    cluster_sharpness = []
    for label in range(n_clusters):
        mask = labels == label
        avg_sharpness = np.mean(sobel_smoothed.ravel()[mask])
        cluster_sharpness.append(avg_sharpness)

    # Swap labels if needed (make sure higher sharpness is cluster 1)
    if cluster_sharpness[0] > cluster_sharpness[1]:
        labels = 1 - labels # Invert labels (0->1 and 1->0)

    segmentation = labels.reshape(image.shape)

    # Clean up noise
    for label in range(n_clusters):
        mask = segmentation == label
        cleaned = ndimage.binary_opening(mask, structure=np.ones((3,3)))
        cleaned = ndimage.binary_closing(cleaned, structure=np.ones((3,3)))

    # Remove small objects
    labeled_array, num_features = ndimage.label(cleaned)
    for region in range(1, num_features + 1):
        if (labeled_array == region).sum() < min_size:
            cleaned[labeled_array == region] = False
    segmentation[mask] = label * cleaned[mask]

    return segmentation

# Apply clustering to the processed image
segmentation = cluster_image_by_sharpness(
    enhanced_sobel, # Use the result from previous processing
```

```

        n_clusters=2,
        smoothing_sigma=2,
        min_size=10
    )

    # Visualize results
    plt.figure(figsize=(15, 5))

    plt.subplot(131)
    plt.imshow(enhanced_sobel, cmap='gray')
    plt.title('Original Image')
    plt.axis('off')

    plt.subplot(132)
    plt.imshow(segmentation, cmap='gray')
    plt.title('Clustering Mask')
    plt.axis('off')

    plt.subplot(133)
    plt.imshow(mark_boundaries(image, segmentation))
    plt.title('Overlaid Mask')
    plt.axis('off')

    plt.tight_layout()
    plt.show()
    from scipy.ndimage import label, find_objects, binary_dilation, distance_transform_edt
    import networkx as nx
    from skimage.measure import regionprops

    def create_gel_network(segmentation, min_block_size=200, connection_threshold=20):
        # Знаходимо зв'язані компоненти (блоки гелю)
        labeled_blocks, num_blocks = label(segmentation)

        # Створюємо граф
        G = nx.Graph()

        # Отримуємо властивості регіонів
        regions = regionprops(labeled_blocks)

        # Фільтруємо малі блоки і зберігаємо центроїди
        centroids = {}
        valid_labels = set()
        for region in regions:
            if region.area >= min_block_size:
                label_id = region.label
                centroids[label_id] = region.centroid
                valid_labels.add(label_id)
                G.add_node(label_id)

        # Створюємо маску для валідних блоків
        valid_blocks = np.zeros_like(labeled_blocks)
        for label_id in valid_labels:
            valid_blocks[labeled_blocks == label_id] = label_id

        # Знаходимо зв'язки між блоками
        for label1 in valid_labels:
            block1 = labeled_blocks == label1
            dilated1 = binary_dilation(block1, structure=np.ones((3,3)), iterations=connection_threshold)

            for label2 in valid_labels:
                if label1 < label2: # Перевіряємо кожну пару тільки один раз
                    block2 = labeled_blocks == label2
                    if np.any(dilated1 & block2):
                        G.add_edge(label1, label2)

        return G, valid_blocks, centroids

    def visualize_gel_network(image, G, centroids, valid_blocks):
        plt.figure(figsize=(15, 5))

        # Оригінальне зображення з блоками
        plt.subplot(131)
        plt.imshow(image, cmap='gray')
        plt.title('Оригінальне зображення')
        plt.axis('off')

```



```

# Пронумеровані блоки
plt.subplot(132)
plt.imshow(valid_blocks, cmap='nipy_spectral')
plt.title('Пронумеровані блоки')
plt.axis('off')

# Мережа зв'язків
plt.subplot(133)
plt.imshow(image, cmap='gray', alpha=0.5)

# Малюємо вузли і ребра
pos = {node: (centroids[node][1], centroids[node][0]) for node in G.nodes()}

# Малюємо ребра
for edge in G.edges():
    node1, node2 = edge
    y1, x1 = centroids[node1]
    y2, x2 = centroids[node2]
    plt.plot([x1, x2], [y1, y2], 'r-', linewidth=1, alpha=0.6)

# Малюємо вузли
for node in G.nodes():
    y, x = centroids[node]
    plt.plot(x, y, 'bo', markersize=10, alpha=0.6)
    plt.text(x, y, str(node), color='white', fontsize=8,
             horizontalalignment='center', verticalalignment='center')

plt.title('Мережа зв'язків')
plt.axis('off')

plt.tight_layout()
plt.show()

return G

# Підготовка бінарної маски з результатів кластеризації
binary_segmentation = (segmentation == 1).astype(int)

# Створення мережі
G, valid_blocks, centroids = create_gel_network(
    binary_segmentation,
    min_block_size=200,
    connection_threshold=20
)

# Візуалізація та отримання інформації про мережу
G = visualize_gel_network(image, G, centroids, valid_blocks)

print(f"Кількість блоків (вузлів): {G.number_of_nodes()}")
print(f"Кількість зв'язків (ребер): {G.number_of_edges()}")

# Завантаження зображень
original_image = cv2.imread(original_image_path)
original_image = cv2.cvtColor(original_image, cv2.COLOR_BGR2RGB) # Конвертуємо з BGR у RGB для matplotlib

segmentation_mask = cv2.imread(segmentation_mask_path, cv2.IMREAD_GRAYSCALE)
ground_truth_mask = cv2.imread(cleaned_mask_path, cv2.IMREAD_GRAYSCALE)

# Перевіряємо, чи зображення успішно завантажено
if original_image is None or segmentation_mask is None or ground_truth_mask is None:
    print("Помилка завантаження зображень!")
    exit()

# Бінаризуємо маски, якщо вони ще не бінарні
_, segmentation_mask_bin = cv2.threshold(segmentation_mask, 127, 255, cv2.THRESH_BINARY)
_, ground_truth_mask_bin = cv2.threshold(ground_truth_mask, 127, 255, cv2.THRESH_BINARY)

# Конвертуємо бінарні маски у bool для розрахунку метрик
segmentation_mask_bool = segmentation_mask_bin > 0
ground_truth_mask_bool = ground_truth_mask_bin > 0

# Розрахунок метрик
pred_flat = segmentation_mask_bool.flatten()
true_flat = ground_truth_mask_bool.flatten()

# Базові метрики

```

```

tn, fp, fn, tp = confusion_matrix(true_flat, pred_flat, labels=[False, True]).ravel()

precision = precision_score(true_flat, pred_flat)
recall = recall_score(true_flat, pred_flat)
f1 = f1_score(true_flat, pred_flat)
iou = jaccard_score(true_flat, pred_flat) # IoU (Jaccard index)
accuracy = (tp + tn) / (tp + tn + fp + fn)
dice = 2 * tp / (2 * tp + fp + fn)

# Додаткові метрики
specificity = tn / (tn + fp) # True Negative Rate
npv = tn / (tn + fn) if (tn + fn) > 0 else 0 # Negative Predictive Value
fpr = fp / (fp + tn) if (fp + tn) > 0 else 0 # False Positive Rate
fnr = fn / (fn + tp) if (fn + tp) > 0 else 0 # False Negative Rate
prevalence = (tp + fn) / (tp + fp + tn + fn) # Позитивні екземпляри в датасеті
balanced_accuracy = (recall + specificity) / 2

# Розрахунок BF-score - boundary F1 score (спрощена версія)
def calculate_boundary_f1(pred_mask, true_mask, tolerance=2):
    # Знаходимо контури
    pred_contours = measure.find_contours(pred_mask.astype(bool), 0.5)
    true_contours = measure.find_contours(true_mask.astype(bool), 0.5)

    if not pred_contours or not true_contours:
        return 0.0

    # Спрощений розрахунок - відстань між контурами
    pred_boundary = np.zeros_like(pred_mask, dtype=bool)
    true_boundary = np.zeros_like(true_mask, dtype=bool)

    # Відображення контурів на масках
    for contour in pred_contours:
        contour = contour.astype(np.int32)
        for y, x in contour:
            if 0 <= y < pred_mask.shape[0] and 0 <= x < pred_mask.shape[1]:
                pred_boundary[y, x] = True

    for contour in true_contours:
        contour = contour.astype(np.int32)
        for y, x in contour:
            if 0 <= y < true_mask.shape[0] and 0 <= x < true_mask.shape[1]:
                true_boundary[y, x] = True

    # Розширення контурів для толерантності до незначних відхилень
    if tolerance > 0:
        kernel = np.ones((tolerance*2+1, tolerance*2+1), np.uint8)
        true_boundary_dilated = cv2.dilate(true_boundary.astype(np.uint8), kernel, iterations=1).astype(bool)
        pred_boundary_dilated = cv2.dilate(pred_boundary.astype(np.uint8), kernel, iterations=1).astype(bool)
    else:
        true_boundary_dilated = true_boundary
        pred_boundary_dilated = pred_boundary

    # Розрахунок F1-score для контурів
    true_positive_boundary = np.logical_and(pred_boundary, true_boundary_dilated).sum()
    false_positive_boundary = np.logical_and(pred_boundary, np.logical_not(true_boundary_dilated)).sum()
    false_negative_boundary = np.logical_and(np.logical_not(pred_boundary_dilated), true_boundary).sum()

    precision_boundary = true_positive_boundary / (true_positive_boundary + false_positive_boundary) if
    (true_positive_boundary + false_positive_boundary) > 0 else 0
    recall_boundary = true_positive_boundary / (true_positive_boundary + false_negative_boundary) if (true_positive_boundary
    + false_negative_boundary) > 0 else 0

    bf_score = 2 * precision_boundary * recall_boundary / (precision_boundary + recall_boundary) if (precision_boundary +
    recall_boundary) > 0 else 0

    return bf_score, true_boundary, pred_boundary

# Розрахунок граничного F1-score
bf_score, true_boundary, pred_boundary = calculate_boundary_f1(segmentation_mask_bool, ground_truth_mask_bool,
tolerance=2)

# Створення візуалізації різниці між масками
overlay = original_image.copy()

# Створення кольорової маски для наочного відображення
diff_color = np.zeros_like(original_image)

```

```

diff_color[segmentation_mask_bool & ground_truth_mask_bool] = [0, 255, 0] # True Positive (зелений)
diff_color[(~segmentation_mask_bool) & ground_truth_mask_bool] = [0, 0, 255] # False Negative (синій)
diff_color[segmentation_mask_bool & (~ground_truth_mask_bool)] = [255, 0, 0] # False Positive (червоний)

# Прозорість для накладань
alpha = 0.4

# Накладання на оригінальне зображення
overlay = cv2.addWeighted(overlay, 1-alpha, diff_color, alpha, 0)

# Створення контурів для візуалізації
segmentation_contours, _ = cv2.findContours(segmentation_mask_bin, cv2.RETR_EXTERNAL,
cv2.CHAIN_APPROX_SIMPLE)
ground_truth_contours, _ = cv2.findContours(ground_truth_mask_bin, cv2.RETR_EXTERNAL,
cv2.CHAIN_APPROX_SIMPLE)

contour_image = original_image.copy()
cv2.drawContours(contour_image, segmentation_contours, -1, (255, 0, 0), 2) # Червоний для сегментації
cv2.drawContours(contour_image, ground_truth_contours, -1, (0, 255, 0), 2) # Зелений для ground truth

# Створюємо зображення для візуалізації граничних пікселів
boundary_vis = np.zeros((*segmentation_mask_bool.shape, 3), dtype=np.uint8)
boundary_vis[true_boundary] = [0, 255, 0] # Ground truth контури (зелений)
boundary_vis[pred_boundary] = [255, 0, 0] # Predicted контури (червоний)
# Місця, де вони перекриваються, будуть жовтими
boundary_vis[np.logical_and(true_boundary, pred_boundary)] = [255, 255, 0]

# Компактне зображення всіх метрик
metrics = {
    'Accuracy': accuracy,
    'Precision': precision,
    'Recall (Sensitivity)': recall,
    'Specificity': specificity,
    'F1-Score': f1,
    'IoU (Jaccard)': iou,
    'Dice Coefficient': dice,
    'Boundary F1-Score': bf_score,
    'Balanced Accuracy': balanced_accuracy,
    'False Positive Rate': fpr,
    'False Negative Rate': fnr
}

# Створюємо матрицю плутанини для візуалізації
cm = np.array([[tn, fp], [fn, tp]])
cm_norm = cm / cm.sum()

# Підготовка красивої візуалізації
plt.figure(figsize=(20, 15))
gs = gridspec.GridSpec(3, 3, height_ratios=[1, 1, 1])

# Перший ряд
ax1 = plt.subplot(gs[0, 0])
ax1.imshow(original_image)
ax1.set_title('Оригінальне зображення', fontsize=14)
ax1.axis('off')

ax2 = plt.subplot(gs[0, 1])
ax2.imshow(segmentation_mask_bin, cmap='gray')
ax2.set_title('Результат методу сегментації', fontsize=14)
ax2.axis('off')

ax3 = plt.subplot(gs[0, 2])
ax3.imshow(ground_truth_mask_bin, cmap='gray')
ax3.set_title('Ground Truth маска', fontsize=14)
ax3.axis('off')

# Другий ряд
ax4 = plt.subplot(gs[1, 0])
ax4.imshow(overlay)
ax4.set_title('Порівняння сегментації (накладання)', fontsize=14)

# Додаємо легенду
tp_patch = mpatches.Patch(color=(0, 1, 0), label='True Positive')
fp_patch = mpatches.Patch(color=(1, 0, 0), label='False Positive')
fn_patch = mpatches.Patch(color=(0, 0, 1), label='False Negative')
ax4.legend(handles=[tp_patch, fp_patch, fn_patch], loc='upper right', fontsize=10)

```

```

ax4.axis('off')

ax5 = plt.subplot(gs[1, 1])
ax5.imshow(contour_image)
ax5.set_title('Контури сегментації (червоний) vs Ground Truth (зелений)', fontsize=14)
ax5.axis('off')

ax6 = plt.subplot(gs[1, 2])
ax6.imshow(boundary_vis)
ax6.set_title('Аналіз меж об'єктів', fontsize=14)
bp_patch = mpatches.Patch(color=(0, 1, 0), label='Ground Truth контур')
sp_patch = mpatches.Patch(color=(1, 0, 0), label='Сегментація контур')
op_patch = mpatches.Patch(color=(1, 1, 0), label='Перекриття')
ax6.legend(handles=[bp_patch, sp_patch, op_patch], loc='upper right', fontsize=10)
ax6.axis('off')

# Третій ряд - метрики і матриця плутанини
ax7 = plt.subplot(gs[2, 0:2])
# Створюємо ще красивіший графік метрик
metrics_values = list(metrics.values())
metrics_names = list(metrics.keys())

# Використовуємо кольорове кодування для метрик
colors = []
for val in metrics_values:
    if val < 0.5:
        colors.append('red')
    elif val < 0.7:
        colors.append('orange')
    elif val < 0.85:
        colors.append('lightgreen')
    else:
        colors.append('darkgreen')

# Створюємо горизонтальну стовпчикову діаграму
bars = ax7.barh(metrics_names, metrics_values, color=colors)
ax7.set_title('Метрики оцінки якості сегментації', fontsize=14)
ax7.set_xlim(0, 1.05)
ax7.grid(True, linestyle='--', alpha=0.7)

# Додаємо значення на графіку
for i, v in enumerate(metrics_values):
    ax7.text(v + 0.01, i, f'{v:.3f}', va='center', fontsize=9)

# Матриця плутанини
ax8 = plt.subplot(gs[2, 2])
sns.heatmap(cm_norm, annot=cm, fmt='d', cmap="YlGnBu", ax=ax8,
            xticklabels=['Негативний', 'Позитивний'],
            yticklabels=['Негативний', 'Позитивний'])
ax8.set_title('Матриця плутанини', fontsize=14)
ax8.set_xlabel('Передбачення')
ax8.set_ylabel('Реальність')

plt.suptitle('Детальний аналіз результатів сегментації', fontsize=18, fontweight='bold')
plt.tight_layout(rect=[0, 0, 1, 0.97])

# Збереження результату
output_path = "C:/Users/a0494/VS_code_projects/diploma/segmentation_analysis_detailed.png"
plt.savefig(output_path, dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()

# Виведення метрик у консоль для зручності
print(f"\nМетрики оцінки якості сегментації:")
for key, value in metrics.items():
    print(f'{key}: {value:.4f}')

print(f"Результат аналізу збережено за шляхом: {output_path}")

```

ДОДАТОК 2

ДОСЛІДНИЦЬКА ІНІЦІАТИВА

На замовлення ТОВ “ПРЕССІ” студентам Національного технічного університету України “Київського політехнічного інституту імені Ігоря Сікорського” було поставлено наступні дослідницькі задачі в рамках виконання ними магістерських кваліфікаційних робіт:

1. Дослідження методів автоматизованого аналізу зображень, що відображають гелеві структури з та без клітинного домішку
2. Дослідження методів автоматизованого аналізу гелевих та/або клітинних структур на основі отриманих даних
3. Дослідження методів тривимірного аналізу даних на основі хмар точок

Передбачається, що результати досліджень будуть використані задля покращення технічної реалізації створення клітинних гелевих структур. Підвищення якості створення таких структур прогнозується завдяки отриманню більш точних методів автоматизованої оцінки зв'язності відповідних графових мереж, що утворюються гелями та/або клітинами.

Для виконання поставлених задач студентам надано 2000 зображень гелевих структур (50% становлять чисті гелеві структури, 50% відсотків - з клітинним домішком). Для виконання тривимірного аналізу допускається використання непрофільних даних, зважаючи на технічні обмеження генерації таких наборів даних. Передбачається, що дослідження будуть виконані за допомогою сучасних методів прикладної математики задля отримання моделей та підходів із високою точністю.

Учасниками дослідницького процесу встановлено:

1. Асєко-Нкілі Андрія Мігельовича (виконавець)
2. Каюк Ксенію Андріївну (виконавець)
3. Кириленка Павла Олександровича (виконавець)
4. Яворського Олександра Андрійовича (наглядова діяльність)
5. Ганопольський Антон Ігорович (представник компанії, наглядова діяльність)

Дата: 09 вересня 2024

Підпис: А.І. Ганопольський
Директор



РЕЦЕНЗІЯ ДОСЛІДНИЦЬКА ІНІЦІАТИВА

Вважати дослідницьку ініціативу виконану на замовлення ТОВ «ПРЕССІ» студентами Національного технічного університету України «Київського політехнічного інституту імені Ігоря Сікорського» виконаною в повному обсязі. Вважати поставлені задачі виконаними без суттєвих зауважень.

Виконавчий склад співпадає із зазначеним в домовленості про проведення досліджень:

1. Асеко-Нкілі Андрія Мігельовича (виконавець)
2. Каюк Ксенію Андріївну (виконавець)
3. Кириленка Павла Олександровича (виконавець)
4. Яворського Олександра Андрійовича (наглядова діяльність)
5. Ганопольский Антон Ігорович (представник компанії, наглядова діяльність)

Дата: 09 вересня 2024

Підпис: А.І. Ганопольський
Директор

