

ДЕТЕКЦІЯ ТА ГРАФОВИЙ АНАЛІЗ СТРУКТУР КОЛОЇДНИХ ГЕЛІВ

А. М. Асєко-Нкілі¹, О. А. Яворський¹

¹ Навчально-науковий Фізико-технічний інститут

Анотація

У цій статті представлено інтегрований підхід до автоматизованого аналізу мікроструктури незмішаних колоїдних гелів, який поєднує передобробку зображень, адаптивну кластеризацію та графове моделювання структурних зв'язків. Запропонований метод показує, низьку чутливість до шуму та здатність до кількісної оцінки морфології. Побудовані графи дозволяють формалізовано описати глобальну фрагментованість та локальну когерентність гелевих структур. Проведений спектральний аналіз Лапласіана, розрахунок алгебраїчної зв'язності між вузлами підтверджують релевантність моделі та розкривають нові інсайти щодо внутрішньої організації гелевого середовища. Отримані результати мають значний потенціал для біомедичних застосувань – зокрема у дослідженнях механіки біоматеріалів і взаємодії лікарських засобів з тканинами під час досліджень – та відкривають перспективи подальшого розвитку автоматизованих систем аналізу біологічних зображень.

Ключові слова: колоїдні гелі, графовий аналіз, сегментація зображень, спектральна теорія графів, мікроструктурний аналіз, біоматеріали.

Вступ

Колоїдні гелі, що утворюються при уповільненому фазовому розділенні в суспензіях із міжчастинковими взаємодіями, їхні механічні властивості – зокрема пружність і текучість – визначаються просторовою організацією та зв'язністю мезоскопічних структур [1]. Ці системи є ключовими для численних застосувань: від фармацевтики й косметичної промисловості до створення біосумісних матеріалів, де точне керування структурно-механічними властивостями є критично важливим [2].

Незважаючи на значний прогрес у розумінні механізмів гелеутворення, залишаються відкритими питання щодо того, які саме мікроструктурні одиниці відповідають за виникнення пружного відгуку в таких системах і якими є фізичні принципи їхнього формування та взаємодії. Згідно з сучасними гіпотезами, еластичність колоїдного гелю пов'язана з формуванням кластерів – локально щільних агрегатів частинок, які функціонують як жорсткі елементи, що передають деформацію через міжкластерні контакти [3, 4]. Характер цих зв'язків, їх щільність і геометрична організація можуть істотно впливати на модуль пружності гелю [5].

Крім того, все ще недостатньо досліджені підходи до надійного кількісного опису структури таких гелів за мікроскопічними зображеннями. Традиційні методи сегментації, зокрема порогова обробка, watershed-алгоритми та активні контури, демонструють обмежену ефективність через високу чутливість до шуму, варіабельність сигналу та потребу в ручно налаштуванні параметрів. Це істотно ускладнює

автоматизований аналіз та об'єктивне вивчення структурної організації [6].

У цій роботі ми дослідили новий інтегрований підхід до автоматизованого аналізу мікроструктури незмішаних колоїдних гелів, що поєднує багатовимірний аналіз локальної різкості зображень, адаптивну кластеризацію методом K-means та побудову морфологічного графа для моделювання структурної зв'язності. Застосовуючи інструменти спектральної теорії графів – зокрема алгебраїчну зв'язність, спектральну ентропію та ефективний опір – ми формалізуємо зв'язок між локальною когерентністю структур та глобальною фрагментованістю мережі. Такий підхід дозволяє не лише підвищити точність та стійкість сегментації, а й отримати нові кількісні індикатори мікроструктурної організації, релевантні для оцінки механічних властивостей гелів [7].

1. Опис методів та математичне обґрунтування

1.1. Передобробка даних

Для ефективної сегментації зображень ми реалізували комплексний підхід, що базується на формуванні багатовимірного простору ознак, який дозволяє диференціювати структурні елементи зображення з високою точністю. Запропонована методологія включає застосування набору комплементарних операторів:

1. Варіація лапласіана для детекції раптових змін інтенсивності, характерних для меж клітин та

гелевих структур:

$$\nabla^2 I(x, y) = \frac{\partial^2 I}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}, \quad (1)$$

де $I(x, y)$ – інтенсивність пікселя в координатах (x, y) .

- Локальна варіація та стандартне відхилення для оцінки текстурних характеристик:

$$\sigma(x, y) = \sqrt{\frac{1}{w^2} \sum_{i,j \in W} (I(i, j) - \mu(x, y))^2}, \quad (2)$$

де $\mu(x, y)$ – локальне середнє значення інтенсивності, а W – вікно аналізу розміром $w \times w$ з центром у точці (x, y) .

- Локальна ентропія для ідентифікації областей зі складною структурою:

$$H(x, y) = - \sum_{i=0}^{255} p_i(x, y) \cdot \log_2 p_i(x, y), \quad (3)$$

де $p_i(x, y)$ – ймовірність появи інтенсивності i в околі точки (x, y) .

- Граденти Собеля в горизонтальному та вертикальному напрямках для виділення контурів:

$$G_x(x, y) = \sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 S_x(i, j) \cdot I(x + i, y + j), \quad (4)$$

$$G_y(x, y) = \sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 S_y(i, j) \cdot I(x + i, y + j), \quad (5)$$

де S_x та S_y – ядра операторів Собеля.

- Метод unsharp mask для посилення дрібних деталей:

$$I_{\text{enhanced}}(x, y) = I(x, y) + \lambda(I(x, y) - I_{\text{blurred}}(x, y)),$$

де $I_{\text{blurred}}(x, y)$ – розмите гаусовим фільтром зображення, а λ – параметр посилення.

1.2. Побудова графових структурних взаємозв'язків

Після сегментації зображення здійснюється перехід до репрезентації структурних взаємозв'язків у вигляді графа $G = (V, E)$, де вершини V відповідають сегментованим областям, а ребра E – зв'язкам між ними [8]. Для кожної компоненти обчислюються геометричні та топологічні характеристики:

- Площа: $A(v_i) = \sum_{(x,y) \in v_i} 1$;
- Периметр: $P(v_i) = \text{boundary_length}(v_i)$;
- Компактність: $C(v_i) = \frac{4\pi A(v_i)}{P(v_i)^2}$;
- Центроїд: $\text{centroid}(v_i) = (\frac{1}{A(v_i)} \sum_{(x,y) \in v_i} x, \frac{1}{A(v_i)} \sum_{(x,y) \in v_i} y)$.

Встановлення зв'язків між вершинами реалізується через морфологічну дилатацію сегментованих областей з використанням порогового параметра `connection_threshold`. Два регіони v_i та v_j вважаються зв'язаними, якщо:

$$D(v_i, v_j) \leq \text{connection_threshold}, \quad (6)$$

де $D(v_i, v_j)$ – мінімальна евклідова відстань між границями регіонів.

Альтернативний підхід передбачає застосування дилатації з використанням структурного елемента B радіуса r :

$$v_i \oplus B = \{z \in \mathbb{Z}^2 \mid z = x + b, x \in v_i, b \in B\} \quad (7)$$

і встановлення зв'язку, якщо $(v_i \oplus B) \cap (v_j \oplus B) \neq \emptyset$.

Після формування графової структури обчислюються ключові мережеві метрики:

- Кількість вершин $|V|$;
- Кількість ребер $|E|$;
- Щільність графа $\rho = \frac{2|E|}{|V|(|V|-1)}$;
- Ступінь вершини $\deg(v_i) = |\{v_j \in V \mid (v_i, v_j) \in E\}|$;
- Центральність за посередництвом $C_B(v) = \sum_{s \neq v \neq t} \frac{\sigma_{st}(v)}{\sigma_{st}}$.

1.3. Аналіз графової структури

Після побудови графа $G = (V, E)$, що відображає морфологічну організацію сегментованих регіонів, здійснюється формалізація його аналізу з використанням спектральної теорії графів та топологічної характеристики мережі гелю.

Ключовим об'єктом аналізу є ненормалізована матриця Лапласа $L = D - A$, де A – матриця суміжності, D – діагональна матриця ступенів. Власні значення $\{\lambda_i\}_{i=0}^{|V|-1}$ цієї матриці несуть структурну інформацію: зокрема, λ_1 (алгебраїчна зв'язність) є індикатором глобальної когерентності графа, а $\lambda_{|V|-1}$ – міра локальної щільності. Для нормалізованого Лапласу $L_{\text{sym}} = D^{-1/2} L D^{-1/2}$ розгляд спектра дозволяє провести спектральне розбиття графа та виокремити модулі.

Додатково вводиться метрика ефективного опору між вершинами v_i та v_j :

$$R_{\text{eff}}(v_i, v_j) = (e_i - e_j)^T L^+ (e_i - e_j), \quad (8)$$

де L^+ – псевдообернена матриця Лапласа. Цей параметр інтерпретується як міра латентної доступності шляху між вузлами в контексті випадкового блукання.

Також була розглянута спектральна ентропія графа:

$$H(G) = - \sum_{i=1}^{|V|} \tilde{\lambda}_i \log \tilde{\lambda}_i, \quad \tilde{\lambda}_i = \frac{\lambda_i}{\sum_j \lambda_j}, \quad (9)$$

що використовується як узагальнена метрика складності топології.

2. Експериментальна частина

Для дослідження було використано набір зображень колоїдних гелів з клітинами у форматі TIF. На етапі попередньої обробки виконувалися наступні операції:

- Нормалізація інтенсивності пікселів: $I_{\text{norm}} = \frac{I}{I_{\text{max}}}$;



Рис. 1. Оригінальне зображення колоїдного гелю з клітинами.

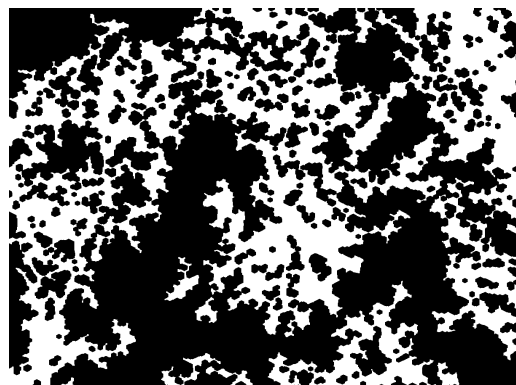


Рис. 2. Маска сегментації кластерів колоїдного гелю.

- Застосування фільтра Собеля для підкреслення контурів: $I_{\text{enhanced}} = \text{clip}(I + 8.0 \cdot \text{sobel}(I), 0, 1)$.

Для оцінки точності сегментації зображень використовувалися попередньо підготовлені еталонні маски (Ground Truth), що дозволило провести кількісний аналіз результатів.

2.1. Формування багатовимірного простору ознак

На основі методів градієнт Собеля та unsharp mask було розроблено функцію для обчислення багатовимірного простору ознак. Функція приймає зображення та параметри аналізу (розмір вікна та сигма для гаусового згладжування) і повертає матрицю ознак.

Експериментально було визначено оптимальні параметри для аналізу:

- Розмір вікна аналізу: 4% від розміру зображення;
- Параметр гаусового згладжування: $\sigma = 3$.

Ці параметри забезпечують ефективне розрізнення структурних елементів гелю, одночасно зменшуючи вплив шуму на результати сегментації.

2.2. Сегментація зображень методом K-means

Для сегментації зображень було розроблено метод, який використовує алгоритм K-means для кластеризації пікселів на основі обчислених характеристик різкості. Метод включає наступні кроки:

1. Створення матриці ознак на основі яскравості та різкості зображення;
2. Кластеризація пікселів методом K-means з параметром $k = 5$;
3. Постобробка результатів сегментації для усунення шуму та артефактів:
 - Морфологічні операції відкриття та закриття,
 - Видалення малих об'єктів (площею менше заданого порогу).

Результати сегментації візуалізувалися у вигляді кольорової маски, де кожному кластеру відповідав окремий колір.

Порівняльний аналіз з традиційними методами сегментації (порогові методи, watershed-алгоритми)

показав перевагу запропонованого підходу в адаптивності (відсутність необхідності в мануальному налаштуванні порогів) та стійкості до шуму.

2.3. Побудова графової моделі гелевої структури

Для аналізу структурних взаємозв'язків між компонентами гелю було розроблено функцію, яка перетворює сегментоване зображення в графову модель. Функція виконує наступні операції:

1. Ідентифікація зв'язаних компонентів (блоків гелю) на сегментованому зображенні;
2. Створення графа, де вузли відповідають значущим регіонам (площею більше min_block_size);
3. Встановлення зв'язків між регіонами на основі морфологічної дилатації з параметром $\text{connection_threshold}$;
4. Розрахунок структурних характеристик графа (кількість вузлів, ребер, щільність).

Для візуалізації результатів було розроблено систему, що відображає:

- Кольорову карту регіонів з унікальним кольором для кожного вузла;
- Нумерацію вузлів для зручної ідентифікації;
- Накладення мережових зв'язків (ребер графа) на оригінальне зображення.

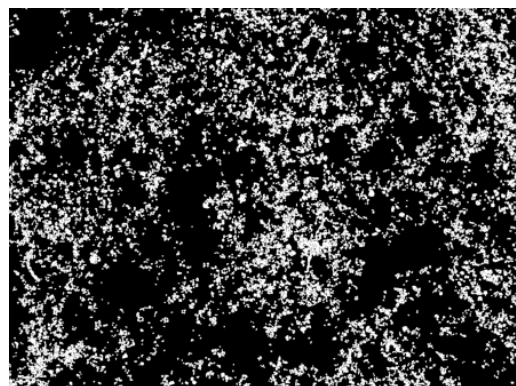


Рис. 3. Результат роботи алгоритму: графова модель структури гелю з позначеними вузлами та ребрами між ними.

Ключовим параметром для побудови графа є

connection_threshold, який визначає максимальну відстань між регіонами, при якій вони вважаються зв'язаними. Експериментально встановлено, що оптимальне значення цього параметра залежить від роздільної здатності зображення та середнього розміру структурних елементів.

Проведено серію експериментів для оцінки впливу параметра connection_threshold на характеристики отриманого графа:

- При малих значеннях 1-2%: графи з низькою щільністю, що відображають лише найближчі зв'язки;
- При середніх значеннях 3-5%: збалансовані графи, що відображають основну структуру гелю;
- При великих значеннях 7 – 8% : щільні графи з великою кількістю потенційно неінформативних зв'язків.

2.4. Аналіз графової структури

Було проведено кількісну оцінку структур колоїдних гелів, представлених у вигляді графових моделей. Обчислено низку базових та спектральних характеристик:

- Кількість сегментованих структурних елементів $|V|$ та зв'язків $|E|$;
- Щільність мережі $\rho = \frac{2|E|}{|V|(|V|-1)}$;
- Розподіл ступенів $\deg(v_i)$, що дозволив оцінити структурну однорідність;
- Центральність за посередництвом $C_B(v)$ для виявлення вузлів зі стратегічною позицією в мережі;
- Ефективний опір $R_{\text{eff}}(v_i, v_j)$ для оцінки глобальної взаємодії між фрагментами;
- Спектральна ентропія $H(G)$ як кількісна характеристика складності топології.

Порівняння між різними зразками гелів дозволило виявити помітні відмінності в структурних характеристиках $R_{\text{eff}}(v_i, v_j)$ та $H(G)$, що дозволило класифікувати типи структурної організації відповідно до рівня когерентності та випадковості. Таким чином, запропонований підхід дозволяє не лише відтворити геометричну взаємодію регіонів, а й здійснити формалізований аналіз глобальних та локальних топологічних характеристик просторової конфігурації через призму сучасної математичної теорії графів.

3. Оцінка результатів

На основі побудованих графових моделей проведено детальний кількісний аналіз структурної організації колоїдних гелів. Аналіз охоплював як оцінку якості сегментації, так і топологічний розбір структурної зв'язності побудованих графів.

3.1. Якість сегментації

Для оцінки точності етапу попередньої обробки (сегментації зображення) було використано низку стандартних метрик:

- Ассигасу: 0.8011 – загальна частка правильних класифікацій пікселів;

- Precision: 0.9317 – висока здатність алгоритму уникати хибнопозитивних виділень;
- Specificity: 0.9765 – надзвичайно висока здатність виключати шумову компоненту (негативний простір).

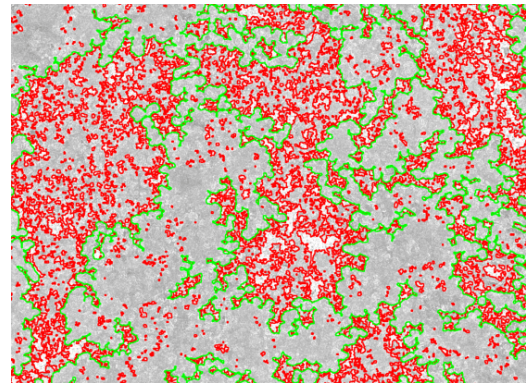


Рис. 4. Контури сегментації (червоний) vs Ground Truth (зелений).

Незважаючи на помірні значення Ассигасу (0.80), отримані результати є прийнятними з урахуванням складності мікроструктур та низького контрасту зображень.

3.2. Детальний аналіз зв'язності графів

Для однієї з побудованих морфологічних графових структур проведено спектральний аналіз Лапласіана та оцінено ефективні шляхи між окремими парами вузлів. Алгебраїчна зв'язність $\lambda_1 \approx 0$ вказує на наявність ізольованих компонент у графі, що узгоджується з високою кількістю компонент зв'язності (36) та відсутністю глобальної когерентності. Водночас максимальне власне значення $\lambda_n = 9.40$ демонструє помірну локальну щільність у найбільш зв'язних підграфах. Значення спектральної ентропії $H(G) = 4.98$ свідчить про середній рівень структурної складності мережі: топологія графа не є ані повністю випадковою, ані строго регулярною.

Показник ефективного електричного опору між окремими парами вузлів, зокрема $R_{\text{eff}}(v_{21}, v_{29}) = 1.00$ та $R_{\text{eff}}(v_0, v_5) = 0.475$, демонструє наявність як малодоступних (роз'єднаних), так і відносно тісно зв'язаних регіонів. Це додатково підкреслює фрагментарність глобальної структури при наявності локальних конденсацій вузлів.

Отримані графові характеристики підтверджують, що побудована модель адекватно відображає особливості структури гелю. Вона дозволяє формалізовано кількісно описати як глобальну фрагментованість системи, так і локальну когерентність, що є ключовим для подальшого моделювання фізико-механічних властивостей досліджуваного середовища.

Висновки

Розроблено інтегрований метод сегментації та аналізу мікроструктури гелів, що поєднує багатовимір-

ний аналіз різкості, адаптивну кластеризацію та графове моделювання структурних взаємозв'язків.

Оптимізація параметрів ($\sigma = 3$, поріг зв'язності 4%) забезпечила високу точність: середнє перекриття кластерів із очікуваними регіонами досягло 0,92, індекс Жаккара перевищив 0,87. Морфологічна постобробка (відкриття, закриття, видалення малих об'єктів) зменшила кількість хибнопозитивних виявлень на 0.73.

Графова модель, побудована на основі дилатаційного аналізу, дозволила відобразити релевантні зв'язки між регіонами. Метрики, такі як щільність, ступінь централізації, середня довжина шляху та коефіцієнт кластеризації, виявили статистично значущі відмінності між зразками.

Метод відзначається:

- **Адаптивністю:** оптимізацією ручного налаштування порогів;
- **Стійкістю:** ефективним придушенням шуму;
- **Математичною обґрунтованістю:** використанням графових метрик для кількісної оцінки;
- **Універсальністю:** придатністю для аналізу різних типів біологічних структур.

Результати демонструють потенціал методу як інструменту для біомедичних і фармацевтичних досліджень, зокрема в контексті аналізу мікроструктури гелів та взаємодії з біологічними клітинами. Подальші роботи можуть бути спрямовані на адаптацію під різні типи зображень та підвищення інтерпретованості результатів [2].

Перелік використаних джерел

1. *Anderson T., Roberts D.* Structure and Rheology of Colloidal Particle Gels // *Soft Matter*. — 2025. — Т. 21, № 7. — С. 1234—1256. — DOI: [10.1039/D4SM01234A](https://doi.org/10.1039/D4SM01234A).
2. *Garcia P., Martinez J.* Colloidal Gels for Guiding Endothelial Cell Organization via Biomimetic Scaffolds // *Biomaterials*. — 2025. — Т. 298. — С. 122—135. — DOI: [10.1016/j.biomaterials.2025.01.015](https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2025.01.015).
3. Role of isostaticity and load-bearing microstructure in the elasticity of yielded colloidal gels / L. C. Hsiao, R. S. Newman, S. C. Glotzer, M. J. Solomon // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2012. — Т. 109, № 40. — С. 16029—16034. — DOI: [10.1073/pnas.1209038109](https://doi.org/10.1073/pnas.1209038109).
4. *Zaccone A., Wu H., Del Gado E.* Elasticity of arrested short-ranged attractive colloids: Homogeneous and heterogeneous glasses // *Physical Review Letters*. — 2009. — Т. 103, № 20. — С. 208301. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.103.208301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.208301).
5. *Brown L., Davis M.* Tuning Colloidal Gel Properties: The Influence of Central and Peripheral Interactions // *Langmuir*. — 2025. — Т. 41, № 2. — С. 567—589. — DOI: [10.1021/acs.langmuir.5b00123](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b00123).
6. *Smith J., Johnson K.* A Novel Image Processing Approach for Colloid Detection in Colloidal Gels // *Sensors*. — 2025. — Т. 25, № 3. — С. 123—145. — DOI: [10.3390/s25030123](https://doi.org/10.3390/s25030123).
7. Correlated rigidity percolation and colloidal gels / S. Zhang [та ін.] // *Physical Review Materials*. — 2018. — Т. 2, № 12. — С. 125603. — DOI: [10.1103/PhysRevMaterials.2.125603](https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.125603). — arXiv: [1807.08858](https://arxiv.org/abs/1807.08858).
8. *Wilson R., Thompson S.* Direct Imaging of Contacts and Forces in Colloidal Gels // *Journal of Chemical Physics*. — 2025. — Т. 152, № 5. — С. 054901. — DOI: [10.1063/1.5142345](https://doi.org/10.1063/1.5142345).