

Московский Государственный университет имени М.В. Ломоносова

На правах рукописи

Лаврухин Ефим Валерьевич

**Математические методы обработки изображений
пористых сред при отсутствии размеченных данных**

Специальность 1.2.2 —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Измаилов Алексей Феридович

Москва — 2024

Оглавление

Стр.

Введение	5
Глава 1. Пористые среды	12
1.1 Определение пористой среды	13
1.2 Данные для моделирования пористых сред	15
1.3 Статистическое описание пористых сред	17
1.4 Выводы	24
Глава 2. Кластеризация изображений пористых сред в пространстве дескрипторов на основе корреляционных функций	26
2.1 Алгоритм кластеризации бинарных изображений пористых сред в векторном пространстве малой размерности	29
2.1.1 Признаковые дескрипторы бинарного изображению	30
2.1.2 Аппроксимация с помощью базисных функций	32
2.1.3 Исправление коллизий в пространстве параметров	34
2.1.4 Кластеризация изображений пористых сред в пространстве дескрипторов	36
2.2 Эксперименты и результаты	37
2.2.1 Исследуемые образцы	37
2.2.2 Анализ качества аппроксимации	38
2.2.3 Кластерный анализ	41
2.3 Выводы	48
Глава 3. Выделение однородных областей на изображениях пористых сред	50
3.1 Разбиение изображения пористой среды на однородные зоны	52
3.1.1 Разбиение изображения на фрагменты	54
3.1.2 Векторное представление фрагментов изображения	57
3.1.3 Условия однородности изображения	59
3.1.4 Вычисление пороговых значений расстояния	60
3.1.5 Алгоритм	64
3.2 Эксперименты и результаты	66

3.3	Выводы	75
Глава 4. Сегментация КТ-изображений пористых сред 77		
4.1	Методы сегментации изображений пористых сред	79
4.1.1	Сегментация с помощью сверточных нейронных сетей . . .	82
4.2	Метрики качества сегментации изображений пористых сред . . .	85
4.2.1	Попиксельные метрики	86
4.2.2	Метрики сегментации	86
4.2.3	Моделирование в масштабе пор	90
4.2.4	Метрики на основе структурных дескрипторов	92
4.3	Эксперименты и результаты	93
4.3.1	Образцы породы: КТ и разметка	93
4.3.2	Обучение нейросетевых моделей	95
4.3.3	Оценка качества сегментации	98
4.4	Выводы	104
Глава 5. Построение синтетического КТ сегментированного изображения пористой среды 106		
5.1	Синтетическая томография	107
5.1.1	Модель компьютерного томографа	107
5.1.2	Численный метод построения синтетического КТ	110
5.2	Эксперименты и результаты	114
5.2.1	Примеры работы алгоритма синтетической томографии . . .	114
5.2.2	Сравнение синтетического и реального КТ	117
5.2.3	Построение универсальной модели сегментации пористых сред	120
5.2.4	Анализ влияния морфологических свойств входных данных на качество сегментации с помощью сверточной нейронной сети	123
5.3	Выводы	126
Глава 6. Программный комплекс для первичного анализа КТ-изображений пористых сред 128		
6.1	Программный модуль «Анализ пустотного пространства»	129

	Стр.
6.1.1 Модификация метода выделения однородных зон	129
6.1.2 Программная реализация	131
6.2 Программный модуль «Сегментация томографических изображений»	132
6.3 Программный модуль «Синтетическая томография»	133
6.3.1 Алгоритм расчета прямой проекции	135
6.3.2 Расчет обратной проекции	136
6.3.3 Производительность	137
Заключение	139
Список литературы	140
Список рисунков	160
Список таблиц	169

Введение

Пористой средой или пористым материалом называют твердое тело, имеющее внутри себя значительную объемную долю свободного пространства. Пористые среды широко встречаются в различных прикладных областях человеческой деятельности, таких как нефтяная, гидрологическая и экологическая инженерия, пищевая промышленность и многих других приложениях. Для повышения эффективности прикладных процессов необходимо моделировать различные физические свойства пористых сред. Такое моделирование невозможно без знаний о морфологии свободного пространства исследуемой пористой среды.

До появления компьютерной томографии в области моделирования пористых сред преобладали статистические методы. С развитием технологий неразрушающего получения информации о внутреннем строении пористых сред появилась возможность широко использовать значительно более точные прямые методы моделирования в масштабе пор. Это привело к появлению различных способов моделирования, таких как прямое моделирование с использованием воксельной модели или моделирование с использованием поровых сетей (pore network), с помощью которых стало возможным эффективно получить множество физических свойств, в том числе транспортные характеристики, по двух- или трехмерному изображению пористой среды.

Первоочередной задачей для реализации подхода прямого моделирования, независимо от используемой методологии, является получение некоторой первичной экспериментальной структурной информации об исследуемом объекте по снимку этого объекта, сделанного с помощью одной из доступных технологий (например, растровой электронной микроскопии, компьютерной томографии или другой). Таким образом, в области моделирования пористых сред необходимо решать множество задач по обработке изображений различных пространственных масштабов: от классификации и категоризации 3-D изображений целого образца керна или почвы до сегментации на фазы или однородные зоны изображений микро-КТ.

Данная работа посвящена решению задач категоризации и сегментации изображений пористых сред в различных постановках. Основной акцент в работе сделан не на количественных улучшениях метрик исследуемых методов и

подходов, а на решении проблем с обучающими данными, которые возникают в конкретной доменной области, а именно: отсутствие размеченных обучающих данных, большая сложность и низкая точность разметки, маленький объем выборок. Небольшое количество доступных данных обусловлено трудоемкостью процедуры извлечения образцов и их съемки. Проблемы с разметкой вызваны наличием эффекта частичного объема (*partial volume effect*) в вокселях изображения, трехмерным “контекстом” разметки и артефактами, которые вносит на изображение процесс съемки — все это делает точную ручную разметку сложновыполнимой задачей. В случае разделения изображения на однородные зоны сделать ручную разметку практически невозможно из-за субъективной природы этой задачи. Перечисленные особенности работы с изображениями пористых сред делают тему данного исследования особенно актуальной.

Задача сегментации КТ изображений пористых сред является актуальной с момента появления технологии неразрушающего получения информации о внутренней структуре пористой среды в начале 1980-х. На текущий момент предложено множество методов сегментации, которые можно условно разделить на четыре категории: ручная сегментация, сегментация с помощью глобального порогового значения, локальные пороговые методы и другие подходы, которые включают в себя машинное обучение и, в частности, алгоритмы обучения без учителя. Несмотря на обилие методов сегментации и некоторых вспомогательных методов обработки изображений, таких как фильтрация, ни одна из существующих методологий не может претендовать на то, чтобы обеспечить универсальные и достаточно точные результаты. Широко признано, что ручные и глобальные методы пороговой обработки уступают методам локальной пороговой обработки, которые, в свою очередь, страдают от необходимости выбирать доверительные пороговые значения, а автоматический выбор порогов не обязательно дает адекватные результаты. Результаты методов без участия оператора ненадежны в смысле количества фаз и точности. Исследования в этой области показывают, что человек-оператор выполняет сегментацию намного лучше, чем любой автоматический алгоритм пороговой обработки.

В настоящее время появилось множество работ, посвященных сегментации пористых сред с помощью сверточных нейронных сетей, которые демонстрируют значимое превосходство данного подхода по сравнению с методами без учителя (*unsupervised learning*), но на заранее размеченном оператором наборе данных. Из-за этого невозможно в полной мере воспользоваться пре-

имуществом нейросетевого подхода на практике, поскольку обученные модели становятся малоприменимыми при смещении распределения тестовых данных вследствие изменения условий КТ-съемки: смены модели или настроек томографа, использования дополнительных фильтров, отличия химического состава тренировочных и тестовых образцов и других причин.

Задача разделения изображения пористой среды на однородные зоны является сравнительно новой. На текущий момент существует небольшое количество работ, в которых исследуется возможность такого разделения на основе признаков представлений, полученных с помощью расчета различных статистических характеристик пористой среды. При этом в предметной области не существует общепринятых количественных или качественных способов оценки результатов решения данной задачи, поэтому прямое сравнение различных подходов является затруднительным.

Целью данной работы является разработка и исследование методов первичной обработки изображений пористых сред на основе машинного обучения и, в частности, сверточных нейронных сетей при отсутствии обучающих данных, с последующей реализацией предложенных методов в виде применимых на практике решений.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать методику оценки качества сегментации, специфичную для исследуемой предметной области моделирования пористых сред.
2. Исследовать различные способы построения моделей нейронных сетей для решения задачи сегментации пористых сред.
3. Разработать алгоритмы построения искусственных обучающих выборок, достаточно точно имитирующих морфологические и статистические свойства различных видов пористых сред.
4. Исследовать влияние морфологических свойств изображений пористых сред на качество их сегментации.

Научная новизна:

1. Предложена модификация метода сжатия структурной информации пористых сред с помощью аппроксимации значений набора корреляционных функций.
2. Разработан метод разделения изображения пористой среды на однородные зоны, который использует в качестве признакового представления

- фрагментов изображения векторы корреляционных функций, рассчитанных по ортогональным направлениям.
3. Было выполнено исследование возможности обучения нейронных сетей для задачи сегментации почв на обучающей выборке, полученной с помощью локальных алгоритмов сегментации без учителя.
 4. Описан перспективный способ построения универсальной модели сегментации пористых сред при помощи итеративного обучения сверточной нейронной сети на выборках, состоящих из синтетических КТ-изображений.
 5. С помощью алгоритма построения синтетических КТ-изображений пористых сред было проведено исследование влияния морфологии входных данных на качество сегментации посредством предобученной модели сверточной нейронной сети.

Практическая значимость состоит в том, что разработаны новые и модифицированы существующие методы обработки изображений пористых сред. Данные методы не требуют для работы наличие обучающих данных, либо сами предназначены для создания обучающих выборок. Полученные и описанные в работе методы и алгоритмы были протестированы на наборах искусственных и реальных данных. Основные методы, описанные в работе, были реализованы в виде программного комплекса, который используется специалистами для решения прикладных задач моделирования течений в пористых средах.

Методология и методы исследования. Основными используемыми методами являются методы математического моделирования в обработке изображений. Вычислительные эксперименты реализованы в рамках задач машинного обучения и анализа данных. Для получения оптимальных наборов параметров моделей используются численные методы оптимизации. Для вычисления прямого и обратного преобразования Радона, а так же для моделирования проницаемости по воксельной модели пористой среды используются численные методы. Также в работе используются методы вероятностного моделирования.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Численный метод сжатия структурной информации, извлеченной из изображения пористой среды с помощью расчета пространственных корреляционных функций по ортогональным направлениям.

2. Метод сегментации изображений пористых сред с использованием модели сверточной нейронной сети, обученной на данных, размеченных с использованием оператором алгоритмов сегментации без учителя.
3. Модификация математической модели томографа, использующая информацию о пространственном распределении фаз исследуемого образца пористой среды и о физико-химических свойствах этих фаз для построения синтетического КТ-изображения.
4. Программный комплекс для первичного анализа трехмерных КТ-изображений пористых сред, который позволяет выделять на КТ-изображении однородные зоны, сегментировать КТ-изображение на несколько минеральных фаз и настраивать параметры модели сегментации по данным синтетической компьютерной томографии.

Достоверность полученных результатов обеспечивается детально описанными и опубликованными алгоритмами, методами и исследованиями, результаты которых при желании могут быть воспроизведены. Результаты исследований согласуются с результатами, полученными другими авторами в соответствующей предметной области.

Апробация работы.

Основные результаты, которые были получены в ходе данной работы, докладывались на следующих конференциях:

1. ГеоЕвразия-2018 (Россия, Москва, 5-8 февраля 2018);
2. Пятая Международная научная конференция “Практическая микротомография” (Россия, Москва, 7-9 ноября 2018);
3. Восьмая Всероссийская конференция с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Россия, ИПРИМ РАН, 18-19 декабря 2018);
4. ГеоЕвразия-2019 (Россия, Москва, 4-7 февраля 2019);
5. European Geosciences Union General Assembly (Австрия, Вена, 3-8 мая 2020).
6. Тихоновские чтения 2023 (Москва, 30 октября - 3 ноября 2023).

Личный вклад. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором под научным руководством д.ф.-м.н., проф. А.Ф. Измаилова. Анализ полученных результатов проводился автором с помощью соавторов, при этом вклад автора был определяющим. В работе [1] автором была разработана и реализован численный алгоритм сжатия структурной информации, извле-

ченной из изображения пористой среды, автором было проведено исследование качества дескрипторов, полученных с помощью разработанного алгоритма, на модельной задаче категоризации трехмерных изображений пористых сред. В работе [2] автор предложил алгоритм получения обучающей выборки для задачи сегментации изображений почв, реализовал алгоритм обучения модели сверточной нейронной сети, провел исследование качества обученной модели в зависимости от размера обучающей выборки, исследовал согласованность классических и доменных метрик сегментации. В работе [3] автор разработал модификацию математической модели синтетического томографа, использующую информацию о пространственном распределении фаз образца и их физико-химическим свойства, реализовал численный метод построения синтетического изображения КТ, предложенный алгоритм был использован автором для проведения исследования влияния морфологических свойств обучающих данных на качество сегментации с помощью предобученной модели сверточной нейронной сети. В работе [4] автор разработал и реализовал алгоритм разбиения бинарного изображения пористой среды на однородные зоны, предложил эмпирические критерии однородности изображения, автором было проведено исследование данного алгоритма на наборе синтетических и реальных данных.

Соавторы внесли значимый вклад в написание и редактуру текстов, а также его перевод на английский язык. В работе [1] соавторы подготовили реальные данные КТ почв и произвели расчет корреляционных функций. В работе [2] соавторы подготовили реальные данные КТ почв, рассчитали корреляционные функции и метрики на основе проницаемости для разметки и сегментаций, полученных с помощью обученных нейросетевых моделей. В работе [3] соавтор произвел итеративную синтетическую реконструкцию исходных образцов. В работе [4] соавторы предоставили наборы искусственных и реальных данных для тестирования алгоритма.

Публикации.

Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях, из них [1–4] в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection, Scopus и РИНЦ, в том числе 3 статьи в журналах, входящих в Q1 [1; 2; 4]; 5 работ [5–9] опубликованы в прочих изданиях; зарегистрировано 2 программы для ЭВМ [10; 11].

Диссертационная работа была выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований №20-31-90118\20 и грантов

Российского научного фонда №19-74-10070, №23-74-0006. Разработка программного комплекса, функционал и возможности которого были описаны в данной работе в главе 6, велась в рамках совместного НИОКР компаний «Иннопрактика» и ПАО «НК «Роснефть»». ПАО «НК «Роснефть»» является правообладателем данного программного комплекса.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и 0 приложений. Полный объем диссертации составляет 169 страниц, включая 39 рисунков и 7 таблиц. Список литературы содержит 187 наименований.

Глава 1. Пористые среды

Данная глава будет посвящена знакомству с основными понятиями и определениями, необходимыми для работы с такими объектами, как пористые среды, и которые будут использоваться в следующих главах данной работы. Пористая среда в широком смысле — это материал, вещество или материальный объект с значительным поровым пространством. Значительность порового пространства определяется с точки зрения физических свойств данного объекта, таких как, например, проницаемость и фильтрационные характеристики.

Существует множество примеров пористых сред из материального мира: породы-коллекторы полезных ископаемых в различных масштабах (от микрообразцов керна до масштаба месторождения), почва, искусственные пористые материалы (использующиеся, например, в различных фильтрах и мембранах), пищевые продукты и многие другие. По приведенным примерам понятно, что моделирование физических свойств пористых сред находит практическое применение в широком наборе приложений: добыча полезных ископаемых, пищевая промышленность, машиностроение. Недавно стала актуальна проблема утилизации углекислого газа, одно из возможных решений данной проблемы — это депонирование CO_2 в естественные подземные резервуары. При моделировании такого процесса так же необходимо моделирование динамики движения флюида в пористых средах.

Нужно отдельно пояснить, что термин “пористая среда” может употребляться для обозначения следующих объектов:

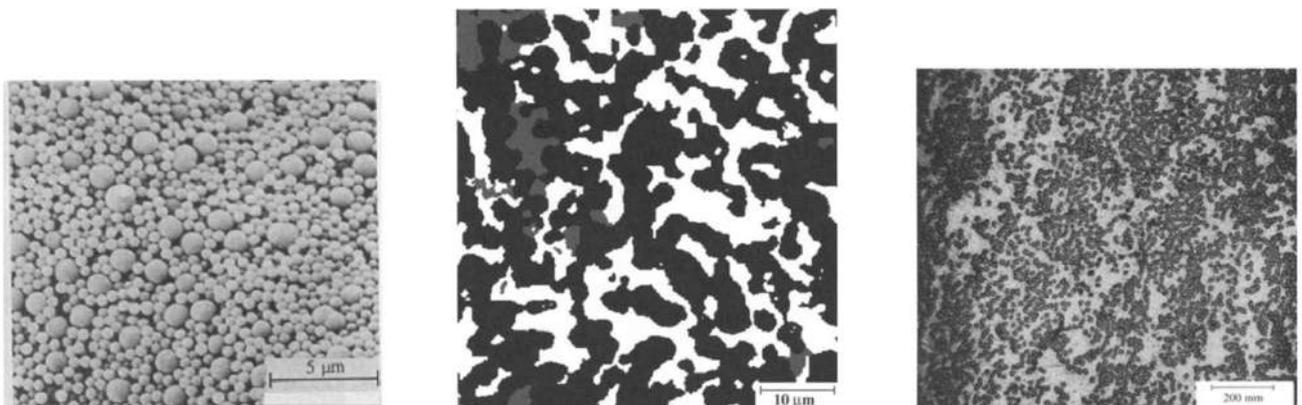


Рисунок 1.1 — Пример изображений пористых сред, снятых на различном масштабе (из книги [12]).

- Непосредственно материальный объект: образец керна, почвы или пористого материала;
- Пористая среда как конечное или бесконечное изображение U ;
- Статистическая модель пористой среды, которая определяет некоторое вероятностное распределение $P(U)$ над всеми возможными для данной модели реализациями изображений U .

В тексте работы перед термином “пористая среда” может опускаться слово “изображение”. О каком именно объекте идет речь должно быть понятно из контекста. В данной работе рассматриваются главным образом изображения пористых сред и задачи, которые возникают при их обработке.

Сейчас не вызывает сомнений, что проницаемость и фильтрационные характеристики пористой среды определяется в первую очередь морфологическими и количественными свойствами порового пространства. Информация о морфологических свойствах пустотного пространства содержится в изображении пористой среды, поэтому задачи, связанные с обработкой таких изображений являются актуальными.

1.1 Определение пористой среды

Когда речь идет про изображение пористой среды (как реализация некоторого процесса генерации либо как снимок материального объекта), можно формально задать такое изображение в виде функции:

$$U : U(x) = y, \quad (1.1)$$

где x — это координата, ее размерность и тип зависит от размерности исследуемого объекта, y — это множество возможных значений изображения. Для изображений пористых сред возможно несколько вариантов области определения:

- Дискретная равномерная ограниченная прямоугольная координатная сетка;
- Конечный прямоугольный параллелепипед;
- Бесконечное изображение, $x \in \mathbb{R}^{2(3)}$.

Можно выделить несколько типов изображений пористых сред в зависимости от множества возможных значений y :

1. $U^a : y \in \mathbb{R}$ — это наиболее общий вариант, может использоваться в теоретических исследованиях, но мало применим на практике, остальные варианты являются его частными случаями. В качестве реального примера такого изображения можно привести *необработанное* изображение пористой среды, полученное с помощью метода компьютерной томографии: оно имеет диапазон значений $[0, +\infty)$, т.е. по сути принадлежит данному случаю;
2. $U^g : y \in \{0, 1, \dots, 255\}$ — это отображение в градациях серого (grayscale). Мы рассматриваем его отдельно, потому что, как правило, именно в таком виде предоставляются *обработанные* данные КТ;
3. $U^c : y \in C, C = \{0, \dots, N - 1\}$ — это отображение, содержащее N различных фаз. Самым каноничным пример — это двухфазная пористая среда, где фазами являются твердое вещество и поровое пространство. Количество фаз N для изображений такого типа, как правило, лежит в границах $2 \leq N \ll 255$. Левая часть неравенства не выполняется только в тривиальных случаях. Правую часть неравенства нужно понимать в смысле “много меньше”, и она, на самом деле, не является необходимой, но как правило выполняется, потому что обычно изображения U^c являются результатом применения к исходному изображению в градациях серого U^g алгоритмов классификации/сегментации, которые объединяют пиксели/воксели в относительно небольшое число классов/фаз.

Далее условимся, что если не оговаривается иное, то мы рассматриваем пористые среды (изображения) со следующими ограничениями:

- С дискретными координатами: в таком случае вектор x определяется тройкой (или двойкой в двумерном случае) натуральных чисел-координат $x = (i, j, k)$;
- С множеством определения функции, которое задается конечным прямоугольным параллелепипедом, т.е. исходное отображение U можно представить в виде двух- или трехмерного тензора с размерами H, W, D вдоль соответствующих осей.

Данные ограничения не являются строго необходимыми для анализа моделей в теоретическом смысле, но являются целесообразными с точки зрения,

во-первых, объема вычислений, и, во-вторых, структуры реальных наблюдаемых данных (КТ, SEM или другие методы предоставляют информацию о пористой среде в виде 2D- или 3D-изображения, которые удовлетворяют описанным выше ограничениям).

Так же в данной работе рассматриваются, в основном, двухфазные пористые среды U^c , для которых не теряя общности можно положить множество фаз (классов) $C = \{0, 1\}$, где 0 — это фаза твердого вещества, а 1 — фаза порового пространства. Такие значения удобны, например, с точки зрения программирования вычисления корреляционных функций. Данные ограничения позволяют сузить класс рассматриваемых функций (тензоров), а так же существенно упростить выкладки и запись формул.

В случае, когда пористая среда состоит из большого количества фаз ($N > 2$), удобно пользоваться индикаторной функцией I_ω относительно конкретной фазы ω , область определения которой совпадает с областью определения исходного изображения U^c , при этом I_ω принимает следующие значения:

$$I_\omega(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } U^c(x) \neq \omega, \\ 1, & \text{если } U^c(x) = \omega. \end{cases} \quad (1.2)$$

1.2 Данные для моделирования пористых сред

Для построения модели пористой среды необходимо решить основную проблему: каким-то образом получить информацию о её внутреннем строении на необходимом для исследования масштабе. Решить эту проблему можно двумя основными способами:

1. Построить некоторую статистическую модель совокупности исследуемых объектов;
2. Получить информацию о существующем предмете инвазивным или неинвазивным способом.

Предметом исследования в данной работе являются, в основном, частные случаи пористых сред: геологические породы и почвы. Для таких пористых сред получение информации инвазивным способом (т.е., возможно, с разрушением исследуемого образца) является достаточно сложным процессом, потому что

необходимы данные на уровне различных масштабов — от полноразмерного образца до микромасштаба (поскольку показано, что на физические свойства для многих пористых сред оказывает влияние как микро-, так и нано-пористость). При этом до изобретения компьютерной томографии (первая половина 1980-х годов) и начала ее массового использования не существовало подходящих неинвазивных способов, которые могли бы предоставить информацию в необходимом для исследований качестве.

По этой причине исследования статистических моделей пористых сред первоначально получили большой толчок к развитию. Несмотря на то, что в настоящий момент стало возможно получать неразрушающую информацию, и широко используется получение данных о строении пористых сред с помощью КТ или SEM, статистические модели до сих пор играют важную роль в приложениях. С их помощью возможны описание морфологических свойств пустотного пространства, сравнительный анализ различных образцов по полученным характеристикам, стохастические реконструкции новых пористых сред и много другое.

Существуют различные семейства моделей, применимых к пористым средам. Перечислим основные из них, имеющие на текущий момент наибольшее распространение:

1. Статистические характеристики изображений пористых сред: пористость, корреляционные функции, функционалы Минковского и др. [12; 13];
2. Статистические модели пористых сред: пространственные (spatial) случайные процессы [12];
3. Генеративные модели для изображений пористых сред: GAN, VAE и др. [14].

В данной работе основное внимание уделяется первому семейству моделей, поскольку их можно использовать, во-первых, в качестве метрик качества сегментации пористых сред (данный подход будет описан в главе 4 и применен в работе автора [2]), во-вторых, как признаковый дескриптор отдельных изображений (или фрагментов изображений) пористых сред (данный подход описан в главах 2, 3 и применяется в работе автора [1]), и, в-третьих, для оценки различий морфологических свойств образцов пористых сред (подход описан в главе 5 и используется для оценки влияния морфологических различий в тренировочной и тестовой выборке на качество нейросетевого алгоритма сег-

ментации, который, по оценке автора, является основным результатом данной работы, опубликован в [3]).

1.3 Статистическое описание пористых сред

Статистические характеристики можно рассчитывать как для пористых сред, разделенных на фазы, так и для пористых сред с областью значений в градациях серого. Исходная мотивация для использования статистических моделей была следующей: построить некоторую параметризованную модель $\theta(U)$, которая бы позволила предсказывать физические характеристики исходной пористой среды, например, с помощью нахождения зависимости вида:

$$f(\theta(U)) \approx K,$$

где:

K — это некоторая физическая характеристика пористой среды (например, проницаемость);

f — это некоторая функция, которая описывает зависимость между параметрами статистической модели и физическими свойствами исходной пористой среды.

Статистические характеристики пористых сред, а именно пористость и корреляционные функции, будут широко применяться в следующих главах, поэтому ниже будет дано определение этих математических объектов в форме, удобной для применения в рамках данной работы.

Далее будут рассматриваться в том числе вопросы вычислительной сложности расчета статистических характеристик для более трудоемкого случая трехмерных изображений. Для определенности и удобства обозначим символом D размер стороны 3D-изображения, символом L_{max} — максимальную длину корреляции для корреляционных функций (которые будут описаны ниже).

Одной из очевидных статистических характеристик пористой среды является пористость. **Пористость** - это отношение объема пористого пространства к общему объему образца. В двухфазном случае пористость можно посчитать следующим образом:

$$\varphi = \frac{\sum_{x \in V_{U^c}} U^c(x)}{|V_{U^c}|} = \mathbb{E}_{x \in V_{U^c}} U^c(x). \quad (1.3)$$

Для многофазного случая обозначим метку фазы, которая является поровым пространством, как ω_0 . Тогда формула для расчета пористости в многофазном изображении может быть записана следующим образом:

$$\varphi = \mathbb{E}_{x \in V_{U^c}} I_{\omega_0}(x). \quad (1.4)$$

Пористость является достаточно простой характеристикой пористого пространства, значительно влияет на фильтрационные характеристики, и при этом может быть измерена в лаборатории (например, с помощью расчета плотности образца при известном химическом составе, либо с помощью насыщения образца флюидом, в таком случае будет получена т.н. эффективная пористость). Также она просто вычисляется для изображения пористой среды по определению за $O(D^3)$ операций.

Другим популярным инструментом для анализа структуры порового пространства являются **корреляционные функции**. Начнем с определения пористой среды: в классической книге [12] пористая среда U определяется как реализация пространственного (spatial) стохастического процесса $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$, который является статическим, т.е. не зависит от времени. В этом случае пористая среда U является реализацией некоторого случайного события из множества всех элементарных исходов $\omega \in \Omega$, т.е. $U(x) = \xi(x, \omega)$. **Многоточечная корреляционная функция** — это, по сути, функция распределения, рассчитанная для событий некоторого вида для конкретного пространственного случайного процесса. Событиями в данном случае обычно является принадлежность концов (либо всей длины участвующих отрезков) к определенной фазе ω (см. пример на рис. 1.2). Если рассматривать многоточечную корреляционную функцию для N точек для события “принадлежность конца отрезка фазе ω_0 ”, то ее расчетная формула может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} CF_{N\omega_0}(x_1, \dots, x_N) &= P(I_{\omega_0}(x_1) = 1, \dots, I_{\omega_0}(x_N) = 1) \\ &= \mathbb{E}[I_{\omega_0}(x_1) = 1, \dots, I_{\omega_0}(x_N) = 1]. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Для того, чтобы каким-то образом применять корреляционные функции на практике, как правило, необходимы два свойства исследуемой пористой среды:

- *Эргодичность* — в конкретном случае это свойство дает возможность рассчитывать корреляционные функции с помощью усреднения по объему U , вместо усреднения по событиям ω из множества элементарных исходов. Для дискретного случая усреднение проводится по объему V , вместо усреднения среди разных реализаций случайного процесса (которых, как правило, вообще не существует в случае анализа реальных изображений), как, например, в формулах (1.3), (1.4));
- *Изотропия* — обеспечивает инвариантность корреляционных функций относительно сдвига точек (x_1, \dots, x_N) на произвольный вектор x . Наличие изотропии позволяет параметризовать N -точечные корреляционные функции с помощью $N - 1$ векторов. Например, в случае (1.5) можно вместо параметров (x_1, \dots, x_N) использовать $(x_2 - x_1, \dots, x_N - x_1)$.

При работе с изображениями пористых сред на практике для расчета корреляционных функций имеются следующие ограничения:

- Неизвестен случайный процесс, порождающий реализации пористых сред U ;
- Конкретная реализация пористой среды U конечна и задана в дискретных координатах;
- Точный расчет многоточечных корреляционных функций, а также функций с неортогональными направлениями x , затруднен из-за ограниченности вычислительных ресурсов.

Ниже будут приведены расчетные формулы для набора корреляционных функций, использованных в данной работе, учитывая вышеописанные ограничения. Далее в записи формул будет опускаться зависимость корреляционных функций от конкретной реализации пористой среды U^c , по которой идет расчет, так же всегда (если отдельно не оговорено иное) будут рассматриваться двухточечные корреляционные функции для фазы порового пространства, т.е. будут приняты следующие обозначения:

$$CF_{2\omega_1}(r|U^c) = CF(r).$$

В качестве единственного аргумента для двухточечных корреляционных функций будет использоваться переменная r — длина корреляции. Это становится возможным при расчете вдоль конкретного направления из предположения об изотропии пористой среды. Как было написано выше, расчет корреляционных функций по неортогональным осям является вычислительно трудоемким,

поскольку для этого, во-первых, требуется задать сетку по возможным значениям угла $\alpha \in [0, 2\pi]$, т.е. в таком случае потребуется второй аргумент $CF(r, \alpha)$ (что ведет к увеличению на порядки количества хранимой информации), и, во-вторых, такие расчеты были бы очень затратны по времени, поскольку ортогональные направления позволяют эффективно векторизовать вычисления с помощью существующих открытых вычислительных библиотек и фреймворков. Итого, в данной работе будут использоваться корреляционные функции CF , рассчитанные по ортогональным направлениям для двухфазной конечной пористой среды U^c , которая может быть задана в виде тензора с значениями $\{0, 1\}$ принадлежности определенной фазе. Далее введем обозначения: CF^x, CF^y, CF^z — это корреляционная функция CF , рассчитанная по направлениям x, y и z соответственно. В рамках перечисленных ограничений корреляционная функция является вектором размера L_{max} . В случае, когда ось не указывается, имеется в виду CF , усредненная по совокупности ортогональных осей:

$$CF = \frac{CF^x + CF^y}{2}, \text{ если } U \text{ — это 2D-изображение,}$$

$$CF = \frac{CF^x + CF^y + CF^z}{3}, \text{ если } U \text{ — это 3D-изображение.}$$

Перейдем теперь непосредственно к определению корреляционных функций.

Корреляционная функция $\mathbf{S}_2(\mathbf{r})$ определяет долю отрезков длины r , концы которых принадлежат фазе порового пространства. Для двухмерного дискретного случая формулы имеют следующий вид:

$$S_2^x[r] = \frac{\sum_{i,j=1}^{H-r,W} [U^c[i, j] = U^c[i + r, j] = 1]}{W(H - r)}, \quad (1.6)$$

$$S_2^y[r] = \frac{\sum_{i,j=1}^{H,W-r} [U^c[i, j] = U^c[i, j + r] = 1]}{(W - r)H}. \quad (1.7)$$

Формулы для очередной размерности, а так же для трехмерного случая получаются очевидным образом, поэтому здесь и далее будут приводиться формулы для двухмерного случая. Расчет всего вектора значений S_2 для трехмерного изображения по определению занимает $O(D^3 L_{max})$ операций, т.е. имеет место квадратичная зависимость от максимальной длины корреляции. Существует

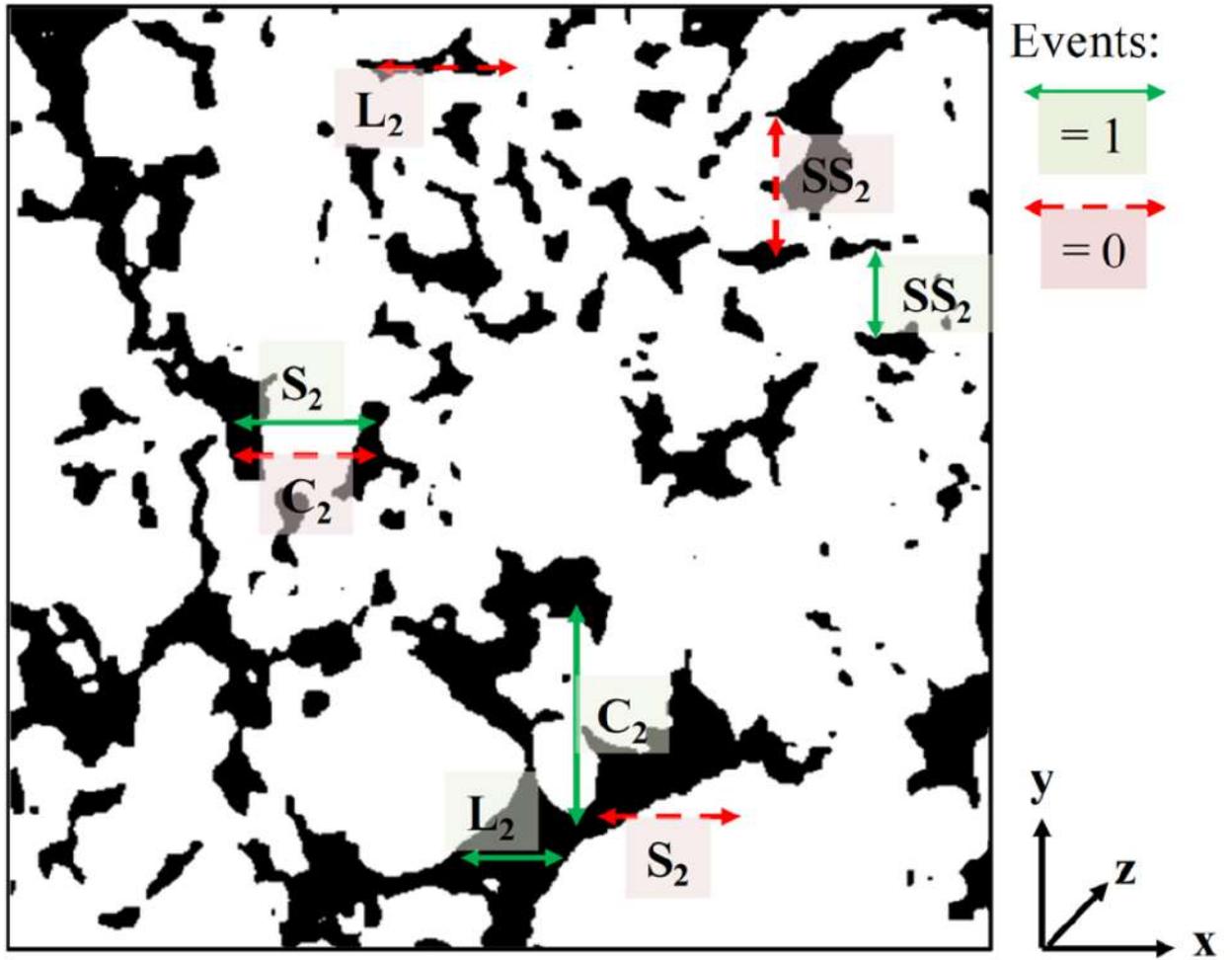


Рисунок 1.2 — Визуализация событий для различных корреляционных функций из [1]. Примеры событий представлены в двух ортогональных направлениях x и y на плоскости, ортогональной оси z . Зеленым показаны позитивные события, красным — негативные.

значительно более быстрый алгоритм расчета за счет сведения вычисления S_2 к умножению полиномов. Для решение этой задачи можно воспользоваться алгоритмом быстрого дискретного преобразованием Фурье (fast fourier transform, FFT, см. [15]), что оптимизирует (кроме случаев больших изображений и очень маленьких длин корреляции, когда выгоднее использовать наивный вариант) асимптотику $O(D^3 \log D)$. Вариант расчетов с помощью FFT является предпочтительным и с точки зрения программной реализации, потому что в открытых вычислительных библиотеках (Pytorch, numpy) существуют высокоэффективные реализации FFT, в том числе на графических ускорителях (GPU).

Корреляционная функция $\mathbf{L}_2(\mathbf{r})$ определяет долю отрезков длины r , которые полностью принадлежат фазе порового пространства. Формула для вычисления корреляционной функции в двумерном дискретном случае име-

ет следующий вид:

$$L_2^x[r] = \frac{\sum_{i,j=1}^{W,H-r} [U^c[i,j] = \dots = U^c[i+r,j] = 1]}{W(H-r)}, \quad (1.8)$$

$$L_2^y[r] = \frac{\sum_{i,j=1}^{W-r,H} [U^c[i,j] = \dots = U^c[i,j+r] = 1]}{(W-r)H}. \quad (1.9)$$

Расчет вектора значений L_2 с помощью определения имеет кубическую сложность по максимальной длине корреляции L_{max} . Для L_2 существует эффективный вычислительный алгоритм, основанный на принципе сканирующей прямой: для корректного расчета всей функции достаточно рассматривать только те отрезки внутри фазы интереса, которые имеют наибольшую возможную длину (когда их концы соседствуют с вокселями другой фазы, либо с границей изображения); остальные отрезки являются вложенными по отношению к максимальным, их можно учитывать во время обработки максимальных отрезков. Алгоритм сканирующей прямой имеет линейную сложность вдоль размерности расчета, итоговая асимптотика составляет $O(D^3)$. При этом нужно отметить, что такой алгоритм не реализован в стандартных вычислительных библиотеках и не векторизуется очевидным образом. Поэтому на практике нужно либо использовать другие оптимизации наивного варианта, либо программировать свою реализацию оптимального варианта на высокопроизводительных языках с опциональным использованием графических ускорителей (например, C++ в сочетании с cuda).

Кластерная функция $\mathbf{C}_2(\mathbf{r})$ определяет долю отрезков длины r , концы которых принадлежат одной компоненте связности порового пространства. Если все поровое пространство связно, то имеет место тождество $C_2(r) = S_2(r)$, в случае нескольких компонент логика расчета $C_2(r)$ повторяет оную для $S_2(r)$ внутри каждой отдельной компоненты, поэтому нет смысла отдельно приводить формулу для вычисления данной функции. Процедура разбиения порового пространства на связные компоненты может быть проведена, например, поиском в ширину (breadth-first search). При использования на графе изображения с ребрами-границами вокселей сложность этого алгоритма составляет $O(|V| + |E|) = O(D^3 + 4D^3) = O(D^3)$ операций. Таким образом итоговая асимптотика расчета будет $O(D^3 \log D)$, т.е. совпадает с асимптотикой для S_2 .

Функция поверхность-поверхность SS_2 так же определяется похожим на S_2 образом, только индикативным событием является попадание обоих концов отрезков на границу целевой фазы. Поскольку мы рассматриваем дискретные объекты, граница может иметь различное определение, из-за этого расчет данной функции является нетривиальным (см., например, [16]). В самом простом случае (и самом неточном, если проводить аналогию с непрерывными изображениями) можно взять следующее определение границы:

- Пиксель принадлежит границе, если у него в соседях по 4-связности есть пиксель (т.е. имеющий с ним общую сторону) из противоположной фазы;
- Воксель принадлежит границе, если у него в соседях по 6-связности есть воксель (т.е. имеющий с ним общую грань) из противоположной фазы.

Тогда SS_2 можно рассчитать аналогично S_2 после применения к изображению тривиального фильтра для определения такой границы. В противном случае граница выделяется сложнее: можно моделировать приближенную к непрерывной границу и выделять ее с помощью более сложных фильтров, например, с помощью фильтра Кэнни (Canny edge detector, [17]). Данный алгоритм заключается в применении последовательных шагов: свертки изображения с гауссовым ядром; еще одной свертки с ядром для детектирования границ; расчет направления градиентов границ; подавление немаксимумов (non-maximum suppression, NMS); отсечение границ по порогу. После для полученного изображения с границами, как и в предыдущем простом алгоритме, рассчитывается S_2 . Если использовать реализацию сверток на основе FFT, то алгоритмическая сложность более сложного варианта вычисления SS_2 аналогична сложности S_2 : $O(D^3 \log D^3 + D^3 \log D) = O(D^3 \log D)$.

Визуализацию расчетов всех перечисленных корреляционных функций можно посмотреть на рис. 1.2. Дополнительные подробности о непрерывных корреляционных функциях для случайных процессов можно найти в книге [12], а приложения и обсуждение использования в почвоведении для изображений доступны в публикациях [18] и [19].

Исследуемые пористые среды могут иметь разную пористость, при этом их структура может быть одинаковой с точки зрения корреляционных функций, т.е. их поровые пространства могут иметь схожую морфологию. На самом деле, это именно то, что мы хотим распознавать с помощью используемой мо-

дели пористой среды. Чтобы сделать корреляционные функции не зависящими от значения пористости, мы можем нормировать их на значение пористость, как это сделано для функции автоковариации в работе [20]. Для функции S_N имеем с одной стороны очевидное равенство $S_N(0) = \varphi$, при этом можно показать, что для нетривиальной пористой среды $\lim_{r \rightarrow \infty} S_N(r) = \varphi^N$, поскольку на бесконечной длине корреляция между значениями точек пористой среды пропадает. Тогда на примере корреляционной функции S_N можно ввести следующую формулу нормализации:

$$S_N^{norm}(r) = \frac{S_N(r) - \varphi^N}{\varphi(1 - \varphi^{N-1})}. \quad (1.10)$$

Из приведенной формулы подстановкой $N = 2$ получается формула нормализации для S_2 . Для корреляционной функции L_2 нормировка выглядит следующим образом:

$$L_2^{norm}(r) = \frac{L_2(r)}{L_2(0)}, \quad (1.11)$$

поскольку легко установить, что $\lim_{r \rightarrow \infty} L_2(r) = 0$ для любой нетривиально пористой среды. Все остальные не перечисленные корреляционные функции, кроме SS_2 , нормализуются таким же способом, как в (1.10), поскольку нулевое момент всех функций для фазы порового пространства равен пористости φ . Для SS_2 нулевое значение — это доля вокселей порового пространства, лежащих на границе с твердой фазой относительно общего числа вокселей порового пространства. Поэтому SS_2 нормализуется аналогично (1.11). При использовании такой нормализацией все корреляционные функции становятся независимыми от пористости, что и требовалось для дескрипторов морфологических свойств пористой среды.

1.4 Выводы

В данной главе введены основные понятия, связанные непосредственно с анализом пористых сред, которые будут использоваться в следующих главах работы, были введены основные обозначения и индексация для упрощения дальнейших выкладок. Даны определения для следующих математических

объектов: пористая среда, многоточечная корреляционная функция, корреляционная функция в дискретном случае, нормализация корреляционной функции. Описан алгоритм расчета основных дескрипторов пористой среды, даны оценка асимптотики работы этих алгоритмов, приведены рекомендации по программной реализации дескрипторов.

Математические модели и формулировки, описанные в данной главе, будут использоваться в этой работе далее:

- В качестве исходных данных для оптимизационной задачи по разложению корреляционных функций на базисные в главе 2;
- В качестве векторных дескрипторов изображений пористых сред для алгоритма кластеризации в главе 2;
- В качестве векторных дескрипторов отдельных фрагментов изображений для алгоритма разделения изображений пористых сред на однородные зоны и для условий однородности изображений пористых сред в главе 3;
- Для оценки качества сегментации изображений пористых сред посредством сравнения значений корреляционных функций для целевой и построенной с помощью модели маски сегментации в главе 4;
- Для проведения стохастической реконструкции в исследовании по оценке влияния морфологических свойств исходной пористой среды U^c на качество нейросетевой сегментации главе 5.

Глава 2. Кластеризация изображений пористых сред в пространстве дескрипторов на основе корреляционных функций

Структура любых пористых сред тесно взаимосвязана со всеми ее физическими свойствами и функциями. В то же время структура большинства естественных пористых сред имеет очень сложный и иерархический характер. Действительно многомасштабная цифровая трехмерная модель строения пористой среды (почвы, геологической породы или любой другой) даже с разрешением не менее 1 мкм будет содержать огромное количество данных, примерно 10^{15} вокселей или более. В настоящее время эффективное моделирование в масштабе пор на основе таких объемных наборов данных не представляется возможным, поэтому идея построить компактную с точки зрения количества параметров модель пористой среды, которая бы описывала её морфологические свойства, является актуальной. Альтернативный же подход будет заключаться в уменьшении сложности до ограниченного, но значимого набора характеристик/параметров, например, с использованием универсальных корреляционных функций.

Аппроксимация значений корреляционных функций, рассчитанных по изображению пористой среды, с помощью набора базисных функций — это эффективный способ сжатия структурной информации об этой пористой среде. Тем не менее нужно отметить, что результаты любого анализа, основанного только на векторном представлении из подобранных параметров базисных функций, будут отличаться от результатов, полученных с помощью значений исходных корреляционных функций (КФ). Несоответствия результатов можно избежать, перейдя от вектора параметров базисных функций к исходным значениям КФ с помощью соответствующего обратного отображения. Кроме того, корреляционные функции — это не только способ сжать информацию о структуре пористой среды с минимальными потерями, но и способ решения ряда дополнительных задач, таких как сравнение и дифференциация образцов пористых сред, поиск расположения элементарных объемов, эффективное прогнозирование физических свойств (в том числе с помощью методов машинного обучения) и слияние иерархических структур пористых сред.

Остановимся подробнее на почвах, как одном из примере реальных пористых сред. Структура почвы, т.е. пространственное распределение различных

компонентов: минеральных частиц (глины), органических материалов, а также порового пространства — определяет все важнейшие свойства почвы: от физических гидравлических свойств до ее плодородия. С физической точки зрения сложную структуру почвы можно рассматривать как гетерогенный материал или многофазный композит [12; 21; 22]. Если известен состав почвы, то ряд свойств можно оценить с помощью моделирования (например, моделирования в масштабе пор на основе уравнения Навье-Стокса для гидравлических свойств или случайного блуждания для диффузии и т.д.) или вывести с использованием статистических подходов [23].

До недавнего времени считалось, что невозможно получить всю необходимую структурную информацию о пористой среде [23; 24], и, таким образом, в данной научной области преобладали статистические методы. Однако с появлением методов получения изображения пористой среды, особенно рентгеновской томографии (КТ) и методов стохастической реконструкции, парадигма постепенно меняется. С текущим развитием науки и техники появляется реальная возможность создать цифровую трехмерную модель структуры почвы, постепенно такие методы превращаются в практическую технологию [25]. Наконец, появление эффективных методологий поможет решить ряд давних проблем в почвоведении, связанных с многомасштабными процессами в критической зоне [26; 27].

Еще не так давно в визуализации структуры почвы преобладали методы исследования шлифов образцов (thin section) и SEM (scanning electron microscope), и во многом эти методики актуальны и сегодня [28; 29] для исследования микробной активности и проведения химического/минерального анализа [30]. В настоящее время основной движущей силой трехмерных структурных исследований является методология КТ [31; 32], так как она позволяет получать неразрушающую трехмерную информацию о ряде масштабов с разрешением от ~ 1 мкм для микротомографических сканеров [33–35], до $\sim 100 - 300$ мкм для медицинских изделий или промышленных макротомографов [36; 37]. Из-за многоуровневой иерархической природы естественных пористых сред [38], включая почву, ни один из методов съемки сам по себе не достаточен для достижения конечной цели — создания трехмерной цифровой модели структуры пористой среды, из-за наличия компромисса между размером исследуемого образца и разрешением его изображения [39; 40]. Слияние данных с различных масштабов из одного изображения в единую многомасштабную модель [41] может быть вы-

полнено с использованием стохастической реконструкции на основе методов из работ [41–43], и в результате применения этих методов получится полное трехмерное изображение структуры пористой среды с заданным разрешением.

Хотя существует множество соответствующих методов стохастической реконструкции, включая многоточечную статистику [44–46] или методы, основанные на машинном обучении [14; 47], методы, основанные на корреляционных функциях обладают рядом явных преимуществ:

1. Они могут описать структуру пористой среды с помощью строгих математических функций [12];
2. Они позволяют перемасштабировать исходные структурные данные при помощи манипуляций с значениями КФ [40; 41];
3. Они обеспечивают иерархическую схему оптимизации имитацией отжига для создания многомасштабной структуры желаемого разрешения [41];
4. Они позволяют произвести экспресс-оценку физических свойств с использованием строгих границ [12];
5. Они предоставляют инструмент для оценки однородности структуры с помощью репрезентативности (representative elementary volume, REV) [48];
6. Они способны использовать экспериментально измеренные значения КФ, полученные, например, при помощи метода малоуглового рассеяния (small angle X-ray scattering, SAXS) [49; 50];
7. Они помогают в корректном моделировании тензорных физических свойств на основе геометрически-периодических копий реальных образцов почвы [51];
8. Они способны описывать динамику изменения структуры почвы [19; 52].

Нужно отметить, что не все перечисленные отдельные преимущества присущи исключительно корреляционным функциям. Некоторые из них могут быть получены с использованием более традиционных дескрипторов, таких как, например, функционалы Минковского и ряда других метрик [13]. Способность КФ описывать структуру и предоставлять средства для реконструкции этой структуры позволяет предположить, что с помощью них возможно эффективно сжимать и хранить структурную информацию [40]. Сжатие информации выглядит особенно привлекательным, если учитывать, что действительно мно-

гомасштабная цифровая 3D-модель структуры почвы для одного генетического горизонта будет содержать огромное количество данных (примерно 10^{15} вокселей или более) даже для пористой среды с разрешением более 1 мкм. Эффективное оперирование и моделирование в масштабе пор на таких наборах данных в настоящее время не представляется возможным из-за отсутствия вычислительных ресурсов требуемой для такой задачи производительности.

Метод, который будет предложен в данной главе, позволяет работать с небольшой частью из всей представленной структурной информации. Основная цель работы, проведенной в [1], заключалась в том, чтобы исследовать возможность сжатия структурной информации из бинарного изображения пористой среды, полученного методом КТ с последующей сегментацией, с помощью вычисления вектора корреляционных функций по направлениям и его дальнейшего сжатия (потенциально с минимальной потерей информации) в очень ограниченный по размеру вектор числовых параметров. Далее в главе будет описан алгоритм кластеризации сегментированного 3D-изображения пористых сред в пространстве малой размерности. Представленный алгоритм состоит из трех составных частей: вычисление дискретных КФ по ортогональным направлениям, построение признакового дескриптора пористой среды малой размерности и, непосредственно, кластеризация. Дескриптор пористой среды будет построен при помощи численного метода по сжатию структурной информации с помощью параметризации КФ. Предложенный алгоритм кластеризации основан на классическом методе K-Means. Представленная процедура кластеризации пористых сред была разработана и проверена на реальных данных в рамках исследования [1].

2.1 Алгоритм кластеризации бинарных изображений пористых сред в векторном пространстве малой размерности

В этом разделе будет описана модификация алгоритма построения дескриптора бинарного изображения пористой среды по её двух- или трехмерному бинарному изображению U^c . Данный алгоритм основан на численной аппроксимации корреляционных функций с помощью выпуклой комбинации базисных функций из заданного набора. Так же будет предложен алгоритм кластериза-

ции изображений пористых сред на основе классического алгоритма K-Means. В этом алгоритме в качестве векторных представлений образцов пористой среды будут использованы параметрические представления векторов корреляционных функций, полученные с помощью их аппроксимации базисными функциями. В тексте будет описан более общий трехмерный случай, при этом в алгоритме нет никаких принципиальных отличий для двух- и трехмерного изображения.

2.1.1 Признаковые дескрипторы бинарного изображению

Предположим, что на вход алгоритму поступает некоторое трехмерное изображение $U_i^c \in \mathbb{R}^{H \times W \times D}$. В качестве гиперпараметров алгоритма требуется выбрать набор корреляционных функций $\{\bar{f}_j\}$ (в этой главе используется верхняя черта над записью корреляционных функций для того, чтобы не было коллизии с обозначениями базисных функций f_1, f_2, \dots) и максимальную длину корреляции L_{max} . Допустимо использовать любой достаточно выразительное множество корреляционных функций, в исследовании [1] использовался следующий набор: двухточечная функция вероятности $S_2[r]$ (1.6), линейная функция $L_2[r]$ (1.8), кластерная функция $C_2[r]$ и функция поверхность-поверхность $SS_2[r]$. Все корреляционные функции рассчитывались по изображению U_i^c :

- Для дискретных длин корреляции r до максимальной длины корреляции L_{max} ;
- По трем основным ортогональным направлениям x, y и z ;
- Исключительно для фазы порового пространства;
- С усреднением по объему.

Таким образом рассчитанная корреляционная функция $\bar{f}_j^d[r|U_i^c]$ для заданного направления d представляет из себя массив из L_{max} значений.

В данный момент важно прояснить взаимосвязь между корреляционными функциями и другими метриками (дескрипторами), применимыми к сегментированным изображениям КТ почвы и других пористых сред, а также указать, какая информация о морфологической структуре порового пространств сохраняется в корреляционных функциях:

1. **Пористость:** пористость является нулевым компонентом всех функций, кроме SS_2 , т. е. $S_2(0) = L_2(0) = C_2(0) = \varphi$, где φ - это величина пористости (или нулевой функционал Минковского);
2. **Площадь поверхности:** функции $SS_2(0)$ и S_2 содержат полную информацию о площади поверхности пор (или первый функционал Минковского) — площадь поверхности пор пропорциональная производной функции S_2 в точке $S_2(0)$, см. [49];
3. **Связность:** информация о связности порового пространства (показано в [53]) и существующие меры перколяционной связности (показано в [54; 55]) содержится в функции C_2 ;
4. **Распределение пор по размерам:** распределение пор по размерам описывается линейной функцией $L_2(r)$, которая измеряет вероятность того, что поровое пространство будет содержать полностью внутри себя направленный отрезок заданной длины r .

Таким образом набор корреляционных функций, использованных в представляемом методе, полностью покрывает все традиционные метрики, за исключением второго и третьего функционалов Минковского [56]. На текущий момент неизвестен точный набор корреляционных функций, который обеспечивает полное описание какой-либо заданной пористой структуры почвы (см. [19]), но в исследовании [57] представили некоторые существенные доказательства того, что представленного выше набора КФ должно быть достаточно для обеспечения необходимого информационного содержания (informational content). К сожалению, современные методологии позволяют оценивать информационное содержание исключительно для пористости и функции S_2 [58; 59], таким образом, прямое сравнение, например, корреляционных функций и функционалов Минковского невозможно.

Нормализация корреляционных функций в настоящее время активно исследуется [60], и, вероятно, в будущем появится единый структурный дескриптор изображения пористой среды. Исследуемые образцы могут иметь разную пористость, но при этом их структура может быть одинаковой, и, таким образом, мы хотим, чтобы векторные представления таких образцов были бы близкими. По этой причине в описываемом алгоритме были применены корреляционные функции, нормализованные с помощью (1.10), (1.11). Функции SS_2 и C_2 были нормализованы аналогично (1.11). Пористость образцов рассчитывалась стандартным способом по формуле (1.3). Таким образом получается

исходное векторное представление изображения U_i^c :

$$\bar{\theta}(U_i^c) = [\bar{f}_1^x(U_i^c), \bar{f}_1^y(U_i^c), \bar{f}_1^z(U_i^c), \dots, \bar{f}_M^z(U_i^c)].$$

2.1.2 Аппроксимация с помощью базисных функций

Далее в рамках описываемого метода требуется перейти от наблюдаемых дискретных значений корреляционных функций к некоторой параметрической модели. Аналитические функции, подходящие для описания разнообразных исходных структур, можно получить как линейную комбинацию некоторого набора базисных функций. Для того, чтобы описать корреляционную функцию, вычисленную по некоторой структуре, необходимо использовать базисные функции, сложность которых соответствует сложности этой структуры (или экспериментальных образцов). При этом все базисные функции должны быть сравнительно простыми, чтобы с ними было удобно работать аналитически.

В работе [61] описывает общий вид математической модели представления КФ с помощью набора базисных. Модель выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{f}(r|\theta) = \sum_{i=1}^N \alpha_i f_i(r|\theta_i) + \sum_{i,j=1}^N \beta_{ij} f_i(r|\theta_i) f_j(r|\theta_j), \\ \sum_{i=1}^N \alpha_i + \sum_{i,j=1}^N \beta_{i,j} = 1, \end{cases} \quad (2.1)$$

где

- $\{f_i(\theta_i)\}_{i=1}^N$ — это набор базисных функций,
- $\{\theta_i\}_{i=1}^N$ — это параметры базисных функций,
- $[\{\alpha_i\}_{i=1}^N, \{\beta_{ij}\}_{i,j=1}^N]$ — это неотрицательные веса базисных функций и их попарных комбинаций,
- $\theta = [\{\alpha_i\}_{i=1}^N, \{\beta_{ij}\}_{i,j=1}^N, \{\theta_i\}_{i=1}^N]$ — это совокупность параметров модели.

Таким образом, предлагается модель, являющаяся выпуклой комбинацией базисных функций и их попарных произведений. При этом набор базисных функций может включать в себя экспоненту, осциллирующие, полиномиальные (как в работе [20]) или любые другие достаточно простые функции, которые хорошо поддаются аналитическому анализу. Так же из [61] известно, что различные базисы подходят для описания различных пористых сред, т.е. на текущий

момент не существует универсального набора. Для предложенной в данной главе модели в набор базисных функций были включены экспоненциальная функцию (2.2), затухающий осциллятор (2.3) и полиномиальная функция (2.4):

$$f_1(r|a) = e^{-\frac{r}{a}}, \quad (2.2)$$

$$f_2(r|b, q, \psi) = e^{-\frac{r}{b}} \cos(qr + \psi), \quad (2.3)$$

$$f_3(r|c) = \begin{cases} (1 - \frac{r}{c})^2, & 0 \leq r \leq c, \\ 0, & r > c, \end{cases} \quad (2.4)$$

где

a, b, c — это коэффициенты масштаба функций,

q — это частота осциллятора,

ψ — это фазовый угол.

Следующим шагом требуется получить параметрическую модель пористой среды U_i^c , которая бы сохраняла структурную информацию, представленную набором рассчитанных нормализованных корреляционных функций $\{\bar{f}_j^d[r|U_i^c]\}_{j,d}$. Это будет сделано посредством численной аппроксимации значений корреляционных функций моделью (2.1) с помощью набора базисных функций (2.2), (2.3), (2.4). Формально, оптимизационная задача аппроксимации некоторой корреляционной функции изображения U_i^c с помощью нашего набора базисных ставится следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{f}(r|\theta) = \alpha_1 f_1(r|a) + \alpha_2 f_2(r|b, q, \psi) + \alpha_3 f_3(r|c), \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1, \\ \alpha_1 \geq 0, \alpha_2 \geq 0, \alpha_3 \geq 0, \\ \theta = (a, b, c, q, \psi, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \\ E(\bar{f}[r|U_i^c], \hat{f}(r|\theta)) \rightarrow \min_{\theta}, \end{cases} \quad (2.5)$$

где:

$E(\cdot, \cdot)$ — это функция ошибки аппроксимации, выпуклая по обоим аргументам,

α_1, α_2 и α_3 — это неотрицательные веса соответствующих базисных функций в их выпуклой комбинации,

a, b и c — это коэффициенты масштаба базисных функций,

q — это частота осциллятора,

ψ — это фазовый угол (далее всегда выполняется $\psi = 0$ из-за наличия нормализации, в противном случае $f_2(0) \neq 0$).

Дополнительное ограничение на выпуклость линейной комбинации возникает из того факта, что все корреляционные функции нормализованы, и мы имеем необходимым к выполнению следующее соотношение:

$$\bar{f}(0) = \hat{f}(0|\theta) = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$$

Таким образом, в постановке (2.5) для каждой вычисленной корреляционной функции решается задача минимизация невязки по вектору параметров θ между реальными значениями корреляционной функции и ее аппроксимацией с помощью линейной комбинации базисных функций. В качестве функции невязки $E(\cdot, \cdot)$ обычно используют сумму квадратов ошибок для всех длин корреляции. Такой выбор обусловлен, помимо прочего, тем, что аналогичная оптимизационная задача по минимизации SSE (error sum of squares), рассчитанного по невязке значений корреляционных функций исходной и реконструируемой пористой среды, ставится в хорошо исследованных и применяемых на практике алгоритмах стохастической реконструкции методом отжига (simulated annealing, см., например, работу [50]). В данном случае для заданного образца пористой среды U_i^c и подсчитанной по нему нормализованной корреляционной функции $f[r|U_i^c]$, оптимизационная задача выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{r=0}^{L_{max}} (\bar{f}_j[r|U_i^c] - \hat{f}(r|\theta))^2 \rightarrow \min, \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1, \\ L_{max} = 250 - \text{максимальная длина корреляции.} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

С помощью решения данной оптимизационной задачи производится отображение между вектором значений корреляционной функции \mathbb{R}^{250} и векторном значении параметров \mathbb{R}^8 (5 параметров базисных функций и 3 параметра весов выпуклой комбинации).

2.1.3 Исправление коллизий в пространстве параметров

В процессе тестирования численного решения задачи (2.6) были получены неоднозначные результаты симуляций: фазовый сдвиг ψ осциллирующего

члена всегда сходилась к 0, потому что в реальных исходных данных не было осцилляции корреляционных функций. Из-за этого базисные функции (2.2) и (2.3) становятся эквиваленты, что приводит к возникновению симметричного минимума задачи оптимизации с точки зрения групп параметров $\{\alpha_1, a\}$ и $\{\alpha_2, b, q\}$. Данный факт приводит к тому, что нет смысла рассматривать расстояние L^2 между векторными дескрипторами различных изображений пористых сред:

$$L_2(\theta_1, \theta_2) = \sqrt{\sum_{k=1}^N (\theta_1[k] - \theta_2[k])^2}, \quad (2.7)$$

поскольку оно не учитывает симметрию группы параметров. Например, при перестановке групп параметров дескриптора $\hat{f}(\cdot|U_a^c)$ меняется фактическое расстояние между объектами U_a^c и U_b^c в пространстве параметров, хотя расстояние между $\bar{f}(\cdot|U_a^c)$ и $\bar{f}(\cdot|U_b^c)$ в пространстве исходных корреляционных функций не изменилось. Это значит, что в таком пространстве параметров нельзя применять метрический анализ и, соответственно, алгоритмы кластеризации, основанные на вычислении расстояний между объектами.

Из-за вышеописанных фактов математическая модель 2.1 была изменена таким образом, чтобы сделать оптимизационную задачу более корректной. Были произведены следующие модификации:

- Из базисной функции (2.3) убран осциллирующий член q ;
- Добавлено дополнительное ограничение $a \geq b$ для того, чтобы исключить симметричные минимумы оптимизации в пространстве параметров.

Финальная постановка задачи оптимизации выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{f}(r|\theta) = \alpha_1 f_1(r|a) + \alpha_2 f_2(r|b, 0, 0) + \alpha_3 f_3(r|c), \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1, \\ \alpha_1 \geq 0 \quad \alpha_2 \geq 0 \quad \alpha_3 \geq 0, \\ \mathbf{a} \geq \mathbf{b}, \\ \sum_{r=0}^{L_{max}} (f[r] - \hat{f}(r|\theta))^2 \xrightarrow{\theta} \min. \end{array} \right. \quad (2.8)$$

В общем случае, после численного решения оптимизационной задачи, аналогичной 2.8, с использованием M различных корреляционных функций будет получено векторное представление 3D-изображения пористой среды U_i^c :

$$\theta(U_i^c) = [\theta_{f_1^x}(U_i^c), \theta_{f_1^y}(U_i^c), \theta_{f_1^z}(U_i^c), \dots, \theta_{f_M^z}(U_i^c)]. \quad (2.9)$$

В рассматриваемом случае $M = 4$, исходное изображение трехмерное, а количество параметров для аппроксимации отдельной корреляционной функции равно 6, поэтому $\theta(U_i^c) \in \mathbb{R}^{72}$.

2.1.4 Кластеризация изображений пористых сред в пространстве дескрипторов

Далее рассмотрим алгоритм кластеризации векторные представления пористых сред $\theta(U_i^c)$, полученные после решения задачи (2.8) (либо любым другим способом). Для этого векторные представления образцов целесообразно предварительно стандартизовать путем вычитания из них покомпонентного среднего и деления на стандартное отклонение. Статистика считается по всей (тренировочной) совокупности векторных представлений пористых сред $\{U_j^c\}_{j=1}^N$:

$$\tilde{\theta}(U_i^c) = \frac{\theta(U_i^c) - \mathbb{E}_k \theta(U_k^c)}{\sqrt{\mathbb{D}_k \theta(U_k^c)}}. \quad (2.10)$$

Такое преобразование входных данных рационально выполнить по следующим причинам:

- После стандартизации задача кластеризации будет более корректно поставлена в виду одинакового масштаба значений компонентов векторов, поскольку для исходных значений КФ (и так же для их аппроксимаций из-за специально выбранного вида базисных функций) справедливы следующие соотношения: $\lim_{r \rightarrow 0} \bar{f}^{norm}(r) = 1$, $\lim_{r \rightarrow \infty} \bar{f}^{norm}(r) = 0$, т.е. компоненты векторов имеют заведомо разный масштаб;
- Распределение компонент векторов после стандартизации будут более похожи на нормальное, что является теоретически необходимым свойством данных для применения алгоритма К-Means (подробно о методе в [62]).

Таким образом, сейчас можно полностью описать алгоритм кластеризации изображений пористых сред в пространстве малой размерности. Он состоит в последовательном выполнении следующих шагов:

1. Рассчитать для каждого образца U_i^c набор дискретных корреляционных функций по направлениям с помощью формул (1.6), (1.7), (1.8), (1.9);
2. Рассчитать для каждого образца пористость (1.3) и нормализовать значения корреляционных функций согласно формулам (1.10) для S_2 и C_2 , (1.11) для L_2 и SS_2 , получить векторное представление $\bar{\theta}(U_i^c)$;
3. (Опционально) Для каждого образца U_i^c поставить и решить численно оптимизационную задачу (2.8), получив таким образом векторные представления $\theta(U_i^c)$ (или воспользоваться векторным представлением $\bar{\theta}(U_i^c)$ из корреляционных функций, в таком случае получим векторы из $\mathbb{R}^{12 \times L_{max}}$);
4. Получить стандартизованную выборку векторов параметров $\tilde{\theta}(U_i^c)$ с помощью формулы (2.10);
5. Провести кластеризацию набора векторов $\{\tilde{\theta}(U_i^c)\}_{i=1}^N$ с помощью K-Means.

2.2 Эксперименты и результаты

2.2.1 Исследуемые образцы

Всего для исследования предложенных алгоритмов на реальных данных было отобрано 14 цельных проб цилиндрической формы на участках, проходящих через два типа пахотной земли. На пашнях отбор проб производился с пахотного слоя. На лесистой земле пробы отбирали из центра гумусового горизонта. Образцы были аккуратно помещены в трубы из ПВХ с внутренним диаметром 3 см и длиной до 5 см. Неразрушающая фиксация внутренней структуры почвы выполняли с помощью рентгеновского микротомографа (КТ) SkyScan-1172, который можно использовать в качестве настольного томографа в условиях полевой влажности [32]. Во время сканирования образцы поворачивались на 180° с шагом в $0,35^\circ$ и временем экспозиции 430 мс. Использовалось напряжение источника 100 кВ и фильтр A1 0,5 мм. Для каждого образца почвы было получено 3D-изображение размером от $2000 \times 2000 \times 2000$ до

2000 × 2000 × 4000 с разрешением 15,88 мкм. Вариативность ширины извлеченных кубов была обусловлена уплотнением грунта по стенкам цилиндра при отборе проб. Уплотнения на границах были убраны для того, что было лучше видно остальные части образца (из-за несколько более высоких коэффициентов затухания в местах уплотнения). Для облегчения вычисления корреляционных функций из каждого цилиндра были извлечены наибольшие вписанные кубы. Длины двух образцов было достаточно для того, чтобы включать более одного горизонта, поэтому из каждого из них было извлечено по два подкуба. Это дало в общей сложности 16 3D-изображений объемом от 900³ до 1300³ вокселей. Обозначим их в рамках принятых обозначений U_i^c , $i \in \{1, \dots, 16\}$ (см. пример трехмерной структуры образцов на рис. 2.1, 2.2).

Все полученные кубические изображения в градациях серого были сегментированы на поры и твердое тело с использованием метода сходящихся активных контуров (converging active contours или САС, метод подробно изложен в [63]), реализованного в программном модуле [10], верхние и нижние пороги этого метода были подобраны оператором вручную. Все полученные 3D-изображения были разделены на категории в соответствии с землепользованием на основе процедур выборки в полевых условиях.

2.2.2 Анализ качества аппроксимации

На первом этапе исследования было проверено качество аппроксимации для набора корреляционных функций с помощью предложенного метода (2.8) по сравнению с другими существующими методами. Решение оптимизационной задачи проводилось численно с помощью последовательного метода наименьших квадратов (Sequential Least Squares Programming, SLSQP), метод запускался из случайной внутренней точки несколько раз до успешной сходимости решения с точностью $ftol = 10^{-9}$. В качестве метрики качества аппроксимации использовалась SSE , которая вычисляется как сумма квадратов поточечных разностей между исходными значениями корреляционной функций и соответствующими значениями аппроксимаций:

$$SSE(f, \hat{f}) = \sum_{r=0}^{L_{max}} (f[r] - \hat{f}(r|\theta))^2. \quad (2.11)$$

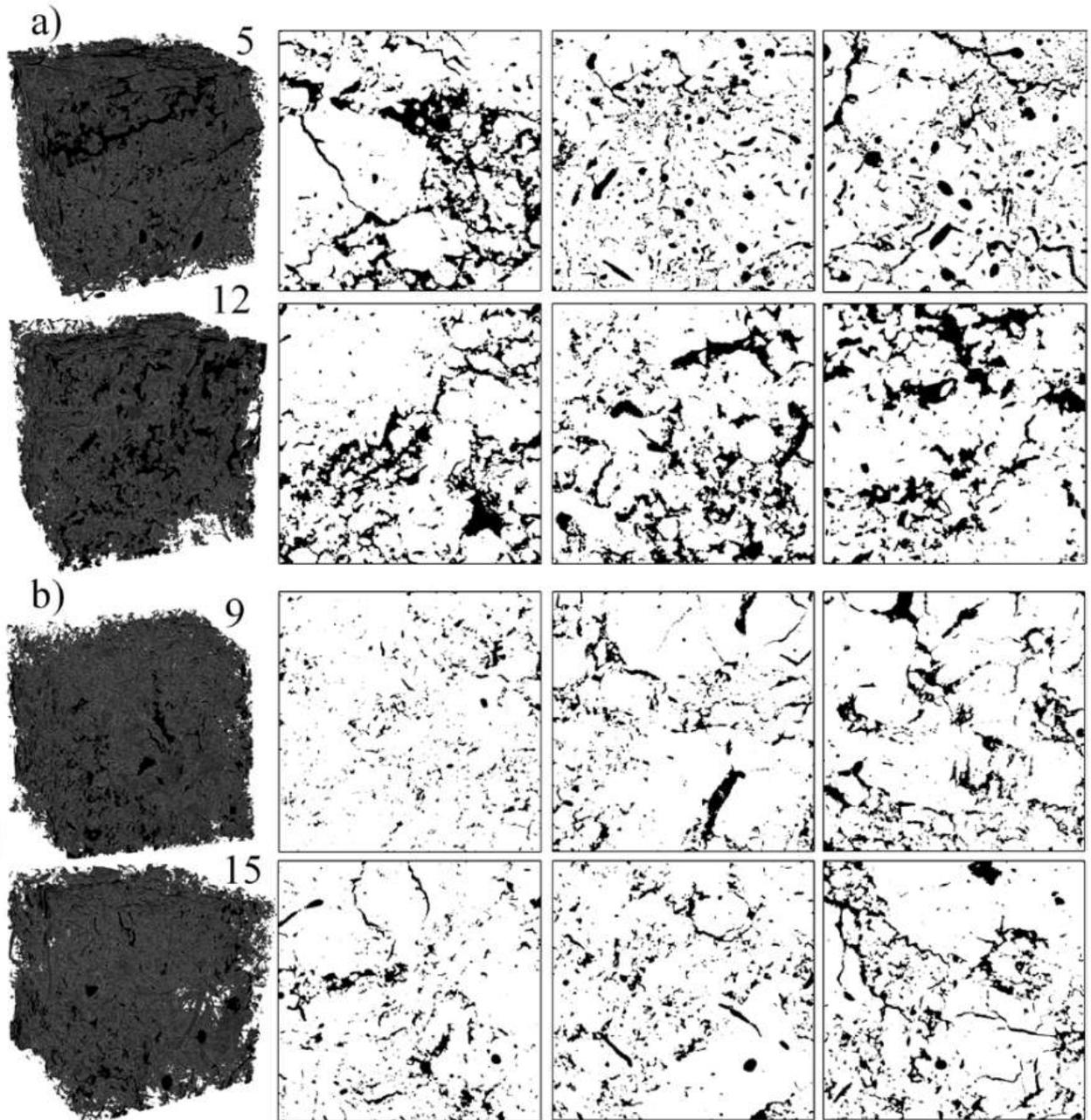


Рисунок 2.1 — Визуализация исследуемых образцов из публикации [1]. Каждой строчке соответствует одно кубическое изображение пористой среды: слева находится 3D-визуализация, справа — центральные 2D-срезы, ортогональные осям x , y и z изображения соответственно. На данном рисунке представлены две пары образцов **a)** 5 – 12 и **b)** 9 – 15, которые имеют между собой наименьшее расстояние в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^6 , т.е. являются наиболее похожими друг на друга с точки зрения предложенной в главе методологии. Представленные изображения имеют скорее однородную структуру, значения пористости визуально достаточно близки.

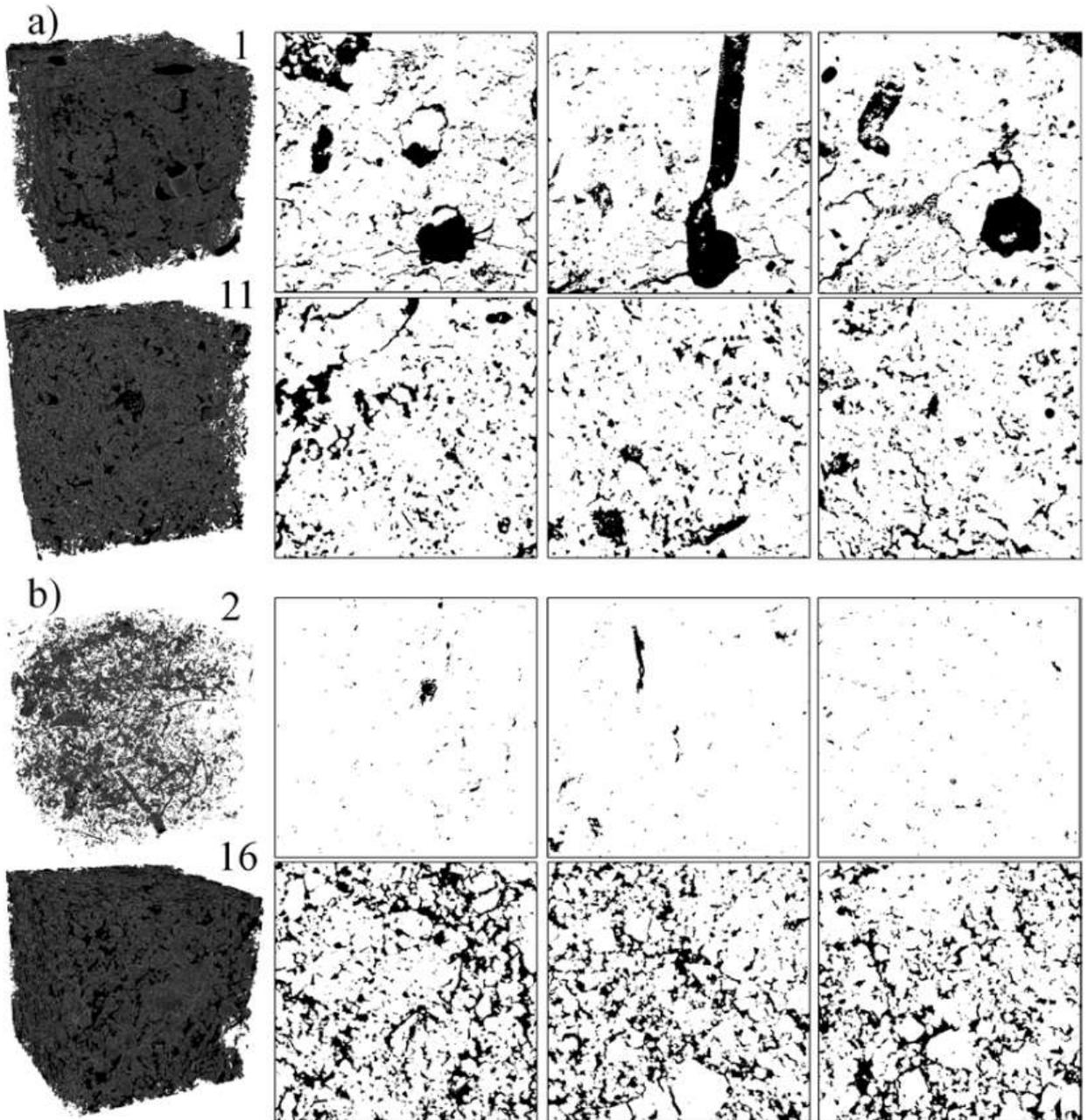


Рисунок 2.2 — Визуализация исследуемых образцов 2 из публикации [1]. Каждой строчке соответствует одно кубическое изображение пористой среды: слева находится 3D-визуализация, справа — центральные 2D-срезы, ортогональные осям x , y и z изображения соответственно. На данном рисунке представлены две пары образцов **a)** 1 – 11 и **b)** 2 – 16, которые имеют между собой наибольшее расстояние в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^6 , т.е. являются наименее похожими друг на друга с точки зрения предложенной в главе методологии. Видно, что в данном случае часть образцов имеет явно неоднородную структуру, так же значительно варьируется пористость.

Сравнение производилось для всего набора использованных корреляционных функций S_2 , L_2 , C_2 , SS_2 , которые были вычислены по трем направлениям x , y , z отдельно, а так же для усредненных по всем трем направлениям.

В качестве результата было установлено, что параметры, полученные с помощью описанной в данной работе модели, превосходят по качеству параметры, полученные методом (2.6). Так же предложенный метод выиграл в сравнении с другими классическими аналитическими подходами, которые использовали модель пересекающихся полидисперсных сфер для функций S_2 [12] и L_2 [64], полидисперсную сферическую модель для функции SS_2 [65]. Таким образом, на рассматриваемой выборке представленный выше метод оказался лучше классических методов. Тем не менее, качество аппроксимации не является идеальным: худшая (наибольшая) величина SSE была зафиксирована для функции C_2 (образец 13, $SSE = 0,023$), лучшая (наименьшая) для L_2 (образец 8, $SSE = 0,00032$). Сравнение графиков исходных КФ и полученных аппроксимаций приведено на рис. 2.3.

2.2.3 Кластерный анализ

Теперь рассмотрим результаты анализа качества кластеризации, проведенной на основе расстояний между сжатыми дескрипторами из \mathbb{R}^{72} и исходными векторами корреляционных функций \mathbb{R}^{1000} (здесь размерность втрое меньше, потому что использовалась конкатенация четырех усредненных по всем направлениям векторов корреляционных функций вместо 12 исходных векторов). Общую схему работы с данными в рамках кластерного анализа можно посмотреть на рис. 2.4. Визуализацию получившихся кластеров можно посмотреть на рис. 2.5. Отдельно нужно отметить, что образец с номером 1 был удален как выброс из общей совокупности, потому что он всегда попадал в свой отдельный кластер, в котором не было других образцов (на рис. 2.6 по величинам расстояний виден порядок различий между ним и остальными образцами).

Дальнейшая интерпретация результатов на рис. 2.5 может быть проведена с помощью построения тепловой карты попарных расстояний между образцами, которая находится на рис. 2.6. Нужно отметить, что расстояния в пространстве параметров нельзя напрямую сравнивать с расстояниями между исходными

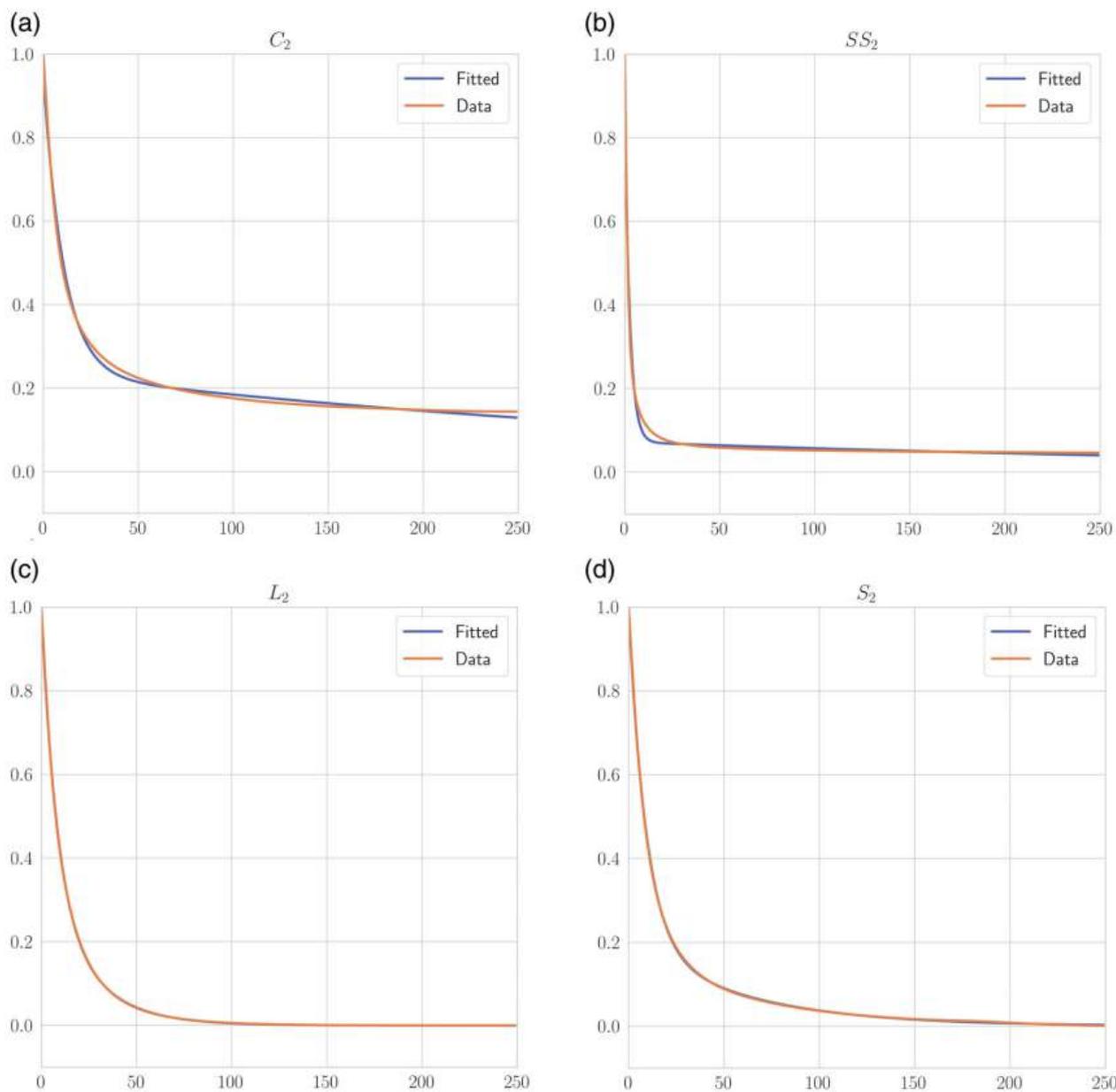


Рисунок 2.3 — Сравнение исходных корреляционных функций и параметрических аппроксимаций из исследования [1]. В верхней строке представлены худшие аппроксимации с точки зрения ошибки по метрике SSE , в нижней — лучшие по этой же метрике. Под литерами изображены следующие примеры: **(a)** усредненная по направлениям C_2 для образца 13, **(b)** усредненная по направлениям SS_2 для образца 1, **(c)** усредненная по направлениям L_2 для образца 8, **(d)** усредненная по направлениям S_2 для образца 9.

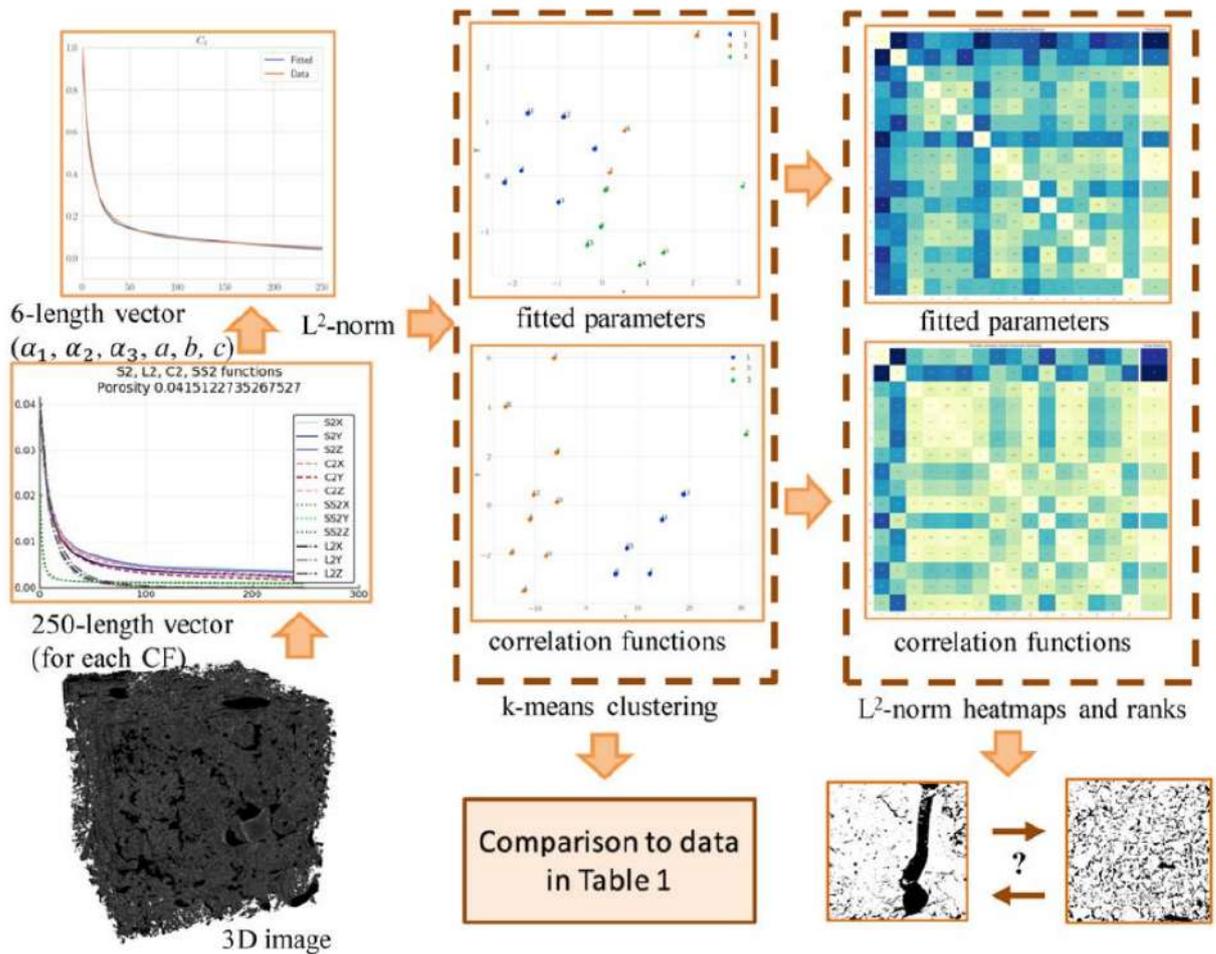


Рисунок 2.4 — Общая схема работы с образцами из публикации [1]. Для анализа используется следующая последовательность действий: по бинарному 3D-изображению вычисляются усредненные векторы корреляционных функций размерности \mathbb{R}^{250} ; далее полученные векторы трансформируются в вектор параметров размерности \mathbb{R}^6 ; после этого полученные два набора векторов стандартизируются; производится кластеризация; строится тепловая карта попарных расстояний между векторами признаков; на финальном этапе проводится анализ соответствия полученных кластеров и данных об образцах из таб. 1, а также визуальный анализ соответствия попарных расстояний на тепловой карте и морфологии исходных изображений.

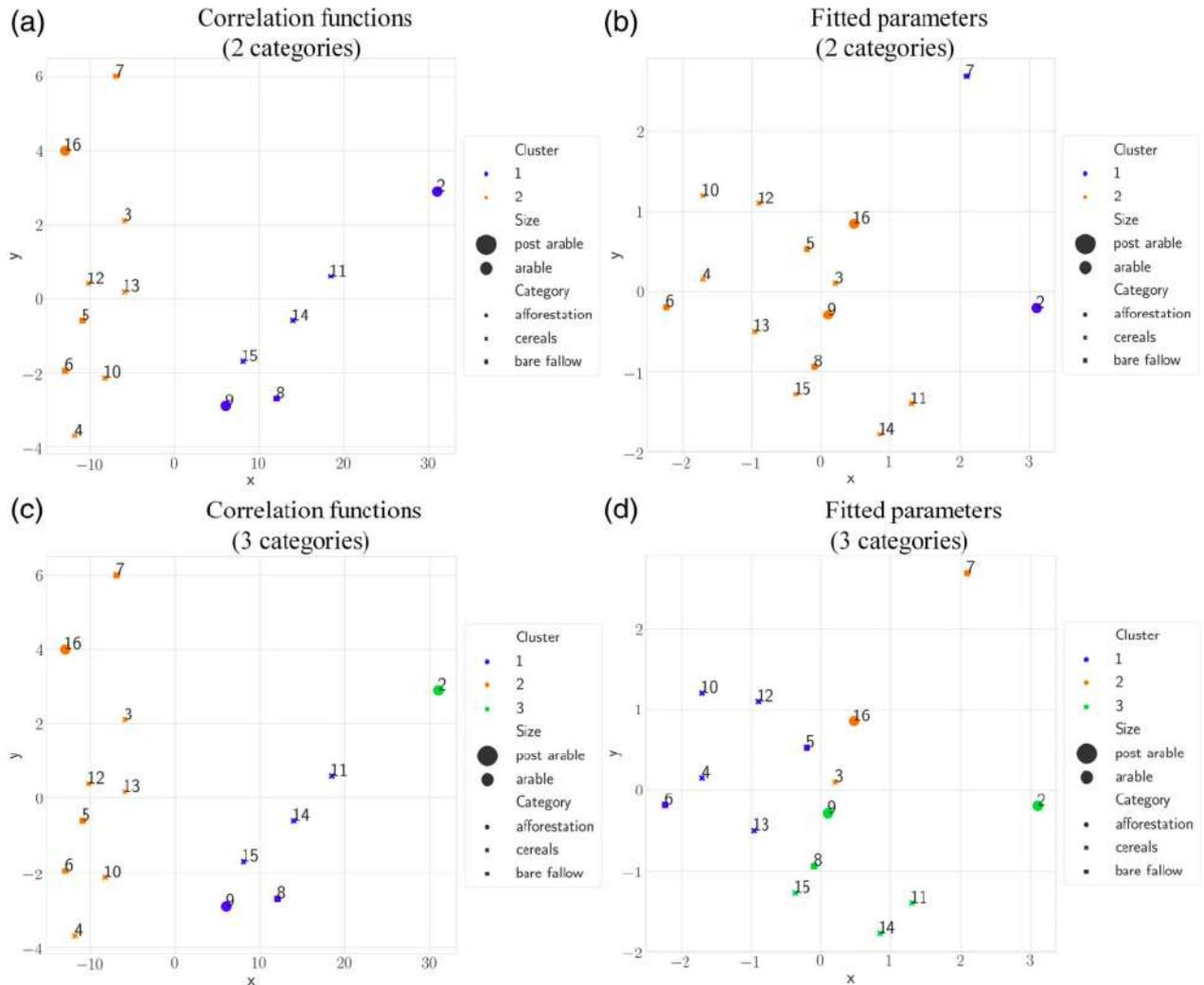


Рисунок 2.5 — Результаты кластеризации образцов в пространстве векторов корреляционных функций \mathbb{R}^{1000} и в пространстве векторов параметров \mathbb{R}^{72} из публикации [1]. В целях упрощения восприятия на рисунке изображена проекция исходных многомерных векторов на две главные оси их PCA разложения, поэтому оси графика не являются интерпретируемыми. В верхней строке рисунка (литеры (a) и (b)) изображена кластеризация на два кластера, в нижней (литеры (c) и (d)) — на три. Размеры точек (два варианта) на рисунках указывают, являлся ли пахотным тот участок почвы, из которого извлечен соответствующий образец. Тип метки (три варианта) указывает на категорию соответствующего образца почвы.

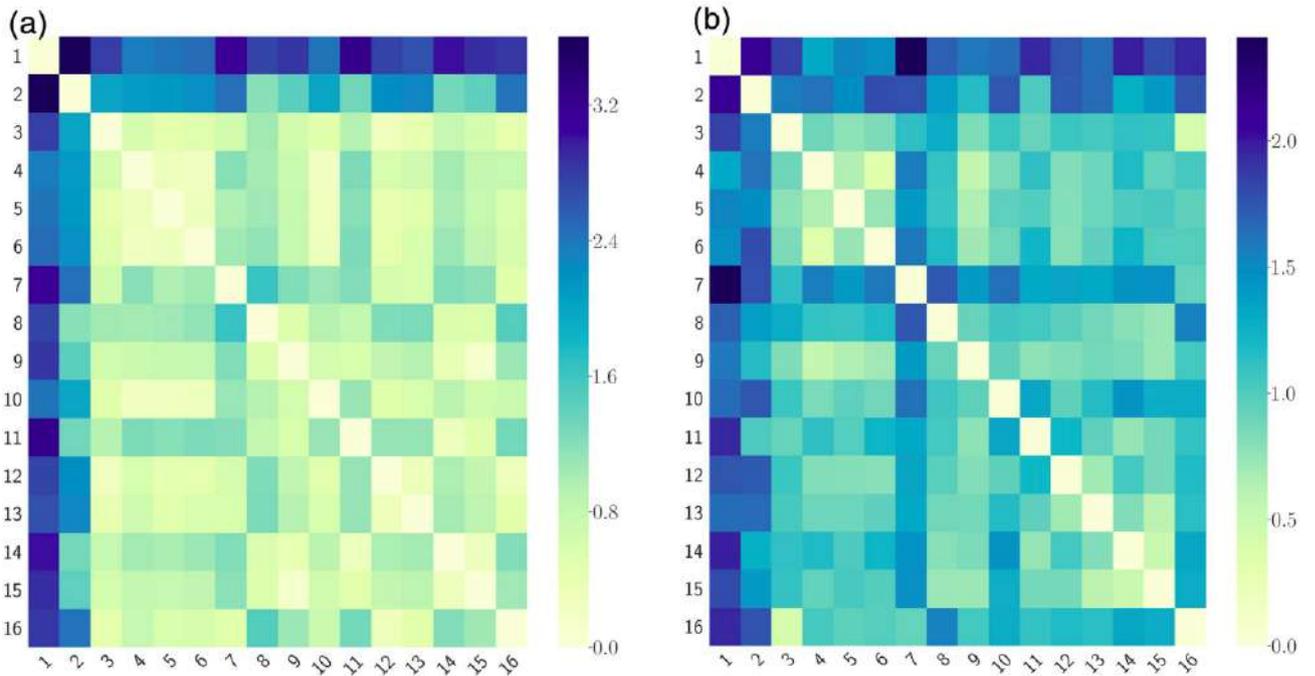


Рисунок 2.6 — Тепловые карты попарных расстояний (2.7) между образцами из публикации [1]. Светлый цвет ячейки соответствует меньшему расстоянию, темный — большому. Изображение (a) слева является тепловой картой в исходном пространстве векторов \mathbb{R}^{1000} корреляционных функций, (b) справа — в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^{72} .

векторами корреляционных функций, поэтому на тепловых картах была отображена величина $\frac{L_2}{\sqrt{R}}$, где R — это размерность соответствующего векторного пространства. С другой стороны, если вместо расстояний мы будем рассматривать порядковые номера расстояний среди всех пар для данного образца (т.е. ранги исходных расстояний внутри группы из всех остальных образцов), то получим более согласованную с реальностью картину. В результате получилось, что кластеризация в пространстве параметров, с одной стороны, не совсем согласуется с кластеризацией в исходном пространстве корреляционных функций, а с другой стороны обе кластеризации не вполне согласуются с информацией о виде почв из таб. 1 и рис. 2.5.

Это не тот результат, который можно было ожидать, поэтому был проведен дополнительный анализ образцов. Было установлено, что пары образцов с минимальным (максимальным) расстоянием между собой максимально (не)похожи друг на друга по структуре, что совершенно логично (см. расстояния между образцами на рис. 2.6 и визуализацию экстремальных образцов на рис. 2.1, 2.2). Таким образом эксперимент показывает, что сжатие структурной информации целого 3D-образца сначала в набор корреляционных

ID	Sample site	Location	Sampling depth, cm	Texture ^a (clay/silt, sand), %	SOC, %	3D image porosity, –	3D image volume, voxels	Soil use	
								Agricultural involvement (two categories)	Vegetation type (three categories)
1	AR-BF	51.621389 N, 36.255861 E	5–10	15.5/76.5/8.0	3.31	0.125	1300 ³	Arable	Bare fallow (without crops)
2	AFF	51.621361 N, 36.256778 E	20–25	15.0/76.9/8.1	3.93	0.009	1100 ³	Post-arable	Afforestation (62-year o ⁻¹ oaks)
3	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	15–20	16.2/76.2/7.6	3.26	0.155	1100 ³	Arable	Cereals (wheat)
4	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	15–20	16.2/76.2/7.6	3.26	0.158	1100 ³	Arable	Cereals (wheat)
5	AR-BF	51.621389 N, 36.255861 E	20–25	15.1/76.9/8.0	3.15	0.161	1100 ³	Arable	Bare fallow (without crops)
6	AR-BF	51.621389 N, 36.255861 E	20–25	15.1/76.9/8.0	3.15	0.178	1100 ³	Arable	Bare fallow (without crops)
7	AR-BF	51.621389 N, 36.255861 E	20–25	15.1/76.9/8.0	3.15	0.179	1100 ³	Arable	Bare fallow (without crops)
8	AR-BF	51.621389 N, 36.255861 E	5–10	15.5/76.5/8.0	3.31	0.042	1150 ³	Arable	Bare fallow (without crops)
9	AFF	51.621361 N, 36.256778 E	20–25	15.0/76.9/8.1	3.93	0.101	1200 ³	Post-arable	Afforestation (62-year o ⁻¹ oaks)
10	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	25–30	15.0/76.9/8.1	3.93	0.148	1200 ³	Arable	Cereals (wheat)
11	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	5–10	16.6/75.9/7.6	3.33	0.094	900 ³	Arable	Cereals (wheat)
12	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	5–10	16.6/75.9/7.6	3.33	0.176	900 ³	Arable	Cereals (wheat)
13	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	5–10	16.6/75.9/7.6	3.33	0.155	1200 ³	Arable	Cereals (wheat)
14	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	20–25	15.3/77.0/7.7	3.22	0.086	1100 ³	Arable	Cereals (wheat)
15	AR-CER	51.621333 N, 36.257444 E	20–25	15.3/77.0/7.7	3.22	0.097	1100 ³	Arable	Cereals (wheat)
16	AFF	51.621361 N, 36.256778 E	20–25	15.0/76.9/8.1	3.93	0.202	1100 ³	Post-arable	Afforestation (62-year o ⁻¹ oaks)

Таблица 1 — Общая характеристика исследуемых образцов из публикации [1]. В таблице можно найти следующую информацию: где и из какой глубины был извлечен образец, его текстуру, объем и пористость, а так же другие характеристики.

функций, а затем в 72-компонентный вектор параметров, сохраняет исходный морфологические свойства изображения с допустимым уровнем потерь, что продемонстрировано на рис. 2.6. В то же время, статистический анализ по функциям и по векторам параметров может приводить к различным выводам. В данном исследовании получилось, что значения параметров могут быть чувствительны к небольшому изменению в значениях корреляционных функций. Другими словами, корреляционные функции, которые имеют лишь небольшое различие в исходном пространстве, могут сильно отличаться в пространстве параметров. С другой стороны, если значения параметров двух объектов близки, то будут близкими и значения корреляционных функций, полученных обратным преобразованием параметров. Этот факт можно подтвердить, внимательно изучив тепловые карты попарных расстояний и рангов между образцами. Вероятно, что добиться непрерывности отображения аппроксимации возможно с помощью подбора соответствующего набора базисных функций. Задача нахождения компактного базиса с такими свойствами является нетривиальной с математической точки зрения, и, возможно, не имеет аналитического решения. На данный момент нельзя с уверенностью утверждать, что использованный набор корреляционных функций позволяет передавать весь спектр структурной информации образцов, хотя текущие опубликованные работы показывают, что набора $S_2 - L_2 - C_2$ достаточно для стационарных изображений небольшого размера. Вопрос о том, какое количество корреляционных функций может полностью передать структурную информацию пористой среды, является важным практическим вопросом, потому что увеличение числа корреляционных функций приведет к увеличению количества обучаемых параметров, а их количество желательно оставить небольшим для достижения максимального сжатия информации. Таким образом, использование параметров для статистического анализа может являться компромиссом между точностью этого анализа и скоростью расчетов, как мы можем наблюдать на рис. 2.5. Так же такие параметрические представления можно использовать в качестве входных данных для алгоритмов машинного обучения, чтобы подтвердить гипотезу о том, что сходная структура образцов означает схожесть их физических свойств. Для проведения исследования такого рода необходима большая выборка подходящих образцов изображений пористых сред. Тем не менее, из проведенных численных экспериментов можно заключить, что вышеописанный новый способ описания

структуры пористой среды подходит для решения задачи сравнения образцов между собой.

2.3 Выводы

В данной главе была изложена модификация модели представления КФ с помощью набора базисных и численный метод сжатия структурной информации бинарного 3D-изображения пористой среды, а так же основанный на данной модификации алгоритм кластеризации изображений пористых сред в пространстве параметризованных векторных представлений. В качестве исходных морфологических векторных дескрипторов были использованы четыре различные двухточечные корреляционные функции, рассчитанных в трех ортогональных направлениях для пустотного пространства: вероятностная S_2 , линейная L_2 , кластерная C_2 и функция поверхность-поверхность SS_2 .

Описанный метод был применен к 16 реальным 3D-образцам почв, полученным с помощью КТ съемки и разделенным на твердое вещество и поровое пространство с помощью алгоритма бинарной сегментации САС (converging active contours). Векторы корреляционных функций были преобразованы в параметрическое представление путем разложения на базисные функции с помощью численного решения оптимизационной задачи. Таким образом было произведено сжатие информации из изображения размером от 900^3 до 1300^3 вокселей в набор из 72 параметров.

Предложенная выше методология может быть использована для следующих приложений:

- Сжатие структурной информации пористой среды;
- Сравнение и группировка образцов пористых сред;
- Выделение репрезентативных объемов среды;
- Предсказание свойств среды с помощью методов машинного обучения;
- Использование информации в иерархических моделях пористых сред.

Описанная в этой главе методология, основанная на использовании корреляционных функций, применяется в следующей главе данной работы. Полученные результаты позволили предположить, что векторные дескрипторы на основе корреляционных функций могут быть эффективно использованы для

разбиения изображения на морфологически однородные зоны. В логику решения подобной прикладной задачи хорошо вписывается алгоритм кластеризации, поскольку число однородных зон изображения обычно не известно заранее. Таким образом, изложенное в этой главе исследование легло в основу метода, описанного в главе 3.

Глава 3. Выделение однородных областей на изображениях пористых сред

В настоящий момент известно, что структура материала определяет его основные физические свойства [12; 21; 66]. Примеры таких структур повсеместны и распространены от звездных и галактических образований [67; 68] до нанопористых сред [69; 70]. Физические свойства материала обычно представляются в виде усредненных полей, позволяющих осуществлять гомогенизацию (см. таблицу 1.1 в [12]). В этом смысле однородность структуры материала эквивалентна статистической стационарности полей физических свойств. Поэтому неоднородность исследуемого материала существенно осложняет моделирование и является причиной наличия многочисленных задач в различных крупных научных и практических областях:

1. Кристаллографии [58; 59; 71; 72];
2. Повышении разрешения изображений пористых сред [51; 73–75];
3. Депонировании CO_2 в геологические образования [76; 77];
4. Повышении плодородия почв [78];
5. Добыче углеводородов [79];
6. Оценке опасности загрязнения водных ресурсов [80–82];
7. Анализе глобальных данных [83],

— и это лишь небольшая часть задач, возникающих в связи с явлением неоднородности. Для получения структурной информации используются различные методы визуализации в зависимости от масштаба структуры. В большинстве перечисленных выше задач для получения изображений с разрешением от см до мм используются два метода визуализации: рентгеновская томография (КТ) и сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) [84; 85].

Для количественной оценки неоднородности сначала нужно вспомнить строгое определение пространственной статистической однородности/стационарности, которое, согласно классической книге Torquato [12], звучит следующим образом: “среда является статистически однородной, если совместные распределения вероятностей, описывающие порождающий её стохастический процесс являются инвариантными относительно переноса (сдвига) начала пространства”. Пространственные корреляционные функции, которые уже использовались для решения аналогичных задач в предыдущей главе 2, являются

универсальными дескрипторами структуры пористой среды и описываются именно такими совместными вероятностями. Корреляционные функции используются во множестве областей исследований: статистическая физика и материаловедение [52; 86; 87], разработке материалов [88; 89], физике горных пород [38; 90; 91], почвоведении [18; 92], пищевой инженерии [93], — и это только несколько примеров. Некоторые КФ могут быть получены экспериментально из измерений *in situ*, таких как рентгеновская томография [94], ядерный магнитный резонанс [95] и малоугловое рассеяние рентгеновских лучей или нейтронов (SAXS/SANS) [96]. Известные (или рассчитанные) значения корреляционных функций позволяют выполнять стохастические реконструкции [25; 42; 97; 98] для решения обратной задачи восстановления структуры или объединения многомасштабных изображений [41; 99; 100].

Измерение КФ или их использование для реконструкции структуры пористой среды обычно подразумевает стационарность этой среды [20; 101]. Это обстоятельство создает трудности, если структура обладает значительными неоднородностями [19; 93], и требует отдельной обработки реконструкций для каждой области неоднородности [102]. Чтобы окончательно разорвать циклическую взаимосвязь между структурными измерениями (такими как, например, малоугловое рассеяние [103]), измерением и масштабированием физических свойств [51] и многоуровневой иерархией в многочисленных природных (пористых) материалах [40], нужен надежный способ измерения структурной (не)стационарности по изображениям. Упомянутое выше определение пространственно однородной среды Torquato относится к статистическому процессу, но не к его реализациям, которые мы получаем в виде цифровых изображений. Это делает применение такого определения малоприменимым без наложения дополнительных структурных условий на процесс генерации данных. В большинстве случаев для реальных изображений это невозможно, если только не используется какая-либо хорошо известная процедура построения выборки изображений, например, гауссово случайное поле или генерация регулярной упаковки сфер. Все это подчеркивает отсутствие какого-либо полу-эмпирического критерия или условия, основанного на теоретических соображениях, которые можно было бы использовать вместо строгого определения при цифровом анализе изображений.

Ниже будет представлен метод количественной оценки неоднородности и выявления нечеткой границы между стационарными и нестационарными

структурами на основе визуальных данных, то есть на основе изображения пористой среды. С помощью расчета векторного представления фрагментов изображения, построенного на корреляционных функциях, и последующей кластеризации, будет предложен способ разделения изображения на зоны со сходной структурой. В этой главе будут описаны детали методологии и далее на синтетических и реальных изображениях пористых сред будет продемонстрировано, как представленный метод помогает оценивать структурную нестационарность. Так же будут показаны некоторые важные результаты и приведены экспериментальные доказательства того, что конкретные структуры являются однородными. Для ясности изложения будут рассматриваться только бинарные (т. е. состоящие из пористой и твердой фаз) $2D$ -изображения, полученные путем сегментации данных КТ или РЭМ.

3.1 Разбиение изображения пористой среды на однородные зоны

Рассматриваемая в данной главе методология использует следующий модельные упрощения:

- Изображение рассматривается на наперед заданном масштабе, который определяется используемым размером D фрагментов изображения;
- Предполагается, что фрагменты изображения на заданном масштабе однородны, и, таким образом, на этом масштабе возможно производить усреднение характеристик (в частности, вычислять корреляционные функции);
- Однородные зоны, выделяемые на изображении, состоят из набора связанных между собой фрагментов изображения размера D . Количество выделяемых однородных зон задается заранее с помощью параметра K . Однородные зоны могут принадлежать к одному и тому же однородному кластеру, но при этом не быть связанными между собой;
- Условия (не)однородности формируются на основе информации, извлеченной из входного изображения, без каких-либо дополнительных априорных предположений.

Формально говоря, процедура разделения изображения на однородные зоны может быть проведена с помощью модели (функции), которая ставит в

соответствии некоторой бинарной пористой среде U^c другую пористую среду $U^{\hat{c}}$ с фиксированным числом фаз:

$$U^c \longrightarrow U^{\hat{c}} : U^{\hat{c}}[x] = f_{seg}^{clust}(V(x|U^c)) = y, \quad y \in \{1, \dots, K\}, \quad (3.1)$$

где:

- x — это координата пикселя изображения пористой среды;
- $V(x|U^c)$ — это признаковое представление пикселя x исходной пористой среды;
- f_{seg}^{clust} — это модель сегментации;
- K — это задаваемое число однородных зон;
- $U^{\hat{c}}$ — это результирующее изображение, состоящее из K однородных зон.

Из постановки задачи становится очевидна связь с задачей сегментации изображения пористой среды на фазы, которая будет рассматриваться в следующей главе 4. В отличие от сегментации-классификации, в данной постановке число однородных зон K неизвестно заранее, поэтому оно является параметром метода, но не построенной (обученной) модели. Это свойство задачи естественным образом приводит к использованию алгоритмов кластеризации для ее решения.

Предлагаемый метод для разбиения изображения на однородные зоны основан на решении задачи кластеризации множества фрагментов исходного изображения. Алгоритм состоит из следующих основных шагов:

1. Исходное изображение U^c разбивается на множество пересекающихся фрагментов размера D ;
2. Для каждого фрагмента (но не пикселя) изображения вычисляется его векторное представление (или дескриптор) V , состоящее из значений набора корреляционных функций;
3. Полученные векторные представления фрагментов изображения кластеризуются на K кластеров;
4. Определяется, является ли кластеризация существенной, с помощью следующих условий:
 - На распределение L_1 расстояний между дескриптором всего изображения и дескрипторами отдельных фрагментов;
 - На попарные расстояния между центрами полученных на предыдущем шаге кластеров.

3.1.1 Разбиение изображения на фрагменты

Первым шагом метода будет являться разбиение изображения на отдельные (заведомо однородные, как указано в предположениях) фрагменты, которые затем будут разделены на кластеры, в которых содержатся близкие друг к другу фрагменты. В качестве минимального примитива, с которым работает предлагаемый метод, рассматривается квадратный фрагмент (patch) размера D (при этом в общем случае мы можем рассматривать прямоугольные фрагменты, но использование квадратных упрощает некоторые выкладки). Будем обозначать фрагменты как $p_{ij}^{D_1 D_2}$, где нижние индексы i, j — это координаты узлов сетки исходного изображения, в которых находится верхняя левая часть соответствующего фрагмента, а верхние индексы D_1 и D_2 — это размеры фрагмента вдоль соответствующих осей. Для квадратных фрагментов размера D верхние индексы будут опускаться.

Для того, чтобы границы регионов были более гладкими, удобно позволить фрагментам пересекаться друг с другом. Введем еще один параметр алгоритма: O (overlay) — это количество пикселей, в точности на которое осуществляется наложение соседних по сетке фрагментов. Чтобы построенная таким образом сетка из фрагментов была удобной для использования, нужно потребовать выполнения следующих ограничений на параметры:

$$\begin{cases} D \bmod (D - O) = 0, \\ \frac{O}{D-O} \bmod 2 = 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

Такое требование позволяет сохранить однозначность отображения между пикселем изображения и соответствующим ему кластером в следующем смысле: принадлежность дескриптора целого фрагмента кластеру определяет метку этого кластер только для единственного центрального подфрагмента (sub-patch) размером $(D - O) \times (D - O)$, поскольку каждый пиксель из центрального подфрагмента принадлежит центру ровно одного фрагмента (см. рис. 3.1 с визуализацией построенной сетки фрагментов). Удобно сделать так, чтобы размер наложения фрагментов O зависел от размера самих фрагментов D . Типичное значение параметра, которое было использовано в экспериментах на реальных данных, составляет $O = \frac{4D}{5}$.

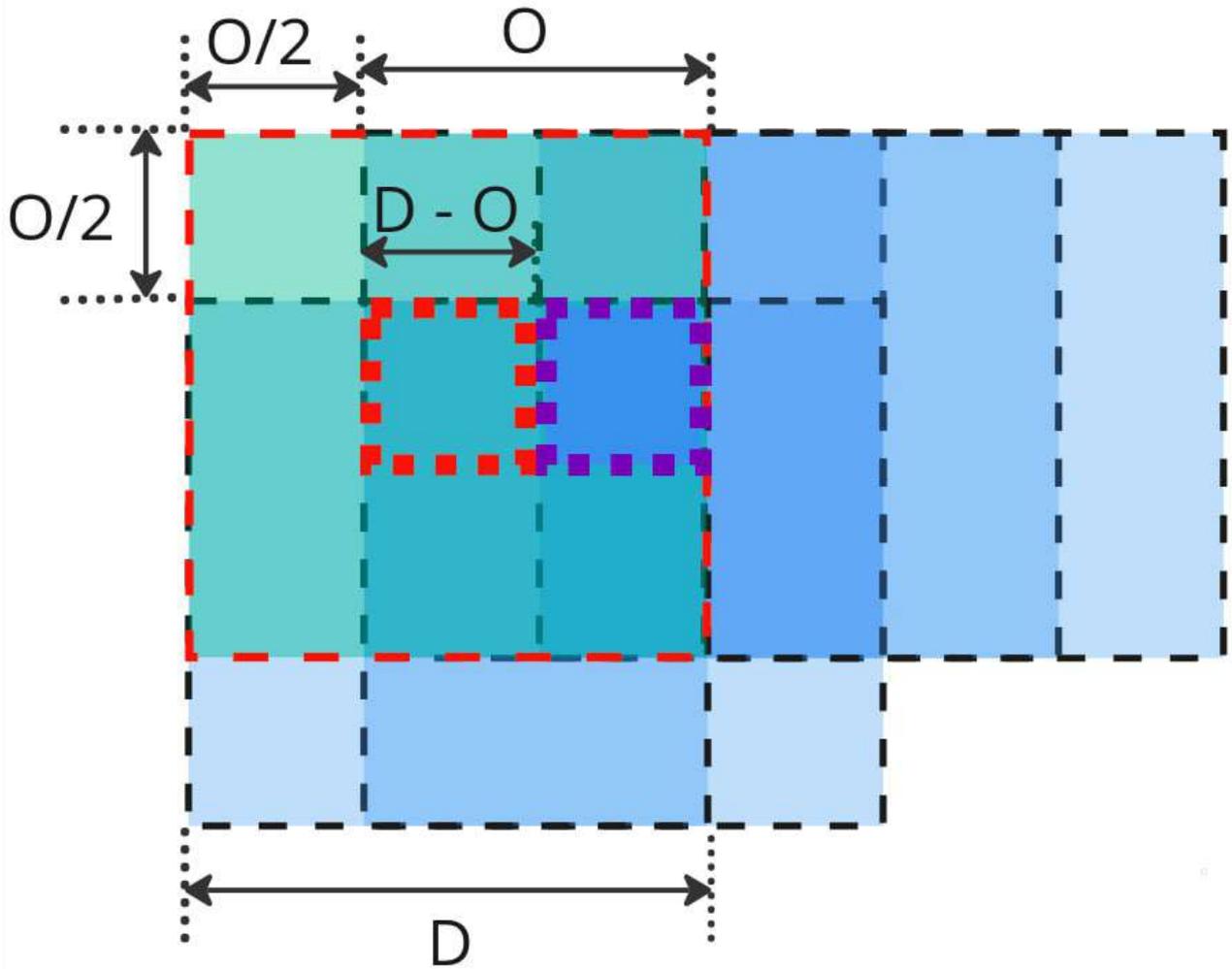


Рисунок 3.1 — Визуализация схемы построения накладывающейся сетки из фрагментов изображения. На изображении обозначены следующие параметры: D — размер фрагментов; O — величина наложения соседних фрагментов в пикселях; $(D - O)$ — размер подфрагментов, для которых определяются метки принадлежности кластеру; $\frac{O}{2}$ — размер рамки вокруг исходного изображения, для пикселей которой не будут получены метки принадлежности кластеру. Рассматриваемый фрагмент выделен светло-зеленой заливкой и красным тонким пунктиром по границам; подфрагмент, соответствующий рассматриваемому фрагменту — жирным красным пунктиром по границам; подфрагмент, следующий в сетке справа относительно рассматриваемого подфрагмента — фиолетовым жирным пунктиром по границам; соседние фрагменты выделены светло-синей заливкой (интенсивность заливки отображает количество накладывающихся друг на друга фрагментов). На изображенном примере выполняется соотношение $O = \frac{2D}{3}$.

Резюмируем преимущество описанной выше организации сетки из накладывающихся фрагментов с имеющим место свойствами из (3.2):

- Границы выделенных однородных регионов получаются более плавными, поскольку кластеризуемые подфрагменты имеют существенно меньший (в 5 раз для приведенного соотношения между D и O) размер стороны, чем исходные фрагменты;
- Требуется на порядок меньше вычислений, чем для случая, когда определяется метка кластера для каждого пикселя отдельно, т.е. для случая $O = D - 1$;
- Для каждого пикселя изображения однозначно определяется кластер;
- Кластеризация центрального подфрагмента позволяет более симметрично учитывать вклад удаленных пикселей в векторное представление фрагментов $V(p_{ij})$. Окраины на расстоянии не более, чем $\frac{\sqrt{2}D}{2}$, вносят вклад в векторное представление для пикселей центрального подфрагмента. В противном случае (когда $O = 0$), например, на метку верхнего левого пикселя фрагмента влияет правый нижний пиксель на расстоянии $\sqrt{2}D$;
- Фактически вторая сетка из подфрагментов позволяет в некоторых случаях оптимизировать расчет векторных представлений $V(p_{ij})$: для некоторого класса функций-дескрипторов (например, для линейных) V можно рассчитать векторные представления для подфрагментов, а затем эффективно получить векторные представления фрагментов с помощью векторных представлений составляющих его подфрагментов (в простейшем случае с линейными функциями через обычное усреднение представлений подфрагментов).

Теперь рассмотрим ограничения на возможные размеры входного изображения. В изображение размером $H \times W$ поместится следующее число фрагментов (при условии, что $H > D$ и $W > D$):

$$\begin{aligned}
 K_H &= \left\lfloor \frac{H - D}{D - O} \right\rfloor + 1, \\
 K_W &= \left\lfloor \frac{W - D}{D - O} \right\rfloor + 1, \\
 \tilde{H} &= O + K_H \times (D - O), \\
 \tilde{W} &= O + K_W \times (D - O).
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Таким образом, мы заранее не сможем определить принадлежность части не помещившихся в крайние фрагменты пикселей, лежащих за обрезанным изображением размером $\tilde{H} \times \tilde{W}$. Так же вокруг изображения с размерами $\tilde{H} \times \tilde{W}$ будет располагаться рамка шириной $\frac{O}{2}$ (четность O следует из (3.2)), для которой не будет получено меток кластера. Можно решить эту проблему как минимум двумя способами. В зависимости от целей и задач, стоящих перед применяющим метод исследователем, можно выбрать один из следующих вариантов:

1. Дополнить изображение с помощью зеркального отражения границ до размера, который позволяет кластеризовать все пиксели исходного изображения. В таком случае все пиксели, попадающие в окружающую изображение рамку ширины $\frac{O}{2}$, будут иметь некоторую неточность в оценке принадлежности кластеру, поскольку для них будет учитываться в том числе искусственная часть изображения;
2. После получения меток кластеров анализировать кадрированное изображение (сгор) без необработанной рамки, т.е. имеющее размер $(\tilde{H} - O) \times (\tilde{W} - O)$.

Второй вариант является более простым и при этом более точным с точки зрения получаемых меток кластеров, поэтому в дальнейшем изложении мы будем опираться на второй вариант.

3.1.2 Векторное представление фрагментов изображения

Для получения векторного представления фрагментов изображения p_{ij} , воспользуемся набором корреляционных функций по направлениям $\{S_2^d, L_2^d\}_{d \in \{x, y\}}$, вычисляемых по формулам (1.6), (1.7), (1.8), (1.9). Аналогичный выбор был сделан в работах [104; 105] для решения задачи стохастической реконструкции. Такой выбор, помимо прочего, обусловлен наличием у корреляционных функций необходимого для нашего метода свойства: корреляционные функции по направлению можно вычислять по объекту любой размерности с единственным ограничением — вдоль основного направления d должно быть не меньше пикселей, чем заданная максимальная длина корреляции L_{max} . Более широкий набор КФ использовался в методе из главы 2, где он показал свою эффективность с точки зрения описания морфологических свойств исходной

пористой среды, но в данном случае это приведет к слишком высокой вычислительной сложности метода. Чтобы на значения корреляционных функций для высоких длин корреляций меньше влиял шум, в методе рекомендуется ограничить максимальную длину корреляции следующим значением $L_{max} = \frac{D}{2}$. Можно выделить две (или три, если входное изображение является трехмерным) составляющие части векторного представления фрагмента в зависимости от направления d , по которому вычисляются корреляционные функции:

$$\begin{aligned} V^x(p_{ij}) &= \left[S_2^x[\cdot|p_{ij}], L_2^x[\cdot|p_{ij}] \right], \\ V^y(p_{ij}) &= \left[S_2^y[\cdot|p_{ij}], L_2^y[\cdot|p_{ij}] \right], \\ V(p_{ij}) &= \left[V^x(p_{ij}), V^y(p_{ij}) \right]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Таким образом векторные представления имеют следующие размеры: $V^x(p_{ij}) \in \mathbb{R}^{2L_{max}}$, $V^y(p_{ij}) \in \mathbb{R}^{2L_{max}}$, $V(p_{ij}) \in \mathbb{R}^{4L_{max}}$.

Для построения функции расстояния между фрагментами будем использовать усредненное по координатам L_1 -расстояние:

$$L_1^{avg}(v_1, v_2) = \frac{\sum_{i=1}^N |v_1[i] - v_2[i]|}{N}. \quad (3.5)$$

Выбор L_1 -расстояния обусловлен известным для этой функции свойством устойчивости к выбросам (по сравнению с L_2 -расстоянием), но данный выбор не является обязательным: возможно, например, использовать любое расстояние Минковского порядка p , возведенное дополнительно в степень p . Воспользовавшись (3.5), запишем нашу итоговую функцию расстояния между фрагментами, которой будем пользоваться в дальнейшем:

$$\begin{aligned} \rho(a, b) &= L_1^{avg}(V(a), V(b)) = \frac{\|V(a) - V(b)\|_1}{4L} = \\ &= \frac{\|V^x(a) - V^x(b)\|_1}{2L} + \frac{\|V^y(a) - V^y(b)\|_1}{2L} = \\ &= L_1^{avg}(V^x(a), V^x(b)) + L_1^{avg}(V^y(a), V^y(b)) = \\ &= \rho^x(a, b) + \rho^y(a, b). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Тот факт, что запись предложенного расстояния распадается на две компоненты по направлению, будет использован в дальнейшем для получения пороговых значений расстояния. Так же следует отметить, что предложенная функция не является метрикой для исходного пространства фрагментов в буквальном

смысле, поскольку для функций-дескрипторов возможны коллизии (в частности известно, что коллизии имеют место для корреляционных функций S_2 и L_2), и, следовательно из $\rho(a, b) = 0$ не следует $a = b$ (а только $V(a) = V(b)$).

Отдельно остановимся на том, что для предложенных функций-дескрипторов расстояние (3.6) может вычисляться между фрагментами различных размеров, единственное условие — это совпадение для них используемых корреляционных функций и максимальной длины корреляции L_{max} . В частности, расстояния вдоль отдельной оси ρ^x или ρ^y могут вычисляться между двумерным фрагментом p_{ij}^{DD} и одномерными фрагментами p_{kl}^{D1} или p_{kl}^{1D} . Мы воспользуемся этой возможностью в (3.7), когда для рассматриваемого изображения будут формулироваться условия принадлежности классам однородности.

3.1.3 Условия однородности изображения

Сначала нужно установить, имеет ли смысл пытаться выделять на изображении однородные зоны (а именно производить кластеризацию в пространстве векторных представлений фрагментов изображения $\{V(p_{ij})\}$), либо рассматриваемое изображение заведомо однородно. Проверим это с помощью анализа информации, содержащейся в самом входном изображении. Поскольку предложенные функции-дескрипторы (3.4) и рассчитывающееся с их помощью расстояние (3.6) не зависит от размера исходного фрагмента, рассчитаем распределение расстояний между исходным изображением U^c и множеством двумерных фрагментов этого изображения $\{p_{ij}\}_{ij}$, полученных с помощью метода разбиения U^c на фрагменты по сетке из 3.1.1:

$$F(x) = \mathbb{P}(\rho(U, p) \leq x). \quad (3.7)$$

Полученная функция распределения (3.7) буквально определяет, какая доля фрагментов находится на расстоянии не более x от исходного изображения в пространстве дескрипторов. Некоторое достаточное условие однородности изображения можно сформулировать в следующем виде: если достаточно большая часть фрагментов недостаточно сильно отстоит от исходного изображения, то нет смысла проводить кластеризацию (см. рис. 3.2 с визуализацией фрагментов изображения p_{ij} и исходного изображения U^c в пространстве признакового

представления). Сформулируем вышеописанное условие в формальном виде:

$$\mathbb{H}_{homo}(T_{homo}, \alpha) : F(T_{homo}) > \alpha, \quad (3.8)$$

где T_{homo} — это используемое пороговое значения расстояния, а α — доля фрагментов на расстоянии меньше, чем пороговое. Ниже в подпараграфе 3.1.4 будет предложен метод определения необходимого “минимального расстояния” T_{homo} , доля же фрагментов α определялась эмпирически.

В случае, если условие (3.8) отвергается, нужно провести кластеризацию множества фрагментов изображения $\{p_{ij}\}$ по их векторному представлению на заданное число кластеров K . Для этого возможно воспользоваться любым метрическим алгоритмом кластеризации. В программной реализации метода был использован алгоритм K-Means. Требуется отдельно отметить, что кластеризация с помощью K-Means — это единственная часть алгоритма, где используется L_2 расстояние, отличное от (3.6) (которое является, фактически, L_1 расстоянием).

Полученный после кластеризации набор центров кластеров $\{c_i\}_{i=1}^K$ естественно проверить на “существенность” с помощью следующего условия:

$$\mathbb{H}_{clusters}(T_{clusters}) : \exists i, j \ i \neq j : \rho(c_i, c_j) < T_{clusters}, \quad (3.9)$$

то есть фактически устанавливается, достаточно ли далеко полученные кластеры друг от друга в сравнении с некоторым заданным расстоянием $T_{clusters}$. Естественно предположить, что кластеризация не является существенной, если есть хотя бы два центра кластеров, которые лежат достаточно близко друг к другу (см. рис. 3.2 с визуализацией). В этом случае рационально попробовать выделить меньшее, чем K , число кластеров, а если $K = 2$, то выполнение условия указывает на то, что изображение однородно. Способ расчета порогового расстояния для этого условия так же будет предложен в следующем подпараграфе.

3.1.4 Вычисление пороговых значений расстояния

Изначально мы предположили, что фрагменты изображения размером $D \times D$ являются однородными — это свойство позволяет производить усредне-

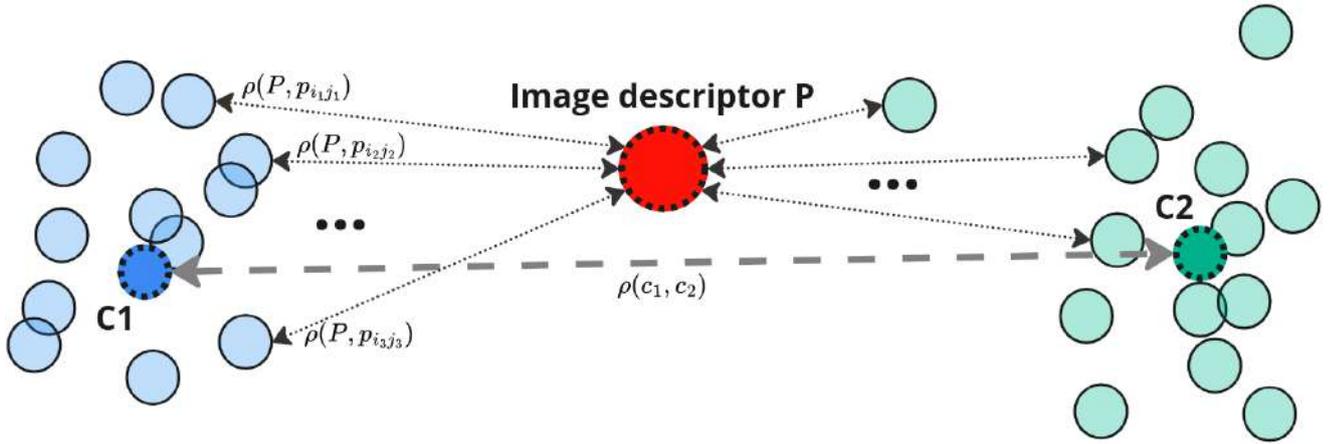


Рисунок 3.2 — Визуализация предложенных условий однородности изображения (3.8) и (3.9). Точки находятся в пространстве дескрипторов размера $4L_{max}$, для удобства восприятия рассматривается проекция на плоскость с помощью алгоритма PCA. Большой красной точкой обозначен вектор-дескриптор всего изображения U , синими и зелеными точками обозначены фрагменты, попавшие в два соответствующих кластера. Точки темно-синего и -зеленого цветов с пунктирной границей — это геометрические центры соответствующих кластеров, полученные с помощью алгоритма K-Means. Мелким черным пунктиром показано расстояния между отдельными фрагментами p_{ij} и изображением U из условия (3.8), крупным серым пунктиром показано расстояние между кластерами из условия (3.9). Все расстояния из условий однородности считаются по формуле (3.5), в то время как кластеризация проводится алгоритмом K-Means с использованием L_2 расстояния.

ние функций-дескрипторов внутри фрагментов такого же и меньшего размеров. Так же интуитивно понятным является тот факт, что чем ближе фрагменты находятся друг к другу (в координатной сетке исходного изображения), тем ближе должны быть их векторный представления, поскольку между значениями пикселей существует явная морфологическая зависимость. Таким образом, мы можем попробовать оценить величину порогового расстояния между фрагментами T через расстояния (в пространстве векторов-дескрипторов) между фрагментами, которые находятся на небольшом расстоянии друг от друга в координатах исходного изображения. Рассмотрим множество всех одномерных фрагментов вдоль ортогональных осей:

$$x : p_{ij}^{D1}, i = \overline{1, H - D + 1}, j = \overline{1, W},$$

$$y : p_{kl}^{1D}, k = \overline{1, H}, l = \overline{1, W - D + 1}.$$

Построим для одномерных фрагментов усредненную функцию расстояния в векторном пространстве дескрипторов (3.6) в зависимости от расстояния между фрагментами в пикселях:

$$P(r) = \mathbb{E}_{i,j} \rho^x(p_{i+r,j}^{D1}, p_{i,j}^{D1}) + \mathbb{E}_{k,l} \rho^y(p_{k,l+r}^{1D}, p_{k,l}^{1D}). \quad (3.10)$$

Значения полученной функции лежат в том же диапазоне, что и исходное расстояние (3.6). Заметим также, что для построения данной функции можно было бы использовать и двумерные фрагменты — в этом случае получится менее шумная (поскольку усреднение внутри корреляционных функций будет происходить для большего количества пикселей) оценка для векторов-дескрипторов $V(p)$, но кратно возрастет вычислительная сложность построения функции.

Таким образом возможно оценить пороговые значения расстояния T через функцию (3.10), связывающую расстояние между фрагментами на координатной сетке изображения и расстояние в векторном пространстве дескрипторов: На основе условий (3.8), (3.9) предлагается выделить следующие классы изображений:

1. Строго однородные изображения — это фактически изображения-текстуры, которые получаются в результате повторения некоторых идентичных шаблонов. Условие принадлежности к классу:

$$\mathbb{H}_{strictly} = \mathbb{H}_{homo}(T_1, \alpha_1) \wedge \mathbb{H}_{clusters}(T_1)$$

2. Слабо однородные изображения — это однородные с точки зрения статистических характеристик изображения. Условие принадлежности к классу:

$$\mathbb{H}_{weakly} = \neg \mathbb{H}_{strictly} \wedge \left(\mathbb{H}_{homo}(T_2, \alpha_2) \wedge \mathbb{H}_{clusters}(T_2) \right),$$

$$\mathbb{H}_{stationary} = \mathbb{H}_{homo}(T_2, \alpha_2) \wedge \mathbb{H}_{clusters}(T_2)$$

3. Промежуточные изображения — это изображения, которые не являются однородными ни в строгом, ни в слабом смысле, но при этом для них нельзя уверенно выделить отдельные однородные зоны. Условие принадлежности к классу:

$$\mathbb{H}_{transition} = \neg \mathbb{H}_{stationary} \wedge \mathbb{H}_{homo}(T_3, \alpha_3)$$

4. Неоднородные изображения — это изображения, внутри которых по статистическим характеристикам можно выделить две или более однородные зоны. Условие принадлежности к классу:

$$\mathbb{H}_{nonstationary} = \neg \mathbb{H}_{stationary} \wedge \neg \mathbb{H}_{transition}$$

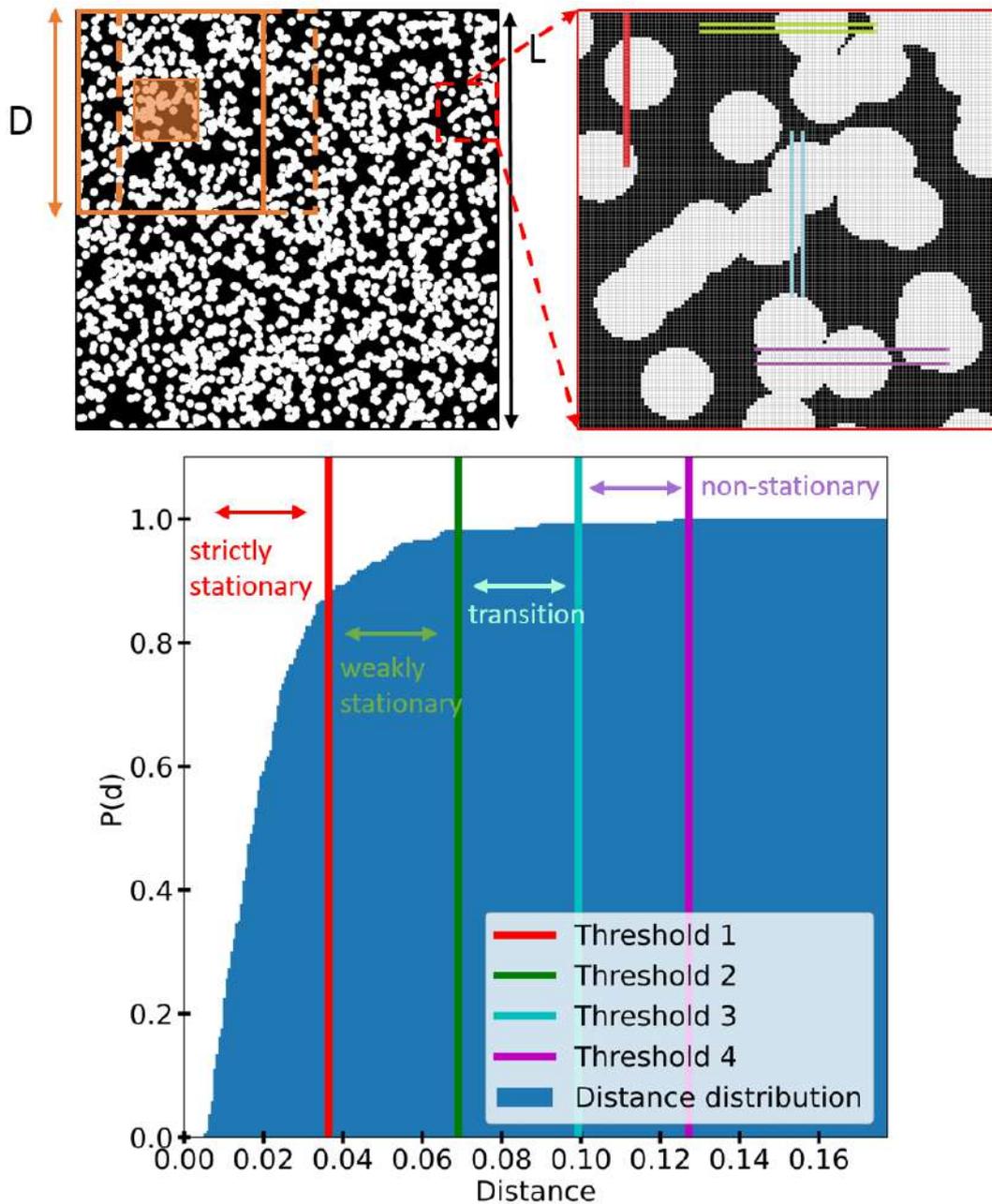


Рисунок 3.3 — Графическая иллюстрация способа расчета пороговых значений расстояния. Красным цветом обозначен порог T_1 для строго однородных изображений, зеленым — T_2 для однородных изображений, голубым — T_3 для изображений переходного типа, фиолетовым — T_4 для неоднородных изображений (см. равенства (3.11)). В верхнем левом углу находится исходное изображение упаковки Пуассоновских сфер, в правом верхнем углу — увеличенное изображение с визуализацией одномерных фрагментов, находящихся на заданном расстоянии друг от друга. Фрагменты на разном расстоянии обозначены соответствующим цветом: красным для $r = 1$, зеленым для $r = 2$, голубым для $r = 3$ и фиолетовым для $r = 4$. В нижнем углу находится гистограмма распределения расстояний (3.7) с отмеченными на ней пороговыми значениями расстояния. Видно, что приведенная на изображении гистограмма удовлетворяет условию однородности (3.8): T_1 покрывает долю более 0.8.

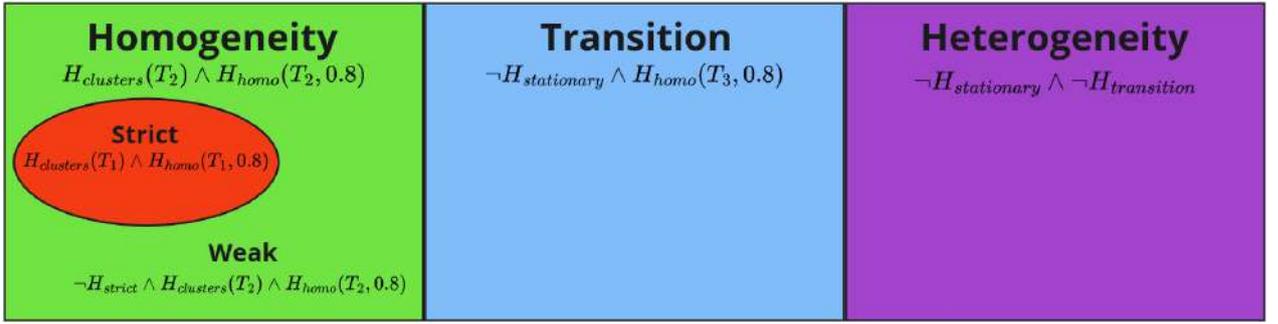


Рисунок 3.4 — Визуализация отношений между предложенными классами изображений: класс однородных изображений включает в себя подкласс строго однородных изображений; классы однородных, переходных и неоднородных изображений не пересекаются между собой; четыре класса вместе покрывают все множество изображений.

Для выделения обозначенных выше классов предлагаются полученные эмпирическим путем соответствующие значения параметров:

$$\begin{aligned}
 T_1 &= T_{homo_1} = T_{clusters_1} = P(1), \\
 T_2 &= T_{homo_1} = T_{clusters_1} = P(2), \\
 T_3 &= T_{homo_1} = T_{clusters_1} = P(3), \\
 T_4 &= T_{homo_1} = P(4), \\
 \alpha_1 &= \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 0.8.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

3.1.5 Алгоритм

Основная цель, которая стояла при разработке метода, состояла в том, чтобы предложить базовый алгоритм определения однородности изображения. Предлагаемый подход имеет несколько компонентов, которые можно заменять независимо друг от друга (например, в случае, когда замена имеет математическое или иное рациональное обоснование). Такими компонентами являются:

1. **Построения сетки фрагментов изображения** — в алгоритме может быть использован любой метод построения сетки. Описанный способ выбран из-за того, что квадратные фрагменты с фиксированным сдвигом окна размера $D - O$ делают вычисления более простыми

- и одновременно эффективными (по сравнению, например, с сдвигом окна на 1 пиксель). Данный метод описан в подпараграфе [3.1.1](#);
2. **Структурные дескрипторы** — в данной работе для получения векторных представлений фрагментов изображений используются корреляционные функции S_2 и L_2 . Важным свойством корреляционных функций является возможность рассчитать их для фрагмента изображения практически произвольного размера (единственное ограничение — размер фрагмента должен быть не меньше L_{max} по оси, вдоль которой производится расчет), что позволяет делать отображение фрагментов изображения различного размера (в том числе одномерных) в одно векторное пространство. Любые функции с подобным свойством применимы в описанном методе. Соответствующий подпараграф [3.1.2](#);
 3. **Кластеризация** — возможно применить любой алгоритм кластеризации, который использует функцию расстояния между парами объектов и обеспечивает сферическую форму кластеров. Например, алгоритм DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications with noise, [106]) не может быть применен в рамках данного метода, поскольку у него нет гарантий на форму кластеров. K-Means был выбран, поскольку хорошо вписывается в логику решения задачи, а так же является простым и распространенным методом.
 4. **Условия (не)однородности** — в работе было предложено два независимых условия (не)однородности. Проверка первого условия проводится с помощью функции распределения расстояний между векторным представлением всего изображения и множеством векторных представлений фрагментов этого изображения. Второе условие проверяется по попарным расстояниям между центрами получившихся на предыдущем этапе кластеров фрагментов. Предложенные условия не являются строго математически обоснованными, поэтому могут быть модифицированы или полностью заменены на более подходящие к конкретной задаче. Подробнее условия описаны в подпараграфе [3.1.3](#);
 5. **Вычисление пороговых значений расстояний** — В работе был предложен способ расчета пороговых значений расстояний с помощью построения функции, которая связывает расстояние в исходных координатах внутри изображения и расстояние между векторными представлениями одномерных фрагментов изображения. Основным

преимуществом предложенного метода является отсутствие потребности в любом способе разметки данных. Подробнее о вычислении пороговых значений написано в подпараграфе 3.1.4.

Итоговую схему метода можно посмотреть на рис. 3.5.

3.2 Эксперименты и результаты

Метод, описанный в предыдущем параграфе, был применен для всех тестируемых искусственных и реальных образцов пористых сред, таким образом для них были получены векторные представления фрагментов, пороговые значения расстояний и метки кластера для каждого пикселя исходного изображения.

Первый тестовый пример на рис. 3.6 — это квадранты с одинаковой пористостью, длиной границ и топологией пор. Такие изображения закономерно вызывают сложности у методов, использующих одноточечные статистики (например, корреляционную функцию S_1). Видно, что предложенный метод корректно выделяет однородные области синтетического изображения, при этом изображение попадает на границу между промежуточным (Transition) и неоднородным (Heterogeneity) классами изображений.

Далее логично было проверить результаты работы метода для заведомо однородных изображений. На основе анализа периодические структуры (например, кресты в верхнем левом углу на рис. 3.5) являются однородными в соответствии с строгим определением стационарности порождающего случайного процесса из [12]. Если мы применим описанную методологию к такому периодическому изображению, то будем наблюдать нулевые различия между векторными представлениями окон достаточного размера D , внутри которых помещается хотя бы один элементарный шаблон. Таким образом, при применении метода к таким изображениям с масштабом D большим, чем размер периодической элементарной ячейки, распределение расстояний (3.8) будет получаться практически полностью прижатым к нулю, и окажется заведомо левее, чем значение T_1 (см. первый пример на рис. 3.7). Это можно заметить по результатам на рис. 3.7: для сравнительно маленького масштаба $D = 10$ метод определяет периодическое изображение как неоднородное, при этом для

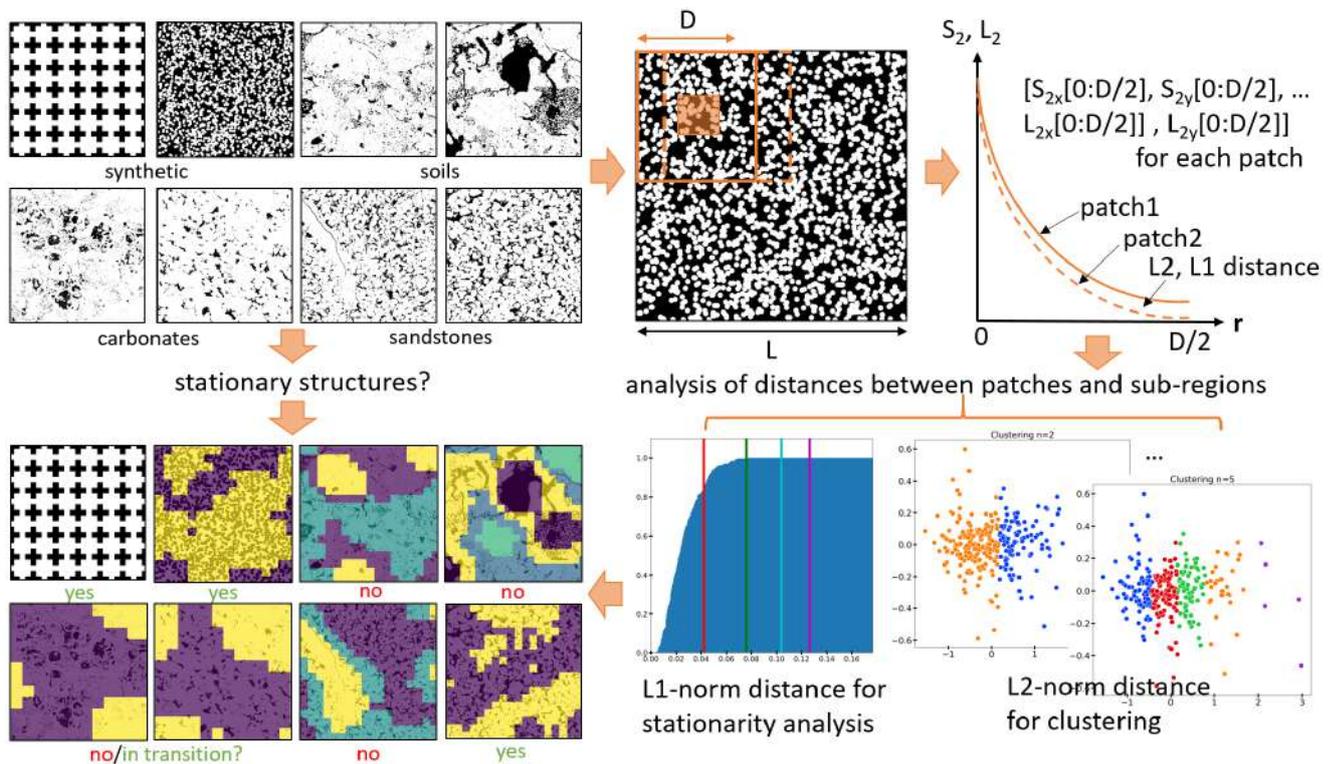


Рисунок 3.5 — Общая схема работы метода выделения однородных зон на изображении. Указанные обозначения: D — размер фрагмента изображения в пикселях; L — ширина изображения в пикселях; S_2 и L_2 — набор используемых корреляционных функций, литеры обозначают ось, вдоль которой считаются функции; L_{max} — максимальная длина корреляции. В левом верхнем углу находятся примеры различных бинарных 2D-изображений пористых сред. В середине верхней части визуализируется процесс извлечения фрагментов изображения с помощью скользящего окна. В правом верхнем углу показаны примеры рассчитанных корреляционных функций (и их разница) для двух различных фрагментов изображений с максимальной длиной корреляции $L_{max} = \frac{D}{2}$. В правом нижнем углу находится пример гистограммы расстояний (3.10) и результаты кластеризации на 2 и 3 класса. Точками на графике являются векторные представления фрагментов изображения, они спроектированы на плоскость с помощью PCA-преобразования. По гистограмме расстояний можно установить выполнение условия (3.8) с помощью отмеченных на ней пороговых значений расстояния T . Подписи “yes/no” в левом нижнем углу изображения отражают результаты работы алгоритма — является ли данная структура однородной или нет.

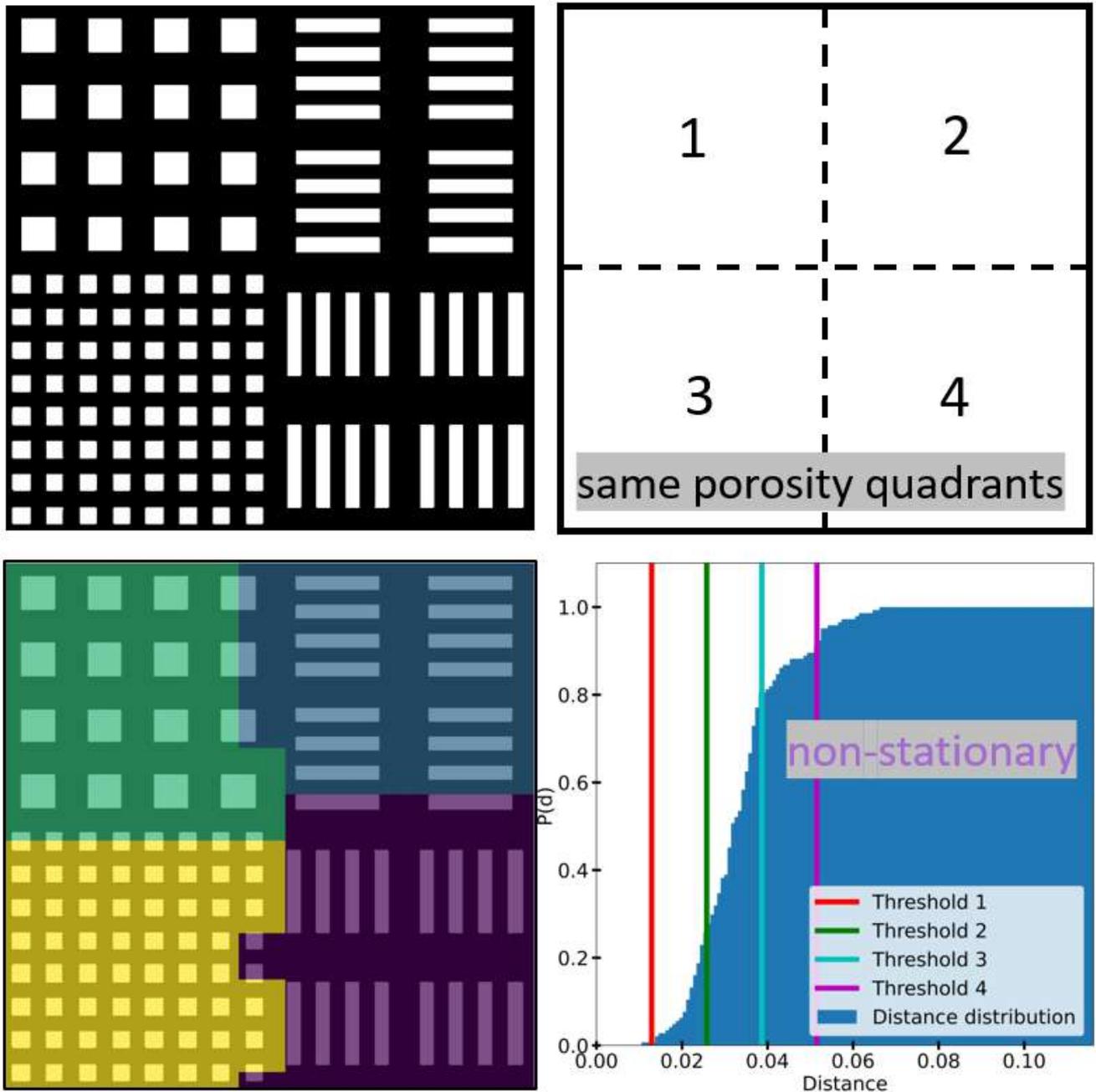


Рисунок 3.6 — Искусственный пример пористой среды, в которой четыре квадранта имеют одинаковую пористость, длину границ и топологию порового пространства. Можно наблюдать, что предложенная методология на основе корреляционных функций корректно выделяет все четыре квадранта в качестве отдельных кластеров и определяет данное изображение как неоднородное.

достаточного масштаба $D = 80$ (размер шаблона равен трети от размера изображения, т.е. $\frac{240}{3} = 80$) изображение становится строго однородным.

Одним из важных результатов анализа, представленного, например, на рис. 3.5 и 3.7, является то, что изображения реальных пористых структур никогда не бывают строго однородными (нужно смотреть на сегментации примеров и соответствующие им гистограммы распределений). То же самое можно сказать и о случайном изображении упаковки пронизываемых кругов с ограниченным разрешением на рис. 3.5 (второе изображение слева в верхней строке примеров), которое является результатом стационарного случайного процесса Пуассона, создающего однородную структуру [12]. Специально для таких структур был введен отдельный класс “слабо” (Weak Homogeneity) однородных изображений. Эта “нестрогая” однородность возникает из-за цифровой природы процедуры визуализации, которая выражается в ограниченном разрешении изображения [2; 107; 108]) и, что наиболее важно, из-за конечного размера самого изображения. В предложенном выше методе пороговые значения расстояний вычисляются как усредненное расстояние между соседними одномерными срезами, как показано на рис. 3.3.

Слабо-однородные структуры, такие как круги Пуассона и образцы некоторых естественных пористых сред, имеют большую часть ($\alpha > 0,8$) гистограммы распределения расстояний левее порогового значения T_2 . Для других реальных образцов основная масса распределения лежит правее T_2 при $D \rightarrow \frac{L}{2}$, но только ограниченная часть распределения выходит за T_3 . Таким образом можно предположить, что граница между T_2 и T_3 можно рассматривать как переходную зону, которая возникает из-за того, что изображения конечного разрешения не являются до конца репрезентативными. Иными словами, карбонатные пробы (два изображения в середине на рис. 3.7) можно было бы признать слабо однородными, если бы для анализа было бы взято более крупное изображение при условии, что оно будет содержать те же структурные признаки (т. е. при больших L значения порогов не сместятся вправо). Если основная масса распределения располагается справа от T_4 , то это является четким индикатором серьезной неоднородности, как видно на рис. 3.7 для образца почвы (последний снизу).

Как видно из рис. 3.7, размер окна D влияет на результаты нашего анализа. Если D слишком мало по сравнению с какой-либо репрезентативной частью структуры, распределение выпадет из порогов T_1 и T_2 . Хвост распределения,

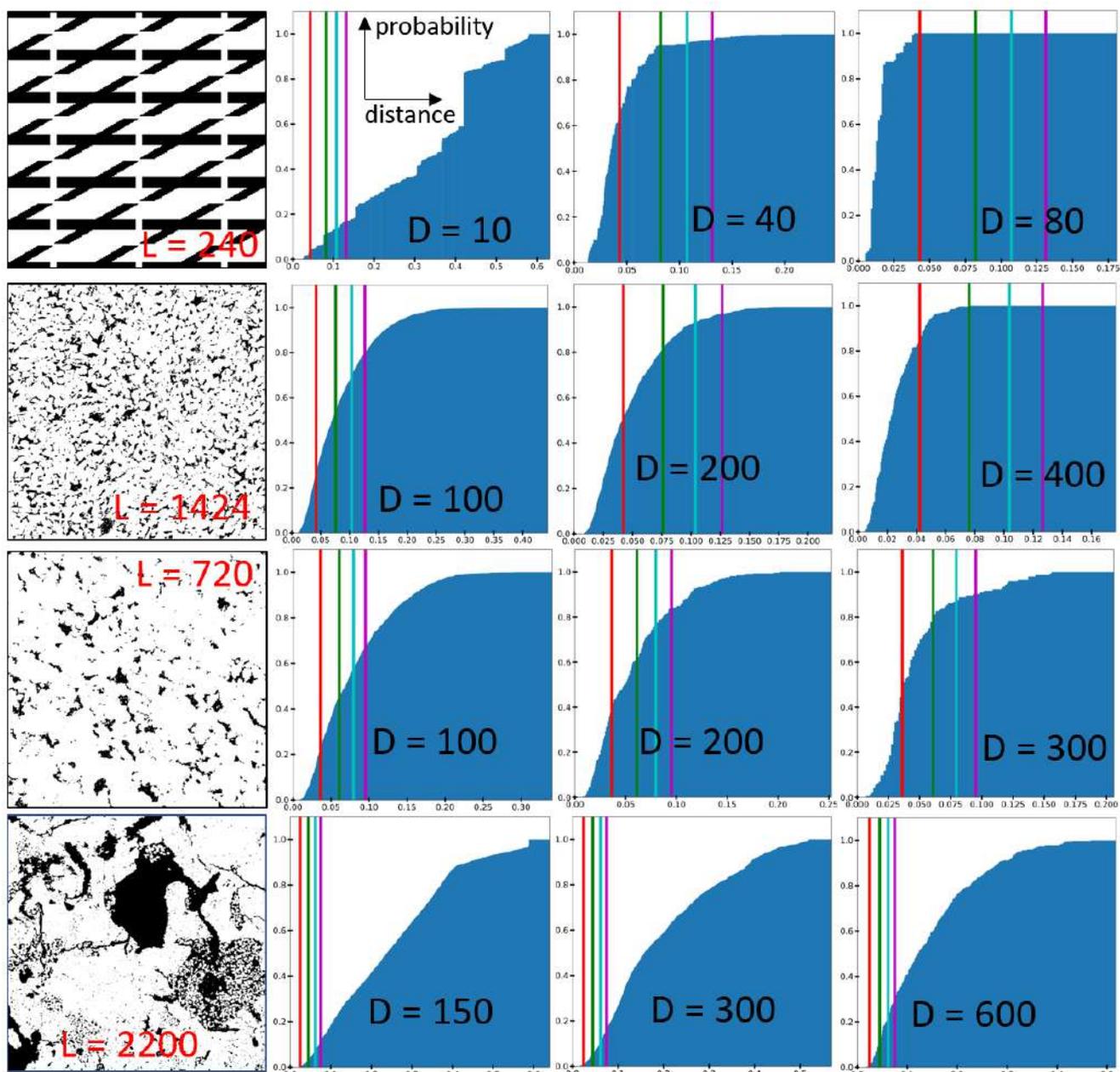


Рисунок 3.7 — Примеры работы метода для различных пористых сред в зависимости от величины фрагмента D . На каждой из гистограмм расстояния (3.7) можно увидеть, какую долю распределения покрывает соответствующее пороговое расстояние. По представленным результатам можно сделать следующий вывод для однородных в пределах изображений: чем больше рассматриваемая величина D , тем более “однородным” становится изображение с точки зрения предложенного метода, т.к. большая часть распределения покрывается пороговым расстоянием. Для неоднородного примера (нижняя ряд изображений) такого эффекта не наблюдается.

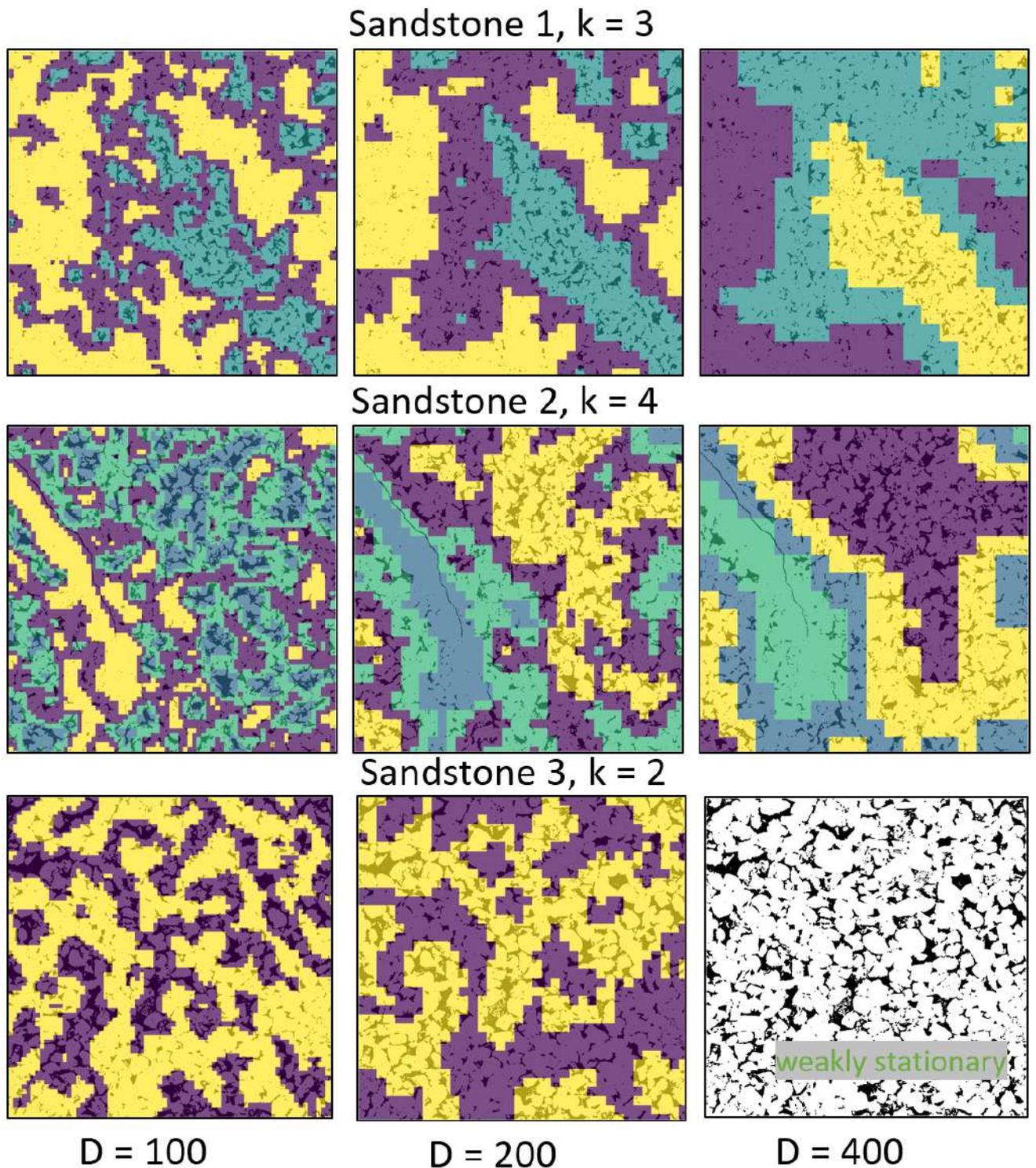


Рисунок 3.8 — Сегментация изображений на однородные регионы с помощью описанного метода для различных размеров фрагмента D : 100, 200, 400 и различного числа кластеров K : 2, 3, 4. Подфрагменты, относящиеся к одному региону однородности, раскрашены в одинаковый цвет. Для изображения, которое было определено как однородное, раскраска отсутствует. На иллюстрации можно наблюдать в динамике, как определение однородности изображения и границы однородных регионов меняются в зависимости от используемого размера фрагмента D .

находящийся в переходной зоне T_3 , может означать, что размер изображения близок к репрезентативному. При этом анализ изображения аналогичной структуры, но большего размера может привести к переходу в слабую однородность. Вполне возможно, что образцы карбонатов с рис. 3.7 демонстрируют именно такое поведение, но только при условии, что структура вне области изображения не имеет статистически отличных признаков от уже присутствующих на изображении. В таком случае увеличение размера изображения будет постепенно сдвигать распределение расстояний влево и достигать строгой однородности в пределе к бесконечному размеру изображения. Эта логика в значительной степени соответствует традиционной теории бесконечно больших структур [12; 21; 66].

Чтобы продемонстрировать влияние размера изображения на получаемые результаты, приведенный метод был применен к пяти изображениям сфер Пуассона с одинаковым пространственным разрешением, но увеличивающимся размером (до 8×10^3 пикселей по ширине L). Результаты подтвердили, что методология надежна и показывает однородность при использовании масштаба $D = 600$ и более пикселей. Однако, в то время как величины порогов были стабильными для этих изображений, распределения расстояний постепенно смещались влево с увеличением размера, а это в свою очередь предполагает, что для изображения бесконечного размера стационарность будет переходить из слабой в строгую. С другой стороны, реальные структуры для природных пористых сред не являются периодическими или бесконечными, поэтому всегда существует вероятность того, что генезис материала сделает невозможным обнаружение однородности области.

Кластеризация накладывающихся друг на друга фрагментов на основе их векторных представлений с помощью корреляционных функций позволяет разбивать изображение структуры на похожие области (см. рис. 3.8 с визуализацией получившихся кластеров однородности для различных реальных образцов). Изменение D приводит к выделению признаков с разным разрешением, а в пределе уменьшения размера фрагмента $D \rightarrow 1$ результат становится похож на сегментацию изображения [109; 110]. Это означает, что предложенный метод пространственного анализа позволяет автоматически разбивать изображение на однородные зоны в дополнение к определению того, однородно ли изображение или нет. Морфологический REV (representative elementary volume), основанный на значениях КФ, с одной стороны и половина от размера изображения с другой стороны могут служить логичными

нижней и верхней границами D соответственно. Нужно отметить, что в текущей версии метод определения целесообразного размера фрагмента D не является автоматическим, поэтому потенциальное расширение предложенной методологии для обеспечения автоматизированного анализа такого рода будет являться приоритетной целью для дальнейших исследований. Так же из рис. 3.8 можно заметить, что анализ неоднородности на основе КФ местами очень похож на вариации пористости, особенно для малых D . Анализ пористости в виде зернистости [12] или локальной пористости [111] является полезным подходом, который привел к раскрытию гипер-однородности [112] и локальной зависимости пористости-проницаемости. Однако одной пористости (или корреляционной функции S_1) недостаточно для характеристики стационарности, как видно на уже рассматриваемом ранее упрощенном синтетическом примере с четырьмя квадрантами на рис.3.6. Структуры с одинаковой пористостью могут иметь очень разные структурные особенности, далекие от стационарности. При поиске репрезентативности ранее использовались пористость, площадь поверхности или топологические характеристики, такие как функционалы Минковского [56; 113–115], которые не отличили бы все квадранты сразу (все четыре квадранта для пористости, с номерами 2 и 4 для других пространственных усредненных метрик) из примера 3.6. То же утверждение верно и для пространственно усредненных корреляционных функций. Таким образом, анализ на основе S_1 , пространственно усредненных КФ и анализ на основе КФ S_2 & L_2 по ортогональным направлениям дают разные результаты. Сразу возникает вопрос: достаточно ли использовать функции S_2 & L_2 , вычисленные по ортогональным направлениям, для анализа однородности изображений пористых среды? Результаты, представленные в данной главе, являются устойчивыми применительно к рассматриваемым образцам пористых сред, но необходимо учитывать информативность корреляционных функций, используемых для анализа [58; 59]. Это означает, что если по любым КФ можно сделать вывод о нестационарности исследуемой структуры, то обратное неверно, если используемая совокупность КФ не обладает близкой к 100% информативностью. Косвенным доказательством того, что результаты определения однородности, представленные в этой главе, являются устойчивыми, является то, что теоретически стационарные структуры, такие как кресты и диски Пуассона, действительно определились как однородные. К сожалению, на данный момент методика оценки информативности существует только для

пространственно усредненной корреляционной функции S_2 [58; 59]. Таким образом, включение в анализ стационарности большинства существующих КФ имеет практическое значение.

Анализ стационарности необходим для описания структур и получения их физических свойств, поскольку нестационарность будет ставить под угрозу гомогенизацию и оценку эффективных макроскопических свойств [19; 69; 75; 78; 93; 116] или сравнение морфологии материалов [1]. Так же такой анализ является особо ценным для извлечения признаков или сжатия структуры пористой среды для машинного обучения [1; 117–119], строгих аналитических оценок [12] и моделирования среды [120] для быстрой оценки ее свойств. В контексте измерений стационарность тесно связана с репрезентативностью [121; 122], поскольку измерения в пределах нерепрезентативного объема будут зависеть от места этого измерения.

Количественная оценка однородности изображений необходима так же для применения стохастических реконструкций [19; 102], особенно тогда, когда используются усредненные корреляции [12; 18–20; 25; 41; 42; 51; 58; 59; 72; 88; 91; 93; 94; 96–102; 104; 105; 123]. В работе [123] было показано, что периодические структуры (т.е. строго стационарные в соответствии с представленной классификацией) могут быть точно восстановлены с помощью процедуры реконструкции. На основании текущих данных можно предположить, что для слабо-стационарных структур с высокой информативностью КФ можно создавать реконструкции с такими же физическими свойствами; однако точные реконструкции невозможны без полной корреляционной карты. Естественное развитие данной идеи следующее: для нестационарных сред точные реконструкции могут быть выполнены путем разделения на стационарные/нестационарные области с последующими отдельными процедурами реконструкции, которые будут учитывать локальные и глобальные корреляционные функции. Таким образом представленный здесь метод разделения изображения на однородные зоны имеет высокое практическое значение для получения многомасштабной цифровой модели пористой среды.

3.3 Выводы

В этой главе был представлен новый метод оценки однородности изображений. Используя корреляционные функции с достаточной информативностью, рассчитанные по направлениям, и кластеризацию фрагментов исходного изображения по их дескрипторам на основе рассчитанных КФ, можно не только оценивать однородность всего изображения, но и автоматически разбивать изображение на однородные зоны в зависимости от используемого масштаба фрагментов. С помощью метода оценки однородности удалось выделить строго и слабо стационарные типы структур и экспериментально показать, что природные материалы без периодических структурных ячеек не бывают на практике строго однородными.

Хотя представленная методология фокусируется только на цифровых изображениях в масштабе от км до нм, возможно, тот же подход будет работать для субнанометровых (молекулярных) структур, где такие показатели, как функция радиального распределения (L_2), могут быть извлечены экспериментально без получения реального изображения [83;124–126]. Проблема масштаба также может повлиять на выбор параметров для анализа (не)однородности и, таким образом, требует автоматизации. Можно рассчитывать, что методология, предложенная в этой главе, найдет свое применение во многих областях исследований, связанных с материалами, структурами и измерениями/моделированием в таких структурах.

В рамках изложенного метода рассматривались только бинарные (двухфазные) 2D структуры, но подход применим к анализу общих многофазных 3D структур: корреляционные и кросс-корреляционные функции могут быть вычислены для любого количества фаз, а ковариации могут быть использованы для изображений в градациях серого или для скалярных изображений в общем случае.

Использование предлагаемой методологии не ограничивается изображениями пористых сред, необходимых для вычислений в масштабе пор или наук о Земле в целом. Описанный метод можно эффективно применять к широкому спектру структур, от космологии и инженерии до материаловедения и биологии.

Отдельно нужно заметить, что решаемая в данной главе задача очень близка задаче сегментации изображения пористой среды, при этом предложен-

ный метод решения не использует размеченных данных. Поэтому естественно предположить, что ответы (предсказания) метода можно использовать в качестве обучающих данных для алгоритмов машинного обучения, в частности сверточных нейронных сетей (как для наиболее идейно подходящего варианта). Изложенная идея об получении и использовании искусственных данных, но уже для задачи сегментации-классификации, будет развита в следующих главах 4 и 5.

Глава 4. Сегментация КТ-изображений пористых сред

Исследователи пористых сред в течение многих десятилетий подтверждают, что структура пористой среды, т.е. пространственная организация составляющих фаз, значительно влияет на все процессы, протекающие в пористых средах. Например, в случае почв структура отражает все ее ключевые функции, такие как рост и функционирование микроорганизмов [127], вегетация растений [128; 129], трансформация органического вещества [130], сопротивление эрозии [131], перенос растворенных веществ [81; 132] — и это далеко не полный список. В данном контексте под структурой пористой среды подразумевается пространственное распределение ее компонент в большом промежутке физических масштабов: от метра до нанометра [25; 133; 134].

Различные образцы пористых сред могут иметь сходную макроскопическую структуру, но в то же время иметь сильно различные свойства за счет отличий в микроскопической структуре, размерах пор и их связности [54; 135]. Так как все свойства пористых сред и их структура неразрывно влияют друг на друга, такие модели как распределение размеров пор [136] и корреляционные функции [19] могут быть использованы для анализа свойств пористых сред [39]. Более того, информация о структуре пористой среды может быть использована для прямого вычисления ее физических свойств [51; 137–140].

Существует множество методов для оценки структуры пористой среды. Эти методы могут быть грубо разделены на два класса:

1. **Непрямые** — это методы, которые используют агрегированную информацию о пористой среде;
2. **Прямые** — это методы, которые используют непосредственно изображение пористой среды.

Например, первый класс методов включает в себя инверсию кривой водоудержания, ядерный магнитный резонанс и ртутно-газовую порометрию [141], а во втором классе преобладают классические методы анализа шлифов (thin section) [28; 29], компьютерной томографии (КТ) [31; 32; 142], сканирующей электронной микроскопии (SEM) [143] и FIB-SEM [134]. Прямые методы предоставляют информацию в виде 2D- или 3D-изображения (например, КТ предоставляет информацию в виде изображения в градациях серого U^g), что является более надежным форматом данных в сравнении с форматами, используемыми

непрямыми методами, которые в результате своей работы могут предоставлять приблизительные или просто недостоверные данные [144]. С другой стороны, прямые методы обычно страдают от компромисса между разрешением и размером выходного изображения [40], а так же являются более трудоемкими и затратными с точки зрения времени проведения исследования. Вышеописанный компромисс может быть разрешен с помощью совмещения изображений разных масштабов [25]: таким образом возможно построить многомасштабную 3D-модель пористой среды произвольной сложности [1; 25].

КТ в настоящее время является наиболее известным подходом к изучению структуры пористых сред среди прямых методов визуализации на микроуровне из-за того, что КТ получает трехмерное изображение и имеет неразрушающий характер. Однако, результаты визуализации КТ представляют собой стеки изображений (тензоры) U^g в градациях серого, значение в каждом пикселе/вокселе которых пропорциональны локальному ослаблению рентгеновского излучения вещества, содержащегося в конкретном пикселе/вокселе. Такой формат данных затруднительно использовать в исходном виде, поэтому требуется применения алгоритмов обработки изображений для извлечения более полезной информации, которая, в свою очередь, необходима для структурного анализа пористой среды [145]. Более подробное описание принципов работы компьютерного томографа в контексте построения синтетического КТ-изображения будет дано в главе 5.

Данная глава посвящена методам анализа изображений пористых сред, полученных с помощью КТ-съемки. Таким образом, рассматриваемые в данной главе методы отличаются от методов статистического моделирования, затронутых в главе 1 с точки зрения используемых входных данных. Материал этой главы подготовлен на основе исследования, проведенного в статье [1]. В параграфе 4.1 будет дана характеристика основных методов сегментации изображений пористых сред, актуальных на момент написания работы. Основное внимание будет уделено сегментации с помощью моделей сверточных нейронных сетей. Затем в параграфе 4.2 будет дан обзор способов измерения качества сегментации пористых сред с помощью классических метрик компьютерного зрения и некоторых доменных метрик. Далее в параграфе 4.3 будет описан подход к построению обучающей выборки для задачи сегментации при отсутствии размеченных данных посредством получения разметки с помощью алгоритмов сегментации, не требующих обучающих данных. В результатах исследования

будет показано, что обученная на полученных таким образом данных модель сверточной нейронной сети демонстрирует высокое качество сегментации как с точки зрения классических метрик компьютерного зрения, так и с точки зрения доменных метрик: анализа корреляционных функций и численного моделирования течения флюида внутри воксельной модели, полученной по сегментированному изображению пористой среды.

4.1 Методы сегментации изображений пористых сред

Ключевой этап анализа структуры пористой среды по КТ-изображению U^g — это сегментация (или бинаризация в случае, когда мы рассматриваем в качестве фаз только поровое пространство и твердое вещество). Эта процедура относит каждый пиксель (воксель) КТ-изображения в градациях серого в одну из выделенных фаз. Формально говоря, эта процедура может быть определена как функция, которая ставит в соответствии некоторой пористой среде в градациях серого U^g другую пористую среду U^c с фиксированным числом фаз:

$$U^g \longrightarrow U^c : U^c[x] = f_{seg}^{cls}(V(x|U^g)) = y, y \in \{1, \dots, N\}, \quad (4.1)$$

где:

- N — это число фаз;
- x — это координата пикселя изображения пористой среды;
- $V(x|U^g)$ — это признаковое представление исходной пористой среды в точке x ;
- f_{seg}^{cls} — это модель сегментации;
- U^c — это результирующее изображение, разделенное на N фаз.

При этом число фаз для сегментации может определяться как для текущей задачи, т.е. в supervised случае для набора данных, под которые производится оптимизация модели, так и быть гиперпараметром алгоритма в unsupervised случае, когда необходимо выделить на входном изображении некоторое количество однородных зон (именно такая постановка задачи рассматривается в предыдущей главе 3).

Нужно отметить, что одной информации КТ может быть недостаточно, чтобы сегментировать различные химические или минеральные компоненты,

так как на рентгеновское поглощение влияет эффективный атомный номер и плотность вещества одновременно. Несмотря на это, данная неоднозначность может быть приближенно решена с помощью сканирования на нескольких энергиях и решения обратной задачи [146]. Сканирование на нескольких энергиях может производиться с использованием моно- или полихроматических источников, но синхротронное излучения обычно более предпочтительно потому, что полихроматический случай требует решения более сложной обратной задачи и добавляет больше шума в результаты. В вышеизложенном контексте, сегментация КТ-изображения — это в некотором роде аппроксимация, в основном из-за эффекта частичного объема (partial volume effect). В реальности материалы и границы между ними имеют практически бесконечное разрешение, в то время как КТ имеет фиксированный размер пикселя/вокселя, поэтому пиксели/воксели могут содержать смесь фаз. Так же в большинстве случаев требуется дополнительная предобработка КТ-изображений из-за наличия шумов и артефактов реконструкции, которые приводят к потере исходной информации.

Текущие лучшие (state-of-the-art) методы сегментации включают в себя локальные методы, такие как индикаторный криггинг (indicator kriging) [147; 148], метод роста регионов (region growth) [149] или метод сходящихся активных контуров (converging active contours) [63]. В этих методах, в отличие от глобальных [150], каждая выделяемая фаза имеет два порога t_{lower} и t_{upper} . Например, в случае бинаризации, задаются два порога: нижний t_{lower} , для интенсивностей пикселей ниже которого мы уверены в том, что это поры:

$$U^g(x) < t_{lower} \Rightarrow U^c(x) = 1,$$

и верхний, выше которого мы уверены в том, что это твердое вещество:

$$U^g(x) > t_{upper} \Rightarrow U^c(x) = 0.$$

Далее все пиксели/воксели между этими порогами обрабатываются с помощью различных статистических методов и классифицируются по фазам. Как показывается в исследовании [151], соответствующие пороги могут быть выбраны вручную или автоматически. Но, к сожалению, как показано в работе [152], никакая автоматическая техника не обеспечивает лучшего качества, чем опытный оператор. Нужно отметить, любые операторы склонны совершать ошибки, поэтому результаты разметки существенно отличаются в зависимости от опыта оператора.

Другой класс сегментационных алгоритмов основывается на алгоритмах обучения без учителя, в частности на методах кластеризации [153]. На первый взгляд это может казаться идеальным решением для задачи сегментации, но в реальности результаты таких алгоритмов далеки от безупречных. Кластеризация требует априорно задать число кластеров как гиперпараметр метода. К примеру, метод случайных марковских полей (Markov random field, MRF) может выполнять многофазную сегментацию с автоматическим вычислением количества кластеров, но у него есть другие значимые гиперпараметры [154]. Более того, качество сегментации таких методов обычно уступает аналогам — это не удивительно, учитывая относительную простоту методов кластеризации.

Для того, чтобы избежать ошибок оператора и исключить неаккуратность автоматических методов, можно использовать методы машинного обучения с учителем, в том числе с обучением моделей нейронных сетей [155; 156]. В свою очередь, самая большая проблема для методов обучения с учителем — это отсутствие разметки (ground truth) для обучения. В этой главе будет показан способ, с помощью которого можно обучить модель сверточной нейронной сети без разметки, используя в качестве истинной сегментации результаты работы настроенных оператором алгоритмов без учителя.

В этой главе мы будем исходить из предположения, что текущие state-of-the-art методы локальной сегментации могут быть использованы для получения разметки. Ниже будет показано, что даже с помощью такой процедуры разметки можно получить устойчивую технологию для обучения supervised моделей. Качество модели сверточной нейронной сети, полученной таким образом, будет оценено с помощью различных метрик, в том числе вычисления физических свойств пористой среды (а именно проницаемости). Методология создания истинной во всех смыслах разметки для выборки КТ-изображений будет обсуждаться в главе 5, посвященной методу построения синтетического КТ. Нужно отметить, что разработка математической модели синтетического томографа была мотивирована результатами текущего исследованием.

4.1.1 Сегментация с помощью сверточных нейронных сетей

С точки зрения формальной математики нейронные сети представляют из себя функции, дифференцируемые по некоторому набору параметров:

$$f_{NN}(x|\theta) = y \quad (4.2)$$

где:

x — это входное представление объекта;

y — это выход сети;

θ — это настраиваемые параметры сети.

Дифференцируемость функции (4.2) по набору параметров позволяет искать оптимальное значение этих параметров θ^* с помощью решения (обычно численного) оптимизационной задачи:

$$\begin{cases} R(X, Y|\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(f_{NN}(x_i|\theta), y_i), \\ R(X, Y|\theta) \rightarrow \min_{\theta}, \end{cases} \quad (4.3)$$

где

(x_i, y_i) — это пара объект-разметка;

$f_{NN}(x_i|\theta)$ — это предсказание модели нейронной сети;

$\{x_i, y_i\}_{i=1}^N$ — это обучающая выборка;

$L(x, y)$ — это функция потерь;

$R(X, Y|\theta)$ — это эмпирический риск, рассчитанный по всей обучающей выборке.

Возможность автоматической настройки параметров модели под решаемую задачу является ключевым преимуществом алгоритмов машинного обучения. Конкретный вид обучающей выборки и функции потерь зависит от природы решаемой задачи.

Существуют различные виды классификации нейронных сетей. Можно классифицировать их, например, по типу данных, для которых они предназначены:

- **Структурированные (или табличные) данные** — в этом случае объект x представляет из себя набор числовых и категориальных признаков;

- **Последовательный данные** — текст, звук, либо другие варианты последовательностей: в таком случае x представляет из себя некоторую упорядоченную дискретную последовательность величин $\{x(t)\}_{t=1}^T$;
- **Пространственные данные** — это, как правило, различные виды изображений, которые в рассматриваемом здесь случае являются изображениями пористой среды U^g и/или U^c .

Архитектурой нейронной сети называют набор принципов (или используемых шаблонов), по которым строится функция f_{NN} . В архитектуре принято выделять отдельные слои — это стандартизованный небольшой набор математических операций, который широко используется внутри различных нейросетевых архитектур. Таким образом возможно выделить несколько классов нейронных сетей по виду слоев, которые имеют определяющее значение в структуре модели. Представим некоторый список классов архитектур, который при этом не является исчерпывающим:

- **Полносвязные** — это сети, где преобладают полносвязные слои вида $Z = WX + b$, такие сети оперируют структурированными данными [157];
- **Сверточные** — это сети, где преобладают сверточные слои, которые выполняют операцию дискретной свертки над входными пространственными данными x [158];
- **Рекуррентные** — это сети, где преобладают рекуррентные слои, которые используют в качестве входных данных не только текущий элемент входной последовательности, но и некоторый вектор состояния, полученный на предыдущих итерациях обработки последовательности [159].

Как можно заметить, классы архитектур сетей напрямую связаны с видами используемых входных данных.

Естественным образом для решения задачи сегментации изображений (в которой исходное представление данных является пространственным) наиболее подходящими являются сверточные архитектуры нейронных сетей. Менее очевидным является вид выходных данных. Исторически рассматривались различные варианты, и изначально в контексте решения данной задачи исследовались архитектуры, в которых сеть предсказывает метку для центрального пикселя входного изображения [160]. В таком случае архитектура сети состояла из набора сверточных слоев, которые в конце переходили в несколько полносвязных слоев. Такая архитектура является наиболее простой, но вы-

числительно неэффективной, поскольку для сегментации всего изображения приходится многократно подавать на вход одни и те же фрагменты изображения с небольшим сдвигом (в предельном случае на 1 пиксель). В контексте решения вышеописанной проблемы с производительностью возникли полносверточные нейронные сети, которые принимали на вход и выдавали на выходе изображение [161]. Это, с одной стороны, позволило решать задачу (4.1) фактически напрямую, а с другой получить значительный прирост качества моделей.

На текущий момент для численного решения задачи (4.3) применяются, в основном, градиентные методы, поскольку обычно пространство оптимизируемых параметров θ имеет огромную размерность [162]. Из-за невозможности вычислить градиент напрямую на всей обучающей выборке (так как обычно число объектов N измеряется сотнями тысяч) применяются методы стохастического градиентного спуска, и, таким образом, на вход сети приходит некоторый набор объектов фиксированного размера. Такой набор называется порцией (или batch) данных, и её размер является гиперпараметром метода обучения модели. Помимо размера порции данных, у алгоритма минимизации существует много других параметров — можно условно поделить их на две группы: внутренние параметры метода (скорость обучения, величина импульса и другие) и параметры стратегии обучения (количество порций данных в одной эпохе обучения, количество эпох, изменение внутренних параметров метода оптимизации по некоторому расписанию, критерий останова и другие).

Перед подачей порции обучающих данных (или данных для предсказания, в таком случае нужно исключить из рассмотрения манипуляции с y) на вход полносверточной нейронной сети необходимо провести некоторую подготовку:

1. Нарезать исходное изображения на фрагменты, при этом размер фрагментов не может быть слишком большим (иначе не получится проинформировать предсказание с помощью модели либо шаг численного метода) и слишком маленьким (иначе потеряются морфологические и цветовые свойства изображения). Зачастую используется размер фрагмента, являющийся степенью двойки (256 или 512);
2. (Опционально) провести т.н. аугментацию данных, т.е. некоторое преобразование фрагмента изображения $\tilde{x} = f_{aug}^x(x)$, для которого известно аналогичное преобразование изображения с разметкой $\tilde{y} = f_{aug}^y(y)$, при этом пара изображений после преобразования (\tilde{x}, \tilde{y}) должна оставаться корректной с точки зрения разметки для решаемой задачи;

3. Предобработать полученные фрагменты изображений: для цветных изображений часто используется стандартизация (аналогичная (2.10)) по каналам, для изображений в градациях серого используется деление на максимально возможное значение интенсивности 255 (таким образом значения обработанного изображения лежат в отрезке $[0, 1]$);
4. Сформировать порцию данных в тензоры (один для предсказания или два с учетом разметки для обучения) из нескольких фрагментов изображений.

Предположим, что в нашем распоряжении есть некоторая обучающая выборка (X, Y) для задачи сегментации. Резюмируя написанное выше, для корректного определения процедуры обучения модели нейронной необходимо следующее:

1. Выбрать архитектуру и затем модель сверточной нейронной сети и алгоритм инициализации её параметров;
2. Определить функцию потерь $L(x, y)$;
3. Выбрать численный метод оптимизации для решения (4.3);
4. Зафиксировать алгоритм подготовки порции данных;
5. Сформировать стратегию обучения.

Таким образом, для получения итогового результата — обученной модели, необходимо зафиксировать множество гиперпараметров в методологии обучения. В параграфе 4.3 будет подробное описание методологии обучения, которая применялась в исследовании [2].

4.2 Метрики качества сегментации изображений пористых сред

Для оценки качества модели сегментации можно использовать различные виды метрик:

- Метрики классификации, рассчитанные для каждого пикселя/вокселя отдельно, и усредненные для всего изображения, т.е. pixel-wise;
- Специализированные метрики сегментации, которые принимают в качестве аргументов пару изображений предсказания-истинная разметка;
- Доменные метрики из области моделирования в пористых средах.

Ниже рассмотрим каждый из типов метрик более подробно.

4.2.1 Попиксельные метрики

Существует множество различных по픽сельных (pixel-wise) метрик классификации. В качестве примера естественно привести функции потерь, которые используются для обучения моделей: кросс-энтропию (4.10) и dice (4.11). Для того, чтобы получить единственную величину, характеризующую качество сегментации изображения, необходимо усреднить значение метрики по всему тестовому изображению.

4.2.2 Метрики сегментации

Рассмотрим метрики, которые были использованы в исследовании [2]: доля правильных ответов (accuracy), точность (precision), полнота (recall), усредненная точность (average precision, PR-AUC), отношение площади пересечения к площади объединения (intersection over union, IoU).

Для того, чтобы дать формальное определение вышеописанным метрикам, удобно ввести следующие обозначения (см. рис. 4.1):

- **TP** (true positive) — число объектов, для которых предсказанный позитивный класс является правильным;
- **FP** (false positive) — число объектов, для которых предсказанный позитивный класс является неправильным;
- **TN** (true negative) — число объектов, для которых предсказанный негативный класс является правильным;
- **FN** (false negative) — число объектов, для которых предсказанный негативный класс является неправильным.

Accuracy — это доля корректно предсказанных пикселей относительно общего числа пикселей.

Долю правильных ответов можно вычислить следующим образом:

$$A = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}.$$

Это классическая метрика, которая широко применяется на практике, но в то же время она очень плохо подходит для несбалансированных данных (в том

числе и для нашей задачи сегментации пористых сред, поскольку средняя пористость образцов из исследования [2] составляет 18%, то есть твердая фаза встречается примерно в 5 раз чаще, чем пустоты).

Точность (precision) определяется как доля правильно предсказанных пикселей позитивного класса относительно общего числа предсказанных пикселей позитивного класса.

Как можно видеть из рис. 4.1, precision вычисляется следующим образом:

$$P = \frac{TP}{TP + FP}. \quad (4.4)$$

В контексте оценки качества сегментации высокое значение точности говорит о том, что модель уверена в своих положительных предсказаниях. Нужно в то же время отметить, что модель может недооценивать величину пористости образца даже при высоких значениях точности.

Полнота (recall) определяется как доля правильно предсказанных пикселей позитивного класса относительно общего числа позитивных пикселей.

Полноту (recall) можно вычислить следующим образом:

$$R = \frac{TP}{TP + FN}. \quad (4.5)$$

В контексте оценки качества сегментации высокое значение полноты говорит о том, что предсказанная моделью пористость в основном соответствует действительной. Нужно, тем не менее, отметить, что модель может переоценивать величину пористости даже при высоком значении полноты.

IoU — это отношение между площадью (или объемом) пересечения множества пикселей, принадлежащих к позитивному классу, и множества пикселей, предсказанных моделью как позитивных, к площади (или объему) объединению этих же множеств.

Более формально это выражение можно записать следующим образом:

$$IoU = \frac{TP}{FP + TP + FN}. \quad (4.6)$$

Высокое значение метрики IoU обычно говорит о высоком качестве сегментации в целом. К недостатком данной метрики можно отнести необходимость задания порога t для позитивного класса, поскольку метрика оперирует не вероятностями \hat{p} , предсказанными моделью, а полученными по этим вероятностям с помощью процедуры отсечения по порогу дискретными метками классов.

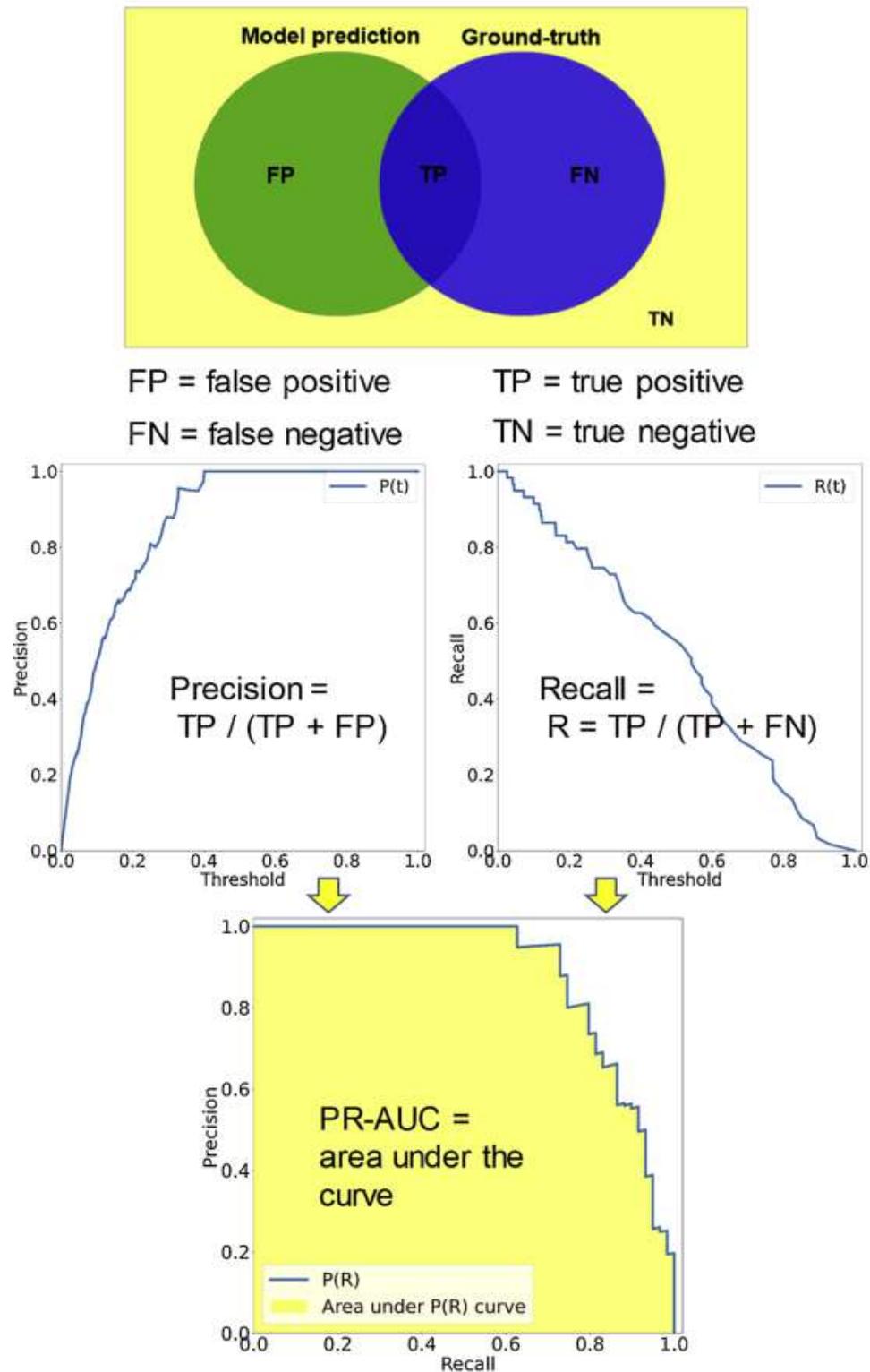


Рисунок 4.1 — Визуализация методики расчета метрик сегментации. В верхней части изображения находится наглядная иллюстрация матрицы ошибок (confusion matrix) со всеми возможными сочетаниями прогнозируемых и предсказанных значений: FP (false positive), TP (true positive), FN (false negative), TN (true negative). В средней части рисунка продемонстрированы кривые точности и полноты в зависимости от величины порога классификации. В нижней части рисунка показано построение кривой точности-полноты и, соответственно, определение значения метрики усредненной точности (PR-AUC).

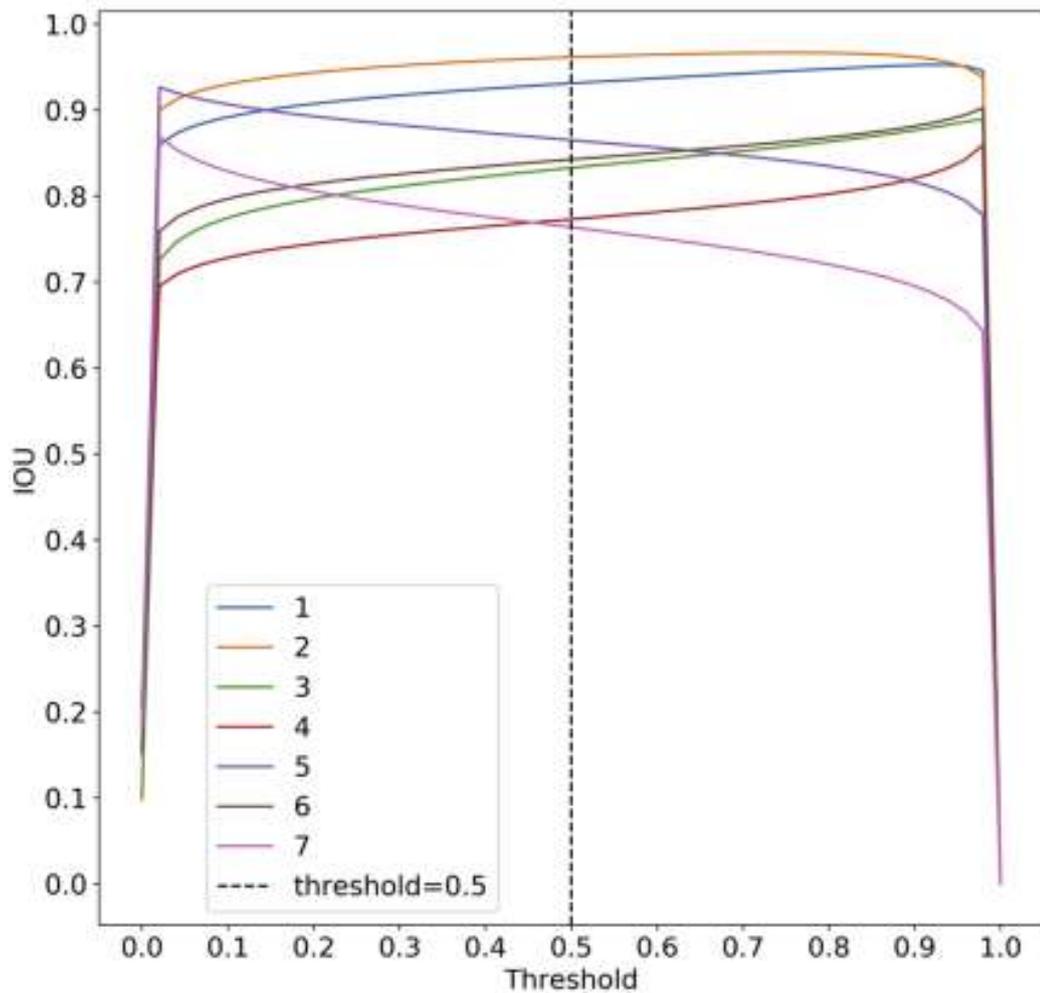


Рисунок 4.2 — Демонстрация возможности наличия зависимости качества сегментации моделей, обученных на различных наборах данных, по метрике IoU от порога вероятности t . Для каждого из рассматриваемых образцов построена отдельная кривая. При этом в среднем оптимальная величина порога находится в районе $t = 0,5$. Пример взят из исследования [2].

Чтобы получить бинарное изображение сегментации с помощью модели сверточной нейронной сети, нужно выбрать отсечку вероятности t , после которой пиксель изображения считается принадлежащим к истинному классу (в нижеизложенном исследовании использовалось значение $t = 0,5$). Нужно отметить, что перечисленные выше метрики сегментации как правило сильно зависят от того, какая величина порога будет выбрана (см. рис. 4.2). Чтобы оценить качество модели в общем, а не для конкретной величины порога, нужно воспользоваться соответствующей метрикой.

Для любой модели можно построить зависимость $P(t)$ (точность в зависимости от величины порога) и $R(t)$ (полнота в зависимости от величины порога),

см. примеры графиков на рис. 4.1. Через эти соотношения мы можем получить PR-AUC кривую посредством исключения из зависимостей переменной t , т.е. с помощью параметризации precision от recall напрямую — $P(R)$. Далее можно рассчитать метрику PR-AUC. **PR-AUC** — это площадь под $P(R)$ кривой.

Данная метрика позволяет оценить качество модели, не производя выбор дополнительного параметра t величины порога.

4.2.3 Моделирование в масштабе пор

Также для оценки качества сегментации пористой среды, выполняемой произвольной моделью, можно сравнивать гидродинамические свойства оригинальной пористой среды против полученной с помощью сегментации. Проницаемость (т.е гидравлическая проводимость нормализованная на скорость течения жидкости) — это очень чувствительная к изменению локальной структуры величина [101]. Более того, это одно из самых важных физических свойств пористой среды. Свойства потока жидкости можно рассчитать численно с помощью решения уравнения Стокса. Постановку задачи для обобщения уравнения Навье-Стокса для жидкостей с низкими числами Рейнольдса можно найти в [163]. На практике, как правило, решается следующая система:

$$\begin{cases} \mu \Delta \mathbf{v} - \nabla \mathbf{p} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \end{cases} \quad (4.7)$$

где

$\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ — это поле скорости;

μ — это вязкость жидкости;

$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ — это поле давления.

Для того, чтобы доопределить задачу, необходимо задать граничные условия. Граничные условия можно задать следующим образом: они определяются для входящих и выходящих поверхностей моделируемого 3D-объекта, а остальные четыре грани исследуемого объема закрываются твердым веществом, что является не очень хорошим способом задания граничных условий с точки зрения вычисления полного тензора проницаемости [51], но вполне подходит для

нашей цели сравнения свойств порового пространства, предсказанного обученной моделью, против реального. В обозначенном выше случае уравнение Стокса может быть решено для давления и скорости с помощью численных методов. В этой работе был использован решатель (solver) уравнения Стокса методом конечных разностей FDMSS [164] с пространственной схемой, дающей 4-ый порядок точности. Данная схема решения менее точная, чем схемы мультирелаксации по решетке Больцмана [139; 165; 166], но она менее требовательна к вычислительным ресурсам и позволяет производить эксперименты на обычном персональном компьютере. Для того, чтобы обеспечить хорошую сходимость численного эксперимента, нужно, как правило, провести не менее $3,5 \times 10^3$ итераций метода до выполнения критерия останова $E_{NM_{relative}} < 0,05$.

После численного решения уравнения Стокса (4.7) проницаемость можно посчитать с помощью закона Дарси:

$$K = \frac{\mu L Q}{\delta p S} = \frac{\mu L \langle \mathbf{v} \rangle}{\delta p}, \quad (4.8)$$

где:

- K — это проницаемость;
- μ — это вязкость жидкости;
- L — это расстояние между градиентами давления;
- Q — поток через площадь сечения S ;
- $\delta p = P_{out} - P_{in}$ — это разность давлений между стоками и истоками;
- S — площадь сечения;
- $\langle \mathbf{v} \rangle$ — это усредненная скорость потока.

В геологических и почвенных приложениях обычно используют насыщенную гидравлическую проводимость вместо проницаемости, здесь мы преобразовали K в K_{sat} ($\text{см} \times \text{день}^{-1}$) для нормальных условий (температура для вычисления вязкости воды = 20°C). В качестве метрики качества сегментации можно использовать относительную ошибку величины (4.8), которая вычисляется по формуле:

$$Error_{relative} = \frac{K_{seg}}{K_{GT}} - 1, \quad (4.9)$$

где:

K_{seg} — это насыщенная гидравлическая проводимость сегментированного 3D-изображения;

K_{GT} — это насыщенная гидравлическая проводимость 3D-изображения разметки.

Для каждого 3D-изображения в случае, если используются запирающие граничные условия на стенки, целесообразно вычислять три значения метрики вдоль каждой из ортогональных осей.

4.2.4 Метрики на основе структурных дескрипторов

Для того, чтобы сравнить структуры пористых сред друг с другом, можно использовать их структурные дескрипторы, а именно корреляционные функции для бинаризованных изображений U^c и ковариационные матрицы для изображений в градациях серого U^g [167], усредненные по всем (двум в двухмерном случае и трем в трехмерном) ортогональным осям. Для того, чтобы сделать корреляционные функции независимыми от значения пористости, их целесообразно нормализовать по стандартным формулам (1.10), (1.11).

Рассчитанные по образцам дискретные функции можно использовать для визуального сравнения, построив графики с интересующей нас характеристикой для изображения разметки и изображения сегментации, либо можно воспользоваться подходящей для наших целей метрикой между двумя векторами в пространстве \mathbb{R}^r , где r — это максимальная длина корреляции. Самый простой вариант такой метрики — это расстояние между векторными дескрипторами пористой среды в пространстве L_2 . Именно эта метрика была использована для анализа качества полученной сегментации в исследовании [2]. Так же нужно отдельно отметить, что аналогичным образом (в том же векторном пространстве и с той же метрикой близости L_2) в предыдущих главах 2, 3 производится кластеризация.

4.3 Эксперименты и результаты

В данном параграфе будет описано исследование применимости алгоритма сегментации пористых сред с помощью сверточных нейронных сетей [2]. Цель данного исследования была сформулирована следующим образом: понять, какое влияние оказывают морфологические свойства образцов и размер обучающей выборки на качество обученных моделей сверточных нейронных сетей. В случае явного положительного влияния размера обучающей выборки (что в итоге и было получено) основной фокус в исследованиях алгоритмов сегментации естественным образом может сместиться в сторону построения достаточно большой и разнообразной обучающей выборки, которая обеспечит высокое качество сегментации для изображений пористых сред с разными морфологическими и цветовыми свойствами. Таким образом логичным продолжением данного исследования является усовершенствование численного алгоритма построения синтетической томографии, которое было сделано в главе 5. Ниже будет описана вся логика проведенного исследования, приведена оценка результатов с помощью различных метрик сегментации и сделаны выводы о перспективах предложенного метода обучения сверточных нейронных сетей.

4.3.1 Образцы породы: КТ и разметка

Для проведения исследования были выбраны 7 3D-образцов пористых сред (почв) различного размера, качества и свойств. Такой выбор обусловлен желанием проверить, насколько хорошо обученная модель сверточной нейронной сети сможет обобщить свойства пористых сред, не встречавшихся в тренировочных данных. Для того, чтобы обучение и валидация происходили на образцах одинакового размера, все изображения были обрезаны до размера 700^3 вокселей. КТ-изображения образцов были получены с помощью настольного томографа SkyScan-1172 [32; 35], разрешение съемки образцов варьировалось в диапазоне $15,85 - 15,88 \mu m$.

Для того, чтобы получить обучающую выборку и провести дальнейшее моделирование течений в масштабе пор, необходимо было выполнить сегментацию

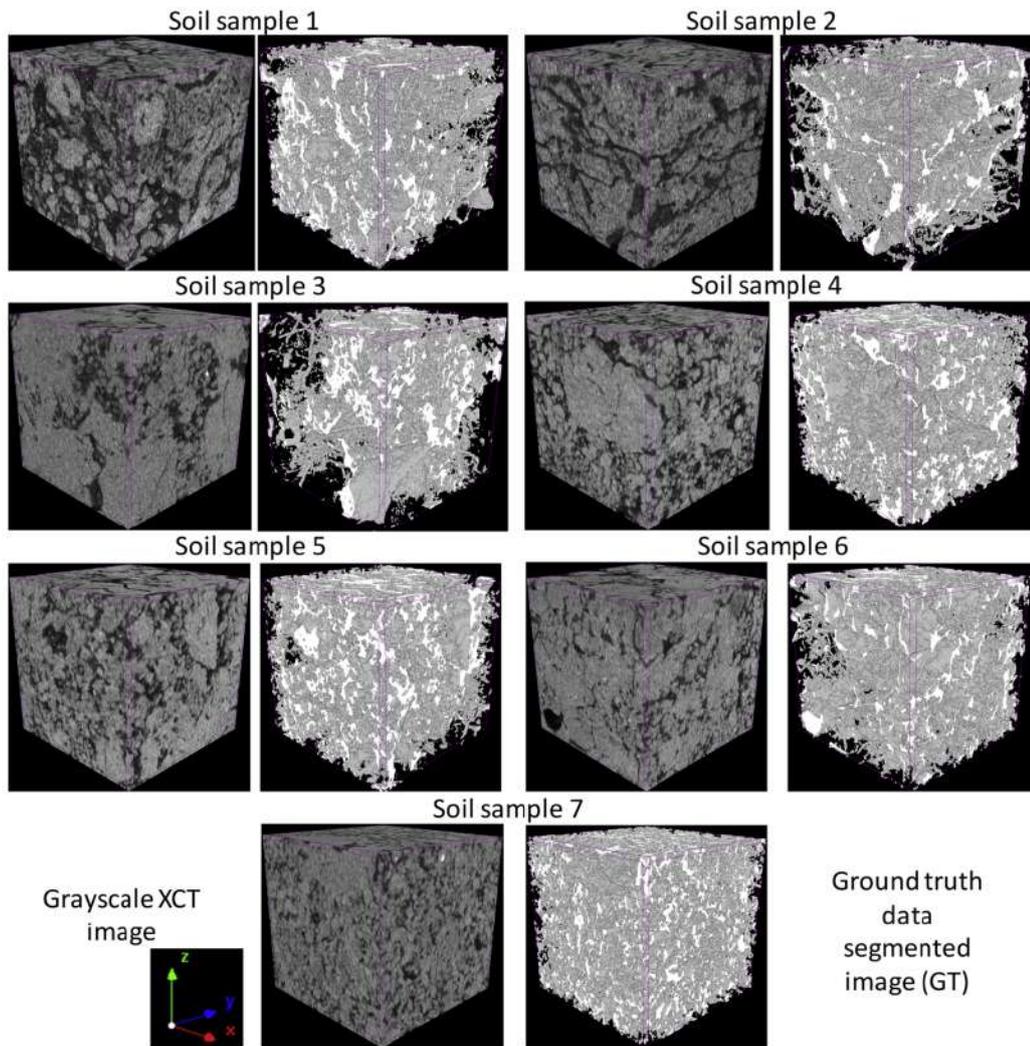


Рисунок 4.3 — Визуализация образцов, участвовавших в исследовании [2]. Для каждого из 7 образцов слева находится КТ-снимок в оттенках серого, справа бинарная маска сегментации, полученная с помощью unsupervised методов.

(бинаризацию) исходных КТ-изображений на поровое пространство и твердую фазу. Для решения этой задачи были использованы проверенные state-of-the-art алгоритмы unsupervised сегментации: метод активных сходящихся контуров (converging active contours) [63] и метод растущих регионов (region growing) [168] (методы были реализованы в программном модуле [10]). Для каждого КТ-изображения параметры методов подбирались оператором, в качестве итоговой разметки был выбран наилучший результат сегментации для двух методов сегментации и всего опробованного множества параметров. Далее полученные бинарные изображения были использованы в качестве разметки для обучения нейросетевой сегментации. Оригинальные КТ-изображения и соответствующая им сегментация для всех образцов представлены на рис. 4.3.

4.3.2 Обучение нейросетевых моделей

Далее опишем особенности методологии обучения сверточных сетей, использованные в исследовании. В качестве основы архитектуры сегментационной модели использовалась U-net [161]. Данная архитектура показала свою эффективность для решения задач сегментации различной природы [169–171]. Эта архитектура состоит из двух частей — кодировщика (encoder) и декодировщика (decoder). Входные данные в виде 2D-изображения поступают на вход в сжимающий сверточный слой (downsampling convolutional block) кодировщика и преобразуются на выходе в признаковое представление исходного изображения. Это представление реконструируется до изначального размера с помощью разжимающего разверточного слоя (upsampling deconvolutional block) декодировщика. В результате работы модели на выходе получается так называемая маска сегментации. Для того, чтобы уменьшить потерю информации во время преобразований, в U-net используются сквозные соединения (skip-connections) между соответствующими блоками кодировщика и декодировщика. В рассматриваемом исследовании в качестве кодировщика была использована предобученная на Imagenet [172] модель ResNet-101 [173]. Такой выбор кодировщика является обычной практикой в лучших на настоящий момент архитектурах для решения задачи сегментации [174]. Более того, данный подход так же позволяет быстрее производить обучение, потому что модель Resnet имеет меньшее число параметров, чем оригинальный кодировщик U-net.

Во время обучения модели (как было указано в параграфе 4.1) целесообразно применять техники аугментации. В исследовании были последовательно использованы следующие преобразования:

- Вырезание из фрагмента случайного подфрагмента (crop) размера 64×64 с последующим ремасштабированием (upscale) подфрагмента обратно в размер 128×128 ;
- Поворот и вращение подфрагмента на 90 градусов;
- Упругие преобразования координатной сетки подфрагмента.

Каждое преобразование применялось с вероятностью $p = 0,5$. Использовался размер порции данных = 64. Входной тензор для нейронной сети формировался следующим образом:

1. Исходные фрагмент КТ-изображения размером 128×128 копируется 3 раза, формируя тензор с тремя каналами размера $128 \times 128 \times 3$. Такое преобразование применяется из-за того, что предтренированная (pretrained) на ImageNet архитектура принимает на вход трехканальные изображения;
2. К получившемуся “цветному” фрагменту изображения применяется стандартизация с использованием статистик каналов, посчитанных на ImageNet (этот шаг опять же вытекает из предобучения используемого энкодера на данном наборе данных);
3. Набор из 64 фрагментов объединяются в четырехмерный тензор размера $128 \times 128 \times 3 \times 64$;
4. В полученном тензоре производится смена порядка осей на следующий: $(3, 2, 0, 1)$ (нумерация осей начинается с нуля). В результате чего получается тензор размера $64 \times 3 \times 128 \times 128$, который и подается на вход модели.

Более полную и подробную схему использованной сверточной архитектуры можно посмотреть на рис. 4.4.

Для численного решения задачи оптимизации был использован вариант стохастического градиентного спуска Adam [175] со следующими параметрами:

learning rate = 10^{-4} — скорость обучения;

weight decay = 10^{-4} — коэффициент регуляризации;

$\beta_1 = 0,9$ — импульс по координатам;

$\beta_2 = 0,99$ — импульс по скорости изменения координат.

В процессе обучения параметр *learning rate* понижался в два раза каждый раз, когда величина функции потерь, вычисленная на валидационном наборе данных, оставалось на плато (т.е. не убывала) в течении 10 эпох.

Модель обучалась предсказывать класс порового пространства в качестве положительного класса. На выходе модели использовалась функция активации мягкого максимума (softmax), которая позволяет преобразовать ответ модели в вероятности рассматриваемых классов:

$$\hat{p}_k = \frac{e^{out_k}}{\sum_{i=1}^N e^{out_i}}, k \in \{1, \dots, N\},$$

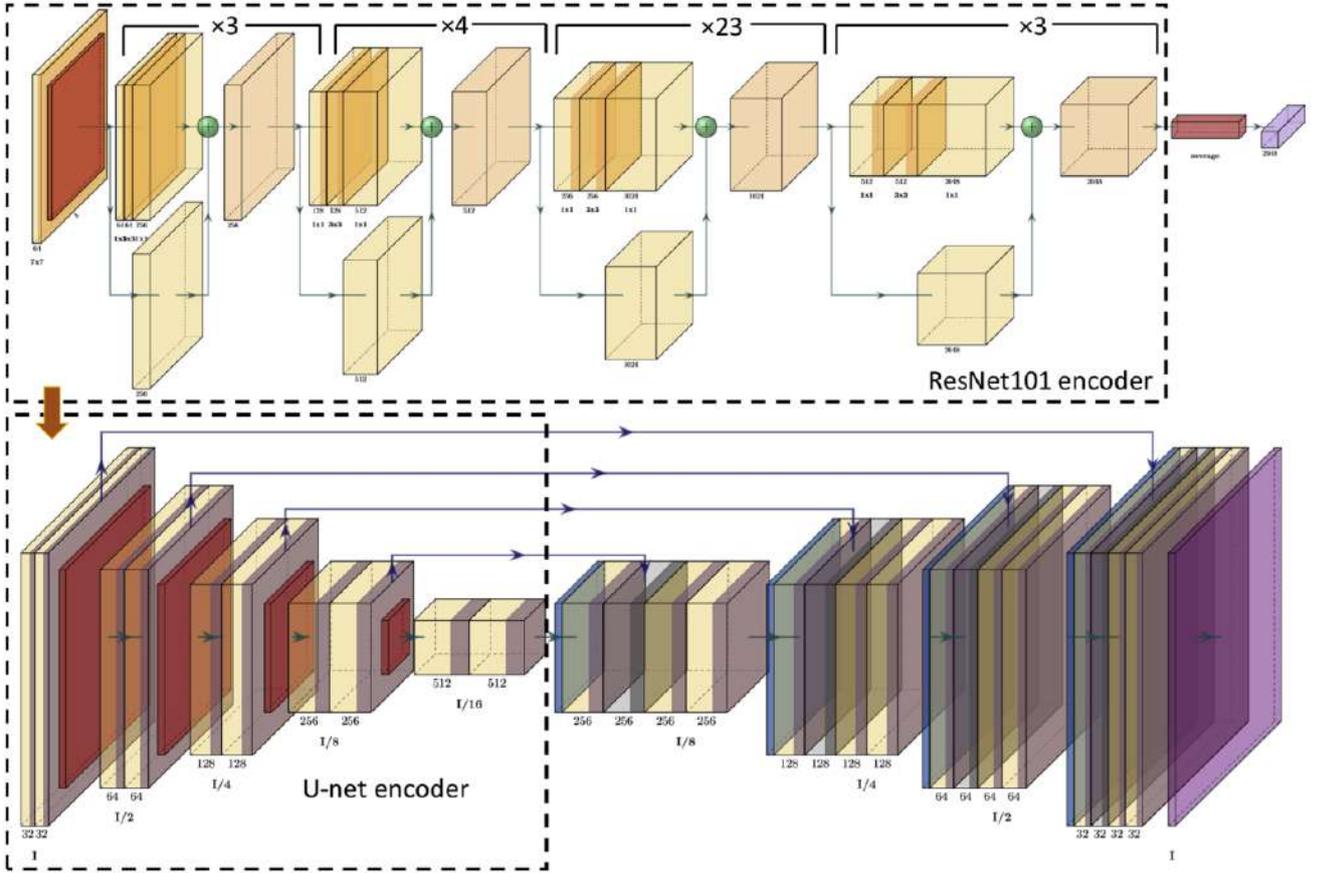


Рисунок 4.4 — Архитектура U-net-подобной полносверточной нейронной сети, использовавшаяся в исследовании [2]. Стрелками обозначается направление движения данных: прямая передача тензоров и сложение через skip-connections. В верхней части изображения находится архитектура кодировщика ResNet101, с помощью которого заменяется стандартный U-Net кодировщик.

где k — это номер предсказываемого класса, а out_i — это выход модели для класса i , \hat{p}_k — это оценка вероятности класса k , полученная с помощью применения мягкого максимума к выходу модели. Функция потерь состояла из суммы взвешенной кросс-энтропии (weighted cross-entropy, WCE) (4.10) и сглаженного коэффициента Дайса (Dice loss, [176]) (4.11):

$$WCE(p, \hat{p}) = - \sum_{h,w} [\beta p_{h,w} \log(\hat{p}_{h,w}) + (1 - p_{h,w}) \log(1 - \hat{p}_{h,w})], \quad (4.10)$$

$$Dice(p, \hat{p}) = 1 - 2 \frac{\sum_{h,w} p_{h,w} \hat{p}_{h,w}}{\sum_{h,w} p_{h,w}^2 + \sum_{h,w} \hat{p}_{h,w}^2 + \epsilon}. \quad (4.11)$$

Для приведения двух функций потерь в один масштаб к слагаемому Dice loss применяется логарифм:

$$Loss(p, \hat{p}) = WCE(p, \hat{p}) + \alpha \log_2(Dice(p, \hat{p})), \quad (4.12)$$

где:

- p — истинная метка положительного класса;
- \hat{p} — вероятность положительного класса, предсказанная моделью;
- h, w — координаты пикселя;
- $\alpha = 1$ — это вес dice loss (4.11) в сумме функций потерь;
- $\beta = 10$ — это вес положительного класса (фазы порового пространства);
- $\varepsilon = 10^{-6}$ — числовая константа в dice loss для стабильности вычислений.

Для каждого из семи 3D-образцов (состоящего из КТ-изображения и соответствующего ему изображения разметки) была обучена отдельная сегментационная модель. Далее все обученные модели валидировались с помощью оставшейся валидационной части соответствующих изображений. Для этого каждое 3D-изображение было поделено на тренировочный и валидационный набор вдоль оси z в отношении 2 : 1. Часть данных (а именно 5%) на границе между тренировочными и валидационными наборами были удалены, чтобы не допустить высокой корреляции между горизонтальными срезами на границе наборов. Так же на всех изображениях была обучена одна общая модель, результаты работы которой были оценены отдельно для валидационной части каждого из 7 3D-изображений. Далее для визуальной оценки качества из соответствующих частей 3D-изображений были получены наборы 2D-изображений при помощи нарезки вдоль оси z на фрагменты размера 128×128 пикселей.

4.3.3 Оценка качества сегментации

Для того, чтобы провести комплексную оценку качества обученных моделей сверточных нейронных сетей, были использованы все описанные в подпараграфе 4.2 методы и метрики. В таб. 2 находятся метрики компьютерного зрения, рассчитанные для отдельных моделей сегментации, обученных на тренировочной части своего образца пористой среды. Значения метрики можно интерпретировать следующим образом:

- Для образцов 3, 4 и 6 характерно низкое значение точности (4.4) при высоком значении полноты (4.5) — это говорит о том, что модель для этих образцов предсказывает позитивный класс более уверенно, чем нужно;

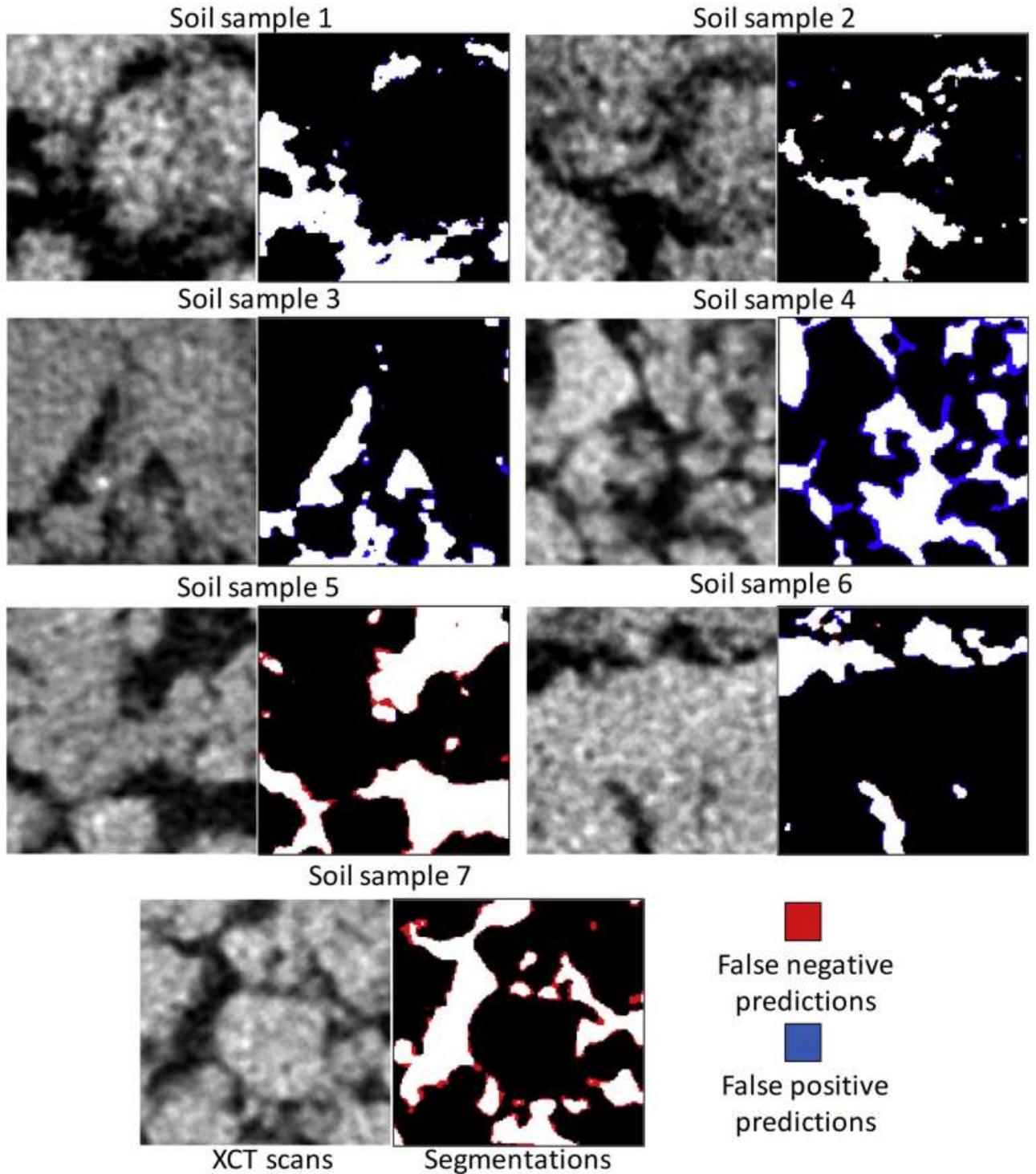


Рисунок 4.5 — Визуализация примеров работы отдельных сегментационных моделей из исследования [2]. Ошибки сосредоточены на границе раздела фаз, что говорит об адекватности полученных моделей. Наибольшее количество ошибок содержится в примерах для образцов 4 (ложно-положительные пиксели) и 7 (ложно-отрицательные пиксели). Наилучшее качество сегментации наблюдается для образцов 1, 2, 6.

Номер образца	Доля правильных ответов	Точность	Полнота	PR-AUC	IoU
1	0.990278	0.943769	0.996358	0.998623	0.940524
2	0.996335	0.968988	0.993439	0.998841	0.962826
3	0.973652	0.820249	0.995574	0.990357	0.817269
4	0.939552	0.792140	0.999917	0.996171	0.792088
5	0.969022	0.998757	0.865202	0.996564	0.864272
6	0.975915	0.863557	0.994796	0.993793	0.859673
7	0.958027	0.998234	0.760084	0.989519	0.759064

Таблица 2 — Стандартные метрики компьютерного зрения из подпараграфа 4.2.2 для отдельных нейросетевых моделей сегментации, обученных на тренировочной части соответствующих образцов. Каждая модель оценивалась на отложенной части соответствующего ей 3D-образца.

Номер образца	Доля правильных ответов	Точность	Полнота	PR-AUC	IoU
1	0.993453	0.954353	0.997504	0.999157	0.952079
2	0.993797	0.951161	0.995484	0.998651	0.947074
3	0.983351	0.884995	0.991901	0.992297	0.878646
4	0.966813	0.873061	0.997794	0.994909	0.871378
5	0.983910	0.964919	0.956062	0.995234	0.923946
6	0.985962	0.926988	0.992029	0.997118	0.920134
7	0.978669	0.908644	0.985702	0.994329	0.896824

Таблица 3 — Стандартные метрики компьютерного зрения из подпараграфа 4.2.2 для общей нейросетевой модели сегментации, обученной на тренировочной части всех образцов. Модель оценивалась на отложенной части всех 3D-образцов отдельно.

Номер образца	Разметка		Предсказание	
	Пористость	Связная пористость	Пористость	Связная пористость
1	0,14998	0,14217	0,15730	0,14892
2	0,09784	0,08350	0,09843	0,08356
3	0,10269	0,09411	0,12097	0,11269
4	0,21325	0,20956	0,26943	0,26665
5	0,20404	0,19805	0,17768	0,17151
6	0,15627	0,14919	0,18652	0,17841
7	0,18199	0,17504	0,13879	0,12708

Таблица 4 — Обычная и связная пористость для разметки образцов и сегментаций, полученных с помощью соответствующих моделей. Значение обычной пористости можно использовать для интерпретации метрик компьютерного зрения, а значение связной пористости для интерпретации величин проводимости, полученных с помощью численного моделирования в масштабе пор.

- Для образцов 5 и 7 характерно низкое значение полноты при высоком значении точности — это говорит о том, что модель для этих образцов предсказывает позитивный класс недостаточно уверенно;
- Для образцов 1 и 2 характерны высокие значения точности и полноты, что выражается в аналогично высоких значениях метрики IoU (4.6).

Значения метрик компьютерного зрения в таб. 2 хорошо согласуются с примерами на рис. 4.5, по которым можно заметить, для каких образцов модель завышает (в примерах 3, 4 и 6 основная часть ошибок синие пиксели — это FP, завышение пористости) и занижает (в примерах 5 и 7 ошибки — это в основном красные пиксели, FN, или занижение пористости) прогноз пористости. Аналогичным образом метрикам из таб. 2 соответствуют данные о пористости образцов и сегментационных масок из таб. 4.

Так же были получены результаты численной симуляции течения в масштабе пор (4.7) для разметки и предсказанной моделью сегментации с ошибкой, вычисленной по (4.9), они содержатся в таб. 5. Данные в таб. 5 полностью согласуются с результатами из таб. 2 с метриками компьютерного зрения и данными о пористости образцов из таб. 4:

	K_{sat} по направлению, предсказание (см \times день $^{-1}$)			K_{sat} по направлению, сегментация (см \times день $^{-1}$)			Относительная ошибка		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
1	1278,87	1407,92	1630	1625,97	1802,07	2045,55	0,27	0,28	0,25
2	654,37	420,43	365,97	680,86	441,62	379,53	0,04	0,05	0,03
3	496,08	595,46	1082,85	831,32	914,6	1728,96	0,67	0,53	0,57
4	2901,45	3173,12	3565,15	6649,47	7012,26	7843,58	1,29	1,21	1,2
5	2228,85	2488,02	3660,3	1373,8	1578,08	2366,8	-0,38	-0,36	-0,35
6	1251,74	1648,01	1574,69	2516,62	134,99	2894,25	1,01	0,73	0,84
7	780,46	747,19	1004,23	260,86	251,11	309,38	-0,66	-0,66	-0,69

Таблица 5 — Результаты расчета проницаемости (4.8) и относительной ошибки проницаемости (4.9) для исследуемых образцов по трем ортогональным направлениям вдоль осей x , y и z . Сегментация изображений проводилась специфичной для каждого образца моделью. Видно, что размер относительной ошибки проницаемости мало зависит от выбранной для расчета оси, что косвенным образом указывает на качество алгоритма сегментации, потому что сегментация производится по 2D-срезам в одном направлении z .

- Как и ожидалось, образцы 3, 4 и 6 с излишней предсказанной пористостью (низкая точность и высокая полнота) имеют большую, чем в разметке, проницаемость. Ошибка в проницаемости пропорциональна величине излишне предсказанной пористости;
- Образцы 5 и 7 с недостаточно предсказанной пористостью (высокая точность и низкая полнота) имеют меньшую, чем в разметке, проницаемость. Ошибка в проницаемости так же пропорциональна величине недопредсказанной пористости;
- Образцы 1 и особенно 2 были хорошо предсказаны моделью, поэтому для них получились высокие значения метрик компьютерного зрения, хорошее совпадение реальной и предсказанной пористости и небольшая (в особенности для образца 2) разница в реальной и предсказанной проницаемостях;

Дальнейший анализ причин различий в метриках можно производить, сравнивая морфологических свойств исходных 3D-изображений КТ и масок сегментации при помощи корреляционных/ковариационных функций, см. рис. 4.6.

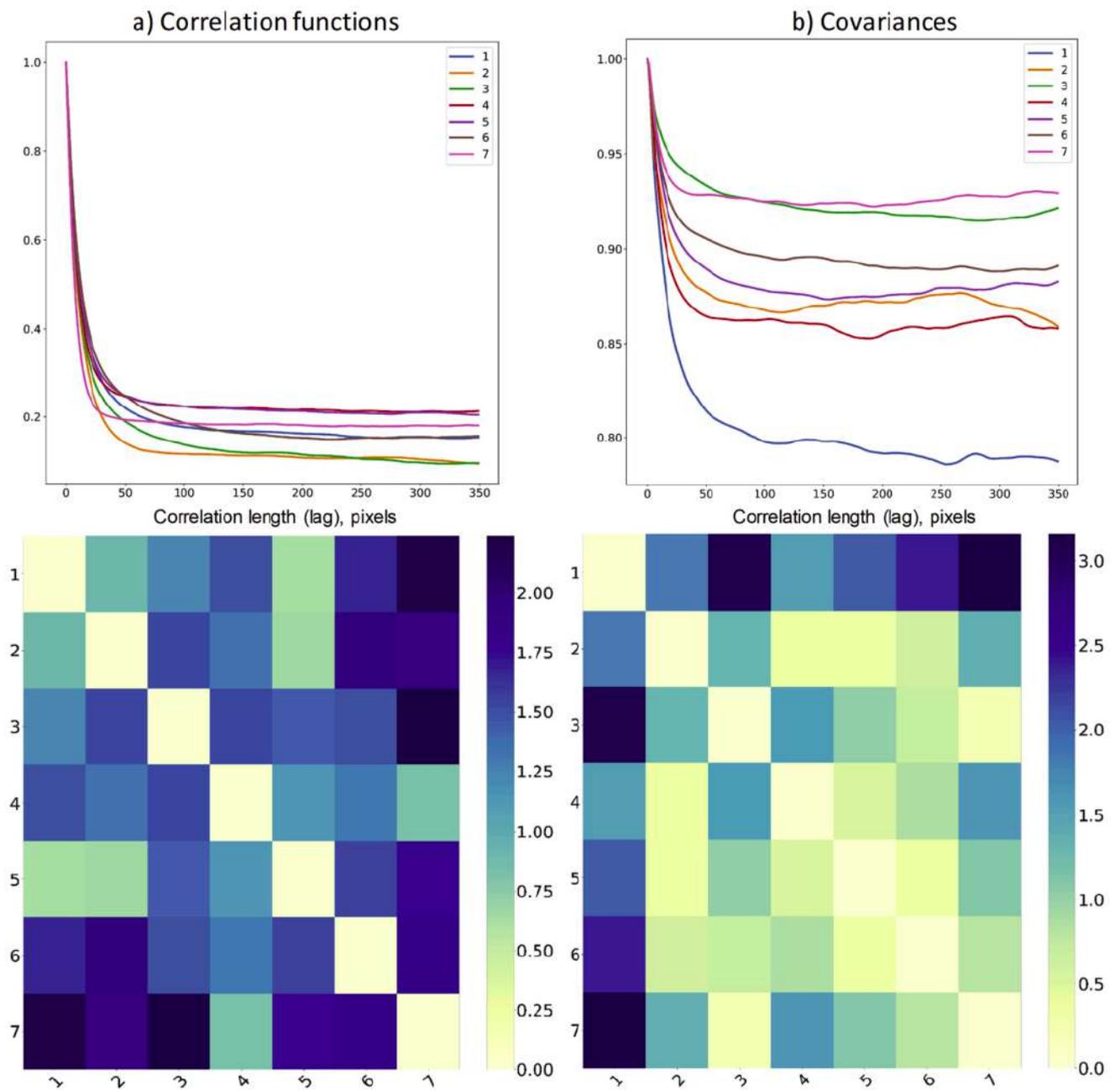


Рисунок 4.6 — Визуализация нормализованных функций и соответствующих им тепловых карт для сегментационных масок (под литерой **a**) слева) и исходных изображений в градациях серого (под литерой **b**) справа) из исследования [2]. Методология построения тепловых карт аналогична использованной в подпараграфе 2.2.3, рис. 2.6.

По тепловой карте корреляционных функций бинарных изображений сегментаций можно предположить, что образцы 1 и 2 имеют наилучшее значение метрик потому, что меньше всего отличаются от общей совокупности образцов (соответствующие этим образцам строки тепловой карты в среднем самые светлые). Но однозначно определить причины различий в метриках таким образом не получится, потому что на итоговый результат может влиять множество факторов: морфология порового пространства, распределение интенсивностей пикселей в исходном КТ-изображении, неидеальностью использованной разметки, *partial volume effect* и другие.

Еще один важный вывод можно сделать, сравнивая значения метрик в таб. 2 и 3. Можно заметить, что при значительном увеличении количества обучающих данных полученная модель сегментации значительно улучшает качество на образцах-“аутсайдерах” при относительно стабильном качестве на образцах с хорошим качеством сегментации. Таким образом, увеличение морфологического разнообразия выборки (которого невозможно добиться с помощью ручной разметки, поскольку в таком случае потребовалось бы разметить 7×700 снимков размера 700^2) значительно улучшает совокупное качество обученной модели.

По результатам оценки качества сегментации можно сделать важный вывод — метрики компьютерного зрения в целом хорошо отображают результаты физического моделирования, и могут использоваться в качестве прокси-оценки оных. Это наблюдение является очень полезным на практике, поскольку любое физическое моделирование проницаемости — это трудоемкая задача, численное решение которой занимает много времени и вычислительных ресурсов, а классические метрики компьютерного зрения сравнительно просты для расчета.

4.4 Выводы

В данной главе описаны основные методы решения задачи сегментации, использующиеся в приложении к пористым средам, представлены метрики для оценки качества сегментации, а так же показаны результаты работы методики сегментации КТ-изображений пористой среды с помощью моделей сверточных нейронных сетей. В рамках представленного в работе исследования было сделано предположение, что в качестве разметки для исходных КТ-изобра-

жений можно использовать результаты работы лучших локальных методов сегментации, не требующих обучающих данных. Использование предложенного процесса получения обучающей выборки на практике позволит значительно сократить время оператора на разметку отдельных изображений. Таким образом можно добиться значительного увеличения размера обучающей выборки, и, как следствие, улучшения качества итоговой нейросетевой модели сегментации.

В качестве архитектуры нейронной сети была использована полносверточная U-net с предобученным ResNet-101 энкодером. Обучение и оценка модели производились на различных подвыборках исходного набора данных. Оценка качества полученной сегментационной модели производилась как с помощью классических метрик компьютерного зрения, так и с помощью вычисления физических свойств сегментированных изображений пористых сред. Качество сегментации варьировалось в зависимости от конкретного образца, на тестовых образцах ошибка по гидравлическим свойствам получилась в диапазоне от 5% до 130%. По результатам был проведен сравнительный анализ разметки и полученной сегментации для того, чтобы объяснить полученные расхождения в проницаемости. Для этого был использован статистический аппарат из предыдущих глав 1, 2, 3, а именно корреляционные и ковариационные функции.

Результаты, полученные в данной главе, показывают, что методы сегментации с помощью моделей сверточных нейронных сетей могут быть использованы в качестве основы для универсального подхода сегментации пористых сред. Подробнее о том, как может быть организован этот процесс, будет рассказано в главе 5. Так же проведенное исследование обозначает важную проблему интерпретации ошибок модели сегментации с помощью свойств исходных данных. Описанный в следующей главе численный метод построения синтетической томографии способен с одной стороны нивелировать ошибки разметки, а с другой четко разделить эффекты от варьирования морфологических и цветовых свойств изображения пористой среды, а так же одновременно моделировать различные степени partial volume effect за счет контроля сжатия результирующего изображения синтетического КТ.

Глава 5. Построение синтетического КТ сегментированного изображения пористой среды

Основная проблема, от которой страдают все алгоритмы сегментации пористых сред с учителем — это отсутствие достаточного количества обучающих данных. Процесс разметки больших 3D-изображений требует много времени оператора. При этом разметка оператором не может быть гарантированно правильной, поскольку пиксели (воксели) КТ-изображения представляет из себя некоторую аппроксимацию локального поглощения U^a материала пористой среды, искаженную шумами и артефактами реконструкции, а истинное пространственное распределение фаз внутри образца пористой среды неизвестно. Возможно получение разметки с помощью других технологий: например, определения для каждого минерала интервала интенсивности (который определяется коэффициентом поглощения минерала) на конкретном двухмерном КТ-изображении с помощью SEM [177]. Такие подходы позволяют получать разметку для одного 2D-среза образца и аналогичным образом страдают от артефактов и шумов на КТ-изображении. Алгоритмы сегментации без учителя (unsupervised), в свою очередь, требуют перед применением аккуратной настройки для каждого отдельного изображения пористой среды (и, соответственно, оператор также тратит много времени). При этом на процесс подбора параметров аналогично влияет тот факт, что оператору неизвестно истинное пространственное распределение фаз образца пористой среды.

Для построения обучающей выборки можно пойти альтернативным путем — решить обратную задачу, т.е. построить отображение из 3D-изображения пространственного распределения фаз U^c в изображение компьютерной томографии в градациях серого U^g . Для этого, по сути, нужно смоделировать физические процессы, которые происходят в компьютерном томографе во время съемки. Попытки построить такую модель предпринимались и ранее, например, в работах [178–180], но приведенные в этих работах алгоритмы страдают от недостаточной реалистичности полученных результатов, поскольку не учитывают химический состав снимаемого образца. Так же нужно отметить, что существуют альтернативные подходы. Одним из примеров таких подходов является симуляция поведения каждой отдельной частицы, эмитированной источником излучения в процессе съемки, как в работах [181; 182]. Результаты

применения этих моделей получаются более физически достоверными, но на текущий момент рассчитывать с помощью таких моделей образцы с размерами, близкими к реальным, не представляется возможным из-за требуемого для таких подходов количества вычислительных ресурсов.

В данной главе будет предложен один из возможных способов решения поставленной выше задачи: построение синтетического КТ-изображения с помощью симуляции прохождения фотонов через тело образца согласно физическому закону Бугера-Ламберта-Бера. Описанная в данной главе математическая модель томографа учитывает химический состав снимаемого образца, при этом предложенный численный метод построения синтетического КТ-снимка имеет приемлемую вычислительную сложность и может быть использован на обычном ноутбуке с графической картой. Ниже в главе будет представлена модель синтетического компьютерного томографа, описан процесс применения этой модели и соответствующий численный метод, использующий данную модель.

Далее предложена схема универсального процесса сегментации пористых сред с помощью моделей сверточных нейронных сетей, ключевым элементом которой является численный алгоритм построения синтетической КТ. Так же продемонстрированы результаты применения метода синтетической томографии для оценки влияния морфологических свойств пористой среды на качество нейросетевой сегментации.

5.1 Синтетическая томография

5.1.1 Модель компьютерного томографа

Рассмотрим упрощенную модель томографа: она состоит из точечного источника излучения, камеры с исследуемым образцом и детектора. Предположим при этом, что камера во время съемки образца будет вращаться, а источник и детектор зафиксированы на одном месте (см. рис. 5.1). Принцип работы компьютерного томографа следующий: источник излучает пучок фотонов, которые частично задерживаются при прохождении через исследуемый

образец (сколько именно фотонов задержится зависит от физических параметров материалов объекта — поглощения и плотности), а прошедшие через камеру томографа фотоны регистрируются на детекторе. Число фотонов, достигших конкретного пикселя детектора при фиксированном угле поворота камеры, пропорционально линейному интегралу некоторой функции (условно говоря, локального поглощения образца), взятому вдоль отрезка, соединяющего источник и рассматриваемый пиксель детектора. Таким образом, томограф по сути выполняет преобразование Радона [183] (или некоторый его аналог) над некоторой функцией $f_{domain}(X)$, заданной на исследуемом образце:

$$f_{domain}(X) = \begin{cases} U^a(X), & X \in V, \\ \alpha_{air}, & X \notin V, \end{cases} \quad (5.1)$$

где

V — это объем исходного образца;

$U^a(X)$ — это локальное поглощение материала в точке X ;

α_{air} — это коэффициент поглощения воздуха (которым заполнен свободный объем камеры томографа).

В данной главе будет построено “обратное” отображение, которое преобразует сегментированное изображение пористой среды U^c в изображение U^a , где $U^a(X)$ имеет смысл локального поглощения материала, находящегося в точке X . Данное преобразование можно нестрого обозначить следующим образом:

$$f_{seg}^{-1} : U^c \longrightarrow U^a.$$

При этом нужно отметить, что отображение f_{seg}^{-1} в итоге не будет полностью локальным, потому что на величину поглощения, зафиксированную в конкретной точке X , оказывают влияние набор следующих факторов:

- Материал в самой точке X ;
- Распределение материалов в окрестности точки X ;
- Стохастическая природа процесса излучения фотонов, их прохождения через образец и последующей регистрации на детекторе;
- Численный алгоритм реконструкции изображения пористой среды U^a по синограмме, рассчитанной с помощью прямого преобразования Радона.

Теперь опишем процесс более формально. Положим, что D — это точка на двумерном детекторе, S — это точечный источник излучения фотонов, φ — это

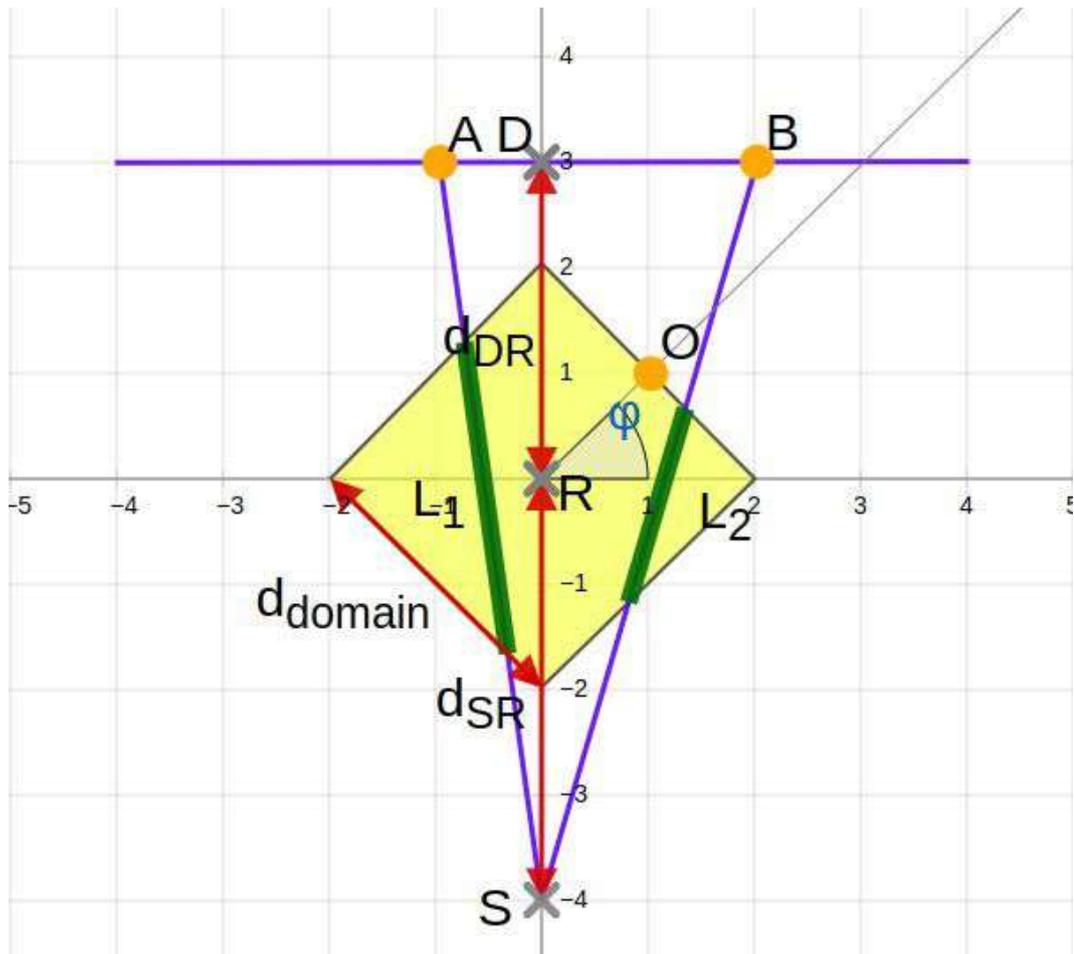


Рисунок 5.1 — Схема построения теневых проекций для точечного источника излучения. В середине изображения находится образец, вокруг него вращается связанная система из источника излучения на одной стороне и детектора на другой стороне. Регистрация фотонов происходит для каждого пикселя детектора при фиксированно угле поворота источника φ .

угол поворота камеры томографа, f_{domain}^φ — это поворот функции (5.1) вокруг центральной оси камеры томографа на угол φ по часовой стрелке (см. рис. 5.1). Тогда информацию, которую регистрирует детектор во время процесса съемки, можно записать следующим образом:

$$R(D, \varphi) = \int_0^1 f_{domain}^\varphi(S + z\overline{SD})dz. \quad (5.2)$$

Полученная в (5.2) функция называется **синограмма**. После того, как томограф зафиксировал значения синограммы, производится обратное преобразование Радона (в дальнейшем будем для простоты изложения обозначать его как R^{-1}), и таким образом получается некоторое изображение образца U^a .

Приведенное выше описание томографа сильно упрощено и по сути использует единственный физический принцип — **закон Бугера-Ламберта-Бера**. В данной работе он будет использоваться в следующей математической формулировке:

$$T = e^{-l \sum_i^N \sigma_{\omega_i} \rho_{\omega_i}}, \quad (5.3)$$

где:

T — это коэффициент пропускания объема образца;

N — это количество различных материалов, представленных в объеме;

l — это длина пути, преодолеваемого лучом через материал образца;

σ_{ω_i} — проникаемость эффективного сечения материала ω_i ;

ρ_{ω_i} — это плотность материала ω_i .

В реальности на процесс КТ-съемки могут влиять некоторые другие эффекты (например, эффект Комптона), поскольку фотоны могут не только задерживаться образцом, но и отклоняться от изначальной траектории, но для нашей текущей модели синтетического томографа мы ими пренебрегаем. Для более полного знакомства с принципами работы компьютерной томографии можно познакомиться с материалами, изложенными в книге [184].

5.1.2 Численный метод построения синтетического КТ

Теперь задача состоит в следующем: построить функцию локального поглощения образца U^a по входным данным. В данный момент мы переходим от непрерывной модели в сеточную, поскольку появляется дискретное изображение U^c , задающее пространственное распределение фаз. Поскольку мы решаем “обратную” для сегментации задачу, то на входе мы имеем следующий набор данных и параметров, связанных с исходным сегментированным образцом U^c :

- U^c — это изображение пористой среды, состоящая из N фаз;
- $I_{\omega_1}, \dots, I_{\omega_N}$ — это индикаторы соответствующих фаз (1.2) для вычисления линейных интегралов вдоль траектории лучей, соединяющих источник излучения и детектор;
- σ_{ω_i} — это проницаемость для каждого материала ω_i (на самом деле проницаемость зависит дополнительно от энергии источника, но в данной модели для упрощения эта зависимость учитываться не будет);
- n_{ω_i} — это концентрация частиц (или плотность) материала ω_i .

И следующий набор параметров, связанных с геометрией томографа:

- d_{domain} — это размер камеры томографа из (5.1);
- d_{SR} — это расстояние между источником излучения и центром камеры томографа;
- d_{SD} — это расстояние между источником излучения и детектором;
- D_H — это высота детектора;
- D_W — это ширина детектора.

Параметры размеров установки томографа непосредственно не участвуют в дальнейших формулах, но их геометрия вложена неявно в преобразование Радона (5.2), и поэтому учитывается при выполнении численных прямого и обратного преобразований. Для простоты изложения параметры, которые каким-либо образом влияют на разрешение входных, промежуточных и выходных изображений не будут использоваться в формулах. В эту группу параметров можно включить:

- DR_H — это количество пикселей детектора по высоте;
- DR_W — это количество пикселей детектора по ширине;
- SR_α — это частота дискретизации по углу поворота α , определяет размер сетки по углу в пределах $[0, 2\pi]$;
- SR_H, SR_W, SR_D — это количество вокселей исходного образца пористой среды U^c по высоте, ширине и глубине;
- TR_H, TR_W, TR_D — это количество вокселей получаемого образца пористой среды U^a по высоте, ширине и глубине.

Для построения синтетического КТ изображения в первую очередь нужно решить следующую задачу — вычислить теневые проекции (синограмму),

полученные по трехмерному распределению фаз с известными локальными коэффициентами поглощения. Для этого сначала нужно вычислить линейное поглощение A_{ω}^l (5.4) для каждой фазы ω_i и каждого направления l преобразования Радона (в данном случае интеграл уже является дискретной суммой):

$$\begin{aligned} C_{\omega_i}(X) &= n_{\omega_i}(X)I_{\omega_i}(X), \\ A_{\omega_i}^l &\propto \sigma_{\omega_i} \int_l C_{\omega_i}(l)dl. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Суммарное поглощение всех фаз A^l можно вычислить как сумму отдельных поглощений $A_{\omega_i}^l$ (5.4):

$$A^l = \sum_{i=1}^N A_{\omega_i}^l. \quad (5.5)$$

Проницаемость по заданному направлению T^l связывается с суммарным поглощением по направлению A^l (5.5) с помощью следующей формулы:

$$T^l \propto e^{-A^l}. \quad (5.6)$$

Далее, требуется вычислить теневые проекции (синограмму), которые рассчитываются для каждого пикселя детектора. Соответствующие величины могут быть рассчитаны как число фотонов, которые достигли конкретного пикселя детектора по данному направлению l . Количество долетевших фотонов N^l можно представить в виде случайной величины, имеющей распределение Пуассона [184], с средним, которое равно числу эмитированных источником фотонов, умноженному на коэффициент поглощения по данному направлению:

$$\begin{aligned} T^l \approx \frac{N^l}{N_0} &\Rightarrow N^l \sim Pois(N_0 T^l), \\ Pois(k) &= \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Последний этап состоит в реконструкции изображения в градациях серого по полученным теневым проекциям. Эта процедура выполняется численно, с помощью обратного преобразования Радона. Таким образом мы получили пару: оригинальное изображение с распределением фаз (разметка) и соответствующее ему трехмерное КТ-изображение.

Формализуем алгоритм:

1. Для каждого материала ω_i рассчитать изображение C_{ω_i} (интегрируемая функция (5.4)), воксели которого пропорциональны локальному поглощению фазы ω_i (т.е. учитывают поглощение и плотность материала). Воксели, которые не принадлежат фазе ω_i , инициализируются нулем. Каждая фаза изображения U^c обрабатывается отдельно. Так же нужно отметить, что можно использовать более сложную модель плотности, чем константа n_{ω_i} . Например, сэмплирование значений плотности в вокселе из некоторого наперед заданного распределения. Так же возможно сделать более плавные переход на границах между фазами с помощью применения пространственной дискретной свертки к полученному изображению C_{ω_i} .
2. Для каждой фазы ω_i , каждой точки детектора D и каждого угла поворота образца φ рассчитать величину поглощения $A_{\omega_i}^l(D, \varphi)$ по формуле (5.4), и затем суммарное поглощение $A^l(D, \varphi)$ по формуле (5.5);
3. Для каждой точки детектора D и каждого угла поворота образца φ рассчитать величину проницаемости $T^l(D, \varphi)$ по формуле (5.6) и количество долетевших до детектора фотонов N^l по формуле в (5.7);
4. По полученной синограмме $N^l(D, \varphi)$ произвести численное обратное преобразование Радона, получив таким образом изображение пористой среды U^a с непрерывной областью значений;
5. Провести преобразование пористой среды с непрерывной областью значений U^a в пористую среду в градациях серого U^g . Как правило, для этого исходное распределение интенсивностей вокселей U^a обрезается по некоторым выбранным оператором порогам, а оставшаяся часть дискретизируется на 256 частей. Таким образом получается восьмибитное представление изображений (см. рис. 5.7 и 5.8 с примерами гистограмм распределений интенсивностей вокселей для реального и синтетического КТ-изображений).

После завершения работы алгоритма получим следующие данные на выходе:

U^a — изображение пористой среды с непрерывной областью значений размера $TR_H \times TR_W \times TR_D$ (до постобработки);

U^g — изображение пористой среды в градациях серого размера $TR_H \times TR_W \times TR_D$.

Кроме того, в процессе численных симуляций помимо применения различных настроек томографа и подмены физических свойств образца, мы можем применять дополнительно любые численные преобразования (добавление случайного шума, как в работе [180], либо типичных артефактов на синограмму и/или итоговое изображение), а также выставлять произвольное результирующее разрешение получаемого образца U^a .

5.2 Эксперименты и результаты

Во всех нижеописанных экспериментах использовались следующие параметры геометрии и разрешающей способности томографа:

$$\begin{aligned} d_{domain} &= 1 \text{ см}; \\ d_{SR} &= 14,2 \text{ см}; \\ d_{SD} &= 21,3 \text{ см}; \\ D_H &= 3 \text{ см}; \\ D_W &= 4,5 \text{ см}; \\ SR_\alpha &= 180; \\ DR_H &= 200; \\ DR_W &= 300; \end{aligned}$$

В качестве материалов, наполняющих образцы, использовались следующие: воздух (он всегда использовался для заполнения порового пространства), каолинит ($Al_2Si_2O_5OH_4$), диоксид кремния (SiO_2), карбонат кальция ($CaCO_3$) и дисульфид железа (FeS_2). Если в исходном изображении сегментации U^c содержалось меньше 5 фаз, то использовался некоторое подмножество перечисленных материалов с обязательным включением воздуха.

5.2.1 Примеры работы алгоритма синтетической томографии

В качестве первого этапа валидации реализованного алгоритма построения синтетического КТ можно визуально оценить результаты его работы. Для

этого по четырем сегментированным 3D-изображениям пористых сред U^c исходного размера 1000^3 были построены их синтетические реконструкции размера 200^3 (см. рис. 5.2). Было использовано пятикратное сжатия синтетического КТ-изображения, для того, чтобы частично смоделировать partial-volume effect, имеющий место в реальном КТ. В качестве постобработки результирующего изображения синтетическо КТ U^a использовалось отсечение 0,1 нижнего и 99,9 верхнего квантилей распределения интенсивностей вокселей с последующим переводом значений вокселей изображения из вещественных в градации серого с помощью простого масштабирования с последующим округлением:

$$U^g[X] = \left[255 \times \frac{U^a[X] - \min_Y U^a[Y]}{\max_Y U^a[Y] - \min_Y U^a[Y]} \right],$$

где внешние квадратные скобки означают целочисленное округление. Нужно отметить, что именно таким образом (но с значениями квантилей, которые выбирает исследователь вручную) производится постобработка КТ-изображений в реальным компьютерных томографах. По образцам, представленным на рис. 5.2, можно заключить, что полученные синтетические КТ имеют высокую степень схожести с реальными КТ-изображениями.

Так же можно сравнить полученные изображения с аналогичными методами, описанными в более ранних работах. Примеры таких изображений приведены на рис. 5.3. Видно, что изображения, полученные с помощью описанного в предыдущем параграфе метода, имеют более разнообразное распределение интенсивностей пикселей внутри одной фазы. Так за счет сжатия результирующего изображения синтетического КТ границы между фазами на рис. 5.2 определяются менее четко, что в большей степени соответствует реальным КТ-изображениям. Последним преимуществом описанного выше метода, которое можно отметить, является большее количество используемых фаз (за счет явного учета физических свойств каждой фазы): 5 на рис. 5.2 против 2 на рис. 5.3а, 2 на рис. 5.3б и 3 на рис. 5.3в (при этом в данном методе никаким образом не используются математические модели для определения поглощения отдельных фаз, их значения задаются вручную в качестве параметра). К недостаткам текущей реализации метода можно отнести отсутствие различных искусственных артефактов: шума соли и перца (salt-and-pepper noise) как на рис. 5.3а, кольцевых артефактов как на рис. 5.3б. Но нужно отметить, что нет

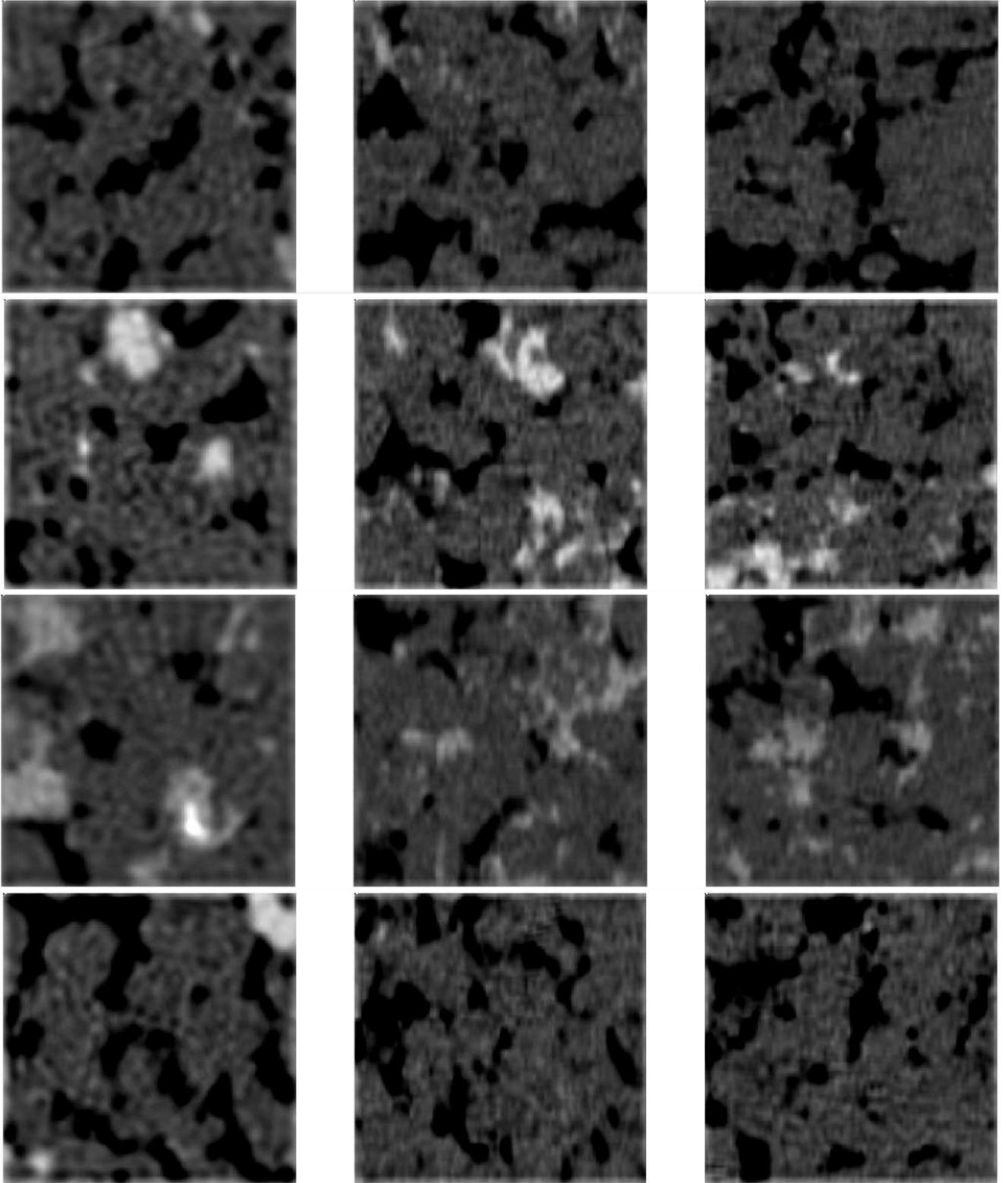
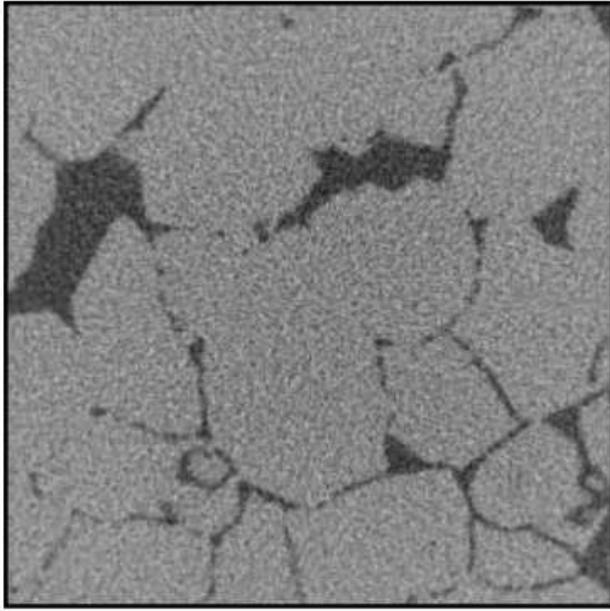
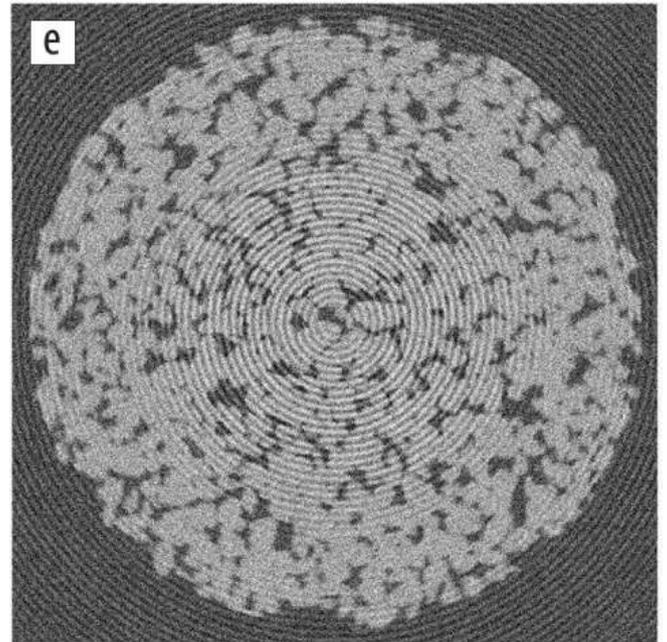


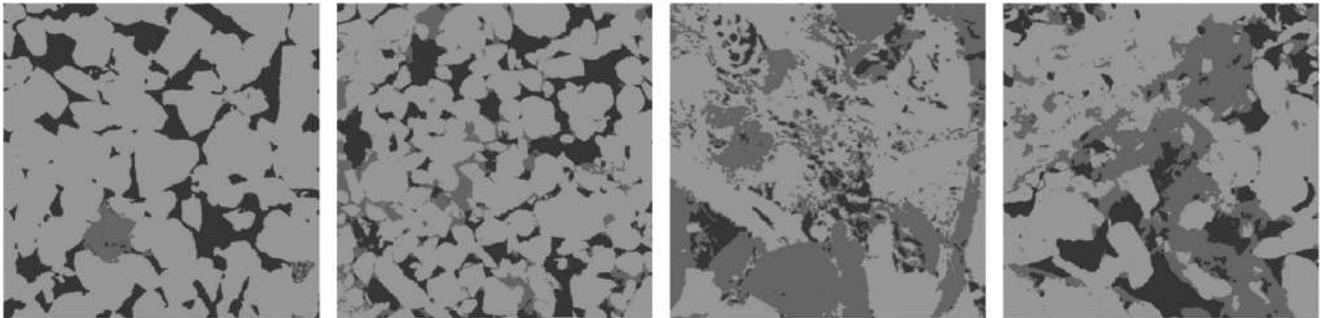
Рисунок 5.2 — Примеры изображения синтетического КТ, полученных описанным в работе алгоритмом в трех центральных проекциях. Использовались образцы размера 1000^3 , размер изображения синтетического КТ 200^3 .



а) Пример синтетического КТ из работы [178].



б) Пример синтетического КТ из работы [179].



в) Пример синтетического КТ из работы [180].

Рисунок 5.3 — Примеры изображений синтетических КТ, полученных различными методами на основе прямого и обратного проецирования с помощью преобразования Радона.

никаких принципиальных проблем, которые бы мешали добавить подобные артефакты в программную реализацию рассматриваемого в данной главе метода.

5.2.2 Сравнение синтетического и реального КТ

Следующим логичным шагом в валидации алгоритма синтетического КТ будет сравнение реального КТ-изображения с аналогичным изображением синтетического КТ, построенного с использованием пространственного распре-

деления фаз из оригинальной пористой среды. Для этого требуется произвести следующую последовательность действий:

1. Взять существующее КТ-изображение U_{true}^g ;
2. Выполнить многофазную сегментацию КТ изображения любым подходящим методом, который может выделить несколько фаз из образца и при этом имеет достаточную точность, получить изображение U^c ;
3. По полученной многофазной сегментации U построить синтетической КТ-изображение $U_{synthetic}^g$;
4. Оценить схожесть изображений U_{true}^g и $U_{synthetic}^g$.

Описанный эксперимент был проведен: ортогональные срезы исходного образца U^g приведены на рис. 5.4, ортогональные срезы получившейся сегментации приведены на рис. 5.5, ортогональные срезы синтетического КТ приведены на рис. 5.6. Видно, что на изображении синтетического КТ 5.6 присутствуют типичные для КТ артефакты-полосы (streak), которые появляются из-за большой разности в поглощении между зерном (в данном случае из FeS_2) и окружающей его фазой, что подчеркивает адекватность предложенного алгоритма. Дополнительно можно заметить, что в примерах синтетической томографии, полученной с помощью других методов, таких артефактов нет (см. рис. 5.3).

Нужно подчеркнуть, что необходимо аккуратно сравнивать получившиеся изображения, поскольку на результат помимо самой вычислительной модели синтетической томографии влияет множество факторов. Перечислим наиболее значимые:

- Ошибки алгоритма сегментации — их возможная природа подробно обсуждалась в предыдущих главах и выше в данной главе;
- Несоответствие химического состава исходного образца и образца, построенного с помощью синтетического КТ — достаточно редко встречаются изображения пористых сред с известным химическим составом, поскольку их определение является крайне трудоемким процессом, поэтому материалы для алгоритма синтетического КТ выбирались исходя из предполагаемого коэффициента поглощения фаз (например, самая светлая фаза на КТ должна иметь наибольший коэффициент поглощения, поэтому она будет заполнена дисульфидом железа FeS_2 , который является самым плотным материалом и имеет наибольший коэффициент поглощения из всех имеющихся в наличии);

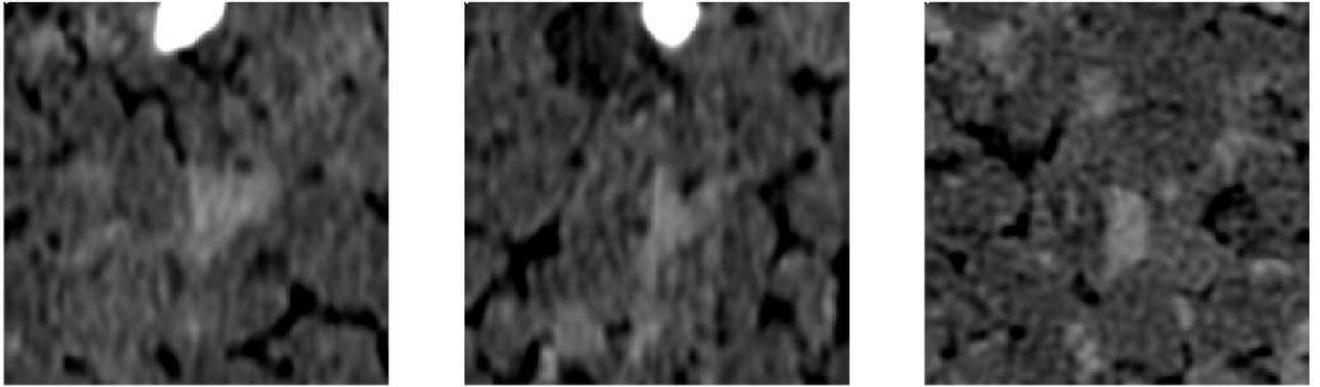


Рисунок 5.4 — Реальное КТ-изображение образца породы. На изображении представлены центральные срезы кубического образца в трех ортогональных плоскостях.

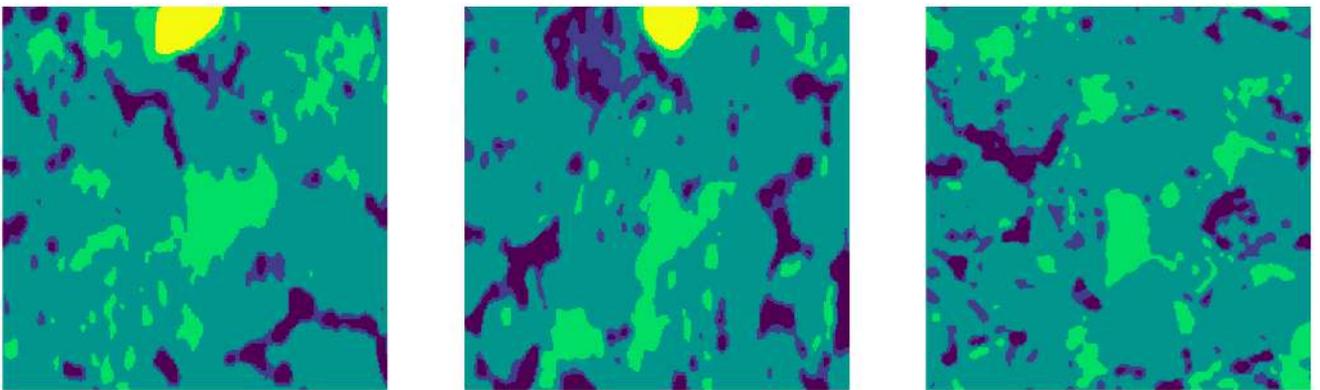


Рисунок 5.5 — Сегментированный на 5 фаз образец породы. На изображении представлены те же срезы, что и на с рис. 5.4.

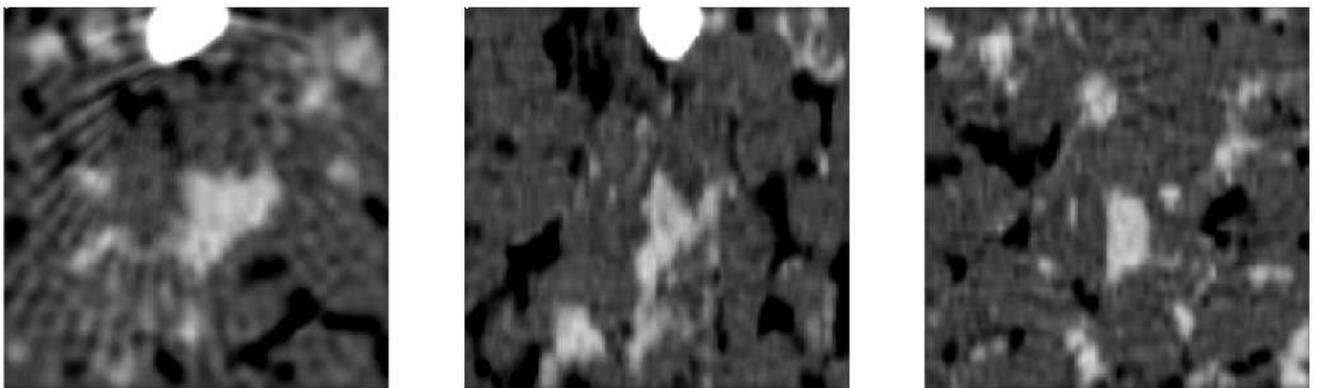


Рисунок 5.6 — Синтетическая томография, построенная по сегментированному образцу с использованием 5 фаз. Нужно отметить, что исследование состава исходного образца породы не проводилось, поэтому состав реального и синтетического образца заведомо не совпадает. На изображении представлены те же срезы, то и на рис. 5.5.

- Реальное КТ-изображение получается путем съемки реального образца пористой среды, который имеет разрешение на много порядков выше, чем полученное КТ-изображение (границы фаз определяются на уровне отдельных молекул). Синтетическое КТ-изображение получается путем “съемки” изображения сегментации, которое имеет такое же как синтетическое КТ или чуть меньшее (например, в 5 раз, как в примерах из предыдущего подпараграфа) разрешение. Из-за такого несоответствия в реальной сегментации намного сильнее выражен partial-volume effect.

Из-за перечисленных выше особенностей эксперимента затруднительно сравнивать выходные изображения “как есть”. Наиболее адекватным способом сравнения будет являться сравнение гистограмм распределения интенсивностей вокселей изображений. На рис. 5.7 приведено такое распределение для реального КТ-изображения, а на рис. 5.8 — для синтетического. Видно, что формы распределений достаточно хорошо согласуются между собой: в обоих случаях унимодальное колоколообразное распределение. Но при этом у гистограммы синтетического КТ тяжелее оба хвоста — что явно видно по правому хвосту, а левый хвост отсекается порогом, при этом доля “отсеченных” вокселей явно выше у синтетического КТ. Тем не менее, можно сделать вывод о высокой схожести полученных распределений интенсивностей вокселей. Так же нужно подчеркнуть, что итоговое изображение синтетического КТ можно “настраивать” путем подбора абсолютных порогов или значений квантилей интенсивностей вокселей для отсечения — аналогичная процедура проводится и при получении реального КТ для повышения контрастности снимка.

5.2.3 Построение универсальной модели сегментации пористых сред

Как уже замечалось выше и в предыдущих главах: основная проблема методов сегментации с учителем — это отсутствие достаточного количества качественно размеченных данных. Предложенный метод построения синтетической томографии позволяет преодолеть данную проблему. Вследствие этого, процесс построения универсальной модели сегментации пористых сред может выглядеть следующим образом:

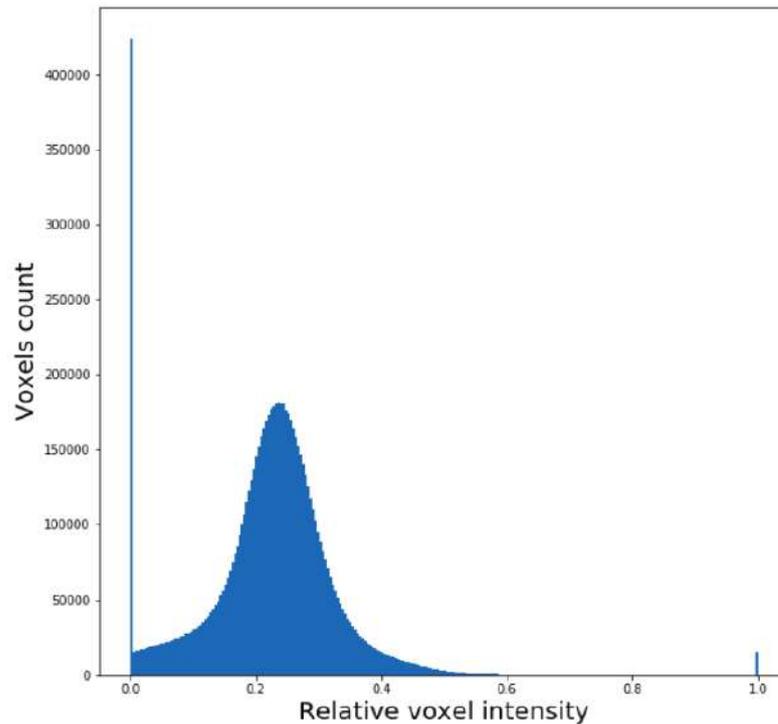


Рисунок 5.7 — Гистограмма распределения интенсивностей вокселей для КТ-изображения образца с рис. 5.4. Значения интенсивностей вокселей расположены на оси x и нормализованы в отрезок $[0, 1]$.

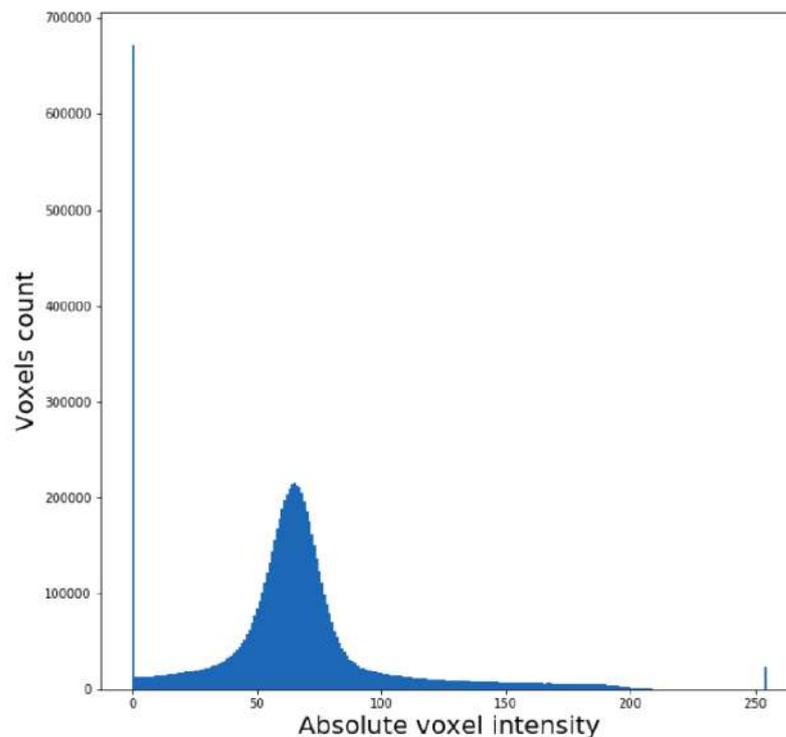


Рисунок 5.8 — Гистограмма распределения интенсивностей вокселей для синтетического КТ-изображения образца с рис. 5.6. Значения интенсивностей вокселей расположены на оси x и представлены в градациях серого в отрезке $[0, 255]$.

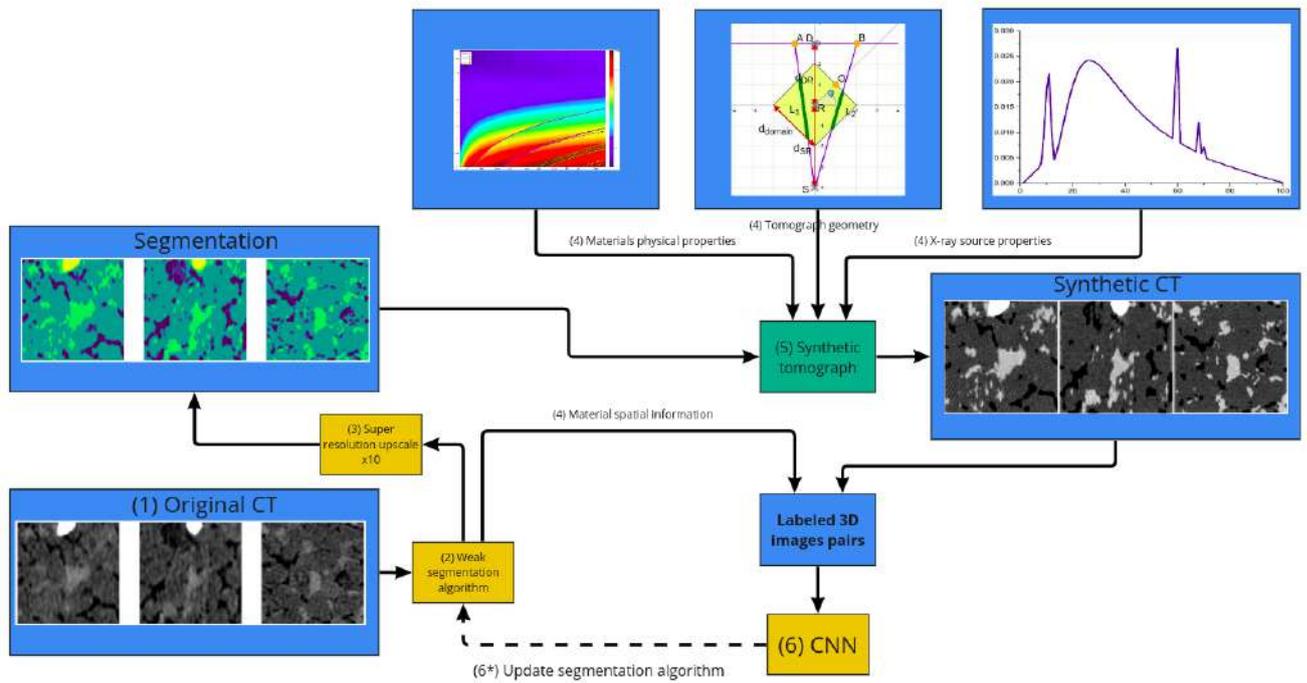


Рисунок 5.9 — Схема процесса построение универсальной модели сегментации пористых сред. В качестве модели сегментации предполагается использование сверточных нейронных сетей. Обучающая выборка конструируется с помощью предложенного численного алгоритма построения синтетической КТ. Синим цветом выделены входные данные для алгоритмов, желтым — различные предсказательные модели, зеленым — алгоритм построения синтетического КТ. Цифрами обозначены соответствующие пункты из текстового алгоритма.

- (1) Собрать достаточно большую коллекцию реальных КТ-изображений пористых сред $\{U_i^g\}$ из исследуемого домена (таких, как, например, на рис. 5.4);
- (2) Сегментировать собранные образцы с помощью методов, не требующих обучающих данных, получив при этом набор изображений пористых сред $\{U_i^c\}$ (см. пример на рис. 5.5);
- (3) Повысить разрешение выборки сегментированных изображений $\{U_i^c\}$ с помощью какой-либо модели (наиболее подходящим для решения этой задачи выглядят super-resolution модели на основе нейронных сетей), получить набор с повышенным разрешением $\{\hat{U}_i^c\}$;
- (4) Задать необходимые для данного домена параметры: настройки томографа, физические свойства составляющих образцы фаз (еще раз подчеркнем, они могут не совпадать с исходными свойствами мате-

риалов набора из пункта (1)), масштаб входного изображения U^c и выходного изображения U^g ;

- (5) Воспользоваться алгоритмом синтетической томографии для набора $\{\hat{U}_i^c\}$, получить размеченную выборку $\{U_{synthetic_j}^a, U_j^c\}$ (с использованием понижения разрешения результирующего изображения, чтобы учесть *partial volume effect*). Количество пар в данной выборке может быть больше, чем исходных образцов в пункте (1) за счет варьирования свойств томографа и набора используемых материалов для фаз;
- (6) Обучить на получившейся выборке для задачи сегментации сверточную нейронную сеть, например, по методологии из главы 4;
- (7) (При необходимости) скорректировать метод/модель сегментации из пункта (2) путем замены на полученную в пункте (6) модель сверточной нейронной сети, далее повторить следующие пункты алгоритма до момента “сходимости” (т.е. до момента, когда будет получена модель с требуемой точностью).

Похожие подходы предлагались и ранее, например, в работах [179], [180].

Подчеркнем основные отличия вышеописанного подхода от уже существующих:

- В пункте (3) есть возможность образцом задать размер выходного изображения, чтобы отразить влияние *partial volume effect*;
- В пункте (4) есть возможность произвольным образом задать химический состав образца и, таким образом, учесть все разнообразие цветовых свойств реальных КТ;
- В пункте (7*) предполагается последовательная корректировка ошибок начальной сегментации.

5.2.4 Анализ влияния морфологических свойств входных данных на качество сегментации с помощью сверточной нейронной сети

Описанный алгоритм построения универсальной сегментационной модели является скорее общей схемой, чем законченным решением проблемы сегментации, поскольку относительно каждого использованного этапа существует множество открытых вопросов. Один из таких вопросов может звучать следующим образом: “насколько существенно будет влиять на качество нейросетевой

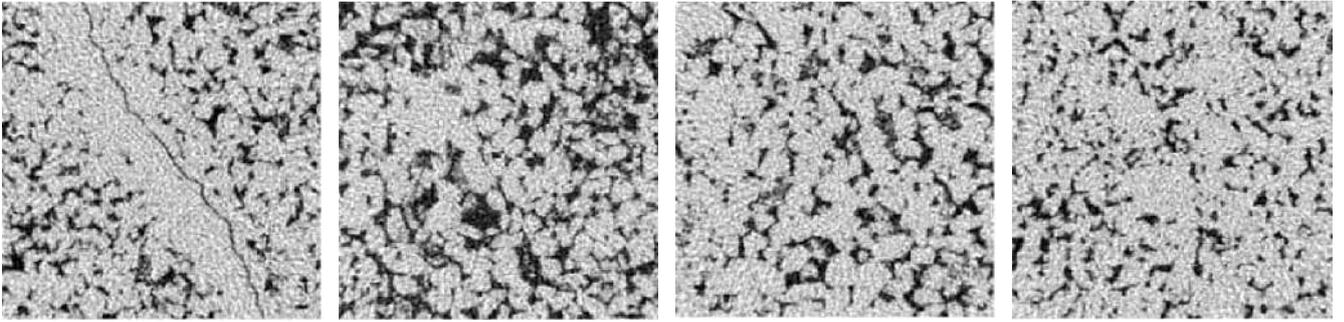
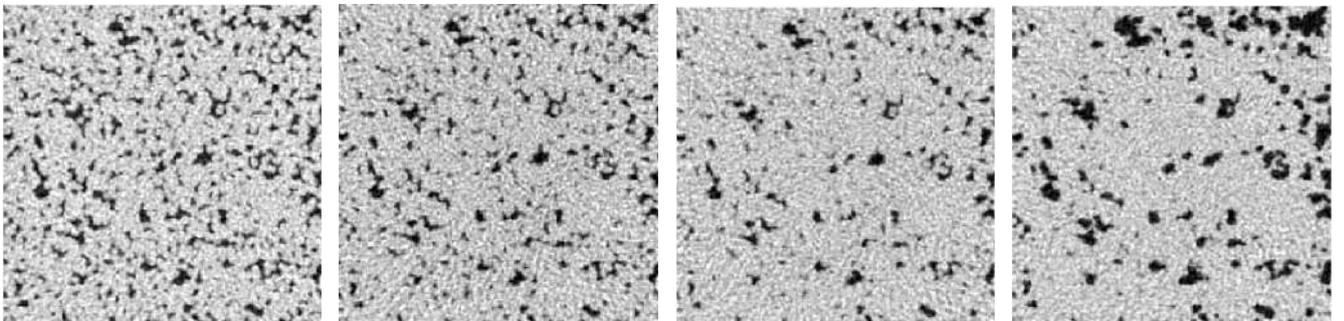


Рисунок 5.10 — Примеры 2D-срезов синтетического КТ образцов из исследования [3]. Размер срезов 200^2 . В синтетическом КТ использовались два одинаковых материала, поэтому полученные изображения имеют одинаковые цветовые свойства. Видно, что образцы имеют различную структуру порового пространства, т.е. отличаются по морфологическим свойствам.



Номер итерации
= 1×10^4

Номер итерации
= 4×10^4

Номер итерации
= 16×10^4

Номер итерации
= 64×10^4

Рисунок 5.11 — Примеры промежуточных результатов алгоритма стохастической реконструкции методом отжига для различного количества итераций, по которым построено изображение синтетической томографии (поэтому изображения представлены в градациях серого). Алгоритм начинает реконструкцию из случайно расположенных пикселей (сохраняя только пропорцию между количеством пикселей твердой фазы и порового пространства), поэтому первый промежуточный результат реконструкции достаточно далек от последнего. С увеличением числа итераций размер пор увеличивается, и их форма изменяется.

модели сегментации погрешность морфологических свойств фаз в обучающей выборке из пункта (4), которая появляется из-за наличия ошибок у неидеального алгоритма сегментации из пунктов (2) и (3)”?

Для ответа на данный вопрос с помощью алгоритма синтетической томографии в [3] было проведено следующее исследование:

1. В качестве исследуемых образцов было взято 4 исходных сегментированных на две фазы 3D-образца пористых сред размером 1000^3 с различными морфологическими свойствами (различие устанавливалось исходя из различия в значениях корреляционных функций), для каждого из них было построено пара изображений (сегментация, синтетическое КТ) размера 200^3 , т.е. с понижением исходного разрешения в 5 раз (примеры на рис. 5.10).
2. Каждое 3D-изображение сегментации было реконструировано с помощью метода отжига по набору корреляционных функций $\{S_2, L_2, F_{ss}\}$ [101] до сходимости, промежуточные результаты стохастических реконструкций сохранялись после 1, 4, 16 и 64×10^4 итераций отжига. Таким образом для каждого из образцов были получены бинарные 3D-изображения с различной степенью отличий в морфологических свойствах от оригиналов, для каждой итерации реконструкции построено синтетическое КТ-изображение (см. пример на рис. 5.11).
3. На каждом из оригинальных образцов была обучена нейросетевая модель сегментации (методология обучения совпадала с описанной в главе 4), далее данная модель была протестирована на валидационной части оригинального образца и на стохастических реконструкциях из различных итераций метода отжига. Результирующие метрики приведены на диаграммах 5.12 и 5.13.

Результаты данного исследования позволяют предположить, что различия в морфологической структуре фаз между итерациями отжига (в которых пористые среды в целом похожи по морфологии, отличия не такие значительные) влияют на итоговое качество сегментации значительно меньше, чем изначальный вид образца (каждый из образцов значительно отличается по морфологическим свойствам от остальных). Таким образом, разнообразие обучающей выборки в пункте (6) алгоритма является более критичным для качества модели сегментации, чем точность начальной сегментации (2).

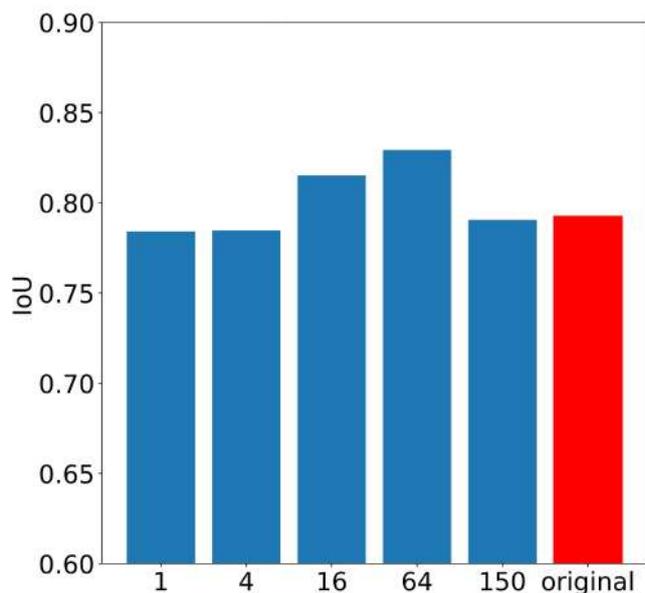


Рисунок 5.12 — Качество сегментации моделей, обученных на исходных образцах, по метрике IoU (4.6). Обученная модель применялась на соответствующие изображения-реконструкции для различных номеров итераций метода отжига.

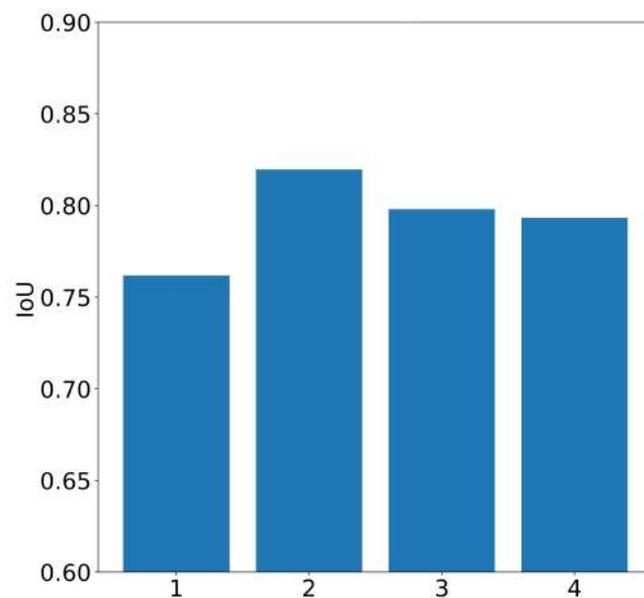


Рисунок 5.13 — Качество сегментации моделей, обученных на исходных образцах, по метрике IoU (4.6). Метрики рассчитывались на тестовой части соответствующих образцов.

5.3 Выводы

В данной главе был описан численный алгоритм построения синтетической томографии путем моделирования процесса работы настоящего томографа. Были представлены результаты работы программного модуля на основе предложенного алгоритма для различных входных образцов пористых сред, приведено сравнение синтетического КТ с оригинальным КТ-изображениями, и с синтетическими КТ-изображениями, полученными отличными от данного методами. Далее был предложен процесс построения нейросетевой модели сегментации изображений пористых сред, которая может претендовать на звание универсальной, поскольку для ее обучения не требуется размеченной выборки. В последнем подпараграфе были приведены результаты исследования влияния различий в морфологии обучающих и тестовых данных на качество нейросетевой модели сегментации. Данное исследование было проведено с помощью

программного модуля построения синтетической томографии [11] и классического алгоритма стохастических реконструкций методом отжига.

Глава 6. Программный комплекс для первичного анализа КТ-изображений пористых сред

Текущая глава посвящена описанию возможностей программного комплекса для анализа изображений пористых сред. Разработка данного ПК велась в рамках совместного НИОКР компаний «Иннопрактика» и ПАО «НК «Роснефть»». ПАО «НК «Роснефть»» является правообладателем данного программного комплекса. ПК включает в себя три модуля:

- Модуль «Анализ пустотного пространства» — предназначен для выделения однородных зон на КТ-изображениях пористых сред;
- Модуль «Сегментация томографических изображений» — предназначен для предварительной обработки исходного КТ-изображения и его сегментации на несколько минеральных фаз (классов);
- Модуль «Синтетическая томография» — предназначен для настройки параметров моделей сегментации, реализованных в предыдущем модуле, а так же для оценки качества сегментации.

В рамках коммерческого НИОКР автор данной работы полностью реализовал функционал программного модуля «Анализ пустотного пространства», реализовал математическую модель томографа в ПМ «Синтетическая томография» и принял участие в разработке функционала ПМ «Сегментация томографических изображений», графический интерфейс модулей разрабатывался отдельно, без непосредственного участия автора в программировании.

Данный комплекс использует математические модели, методы и алгоритмы, описанные в предыдущих главах работы. Представленный набор модулей осуществляет процесс первичной обработки трехмерных КТ-изображений керна. Данный процесс состоит из следующих этапов:

1. Выделение однородных зон на КТ-изображении полноразмерного керна;
2. Извлечение образцов меньшего размера из определенных на прошлом этапе однородных зон для повторной съемки с более высоким разрешением;
3. Настройка модели сегментации с помощью размеченных данных, полученных методом синтетической томографии;

4. Применение модели сегментации КТ-изображений к КТ-снимкам извлеченных фрагментов исходного полноразмерного образца для получения воксельной модели пористой среды и дальнейшего численного моделирования течений флюидов.

6.1 Программный модуль «Анализ пустотного пространства»

Данный модуль предназначен для выделения однородных областей на 3D-изображении пористой среды в градациях серого. В качестве типичных входных данных используются КТ-изображения полноразмерного керна U^g с характерными размерами порядка $500 \times 500 \times 5000$ (в вокселях). Результатом работы модуля является выходное изображение U^c , воксели которого относятся к одной из выделенных однородных областей. Количество выделяемых областей и другие параметры метода задаются пользователем заранее.

Выделенные рассматриваемым программным модулем области могут затем анализироваться и моделироваться независимо, но уже на меньшем масштабе. Такая процедура перехода к более низкому разрешению может быть проведена несколько раз. Описанный подход позволяет получить информацию об исходном образце керна на нескольких масштабах с использованием разумного количества вычислительных ресурсов и затем построить на основе полученной информации многомасштабную “цифровую” модель керна. Альтернативный вариант с использованием изображения всего образца с меньшим разрешением на текущий момент затруднительно реализовать на практике, поскольку съемка, хранение и тем более обработка массивов данных такого объема являются крайне тяжелыми задачами (как пример, увеличение разрешения на порядок ведет к 1000-кратному увеличению объема входных данных).

6.1.1 Модификация метода выделения однородных зон

В основе программного модуля лежит метод, описанный в главе 3. Для того, чтобы данный метод был применим к изображению в градациях серо-

го U^g , используется несколько модификаций. Во-первых, входное изображение нормализуется по формуле:

$$\tilde{U}^g[X] = \frac{U^g[X]}{255}.$$

Таким образом, после нормализации интенсивность вокселей изображения можно интерпретировать как некоторую “вероятность”. Во-вторых, в рассчитываемых корреляционных функциях осуществляется переход от жестких индикативных условий (см. например (1.6), (1.8)) к мягким вероятностным. В качестве примера приведем формулу с “вероятностным” вычислением функции L_2 по направлению z для трехмерного изображения \tilde{U}^g :

$$L_2^z[r] = \frac{\sum_{i,j,k=1}^{W,H,D-r} \prod_{l=0}^r \tilde{U}^g[i, j, k+l]}{WH(D-r)}. \quad (6.1)$$

В-третьих, для того, чтобы функции $S_2[r]$ с двумя операциями умножениями и $L_2[r]$ с $r+1$ операциями умножения сохраняли близкий масштаб значений, целесообразно провести логарифмирование значений L_2 и дополнительно модифицировать значения входного изображения как $\hat{U}^g[i, j, k] = \max(\tilde{U}^g[i, j, k], \epsilon)$, чтобы не возникло ошибок с вычислением логарифма от 0 (целесообразно использовать $\epsilon < \frac{1}{255}$, например, $\epsilon = 10^{-4}$).

Для анализа асимптотики вычислительной сложности метода воспользуемся обозначения из главы 3. Из формулы (6.1) видно, что асимптотика вычислительной сложности корреляционной функции L_2 имеет вид $O(D^3 L_{max})$, для S_2 имеет место оценка $O(D^3 \text{Log} D)$ (это подробнее описано в главе 1). С учетом оценки общего числа фрагментов из (3.3) и при использовании следующих зависимостей между параметрами $L_{max} = \frac{D}{2}$, $O = \frac{D}{3}$, асимптотика всего метода при расчете для кубического изображения будет следующей:

$$\begin{aligned} f_{complexity}(H, D) &= O\left(\left(\frac{H}{D-O}\right)^3 (D^3 L_{max} + D^3 \text{Log} D)\right) \\ &= O\left(\left(\frac{2H}{3D}\right)^3 \frac{D^4}{2}\right) = O(H^3 D). \end{aligned}$$

Нужно отметить, что на практике у вычислительной сложности $f_{complexity}$ имеется большой множитель, т.к., во-первых, необходимо вычислять значения двух (или более) КФ по трем направлениям, и, во-вторых, может использоваться большая величина наложения $O = kD$, что дает пропорциональный вклад с

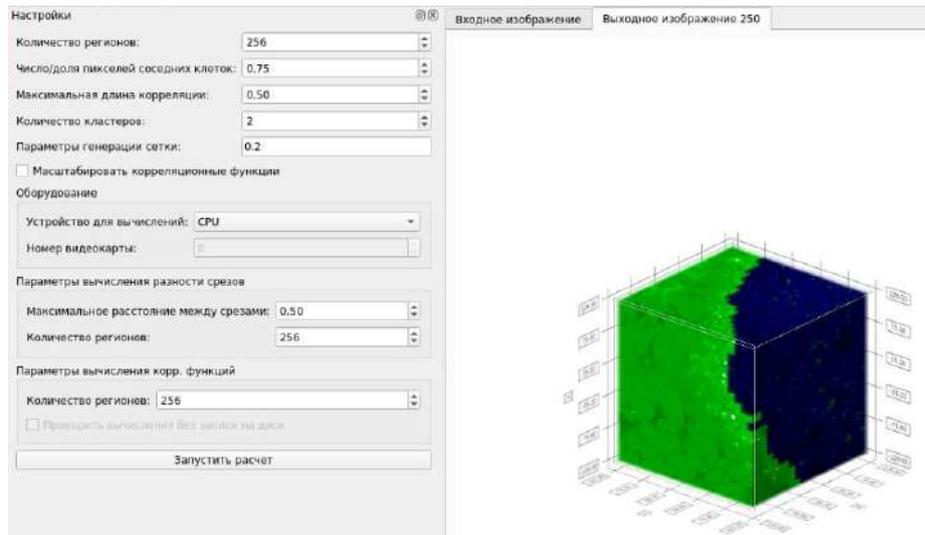


Рисунок 6.1 — Иллюстрация графического интерфейса модуля «Анализ пустотного пространства».

множителем $\frac{1}{(1-k)^3}$ в итоговое количество операций. Для того, чтобы уменьшить итоговую вычислительную сложность, была применена оптимизация в расчете КФ: для каждого линейного фрагмента по всем трем направлениям (например, размера $1 \times 1 \times D$ для направления z) КФ вычисляется единственный раз, далее для любого трехмерного фрагмента усредненные значения КФ можно вычислить с помощью операции дискретной свертки над КФ для линейных фрагментов.

6.1.2 Программная реализация

Программная реализация данного модуля была выполнена на языке Python с использованием фреймворка Pytorch, что позволило перенести все трудоемкие вычисления на графический ускоритель. Использование графического ускорителя в вычислениях позволяет обрабатывать с помощью реализованного модуля изображения полноразмерного ядра за время порядка нескольких часов (в зависимости от входных данных: размера исходного изображения, размера фрагмента D , величины наложения O , максимальной длины корреляции L_{max}). Поскольку общий объем данных, необходимых для вычисления, может на практике превышать размер доступной памяти GPU-устройства, был реализован режим расчета по порциям, *batching* (задача естественно разбивается

на части, поскольку расчет КФ для отдельных фрагментов изображения можно производить независимо). Для работы с файлами конфигурации в формате json использовалась одноименная стандартная библиотека, входные и выходные данные передавались в .raw формате, для чтения и записи использовалась библиотека NumPy. Графический интерфейс модуля был реализован с помощью фреймворка QT (см. рис. 6.1). Пользователь может задавать следующие параметры метода:

- размер единовременно обрабатываемой порции данных (batch), измеряемый в количестве регионов;
- величину наложения фрагментов (через значение отношения к размеру фрагмента $\frac{O}{D}$);
- максимальную длину корреляции (через значение отношения к размеру фрагмента $\frac{L_{max}}{D}$);
- количество выделяемых кластеров однородности;
- размер региона (через значение отношения к размеру входного изображения $\frac{D}{H}$).

Параметры перечислены сверху вниз в том порядке, в котором они отображаются в соответствующей части интерфейса слева. Пользователь может переключаться между исходным изображением и результатами работы модуля с помощью вкладок, которые находятся в верхней части окна с визуализацией объема образца.

6.2 Программный модуль «Сегментация томографических изображений»

Данный модуль [10] предназначен для выполнения сегментации входного изображения пористой среды в градациях серого U^g на две или более минеральные фазы (класса). В модуле реализованы несколько классических локальных методов сегментации:

- Метод сходящихся активных контуров [63] (converging active contour, SAC);
- Метод роста регионов [149] (region growth);
- Метод марковских случайных полей [154] (Markov random field, MRF).

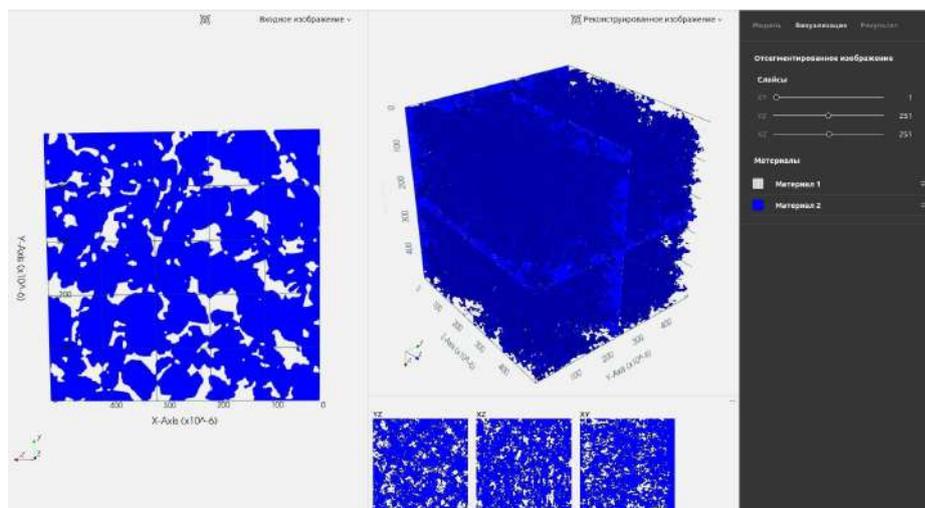


Рисунок 6.2 — Иллюстрация графического интерфейса модуля «Сегментация томографических изображений».

Концепция данных методов описана в главе 4. Так же с помощью методов, реализованных в данном программном модуле, выполнялась предварительная обработка КТ-образцов для проведенных экспериментов из глав 2, 3, 4, 5. Методы принимают на вход изображения в .raw-формате. В качестве общих параметров все методы используют заданные оператором границы интенсивностей фаз (обычно это две фазы: твердая часть и поры), но у каждого из методов есть свой уникальный набор параметров. Например, параметры температуры и энергии для метода MRF и параметры функции скорости для SAC. Результатом работы алгоритмов сегментации является .raw-файл с сегментированным изображением U^c . Данный модуль полностью реализован на языке C++ с применением технологии OpenMP для использования в вычислениях нескольких CPU, интерфейс модулей сделан с помощью фреймворка QT (см. рис. 6.2 с примером GUI). Интерфейс позволяет производить визуализацию результатов сегментации по отдельным ортогональным проекциям во всех трех направлениях.

6.3 Программный модуль «Синтетическая томография»

Данный модуль [11] был реализован на основе математической модели томографа и численного метода для построения изображения синтетической томографии, описанных в главе 5.

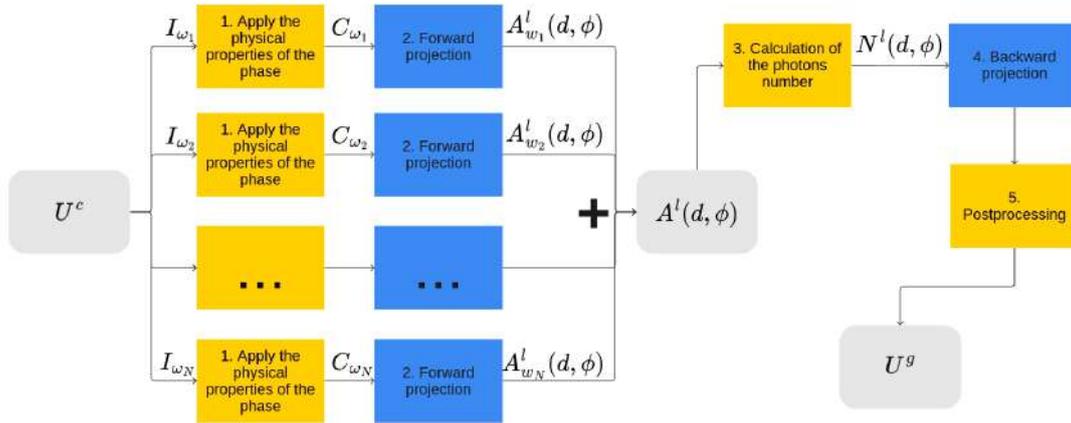


Рисунок 6.3 — Схема численного метода для построения изображения синтетической томографии. Блоки желтого цвета обозначают процедуры, которые реализованы на Python, синим — на C++, серые блоки обозначают поток данных: входных, промежуточных и выходных.

Самыми трудоемкими частями алгоритма являются вычисления линейных интегралов (5.4) для прямого численного преобразования Радона (этап 2 на рис. 6.3) и обратное преобразование Радона для синограмм с рассчитанным количеством достигших детектор фотонов (5.7) (этап 4 на рис. 6.3). Для решения этих задач была реализована библиотека на языке C++.

Построения дискретной модели образца включает в себя следующие шаги: расчет локальных коэффициентов поглощения для конкретной фазы образца, наложение шума, постобработка получившегося КТ-изображения. Операции в рамках этих шагов сводятся к математическим операциям над тензорами, поэтому реализация данных шагов была эффективно векторизована с помощью библиотеки NumPy и фреймворка PyTorch. PyTorch также позволяет перенести большую часть вычислений на графический процессор. Дополнительно с помощью PyTorch была реализована стратегия сэмплирования плотности из beta-распределения с наперед задаваемыми параметрами (таким образом, чтобы в вокселях содержались различные величины плотности материалов, в то же время близкие к целевому среднему уровню) для каждой фазы и сглаживания с помощью пространственной свертки для величины поглощения C_{ω_i} из (5.4). Для работы с файлами конфигурации в json-формате использовалась одноименная стандартная библиотека языка Python. Графический интерфейс модуля был реализован с помощью фреймворка QT (см. рис. 6.4 с иллюстрацией).

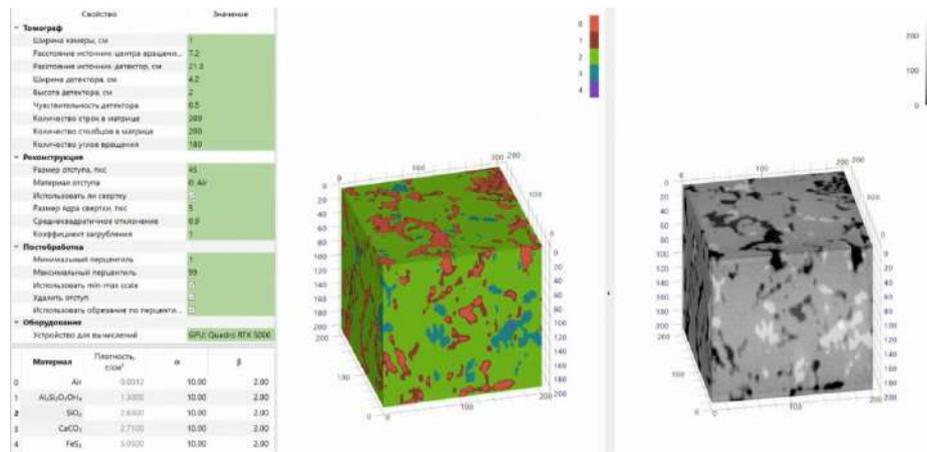


Рисунок 6.4 — Иллюстрация графического интерфейса модуля «Синтетическая томография».

6.3.1 Алгоритм расчета прямой проекции

Входными данными для расчета прямой проекции являются:

- Дискретная модель образца $C_{\omega_i}[X]$;
- Геометрические параметры томографа: размеры детектора в пикселях DR_H , DR_W ; размеры пикселя детектора в сантиметрах (зависит от D_H , D_W и размеров детектора в пикселях); расстояние от источника излучения до центра изображения d_{SR} ; расстояние от источника излучения до центра детектора d_{SD} .

Результатом работы прямой проекции является синограмма (5.5) с величинами линейного поглощения для каждой из фаз образца отдельно.

Расчеты производятся в декартовой системе координат, начало координат находится в центре рассматриваемого изображения. Оси координат сонаправлены граням изображения. Ценой деления для длины является размер одного вокселя изображения. Расчет синограммы производится независимо для рассматриваемой пары: угла поворота изображения (образца) и пикселя матрицы детектора (и поэтому может выполняются параллельно при использовании для расчетов нескольких ядер CPU). Выделяется направление, которое задается точками источника излучения и пикселем детектора, по нему берется отрезок максимальной длины, который проходит полностью внутри изображения образца, т.е. его концы находятся на границе изображения. Далее выбирается одна из осей координат, для которой проекция отрезка на эту ось имеет наибольшую длину. Затем выполняется «проекция» центров вокселей на рас-

сматриваемый отрезок с помощью плоскостей, перпендикулярных выбранной оси координат и при этом проходящих через центры вокселей изображения (например, если выбрана ось x , по которой изображение имеет размер SR_H в вокселях, то количество спроецированных на отрезок точек будет не более, чем SR_H). В “спроецированных” точках X , лежащих на рассматриваемом отрезке, с помощью линейной интерполяции вычисляется значение функции $U^c[X]$. Для интерполяции берутся значения из центров соседних вокселей, которые лежат на соответствующей плоскости, перпендикулярной выбранной оси координат (например, если выбрана ось x , то рассматриваются соседние воксели из плоскости, параллельной yz). Итоговое значение синограммы $A[D, \varphi]$ является суммой интерполированных значений на выделенных точках рассматриваемого отрезка.

6.3.2 Расчет обратной проекции

Входными данными для расчета обратной проекции являются:

1. Количество долетевших до детектора фотонов $N[D, \varphi]$ (5.7), заданное для каждого пикселя детектора и угла поворота изображения;
2. Параметры томографа, аналогичные указанным в предыдущем подпараграфе про прямую проекцию.

Результатом работы обратной проекции является реконструкция трехмерного изображения U^a с непрерывной областью значений.

Для расчета используется система координат из расчета прямой проекции. Первым шагом вычисления обратной проекции является применение к синограмме так называемого Ramp-фильтра. Данный фильтр реализован по алгоритму из работы [185] как циклической свертка, выполненная с помощью быстрого преобразование Фурье. В реализации была использована библиотека «General Purpose FFT Package» <https://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~ooura/fft.html> для расчета быстрого преобразования Фурье. В дальнейшем схема вычислений для получения реконструкции похожа на алгоритм вычисления прямой проекции, с той лишь разницей, что направление строится по точке источника и вокселю образца (а не по пикселю детектора):

Размер изображения (в вокселях)	100 ³	300 ³	500 ³
Astra (GPU)	0.036с	0.409с	2.099с
ПМ «СТ»(CPU)	0.198с	10.942с	95.326с

Таблица 6 — Сравнение производительности процедуры прямой проекции программного модуля «Синтетическая томография» и Astra toolbox.

Размер изображения (в вокселях)	100 ³	300 ³	500 ³
Astra (GPU)	0.682с	2.168с	5.679с
ПМ «СТ»(CPU)	0.285с	13.844с	105.363с

Таблица 7 — Сравнение производительности процедуры обратной проекции программного модуля «Синтетическая томография» и Astra toolbox.

- Для каждого поворота рассматривается прямая, проходящая через источник излучения и центр вокселя образца;
- В точке пересечения этой прямой и детектора рассчитывается линейная интерполяция значения синограммы с помощью соседних пикселей детектора;
- Результирующим значением U^a для вокселя образца является сумма интерполированных значений (в пикселе детектора), рассчитанная по совокупности всех возможных углов поворота образца.

Расчеты для разных вокселей реконструкции распараллеливаются аналогично случаю с прямой проекцией.

6.3.3 Производительность

В процессе тестирования реализованного модуля было проведено сравнение с открытым фреймворком Astra Toolbox [186], который позволяет использовать графический процессор для вычислений, см. таблицы 6 и 7.

Программный комплекс на основе описанного алгоритма способен рассчитывать изображение синтетической томографии для исходного образца размером 300^3 за время порядка минуты на персональном компьютере; для обработки изображения размером порядка 1000^3 понадобится рабочая станция (из-за необходимости иметь оперативную память большого объема для хранения промежуточных данных алгоритма), при этом время расчета составит порядка часа.

Такие параметры сложности выгодно отличают предложенный алгоритм синтетической томографии от аналогов, которые используют прямое моделирование поведения отдельных эмитированных частиц (например, с помощью фреймворка Geant4 [187]) и требуют больших вычислительных ресурсов для расчета небольшого образца с простой геометрией (при этом ожидаемое время расчета составляет порядка нескольких часов).

Заключение

Основные результаты, полученные в рамках данной работы, заключаются в следующем:

1. Разработана модификация математической модели представления корреляционной функции как выпуклой комбинации некоторого набора базисных функций. Данная модификация была использована как часть численного метода сжатия структурной информации, извлеченной из изображения пористой среды с помощью расчета пространственных корреляционных функций по ортогональным направлениям. Признаковое представление, полученное с помощью разработанного метода, было протестировано на реальных данных для задачи категоризации сегментированных изображений почв.
2. Разработан полуавтоматический метод получения разметки для задачи сегментации пористых сред, который основан на использовании оператором алгоритмов сегментации без учителя. Предложенный метод был использован для построения математической модели сегментации на основе сверточной нейронной сети, данная модель была протестирована на наборе реальных КТ-изображений почв. Качество полученной модели было оценено с помощью классических и доменных метрик сегментации.
3. Разработана модификация математической модели томографа, которая использует информацию о пространственном распределении фаз исследуемого образца пористой среды и о физико-химических свойствах этих фаз. На основе предложенной модели был построен численный метод получения синтетического КТ-изображения исследуемого образца пористой среды. Проведено качественное сравнение результатов работы метода с существующими аналогами.
4. Реализован программный комплекс для первичного анализа трехмерных КТ-изображений пористых сред. Данный комплекс позволяет выделять на КТ-изображении однородные зоны, сегментировать КТ-изображение на несколько минеральных фаз и настраивать параметры модели сегментации по данным, полученным с помощью программного модуля синтетической компьютерной томографии.

Список литературы

1. Compressing soil structural information into parameterized correlation functions / Marina V. Karsanina, Efim V. Lavrukhin, Dmitry S. Fomin et al. // *European Journal of Soil Science*. — 2020. — Vol. 72, no. 2. — Pp. 561–577. — URL: <https://doi.org/10.1111/ejss.13025>.
2. Assessing the fidelity of neural network-based segmentation of soil XCT images based on pore-scale modelling of saturated flow properties / Efim V. Lavrukhin, Kirill M. Gerke, Konstantin A. Romanenko et al. // *Soil and Tillage Research*. — 2021. — Vol. 209. — P. 104942. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.still.2021.104942>.
3. *Lavrukhin Efim V., Gerke Kirill M.* The Influence of Image Morphology on Neural Network-Based Segmentation Results // *Advances in Systems Science and Applications*. — 2022. — Vol. 22, no. 4. — Pp. 31–50. — URL: <https://doi.org/10.25728/assa.2022.22.4.1308>.
4. *Lavrukhin Efim V., Gerke Kirill M., Karsanina Marina V.* Measuring structural nonstationarity: The use of imaging information to quantify homogeneity and inhomogeneity // *Physical Review E*. — 2023. — Vol. 108, no. 6. — P. 064128. — URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.108.064128>.
5. Использование методов машинного обучения для сегментации изображений пород полученных методом рентгеновской томографии / Лаврухин Е.В., Герке К.М., Сизоненко Т.О., Корост Д.В. // *Геоевразия* 2018. — 2018. — С. 418–422.
6. Решение проблемы обзора-разрешения томографического метода с помощью совмещения масштабов / Карсанина М.В., Герке К.М., Сизоненко Т.О. и др. // *Практическая микротомография. Сборник материалов Пятой международной конференции*. — 2018. — С. 65–68.
7. Compressing soil structural information / Karsanina M., Lavrukhin E., Fomin D. et al. // *European Geosciences Union General Assembly 2020*. — Vol. 22. — 2020. — Pp. 10807–10807. — URL: <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu2020-10807>.

8. Томографическое исследование почвы при низком разрешении. Проблема автоматической сегментации / Лаврухин Е.В., Семенов И.Н., Абросимов К.Н., Корост Д.В // Почвы — стратегический ресурс России: тезисы докладов VIII съезда Общества почвоведов им. В.В. Докучаева и Школы молодых ученых по морфологии и классификации почв. — 2021. — С. 29–30.
9. *Е.В. Лаврухин*. Сегментация томографических изображений пористых сред с помощью нейронных сетей // Тезисы докладов научной конференции "Тихоновские чтения 2023". — 2023. — С. 70.
10. *Васильев Роман В., Герке Кирилл М., Лаврухин Ефим. В. и др.* Модуль «Сегментация томографических изображений» ПК «РН — Цифровой керн» 1.0.
11. *Герке Кирилл М., Лаврухин Ефим. В., Васильев Роман В. и др.* Модуль «Синтетическая томография» ПК «РН-Цифровой керн» 1.0.
12. *Torquato S.* Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties. — Springer-Verlag, 2002.
13. *Schlüter S., Vogel H. J.* On the reconstruction of structural and functional properties in random heterogeneous media // *Advances in Water Resources*. — 2011. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 314–325.
14. *Mosser L., Dubrulle O., Blunt M. J.* Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks // *Physical Review E*. — 2017. — Vol. 96, no. 4.
15. *Brigham E Oran.* The fast Fourier transform and its applications. — Prentice-Hall, Inc., 1988.
16. Robust surface-correlation-function evaluation from experimental discrete digital images / Aleksei Samarin, Vasily Postnicov, Marina V Karsanina et al. // *Physical Review E*. — 2023. — Vol. 107, no. 6. — P. 065306.
17. *Canny John.* A Computational Approach to Edge Detection // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. — 1986. — Vol. PAMI-8, no. 6. — Pp. 679–698.

18. Gerke K, Karsanina M, Skvortsova E. Description and reconstruction of the soil pore space using correlation functions. // *Eurasian soil science*. — 2012. — Vol. 45, no. 9.
19. Universal spatial correlation functions for describing and reconstructing soil microstructure / Marina V Karsanina, Kirill M Gerke, Elena B Skvortsova, Dirk Mallants // *PloS one*. — 2015. — Vol. 10, no. 5. — P. e0126515.
20. Jiao Yang, Stillinger FH, Torquato S. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles // *Physical review E*. — 2007. — Vol. 76, no. 3. — P. 031110.
21. Adler P. Porous media: geometry and transports. — Butterworth-Heinemann, 1992.
22. M. Sahimi. Heterogeneous Materials I: Linear Transport Properties and Optical Properties. — New York: Springer-Verlag, 2003.
23. Pedotransfer functions in Earth system science: Challenges and perspectives / K. Van Looy, J. Bouma, M. Herbst et al. // *Reviews of Geophysics*. — 2017. — Vol. 55. — Pp. 1199 – 1256.
24. Bear J. Dynamics of fluids in porous media. — New York. London and Amsterdam: American Elsevier, 1972.
25. Karsanina Marina V, Gerke Kirill M. Hierarchical optimization: Fast and robust multiscale stochastic reconstructions with rescaled correlation functions // *Physical review letters*. — 2018. — Vol. 121, no. 26. — P. 265501.
26. Vogel H. J., Roth K. Moving through scales of flow and transport in soil // *Journal of Hydrology*. — 2003. — Vol. 272, no. 1-4. — Pp. 95–106.
27. Pachepsky Y., Hill R. L. Scale and scaling in soils // *Geoderma*. — 2017. — Vol. 287. — Pp. 4–30.
28. Skvortsova E.B., Kalinina N.V. Micromorphometric types of the pore space in virgin and plowed loamy soils // *Eurasian Soil Science*. — 2004. — Vol. 37, no. 9. — Pp. 980–991.

29. *Bryk M.* Resolving compactness index of pores and solid phase elements in sandy and silt loamy soils // *Geoderma*. — 2018. — Vol. 318. — Pp. 109–122.
30. Automated statistical method to align 2D chemical maps with 3D X-ray computed micro-tomographic images of soils / S. M. Hapca, Z. X. Wang, W. Otten et al. // *Geoderma*. — 2011. — Vol. 164, no. 3-4. — Pp. 146–154.
31. Recent progress in X-ray CT as a geosciences tool / V. Cnudde, B. Masschaele, M. Dierick et al. // *Applied Geochemistry*. — 2006. — Vol. 21, no. 5. — Pp. 826–832.
32. *Gerke K.M., Skvortsova E.B., Korost D.V.* Tomographic method of studying soil pore space: Current perspectives and results for some Russian soils // *Eurasian Soil Science*. — 2012. — Vol. 45. — Pp. 700–709.
33. Protection of soil carbon within macro-aggregates depends on intra-aggregate pore characteristic / A. N. Kravchenko, W. C. Negassa, A. K. Guber, M. L. Rivers // *Scientific Reports*. — 2015. — Vol. 5.
34. Microtomographic analysis of pore space in a virgin soddy-podzolic soil / E. B. Skvortsova, V. A. Rozhkov, K. N. Abrosimov et al. // *Eurasian Soil Science*. — 2016. — Vol. 49, no. 11. — Pp. 1250–1258.
35. The impact of multiple freeze-thaw cycles on the microstructure of aggregates from a soddy-podzolic soil: a microtomographic analysis / E.B. Skvortsova, E.V. Shein, K.N. Abrosimov et al. // *Eurasian soil science*. — 2018. — Vol. 51, no. 2. — Pp. 190–198.
36. *Koestel J., Larsbo M.* Imaging and quantification of preferential solute transport in soil macropores // *Water Resources Research*. — 2014. — Vol. 50, no. 5. — Pp. 4357–4378.
37. Quantification of Soil Macropores at Different Slope Positions under Alpine Meadow Using Computed Tomography in the Qinghai Lake Watershed, NE Qinghai-Tibet / Z. C. Li, X. Hu, X. Y. Li et al. // *Eurasian Soil Science*. — 2019. — Vol. 52, no. 11.
38. Stochastic investigation of long-term persistence in two-dimensional images of rocks / Panayiotis Dimitriadis, Katerina Tzouka, Demetris Koutsoyiannis et al. // *Spatial statistics*. — 2019. — Vol. 29. — Pp. 177–191.

39. Soil structure as an indicator of soil functions: a review / E. Rabot, M. Wiesmeier, S. Schlüter, H.J. Vogel // *Geoderma*. — 2018. — Vol. 314. — Pp. 122–137.
40. Gerke Kirill M, Karsanina Marina V, Mallants Dirk. Universal stochastic multiscale image fusion: an example application for shale rock // *Scientific reports*. — 2015. — Vol. 5, no. 1. — Pp. 1–12.
41. Enhancing image resolution of soils by stochastic multiscale image fusion / Marina V Karsanina, Kirill M Gerke, Elena B Skvortsova et al. // *Geoderma*. — 2018. — Vol. 314. — Pp. 138–145.
42. Adler PM, Jacquin Ch G, Quiblier JA. Flow in simulated porous media // *International Journal of Multiphase Flow*. — 1990. — Vol. 16, no. 4. — Pp. 691–712.
43. C.L.Y. Yeong, S. Torquato. Reconstructing random media. II. Three-dimensional media from two-dimensional cuts // *Phys Rev E*. — 1998. — Vol. 58. — Pp. 224–233.
44. Tahmasebi P., Sahimi M. Reconstruction of three-dimensional porous media using a single thin section // *Physical Review E*. — 2012. — Vol. 85, no. 6. — Pp. 146–154.
45. Improved multipoint statistics method for reconstructing three-dimensional porous media from a two-dimensional image via porosity matching / K. Ding, Q. Teng, Z. Wang et al. // *Physical Review E*. — 2018. — Vol. 97, no. 6.
46. Gravey M., Mariethoz G. QuickSampling v1.0: a robust and simplified pixel-based multiple-point simulation approach // *Geosci. Model Dev*. — 2020. — Vol. 13. — Pp. 2611 – 2630.
47. Reconstruction of porous media from extremely limited information using conditional generative adversarial networks / J. Feng, X. He, Q. Teng et al. // *Physical Review E*. — 2019. — Vol. 100, no. 3.
48. K.M. Gerke, M.V. Karsanina. How structure non-stationarity compromises flow properties representativity (REV) of soil samples: pore-scale modelling of saturated hydraulic conductivities // *European Journal of Soil Science*. — 2020.

49. *Debye P., Anderson Jr H. R., Brumberger H.* Scattering by an inhomogeneous solid. II. The correlation function and its application // *Journal of applied Physics*. — 1957. — Vol. 28, no. 6. — Pp. 679–683.
50. Rapid Rock Nanoporosity Analysis Using Small Angle Scattering Fused with Imaging Data Based on Stochastic Reconstructions / M. V. Karsanina, V. V. Volkov, P. V. Konarev et al. // *SPE Russian Petroleum Technology Conference, Society of Petroleum Engineers*. — 2019.
51. *Gerke Kirill M, Karsanina Marina V, Katsman Regina.* Calculation of tensorial flow properties on pore level: Exploring the influence of boundary conditions on the permeability of three-dimensional stochastic reconstructions // *Physical Review E*. — 2019. — Vol. 100, no. 5. — P. 053312.
52. Hierarchical n-point polytope functions for quantitative representation of complex heterogeneous materials and microstructural evolution / Pei-En Chen, Wenxiang Xu, Nikhilesh Chawla et al. // *Acta Materialia*. — 2019. — Vol. 179. — Pp. 317–327.
53. *Torquato Salvatore, Beasley JD, Chiew YC.* Two-point cluster function for continuum percolation // *The Journal of chemical physics*. — 1988. — Vol. 88, no. 10. — Pp. 6540–6547.
54. *Koestel J., Larsbo M., Jarvis N.* Scale and REV analyses for porosity and pore connectivity measures in undisturbed soil // *Geoderma*. — 2020. — Vol. 366.
55. *Renard P., Allard D.* Connectivity metrics for subsurface flow and transport // *Advances in Water Resources*. — 2013. — Vol. 51. — Pp. 168–196.
56. *Vogel H-J, Weller Ulrich, Schlüter Steffen.* Quantification of soil structure based on Minkowski functions // *Computers & Geosciences*. — 2010. — Vol. 36, no. 10. — Pp. 1236–1245.
57. *Jiao Y., Stillinger F. H., Torquato S.* A superior descriptor of random textures and its predictive capacity // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2009. — Vol. 106, no. 42. — Pp. 17634–17639.
58. *Gommes Cedric J, Jiao Yang, Torquato Salvatore.* Density of states for a specified correlation function and the energy landscape // *Physical review letters*. — 2012. — Vol. 108, no. 8. — P. 080601.

59. *Gommes Cedric J, Jiao Yang, Torquato Salvatore*. Microstructural degeneracy associated with a two-point correlation function and its information content // *Physical Review E*. — 2012. — Vol. 85, no. 5. — P. 051140.
60. Probing information content of hierarchical n-point polytope functions for quantifying and reconstructing disordered systems / P. E. Chen, W. Xu, Y. Ren, Y. Jiao // *Physical Review E*. — 2020. — Vol. 102, no. 1.
61. *Jiao Y., Stillinger F. H., Torquato S.* Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications // *Physical Review E*. — 2008. — Vol. 77, no. 3.
62. *Hartigan J. A., Wong M. A.* Algorithm AS 136: A K-Means Clustering Algorithm // *Journal of the Royal Statistical Society. Series C, Applied Statistics*. — 1979. — Vol. 28, no. 1. — Pp. 100–108.
63. *Sheppard Adrian P, Sok Robert M, Averdunk Holger*. Techniques for image enhancement and segmentation of tomographic images of porous materials // *Physica A: Statistical mechanics and its applications*. — 2004. — Vol. 339, no. 1-2. — Pp. 145–151.
64. *Lu B., Torquato S.* Lineal-path function for random heterogeneous materials. II. Effect of polydispersivity // *Physical Review A*. — 1992. — Vol. 45, no. 10.
65. *Miller C. A., Torquato S.* Diffusion-controlled reactions among spherical traps: Effect of polydispersity in trap size // *Physical Review B*. — 1989. — Vol. 40, no. 10.
66. *Sahimi Muhammad*. Heterogeneous materials: Nonlinear and breakdown properties and atomistic modeling. — Springer, 2003. — Vol. 2.
67. *Springel Volker, Frenk Carlos S, White Simon DM*. The large-scale structure of the Universe // *nature*. — 2006. — Vol. 440, no. 7088. — Pp. 1137–1144.
68. *Vazza Franco, Feletti Alberto*. The quantitative comparison between the neuronal network and the cosmic web // *Frontiers in Physics*. — 2020. — Vol. 8. — P. 491.

69. Assessing the utility of FIB-SEM images for shale digital rock physics / Shaina Kelly, Hesham El-Sobky, Carlos Torres-Verdin, Matthew T Balhoff // *Advances in water resources*. — 2016. — Vol. 95. — Pp. 302–316.
70. Modern approaches to pore space scale digital modeling of core structure and multiphase flow / Kirill M. Gerke, Dmitry V. Korost, Marina V. Karsanina et al. // *Геоpecыpcыт.* — 2021. — Vol. 23, no. 2. — Pp. 197–213.
71. *Feigin LA, Svergun Dimitrij I et al.* Structure analysis by small-angle X-ray and neutron scattering. — Springer, 1987. — Vol. 1.
72. *Fullwood David T, Niezgodá Stephen R, Kalidindi Surya R.* Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase-recovery algorithms // *Acta Materialia*. — 2008. — Vol. 56, no. 5. — Pp. 942–948.
73. *Allaire Grégoire.* Homogenization and two-scale convergence // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*. — 1992. — Vol. 23, no. 6. — Pp. 1482–1518.
74. *Jikov Vasili Vasilievitch, Kozlov Sergei M, Oleinik Olga Arsenievna.* Homogenization of differential operators and integral functionals. — Springer Science & Business Media, 2012.
75. *Gerke Kirill M, Karsanina Marina V.* How pore structure non-stationarity compromises flow properties representativity (REV) for soil samples: Pore-scale modelling and stationarity analysis // *European Journal of Soil Science*. — 2021. — Vol. 72, no. 2. — Pp. 527–545.
76. *Lackner Klaus S.* A guide to CO2 sequestration // *Science*. — 2003. — Vol. 300, no. 5626. — Pp. 1677–1678.
77. Carbon capture and storage update / Matthew E Boot-Handford, Juan C Abanades, Edward J Anthony et al. // *Energy & Environmental Science*. — 2014. — Vol. 7, no. 1. — Pp. 130–189.
78. *Kuzyakov Yakov, Razavi Bahar S.* Rhizosphere size and shape: temporal dynamics and spatial stationarity // *Soil Biology and Biochemistry*. — 2019. — Vol. 135. — Pp. 343–360.
79. *Blunt Martin J.* Multiphase flow in permeable media: A pore-scale perspective. — Cambridge university press, 2017.

80. *Gomi Takashi, Sidle Roy C, Richardson John S.* Understanding processes and downstream linkages of headwater systems: headwaters differ from downstream reaches by their close coupling to hillslope processes, more temporal and spatial variation, and their need for different means of protection from land use // *BioScience*. — 2002. — Vol. 52, no. 10. — Pp. 905–916.
81. *Gerke Kirill M, Sidle Roy C, Mallants Dirk.* Preferential flow mechanisms identified from staining experiments in forested hillslopes // *Hydrological Processes*. — 2015. — Vol. 29, no. 21. — Pp. 4562–4578.
82. *Mallants Dirk, Chapman Neil.* How much does corrosion of nuclear waste matrices matter // *Nature Materials*. — 2020. — Vol. 19, no. 9. — Pp. 959–961.
83. *Jun Mikyong, Stein Michael L.* Nonstationary covariance models for global data // *The Annals of Applied Statistics*. — 2008. — Vol. 2, no. 4. — Pp. 1271–1289. — URL: <https://doi.org/10.1214/08-AOAS183>.
84. *Cnudde Veerle, Boone Matthieu Nicolaas.* High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications // *Earth-Science Reviews*. — 2013. — Vol. 123. — Pp. 1–17.
85. *Bultreys Tom, De Boever Wesley, Cnudde Veerle.* Imaging and image-based fluid transport modeling at the pore scale in geological materials: A practical introduction to the current state-of-the-art // *Earth-Science Reviews*. — 2016. — Vol. 155. — Pp. 93–128.
86. *Lubbers Nicholas, Lookman Turab, Barros Kipton.* Inferring low-dimensional microstructure representations using convolutional neural networks // *Physical Review E*. — 2017. — Vol. 96, no. 5. — P. 052111.
87. *Cecen Ahmet, Yabansu Yuksel C, Kalidindi Surya R.* A new framework for rotationally invariant two-point spatial correlations in microstructure datasets // *Acta Materialia*. — 2018. — Vol. 158. — Pp. 53–64.
88. Microstructure and mechanical properties of hyperuniform heterogeneous materials / Yaopengxiao Xu, Shaohua Chen, Pei-En Chen et al. // *Physical Review E*. — 2017. — Vol. 96, no. 4. — P. 043301.

89. Machine learning-based accelerated property prediction of two-phase materials using microstructural descriptors and finite element analysis / Emily Ford, Kailasnath Maneparambil, Subramaniam Rajan, Narayanan Neithalath // *Computational Materials Science*. — 2021. — Vol. 191. — P. 110328.
90. *Semnani Shabnam J, Borja Ronaldo I*. Quantifying the heterogeneity of shale through statistical combination of imaging across scales // *Acta Geotechnica*. — 2017. — Vol. 12. — Pp. 1193–1205.
91. Structural regeneration of fracture-vug network in naturally fractured vuggy reservoirs / Qian Sun, Na Zhang, Mohamed Fadlelmula, Yuhe Wang // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. — 2018. — Vol. 165. — Pp. 28–41.
92. *Sevostianova Elena, Leinauer Bernd, Sevostianov Igor*. Quantitative characterization of the microstructure of a porous material in the context of tortuosity // *International journal of engineering science*. — 2010. — Vol. 48, no. 12. — Pp. 1693–1701.
93. Mimicking 3D food microstructure using limited statistical information from 2D cross-sectional image / Antonio Derossi, Kirill M Gerke, Marina V Karsanina et al. // *Journal of food engineering*. — 2019. — Vol. 241. — Pp. 116–126.
94. Direct extraction of spatial correlation functions from limited x-ray tomography data for microstructural quantification / Hechao Li, Somya Singh, Nikhilesh Chawla, Yang Jiao // *Materials Characterization*. — 2018. — Vol. 140. — Pp. 265–274.
95. *Barrall GA, Frydman Lucio, Chingas GC*. NMR diffraction and spatial statistics of stationary systems // *Science*. — 1992. — Vol. 255, no. 5045. — Pp. 714–717.
96. *Gommes Cedric J*. Stochastic models of disordered mesoporous materials for small-angle scattering analysis and more // *Microporous and Mesoporous Materials*. — 2018. — Vol. 257. — Pp. 62–78.
97. *Yeong CLY, Torquato Salvatore*. Reconstructing random media // *Physical review E*. — 1998. — Vol. 57, no. 1. — P. 495.

98. *Thovert J-F, Adler PM.* Grain reconstruction of porous media: Application to a Bentheim sandstone // *Physical Review E.* — 2011. — Vol. 83, no. 5. — P. 056116.
99. Three-dimensional multiscale fusion for porous media on microtomography images of different resolutions / Xuan Li, Qizhi Teng, Yonghao Zhang et al. // *Physical Review E.* — 2020. — Vol. 101, no. 5. — P. 053308.
100. Multiscale modeling of shale samples based on low-and high-resolution images / Yuqi Wu, Pejman Tahmasebi, Chengyan Lin et al. // *Marine and Petroleum Geology.* — 2019. — Vol. 109. — Pp. 9–21.
101. *Gerke Kirill M, Karsanina Marina V.* Improving stochastic reconstructions by weighting correlation functions in an objective function // *Europhysics Letters.* — 2015. — Vol. 111, no. 5. — P. 56002.
102. *Tahmasebi Pejman, Sahimi Muhammad.* Reconstruction of nonstationary disordered materials and media: Watershed transform and cross-correlation function // *Physical Review E.* — 2015. — Vol. 91, no. 3. — P. 032401.
103. *Gommes Cedric J.* Small-angle scattering and scale-dependent heterogeneity // *Journal of Applied Crystallography.* — 2016. — Vol. 49, no. 4. — Pp. 1162–1176.
104. Improving pattern reconstruction using directional correlation functions / Kirill M Gerke, Marina V Karsanina, Roman V Vasilyev, Dirk Mallants // *Europhysics Letters.* — 2014. — Vol. 106, no. 6. — P. 66002.
105. *Jiao Yang, Chawla Nikhilesh.* Modeling and characterizing anisotropic inclusion orientation in heterogeneous material via directional cluster functions and stochastic microstructure reconstruction // *Journal of Applied Physics.* — 2014. — Vol. 115, no. 9. — P. 093511.
106. A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise / Martin Ester, Hans-Peter Kriegel, Jörg Sander, Xiaowei Xu // *Proceedings of the Second International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining.* — KDD'96. — AAAI Press, 1996. — Pp. 226 – 231.
107. *Ledesma-Alonso René, Barbosa Romeli, Ortegaón Jaime.* Effect of the image resolution on the statistical descriptors of heterogeneous media // *Physical Review E.* — 2018. — Vol. 97, no. 2. — P. 023304.

108. *Ma Zheng, Torquato Salvatore.* Precise algorithms to compute surface correlation functions of two-phase heterogeneous media and their applications // *Physical Review E.* — 2018. — Vol. 98, no. 1. — P. 013307.
109. Supervoxel-based segmentation of mitochondria in em image stacks with learned shape features / Aurélien Lucchi, Kevin Smith, Radhakrishna Achanta et al. // *IEEE transactions on medical imaging.* — 2011. — Vol. 31, no. 2. — Pp. 474–486.
110. *Hu Dandan, Ronhovde Peter, Nussinov Zohar.* Replica inference approach to unsupervised multiscale image segmentation // *Physical Review E.* — 2012. — Vol. 85, no. 1. — P. 016101.
111. *Hilfer R.* Local-porosity theory for flow in porous media // *Physical Review B.* — 1992. — Vol. 45, no. 13. — P. 7115.
112. *Torquato Salvatore, Stillinger Frank H.* Local density fluctuations, hyperuniformity, and order metrics // *Physical Review E.* — 2003. — Vol. 68, no. 4. — P. 041113.
113. Pore scale study of flow in porous media: Scale dependency, REV, and statistical REV / Dongxiao Zhang, Raoyang Zhang, Shiyi Chen, Wendy E Soll // *Geophysical research letters.* — 2000. — Vol. 27, no. 8. — Pp. 1195–1198.
114. *Al-Raoush Riyadh, Papadopoulos Apostolos.* Representative elementary volume analysis of porous media using X-ray computed tomography // *Powder technology.* — 2010. — Vol. 200, no. 1-2. — Pp. 69–77.
115. *Costanza-Robinson Molly S, Estabrook Benjamin D, Fouhey David F.* Representative elementary volume estimation for porosity, moisture saturation, and air-water interfacial areas in unsaturated porous media: Data quality implications // *Water Resources Research.* — 2011. — Vol. 47, no. 7.
116. GPU-based algorithm for evaluating the electrical resistivity of digital rocks / Tatyana Khachkova, Vadim Lisitsa, Galina Reshetova, Vladimir Tcheverda // *Computers & Mathematics with Applications.* — 2021. — Vol. 82. — Pp. 200–211.

117. *Havelka Jan, Kučerová Anna, Sýkora Jan.* Compression and reconstruction of random microstructures using accelerated lineal path function // *Computational Materials Science*. — 2016. — Vol. 122. — Pp. 102–117.
118. *Röding Magnus, Ma Zheng, Torquato Salvatore.* Predicting permeability via statistical learning on higher-order microstructural information // *Scientific reports*. — 2020. — Vol. 10, no. 1. — P. 15239.
119. *Kamrava Serveh, Tahmasebi Pejman, Sahimi Muhammad.* Linking morphology of porous media to their macroscopic permeability by deep learning // *Transport in Porous Media*. — 2020. — Vol. 131. — Pp. 427–448.
120. *Bayuk Irina O, Ammerman Mike, Chesnokov Evgeni M.* Elastic moduli of anisotropic clay // *Geophysics*. — 2007. — Vol. 72, no. 5. — Pp. D107–D117.
121. Optimized structure based representative volume element sets reflecting the ensemble-averaged 2-point statistics / Stephen R Niezgod, David M Turner, David T Fullwood, Surya R Kalidindi // *Acta Materialia*. — 2010. — Vol. 58, no. 13. — Pp. 4432–4445.
122. *Zeman J, Šejnoha M.* From random microstructures to representative volume elements // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. — 2007. — Vol. 15, no. 4. — P. S325.
123. *Rozman MG, Utz Marcel.* Uniqueness of reconstruction of multiphase morphologies from two-point correlation functions // *Physical Review Letters*. — 2002. — Vol. 89, no. 13. — P. 135501.
124. *Lantuejoul Ch.* Ergodicity and integral range // *Journal of Microscopy*. — 1991. — Vol. 161, no. 3. — Pp. 387–403.
125. *Moctezuma-Berthier A, Vizika O, Adler PM.* Macroscopic conductivity of vugular porous media // *Transport in porous media*. — 2002. — Vol. 49. — Pp. 313–332.
126. *Hyman Jeffrey D, Winter C Larrabee.* Stochastic generation of explicit pore structures by thresholding Gaussian random fields // *Journal of Computational Physics*. — 2014. — Vol. 277. — Pp. 16–31.

127. Linking 3D soil structure and plant-microbe-soil carbon transfer in the rhizosphere / A. Vidal, J. Hirte, S.F. Bender et al. // *Frontiers in Environmental Science*. — 2018. — Vol. 6, no. 9.
128. Quantification of soil aggregate microstructure on abandoned cropland during vegetative succession using synchrotron radiation-based micro-computed tomography / Dong Zhao, Mingxiang Xu, Guobin Liu et al. // *Soil and Tillage Research*. — 2017. — Vol. 165. — Pp. 239–246.
129. Vegetation impacts soil water content patterns by shaping canopy water fluxes and soil properties / J.C. Metzger, T. Wutzler, N. Dalla Valle et al. // *Hydrological Processes*. — 2017. — Vol. 31, no. 22. — Pp. 3783 – 3795.
130. Biochar additions can enhance soil structure and the physical stabilization of C in aggregates / D. Wang, S.J. Fonte, S.J. Parikh et al. // *Geoderma*. — 2017. — Vol. 303. — Pp. 110–117.
131. *Barthès B., Roose E.* Aggregate stability as an indicator of soil susceptibility to runoff and erosion; validation at several levels // *Journal of Dispersion Science and Technology*. — 2002. — Vol. 47, no. 2. — Pp. 133 – 149.
132. *Janssen M., Lennartz B., Wöhling T.* Percolation losses in paddy fields with a dynamic soil structure: model development and applications // *Hydrological Processes: An International Journal*. — 2010. — Vol. 24, no. 7. — Pp. 813–824.
133. Soil structure and function in a changing world: Characterization and scaling / M.Á. Martín, F.S.J. Martínez, E. Perfect et al. // *Geoderma*. — 2017. — Vol. 287. — Pp. 1–3.
134. Going submicron in the precise analysis of soil structure: A FIB-SEM imaging study at nanoscale / Kirill M Gerke, Evgeniy V Korostilev, Konstantin A Romanenko, Marina V Karsanina // *Geoderma*. — 2021. — Vol. 383. — P. 114739.
135. Emergent properties of microbial activity in heterogeneous soil microenvironments: different research approaches are slowly converging, yet major challenges remain / P.C. Baveye, W. Otten, A. Kravchenko et al. // *Frontiers in Microbiology*. — 2018. — Vol. 9. — P. 1929.
136. Soil structure changes induced by tillage systems / L.F. Pires, J.A.R. Borges, J.A. Rosa et al. // *Soil and Tillage Research*. — 2017. — Vol. 165. — Pp. 66–79.

137. *Vogel H.J., Roth K.* Quantitative morphology and network representation of soil pore structure // *Advances in Water Resources.* — 2001. — Vol. 24, no. 3-4. — Pp. 233 – 242.
138. 3D simulation of the permeability tensor in a soil aggregate on basis of nanotomographic imaging and LBE solver / F. Khan, F. Enzmann, M. Kersten et al. // *Journal of Soils and Sediments.* — 2012. — Vol. 12, no. 1. — Pp. 86–96.
139. *Pot V., Zhong X., Baveye P.C.* Effect of resolution, reconstruction settings, and segmentation methods on the numerical calculation of saturated soil hydraulic conductivity from 3D computed tomography images // *Geoderma.* — 2020. — Vol. 362.
140. Improving watershed-based pore-network extraction method using maximum inscribed ball pore-body positioning / K.M. Gerke, T.O. Sizonenko, M.V. Karsanina et al. // *Advances in Water Resources.* — 2020. — Vol. 140.
141. Complete characterization of pore size distribution of tilled and orchard soil using water retention curve, mercury porosimetry, nitrogen adsorption, and water desorption methods / M. Hajnos, J. Lipiec, R. Świeboda et al. // *Geoderma.* — 2006. — Vol. 135. — Pp. 307–314.
142. Using X-ray computed tomography in hydrology: systems, resolutions, and limitations / D. Wildenschild, C.M.P. Vaz, M.L. Rivers et al. // *Journal of Hydrology.* — 2018. — Vol. 267, no. 3-4. — Pp. 285–297.
143. *Schaefer C.E.G.R., Gilkes R.J., Fernandes R.B.A.* EDS/SEM study on microaggregates of Brazilian Latosols, in relation to P adsorption and clay fraction attributes // *Geoderma.* — 2004. — Vol. 123, no. 1-2. — Pp. 69–81.
144. *Diamond S.* Mercury porosimetry: an inappropriate method for the measurement of pore size distributions in cement-based materials // *Cement Concrete Research.* — 2000. — Vol. 30. — Pp. 1517 – 1525.
145. *Victor R.A., Prodanović M., Torres-Verdín C.* Monte Carlo approach for estimating density and atomic number from dual-energy computed tomography images of carbonate rocks // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth.* — 2017. — Vol. 122, no. 12. — Pp. 9804 – 9824.

146. A data-constrained modelling approach to sandstone microstructure characterisation / YS Yang, KY Liu, Sherry Mayo et al. // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. — 2013. — Vol. 105. — Pp. 76–83.
147. *Oh Wonho, Lindquist Brent*. Image thresholding by indicator kriging // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. — 1999. — Vol. 21, no. 7. — Pp. 590–602.
148. Adaptive-window indicator kriging: A thresholding method for computed tomography images of porous media / Alasdair N Houston, Wilfred Otten, Philippe C Baveye, S Hapca // *Computers & geosciences*. — 2013. — Vol. 54. — Pp. 239–248.
149. A tomographic imagery segmentation methodology for three-phase geomaterials based on simultaneous region growing / Mir Amid Hashemi, Ghonwa Khaddour, Bertrand François et al. // *Acta Geotechnica*. — 2014. — Vol. 9. — Pp. 831–846.
150. *Iassonov P., Gebrenegus T., Tuller M*. Segmentation of X-ray computed tomography images of porous materials: A crucial step for characterization and quantitative analysis of pore structures // *Water Resources Research*. — 2009. — Vol. 45, no. 9.
151. *Schlüter S., Weller U., Vogel H.J*. Segmentation of X-ray microtomography images of soil using gradient masks // *Computers and Geosciences*. — 2010. — Vol. 36, no. 10. — Pp. 1246–1251.
152. Observer-dependent variability of the thresholding step in the quantitative analysis of soil images and X-ray microtomography data / P.C. Baveye, M. Laba, W. Otten et al. // *Geoderma*. — 2018. — Vol. 157, no. 1-2. — Pp. 51–63.
153. Processing of rock core microtomography images: Using seven different machine learning algorithms / S. Chauhan, W. Rühaak, F. Khan et al. // *Computers and geosciences*. — 2016. — Vol. 86. — Pp. 120–128.
154. Three-dimensional multiphase segmentation of X-ray CT data of porous materials using a Bayesian Markov random field framework / R. Kulkarni, M. Tuller, W. Fink, D. Wildenschild // *Vadose zone journal*. — 2012. — Vol. 11, no. 1.

155. *Karimpouli S., Tahmasebi P.* Segmentation of digital rock images using deep convolutional autoencoder networks // *Computers and geosciences*. — 2019. — Vol. 126. — Pp. 142–150.
156. *Varfolomeev I., Yakimchuk I., Safonov I.* An Application of Deep Neural Networks for Segmentation of Microtomographic Images of Rock Samples // *Computers*. — 2019. — Vol. 8, no. 4. — P. 72.
157. *Werbos Paul J.* Applications of advances in nonlinear sensitivity analysis // *System Modeling and Optimization* / Ed. by R. F. Drenick, F. Kozin. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1982. — Pp. 762–770.
158. *Scherer Dominik, Müller Andreas, Behnke Sven.* Evaluation of Pooling Operations in Convolutional Architectures for Object Recognition // *Artificial Neural Networks – ICANN 2010* / Ed. by Konstantinos Diamantaras, Wlodek Duch, Lazaros S. Iliadis. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010. — Pp. 92–101.
159. *Hochreiter Sepp, Schmidhuber Jürgen.* Long Short-term Memory // *Neural computation*. — 1997. — 12. — Vol. 9. — Pp. 1735–80.
160. Deep Neural Networks Segment Neuronal Membranes in Electron Microscopy Images / Dan C. Ciresan, Alessandro Giusti, Luca Maria Gambardella, Jürgen Schmidhuber // *Neural Information Processing Systems*. — 2012. — URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:7725346>.
161. *Ronneberger Olaf, Fischer Philipp, Brox Thomas.* U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation // *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2015* / Ed. by Nassir Navab, Joachim Hornegger, William M. Wells, Alejandro F. Frangi. — Cham: Springer International Publishing, 2015. — Pp. 234–241.
162. *Abdulkadirov Ruslan, Lyakhov Pavel, Nagornov Nikolay.* Survey of Optimization Algorithms in Modern Neural Networks // *Mathematics*. — 2023. — Vol. 11, no. 11. — URL: <https://www.mdpi.com/2227-7390/11/11/2466>.
163. *Landau L.D., Lifshitz E.M.* Theoretical Physics, in 10 volumes. Vol. 6, Fluid Mechanics, 2nd ed. — Oxford, p. 539: Butterworth-Heinemann, 1987.

164. Finite-difference method Stokes solver (FDMSS) for 3D pore geometries: Software development, validation and case studies / K.M. Gerke, R.V. Vasilyev, S. Khirevich et al. // *Computers and Geosciences*. — 2015. — Vol. 114. — Pp. 41–58.
165. *Khirevich S., Ginzburg I., Tallarek U.* Coarse-and fine-grid numerical behavior of MRT/TRT lattice-Boltzmann schemes in regular and random sphere packings // *Journal of Computational Physics*. — 2015. — Vol. 281. — Pp. 708–742.
166. *Khirevich S., Patzek T.W.* Behavior of numerical error in pore-scale lattice Boltzmann simulations with simple bounce-back rule: Analysis and highly accurate extrapolation // *Physics of Fluids*. — 2018. — Vol. 30, no. 9.
167. *Marcotte D.* Fast variogram computation with FFT // *Computers and Geosciences*. — 1996. — Vol. 22, no. 10. — Pp. 1175 – 1186.
168. *Mehnert A., Jackway P.* An improved seeded region growing algorithm // *Pattern Recognition Letters*. — 1997. — Vol. 18, no. 10. — Pp. 1065–1071.
169. *Albert A., Kaur J., Gonzalez M.C.* Using convolutional networks and satellite imagery to identify patterns in urban environments at a large scale // *August Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*. — 2017. — Vol. 23. — Pp. 1357 – 1366.
170. Exploiting ConvNet diversity for flooding identification / Nogueira K., Fadel S.G., Dourado I.C. et al. // *Geoscience and Remote Sensing Letters*. — 2018. — Vol. 15, no. 9. — Pp. 1446–1450.
171. Deep convolutional neural networks for brain image analysis on magnetic resonance imaging: a review / J. Bernal, K. Kushibar, D.S. Asfaw et al. // *Artificial intelligence in medicine*. — 2019. — Vol. 95. — Pp. 64–81.
172. *Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G.E.* Imagenet classification with deep convolutional neural networks // *Communications of the ACM*. — 2017. — Vol. 60, no. 6. — Pp. 84 – 90.
173. Deep residual learning for image recognition / K. He, Zhang, X. et al. // *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*. — 2016.

174. *Iglovikov V., Shvets A.* Ternausnet: U-net with vgg11 encoder pre-trained on imagenet for image segmentation // *arXiv preprint*. — 2018.
175. *Kingma D.P., Ba J.* Adam: A method for stochastic optimization // *arXiv preprint*. — 2014.
176. Rethinking the Dice Loss for Deep Learning Lesion Segmentation in Medical Images / Yue Zhang, Shijie Liu, Chunlai Li, Jianyu Wang // *Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)*. — 2021. — 02. — Vol. 26. — Pp. 93–102.
177. Physical Accuracy of Deep Neural Networks for 2D and 3D Multi-Mineral Segmentation of Rock micro-CT Images / Y.D. Wang, M. Shabaninejad, R.T. Armstrong, P. Mostaghimi // *arXiv preprint arXiv:2002.05322*. — 2020.
178. Unsupervised segmentation evaluation measures for parameter optimization in indicator-Kriging / T. Bultreys, L. Brabant, M. Boone, L. V. Van Hoorebeke // *1st International conference on Tomography of Materials and Structures (ICTMS 2013)*. — 2013. — Pp. 147–150.
179. Generation of ground truth images to validate micro-CT image-processing pipelines / S. Berg, N. Saxena, M. Shaik, C. Pradhan // *The Leading Edge*. — 2018. — Vol. 37, no. 6. — Pp. 412–420.
180. *Phan Johan, Ruspini Leonardo C, Lindseth Frank.* Automatic segmentation tool for 3D digital rocks by deep learning // *Scientific Reports*. — 2021. — Vol. 11, no. 1. — P. 19123.
181. GEANT4 photon readout simulations of plastic scintillating strips with embedded WLS fibers / J.P. Archambaultt, P. Gumplinger, P. Kitching et al. // 2003 IEEE Nuclear Science Symposium. Conference Record (IEEE Cat. No.03CH37515). — Vol. 3. — 2003. — Pp. 1549–1551 Vol.3.
182. *Korpachev S, Chadeeva M.* Geant4 simulation of optical photon transport in scintillator tile with direct readout by silicon photomultiplier // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2017. — 01. — Vol. 798. — P. 012218.
183. *Svalbe Imants, van der Spek Dimitri.* Reconstruction of tomographic images using analog projections and the digital Radon transform // *Linear Algebra and its Applications*. — 2001. — Vol. 339, no. 1. — Pp. 125–145. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0024379501004876>.

184. *Herman Gabor T.* Fundamentals of Computerized Tomography: Image reconstruction from projections. — New York, 10016: Springer, 2009.
185. *Zeng Gengsheng L.* Revisit of the ramp filter // 2014 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC) / IEEE. — 2014. — Pp. 1–6.
186. Fast and flexible X-ray tomography using the ASTRA toolbox / Wim van Aarle, Willem Jan Palenstijn, Jeroen Cant et al. // *Opt. Express*. — 2016. — Oct. — Vol. 24, no. 22. — Pp. 25129–25147. — URL: <https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-24-22-25129>.
187. Geant4 – a simulation toolkit / S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. — 2003. — Vol. 506, no. 3. — Pp. 250–303. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>.

Список рисунков

- 1.1 Пример изображений пористых сред, снятых на различном масштабе (из книги [12]). 12
- 1.2 Визуализация событий для различных корреляционных функций из [1]. Примеры событий представлены в двух ортогональных направлениях x и y на плоскости, ортогональной оси z . Зеленым показаны позитивные события, красным — негативные. 21
- 2.1 Визуализация исследуемых образцов из публикации [1]. Каждой строчке соответствует одно кубическое изображение пористой среды: слева находится 3D-визуализация, справа — центральные 2D-срезы, ортогональные осям x , y и z изображения соответственно. На данном рисунке представлены две пары образцов **a)** 5 – 12 и **b)** 9 – 15, которые имеют между собой наименьшее расстояние в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^6 , т.е. являются наиболее похожими друг на друга с точки зрения предложенной в главе методологии. Представленные изображения имеют скорее однородную структуру, значения пористости визуально достаточно близки. 39
- 2.2 Визуализация исследуемых образцов 2 из публикации [1]. Каждой строчке соответствует одно кубическое изображение пористой среды: слева находится 3D-визуализация, справа — центральные 2D-срезы, ортогональные осям x , y и z изображения соответственно. На данном рисунке представлены две пары образцов **a)** 1 – 11 и **b)** 2 – 16, которые имеют между собой наибольшее расстояние в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^6 , т.е. являются наименее похожими друг на друга с точки зрения предложенной в главе методологии. Видно, что в данном случае часть образцов имеет явно неоднородную структуру, так же значительно варьируется пористость. 40

- 2.3 Сравнение исходных корреляционных функций и параметрических аппроксимаций из исследования [1]. В верхней строке представлены худшие аппроксимации с точки зрения ошибки по метрике SSE , в нижней — лучшие по этой же метрике. Под литерами изображены следующие примеры: **(a)** усредненная по направлениям C_2 для образца 13, **(b)** усредненная по направлениям SS_2 для образца 1, **(c)** усредненная по направлениям L_2 для образца 8, **(d)** усредненная по направлениям S_2 для образца 9. 42
- 2.4 Общая схема работы с образцами из публикации [1]. Для анализа используется следующая последовательность действий: по бинарному 3D-изображению вычисляются усредненные векторы корреляционных функций размерности \mathbb{R}^{250} ; далее полученные векторы трансформируются в вектор параметров размерности \mathbb{R}^6 ; после этого полученные два набора векторов стандартизируются; производится кластеризация; строится тепловая карта попарных расстояний между векторами признаков; на финальном этапе проводится анализ соответствия полученных кластеров и данных об образцах из таб. 1, а так же визуальный анализ соответствия попарных расстояний на тепловой карте и морфологии исходных изображений. 43
- 2.5 Результаты кластеризации образцов в пространстве векторов корреляционных функций \mathbb{R}^{1000} и в пространстве векторов параметров \mathbb{R}^{72} из публикации [1]. В целях упрощения восприятия на рисунке изображена проекция исходных многомерных векторов на две главные оси их PCA разложения, поэтому оси графика не являются интерпретируемыми. В верхней строке рисунка (литеры **(a)** и **(b)**) изображена кластеризация на два кластера, в нижней (литеры **(c)** и **(d)**) — на три. Размеры точек (два варианта) на рисунках указывают, являлся ли пахотным тот участок почвы, из которого извлечен соответствующий образец. Тип метки (три варианта) указывает на категорию соответствующего образца почвы. 44

- 2.6 Тепловые карты попарных расстояний (2.7) между образцами из публикации [1]. Светлый цвет ячейки соответствует меньшему расстоянию, темный — большему. Изображение (a) слева является тепловой картой в исходном пространстве векторов \mathbb{R}^{1000} корреляционных функций, (b) справа — в пространстве сжатых векторных дескрипторов \mathbb{R}^{72} 45
- 3.1 Визуализация схемы построения накладывающейся сетки из фрагментов изображения. На изображении обозначены следующие параметры: D — размер фрагментов; O — величина наложения соседних фрагментов в пикселях; $(D - O)$ — размер подфрагментов, для которых определяются метки принадлежности кластеру; $\frac{O}{2}$ — размер рамки вокруг исходного изображения, для пикселей которой не будут получены метки принадлежности кластеру. Рассматриваемый фрагмент выделен светло-зеленой заливкой и красным тонким пунктиром по границам; подфрагмент, соответствующий рассматриваемому фрагменту — жирным красным пунктиром по границам; подфрагмент, следующий в сетке справа относительно рассматриваемого подфрагмента — фиолетовым жирным пунктиром по границам; соседние фрагменты выделены светло-синей заливкой (интенсивность заливки отображает количество накладывающихся друг на друга фрагментов). На изображенном примере выполняется соотношение $O = \frac{2D}{3}$ 55

- 3.2 Визуализация предложенных условий однородности изображения (3.8) и (3.9). Точки находятся в пространстве дескрипторов размера $4L_{max}$, для удобства восприятия рассматривается проекция на плоскость с помощью алгоритма PCA. Большой красной точкой обозначен вектор-дескриптор всего изображения U , синими и зелеными точками обозначены фрагменты, попавшие в два соответствующих кластера. Точки темно-синего и -зеленого цветов с пунктирной границей — это геометрические центры соответствующих кластеров, полученные с помощью алгоритма K-Means. Мелким черным пунктиром показано расстояния между отдельными фрагментами p_{ij} и изображением U из условия (3.8), крупным серым пунктиром показано расстояние между кластерами из условия (3.9). Все расстояния из условий однородности считаются по формуле (3.5), в то время как кластеризация проводится алгоритмом K-Means с использованием L_2 расстояния. . 61
- 3.3 Графическая иллюстрация способа расчета пороговых значений расстояния. Красным цветом обозначен порог T_1 для строго однородных изображений, зеленым — T_2 для однородных изображений, голубым — T_3 для изображений переходного типа, фиолетовым — T_4 для неоднородных изображений (см. равенства (3.11)). В верхнем левом углу находится исходное изображение упаковки Пуассоновских сфер, в правом верхнем углу — увеличенное изображение с визуализацией одномерных фрагментов, находящихся на заданном расстоянии друг от друга. Фрагменты на разном расстоянии обозначены соответствующим цветом: красным для $r = 1$, зеленым для $r = 2$, голубым для $r = 3$ и фиолетовым для $r = 4$. В нижнем углу находится гистограмма распределения расстояний (3.7) с отмеченными на ней пороговыми значениями расстояния. Видно, что приведенная на изображении гистограмма удовлетворяет условию однородности (3.8): T_1 покрывает долю более 0.8. 63

- 3.4 Визуализация отношений между предложенными классами изображений: класс однородных изображений включает в себя подкласс строго однородных изображений; классы однородных, переходных и неоднородных изображений не пересекаются между собой; четыре класса вместе покрывают все множество изображений. 64
- 3.5 Общая схема работы метода выделения однородных зон на изображении. Указанные обозначения: D — размер фрагмента изображения в пикселях; L — ширина изображения в пикселях; S_2 и L_2 — набор используемых корреляционных функции, литеры обозначают ось, вдоль которой считаются функции; L_{max} — максимальная длина корреляции. В левом верхнем углу находятся примеры различных бинарных 2D-изображений пористых сред. В середине верхней части визуализируется процесс извлечения фрагментов изображения с помощью скользящего окна. В правом верхнем углу показаны примеры рассчитанных корреляционных функций (и их разница) для двух различных фрагментов изображений с максимальной длиной корреляции $L_{max} = \frac{D}{2}$. В правом нижнем углу находится пример гистограммы расстояний (3.10) и результаты кластеризации на 2 и 3 класса. Точками на графике являются векторные представления фрагментов изображения, они спроектированы на плоскость с помощью PCA-преобразования. По гистограмме расстояний можно установить выполнение условия (3.8) с помощью отмеченных на ней пороговых значений расстояния T . Подписи “yes/no” в левом нижнем углу изображения отражают результаты работы алгоритма — является ли данная структура однородной или нет. 67
- 3.6 Искусственный пример пористой среды, в которой четыре квадранта имеют одинаковую пористость, длину границ и топологию порового пространства. Можно наблюдать, что предложенная методология на основе корреляционных функций корректно выделяет все четыре квадранта в качестве отдельных кластеров и определяет данное изображение как неоднородное. . . . 68

- 3.7 Примеры работы метода для различных пористых сред в зависимости от величины фрагмента D . На каждой из гистограмм расстояния (3.7) можно увидеть, какую долю распределения покрывает соответствующее пороговое расстояние. По представленным результатам можно сделать следующий вывод для однородных в пределе изображений: чем больше рассматриваемая величина D , тем более “однородным” становится изображение с точки зрения предложенного метода, т.к. большая часть распределения покрывается пороговым расстоянием. Для неоднородного примера (нижняя ряд изображений) такого эффекта не наблюдается. 70
- 3.8 Сегментация изображений на однородные регионы с помощью описанного метода для различных размеров фрагмента D : 100, 200, 400 и различного числа кластеров K : 2, 3, 4. Подфрагменты, относящиеся к одному региону однородности, раскрашены в одинаковый цвет. Для изображения, которое было определено как однородное, раскраска отсутствует. На иллюстрации можно наблюдать в динамике, как определение однородности изображения и границы однородных регионов меняются в зависимости от используемого размера фрагмента D 71
- 4.1 Визуализация методики расчета метрик сегментации. В верхней части изображения находится наглядная иллюстрация матрицы ошибок (confusion matrix) со всеми возможными сочетаниями прогнозируемых и предсказанных значений: FP (false positive), TP (true positive), FN (false negative), TN (true negative). В средней части рисунка продемонстрированы кривые точности и полноты в зависимости от величины порога классификации. В нижней части рисунка показано построение кривой точности-полноты и, соответственно, определение значения метрики усредненной точности (PR-AUC). 88

- 4.2 Демонстрация возможности наличия зависимости качества сегментации моделей, обученных на различных наборах данных, по метрике IoU от порога вероятности t . Для каждого из рассматриваемых образцов построена отдельная кривая. При этом в среднем оптимальная величина порога находится в районе $t = 0,5$. Пример взят из исследования [2]. 89
- 4.3 Визуализация образцов, участвовавших в исследовании [2]. Для каждого из 7 образцов слева находится КТ-снимок в оттенках серого, справа бинарная маска сегментации, полученная с помощью unsupervised методов. 94
- 4.4 Архитектура U-net-подобной полносверточной нейронной сети, использовавшаяся в исследовании [2]. Стрелками обозначается направление движения данных: прямая передача тензоров и сложение через skip-connections. В верхней части изображения находится архитектура кодировщика ResNet101, с помощью которого заменяется стандартный U-Net кодировщик. 97
- 4.5 Визуализация примеров работы отдельных сегментационных моделей из исследования [2]. Ошибки сосредоточены на границе раздела фаз, что говорит об адекватности полученных моделей. Наибольшее количество ошибок содержится в примерах для образцов 4 (ложно-положительные пиксели) и 7 (ложно-отрицательные пиксели). Наилучшее качество сегментации наблюдается для образцов 1, 2, 6. 99
- 4.6 Визуализация нормализованных функций и соответствующих им тепловых карт для сегментационных масок (под литерой **a**) слева) и исходных изображений в градациях серого (под литерой **b**) справа) из исследования [2]. Методология построения тепловых карт аналогична использованной в подпараграфе 2.2.3, рис. 2.6. . . 103
- 5.1 Схема построения теневых проекций для точечного источника излучения. В середине изображения находится образец, вокруг него вращается связанная система из источника излучения на одной стороне и детектора на другой стороне. Регистрация фотонов происходит для каждого пикселя детектора при фиксированно угле поворота источника φ 109

- 5.2 Примеры изображения синтетического КТ, полученных описанным в работе алгоритмом в трех центральных проекциях. Использовались образцы размера 1000^3 , размер изображения синтетического КТ 200^3 116
- 5.3 Примеры изображений синтетических КТ, полученных различными методами на основе прямого и обратного проецирования с помощью преобразования Радона. 117
- 5.4 Реальное КТ-изображение образца породы. На изображении представлены центральные срезы кубического образца в трех ортогональных плоскостях. 119
- 5.5 Сегментированный на 5 фаз образец породы. На изображении представлены те же срезы, что и на с рис. 5.4. 119
- 5.6 Синтетическая томография, построенная по сегментированному образцу с использованием 5 фаз. Нужно отметить, что исследование состава исходного образца породы не проводилось, поэтому состав реального и синтетического образца заведомо не совпадает. На изображении представлены те же срезы, то и на рис. 5.5. 119
- 5.7 Гистограмма распределения интенсивностей вокселей для КТ-изображения образца с рис. 5.4. Значения интенсивностей вокселей расположены на оси x и нормализованы в отрезок $[0, 1]$. . . 121
- 5.8 Гистограмма распределения интенсивностей вокселей для синтетического КТ-изображения образца с рис. 5.6. Значения интенсивностей вокселей расположены на оси x и представлены в градациях серого в отрезке $[0, 255]$ 121
- 5.9 Схема процесса построение универсальной модели сегментации пористых сред. В качестве модели сегментации предполагается использование сверточных нейронных сетей. Обучающая выборка конструируется с помощью предложенного численного алгоритма построения синтетической КТ. Синим цветом выделены входные данные для алгоритмов, желтым — различные предсказательные модели, зеленым — алгоритм построения синтетического КТ. Цифрами обозначены соответствующие пункты из текстового алгоритма. 122

- 5.10 Примеры 2D-срезов синтетического КТ образцов из исследования [3]. Размер срезов 200^2 . В синтетическом КТ использовались два одинаковых материала, поэтому полученные изображения имеют одинаковые цветовые свойства. Видно, что образцы имеют различную структуру порового пространства, т.е. отличаются по морфологическим свойствам. 124
- 5.11 Примеры промежуточных результатов алгоритма стохастической реконструкции методом отжига для различного количества итераций, по которым построено изображение синтетической томографии (поэтому изображения представлены в градациях серого). Алгоритм начинает реконструкцию из случайно расположенных пикселей (сохраняя только пропорцию между количеством пикселей твердой фазы и порового пространства), поэтому первый промежуточный результат реконструкции достаточно далек от последнего. С увеличением числа итераций размер пор увеличивается, и их форма изменяется. 124
- 5.12 Качество сегментации моделей, обученных на исходных образцах, по метрике IoU (4.6). Обученная модель применялась на соответствующие изображения-реконструкции для различных номеров итераций метода отжига. 126
- 5.13 Качество сегментации моделей, обученных на исходных образцах, по метрике IoU (4.6). Метрики рассчитывались на тестовой части соответствующих образцов. 126
- 6.1 Иллюстрация графического интерфейса модуля «Анализ пустотного пространства». 131
- 6.2 Иллюстрация графического интерфейса модуля «Сегментация томографических изображений». 133
- 6.3 Схема численного метода для построения изображения синтетической томографии. Блоки желтого цвета обозначают процедуры, которые реализованы на Python, синим — на C++, серые блоки обозначают поток данных: входных, промежуточных и выходных. 134
- 6.4 Иллюстрация графического интерфейса модуля «Синтетическая томография». 135

Список таблиц

- 1 Общая характеристика исследуемых образцов из публикации [1]. В таблице можно найти следующую информацию: где и из какой глубины был извлечен образец, его текстуру, объем и пористость, а так же другие характеристики. 46
- 2 Стандартные метрики компьютерного зрения из подпараграфа 4.2.2 для отдельных нейросетевых моделей сегментации, обученных на тренировочной части соответствующих образцов. Каждая модель оценивались на отложенной части соответствующего ей 3D-образца. 100
- 3 Стандартные метрики компьютерного зрения из подпараграфа 4.2.2 для общей нейросетевой модели сегментации, обученной на тренировочной части всех образцов. Модель оценивались на отложенной части всех 3D-образцов отдельно. 100
- 4 Обычная и связанная пористость для разметки образцов и сегментаций, полученных с помощью соответствующих моделей. Значение обычной пористости можно использовать для интерпретации метрик компьютерного зрения, а значение связанной пористости для интерпретации величин проводимости, полученных с помощью численного моделирования в масштабе пор. 101
- 5 Результаты расчета проницаемости (4.8) и относительной ошибки проницаемости (4.9) для исследуемых образцов по трем ортогональным направлениям вдоль осей x , y и z . Сегментация изображений проводилась специфичной для каждого образца моделью. Видно, что размер относительной ошибки проницаемости мало зависит от выбранной для расчета оси, что косвенным образом указывает на качество алгоритма сегментации, потому что сегментация производится по 2D-срезам в одном направлении z . . . 102
- 6 Сравнение производительности процедуры прямой проекции программного модуля «Синтетическая томография» и Astra toolbox. 137
- 7 Сравнение производительности процедуры обратной проекции программного модуля «Синтетическая томография» и Astra toolbox. 137