
DOI: 10.63527/1607-8829-2025-4-64-75

Короп М.М.¹ (<https://orcid.org/0009-0000-4921-3419>),
Прибила А.В.¹ (<https://orcid.org/0000-0003-4610-2857>),
Лисько В.В.^{1,2} (<https://orcid.org/0000-0001-7994-6795>),
Пилипко В.Г.¹ (<https://orcid.org/0009-0003-8379-4802>),
Халавка Ю.Б.¹ (<https://orcid.org/0000-0002-6832-447X>)

¹Чернівецький національний університет, ім. Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна;
²Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна

Автор-кореспондент: Короп М.М., e-mail: koropmykola@gmail.com

Комп'ютерний зір як інструмент кореляційного аналізу зображень мікроструктури термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те

У даній роботі представлено концепцію інструмента мультимодальної системи комп'ютерного зору та машинного навчання для встановлення кореляцій між мікроструктурою поверхні екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те та їхніми термоелектричними властивостями. Платформа поєднує дані атомно-силової мікроскопії (АСМ), металографічної мікроскопії, хімічного складу, термоелектричних властивостей та технологічних режимів синтезу у єдину базу для подальшого глибокого навчання. Описано розроблений інструмент для створення анотованої бази даних, архітектуру нейронної мережі для автоматизованої сегментації дефектів, а також мультимодальну модель поєднання даних для прогнозування термоелектричних властивостей.

Ключові слова: термоелектричні матеріали, напівпровідники, Ві-Те, штучний інтелект, машинне навчання, комп'ютерний зір, сегментація дефектів, мультимодальне навчання, глибоке навчання, моделювання, кінетичні коефіцієнти, атомно-силова мікроскопія, оптичні металографічні дослідження.

Вступ

Термоелектричні матеріали (ТЕМ) на основі телуриду вісмуту привертають значну дослідницьку увагу завдяки здатності перетворювати теплову енергію в електричну і навпаки, та є найбільш ефективними матеріалами для низькотемпературного

Цитування: Короп М.М., Прибила А.В., Лисько В.В., Пилипко В.Г., Халавка Ю.Б. (2025). Комп'ютерний зір як інструмент кореляційного аналізу зображень мікроструктури термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те. Термоелектрика, (4), 66–78. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75>

термоелектричного перетворення енергії за температури, близької до кімнатної [1]. Ефективність цих матеріалів визначається безрозмірним показником добротності ZT для оптимізації якого потрібно одночасного підвищувати фактор потужності PF та знижувати теплопровідність, що є взаємопов'язаними задачами через спільну залежність цих параметрів від концентрації носіїв заряду та мікроструктури матеріалу [2]. Мікроструктура ТЕМ, а саме: розмір зерен, густина меж зерен, наявність дислокацій, нанопреципітатів та пор суттєво впливає на механізми перенесення заряду та тепла [3]. Межі зерен та точкові дефекти розсіюють фонони, знижуючи решіткову теплопровідність $\kappa_{\text{реш.}}$, водночас вони можуть негативно впливати на рухливість носіїв заряду μ . Тому, встановлення кількісних кореляцій між мікроструктурними характеристиками та функціональними властивостями є критично важливим для розумної оптимізації термоелектричних матеріалів. За останні десятиліття не відбулось значного покращення ефективності комерційно важливих ТЕМ на основі телуриду вісмуту через складний взаємозв'язок між хімічним складом, технологічними режимами синтезу і обробки та мікроструктурою таких сплавів. Традиційні методи оптимізації матеріалів методом спроб та помилок є ресурсозатратними, повільними та погано масштабованими. Протягом останніх 5 років, штучний інтелект (ШІ), машинне навчання (МН) та комп'ютерний зір (КЗ) стали рушіями наукового прогресу в інших класах матеріалів – сталь, керамічні матеріали та композити [4, 5], проте для термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te такі підходи практично не застосовувались.

Метою даної роботи є представлення концепції комплексної мультимодальної системи для автоматизованого аналізу мікроструктури та прогнозування термоелектричних властивостей ТЕМ на основі Bi-Te .

1. Огляд літератури

Значна кількість наукових досліджень із застосування МН для аналізу мікроструктури на основі АСМ пов'язана із екструдованим матеріалом на основі Bi-Te , де параметри обробки та синтезу формують характерні мікроструктурні особливості, що в значній мірі впливає на термоелектричні властивості таких матеріалів. У роботі Wang та ін. проведено дослідження гарячої екструзії сплаву системи Bi-Te-Se з легуванням Cu та розроблено моделі МН, що пов'язують параметри екструзії, характеристики мікроструктури (розмір зерна, фазовий склад, текстуру) та добротність [6]. Автори зазначили, що МН має потенціал відтворювати нелінійні залежності між умовами обробки та ZT , а також може вирішувати обернену задачу для прогнозування оптимальних технологічних параметрів. В наступних працях Wang та ін. було розширено навчальний набір для МН додатковими даними, а саме: умовами екструзії, хімічним складом та характеристиками мікроструктури [7]. У подальшій роботі, автори додатково розширили набір вхідних даних за межі зразків, легованих Cu , та використали МН для ідентифікації нових технологічних режимів і композиційних змін [8].

Хоча прогнозування властивостей та оптимізація обробки матеріалу за допомогою МН вже мають гарні напрацювання у термоелектриці, застосування

комп'ютерного зору для аналізу мікроструктури залишається обмеженим, але надзвичайно перспективним. Sheng та ін. розробили процес синтезу та аналізу властивостей для сполук Cu-Sn-S із застосуванням їх сегментації на основі МН до мікрофотографій у режимі зворотно розсіяних електронів (BSE) для ідентифікації нових фаз і кореляції мікроструктурних особливостей з механізмами перенесення заряду та тепла [9]. Ling та ін. розробили методи на основі згорткових нейронних мереж та автоенкодерів, що дозволяють стискати зображення мікроструктури до компактного набору параметрів і на їх основі прогнозувати властивості матеріалів [10]. Pei та ін. запропонували підхід «інверсії мікроструктури», за якого ці параметри можна цілеспрямовано змінювати для проєктування матеріалів із наперед заданими властивостями [11]. Такі методи, хоча й розроблені переважно для металів і полімерів, можуть бути застосовані до АСМ-зображень термоелектричних матеріалів.

Pręgowska та ін. розглянули способи застосування згорткових нейронних мереж та алгоритмів глибокого навчання для зниження шуму, виділення ознак, сегментацію та автономне сканування в робочих процесах АСМ [12]. Ці методи мають потенціал бути безпосередньо адаптовані до АСМ-зображень екструдованих ТЕ матеріалів, даючи можливість визначати межі зерен, лінії дислокацій, доменні структури та нанопреципітати. Zhang та ін. запатентували пристрій на основі АСМ для побудови карт розподілу локального коефіцієнта Зеєбека безпосередньо на зразку за допомогою термічного зонда [13]. Інший патент, присвячений гнучким об'ємним ТЕМ, прямо передбачає використання ШІ та МН для оптимізації конструкції термоелектричного пристрою [14]. Ці промислові та приладові розробки свідчать про перспективність досліджень зв'язку між мікроструктурою та термоелектричними властивостями ТЕМ із застосуванням АСМ і методів машинного навчання.

У літературі є кілька ключових тенденцій, що підтримують розвиток аналізу мікроструктури на основі АСМ із застосуванням МН для екструдованих термоелектричних матеріалів. МН для прогнозування скалярних властивостей досягло зрілості, але залишається значною мірою незалежним від аналізу зображень мікроструктури. Моделі МН для зв'язку між технологією синтезу та обробки, мікроструктурою та властивостями існують для екструдованих систем на основі Ві-Те, але беруть до уваги грубі дескриптори, отримані з традиційної мікроскопії, а не візуалізацію високої роздільної здатності.

2. Матеріали та методи

Об'єктами дослідження є екструдовані ТЕМ на основі Ві-Те n- та p- типу провідності. Кожен зразок у базі даних має власний унікальний ідентифікатор, описується параметрами із таблиці 1 та набором метаданих.

Для отримання комплексної інформації про досліджуваний зразок, використовується набір взаємодоповнюючих методів дослідження, що дозволяє у повній мірі оцінити його характеристики. На рис. 1 представлено фотографії досліджуваних зразків.

Таблиця 1

Структура бази даних для зберігання інформації про характеристики ТЕМ

Категорія	Значення у базі даних
Хімічний склад	Базовий склад матриці (Bi, Te, Se, Sb), легуючі елементи та їх концентрації, фазовий склад (основна фаза, вторинні фази), параметри кристалічної решітки (a , c).
Параметри синтезу та обробки	Метод синтезу, атмосфера синтезу, швидкість охолодження, температура екструзії, тиск, ступінь деформації, напрямок екструзії, тип мастила, температура відпалу, тривалість відпалу, кількість циклів термообробки.
Термоелектричні властивості	Коефіцієнт Зеєбека, електропровідність, теплопровідність κ (загальна, електронна κ_e , решіткова $\kappa_{resh.}$), фактор потужності, добротність ZT , температурні залежності $S(T)$, $\sigma(T)$, $\kappa(T)$, $ZT(T)$, концентрація носіїв заряду, рухливість μ , тип провідності, коефіцієнт анізотропії.
Мікроструктурні характеристики	Середній розмір зерна, розподіл розмірів зерен, співвідношення сторін зерен, тип меж зерен (малокутові/великокутові), густина меж зерен, густина потрійних точок, густина дислокацій, нанопреципітати (розмір, густина, склад), пори (об'ємна частка, розмір), мікротріщини (довжина, орієнтація, тип), шорсткість поверхні (R_a , R_q).
Зображення мікроструктури	АСМ: топографічні карти, фазові карти. Металографія: світле/темне поле.
Метадані	Ідентифікатор зразка, дата виготовлення, номер партії, оператор, обладнання, дата вимірювання, параметри вимірювання, геометрія зразка, орієнтація зразка, стан поверхні.

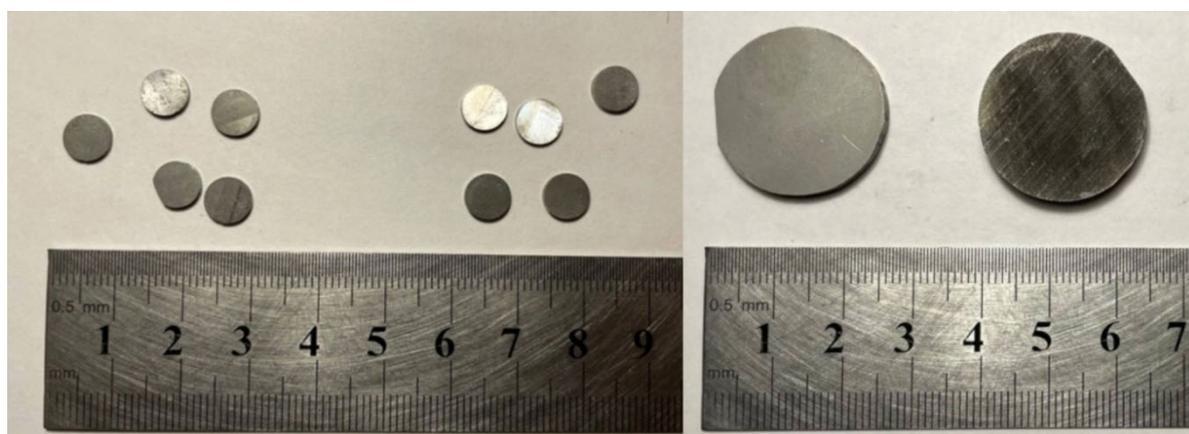


Рис. 1. Фотографії досліджуваних зразків термоелектричного матеріалу на основі Bi-Te n- та p- типу

За допомогою АСМ NT-206 були отримані тривимірні топографічні карти поверхні з нанометровою роздільною здатністю у контактному режимі. Типовим параметром сканування була область в 46×46 мкм² із роздільною здатністю 256×256 пікселів. Вихідними даними були топографічні карти висот у форматі tps, з яких проведено обчислення параметрів шорсткості: середньоарифметична шорсткість, середньоквадратична шорсткість, фрактальна розмірність поверхні, розподіл висот та автокореляційну функцію. За допомогою програми SurfaceView проведено обробку отриманих зображень мікроструктури на Рис. 2 в 2D та 3D в режимах.

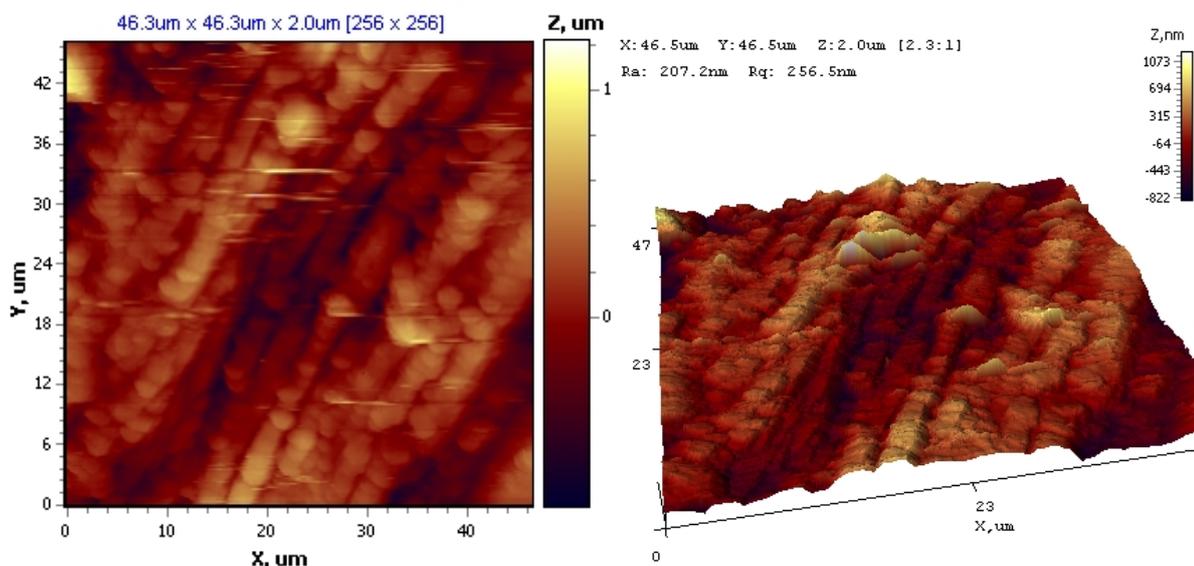


Рис. 2. АСМ зображення поверхні кристала в 2D та 3D режимах

На рис. 3, 4 зображення поверхні ТЕМ отримані за допомогою оптичного металографічного мікроскопу у режимі темного поля із збільшенням 200–400х.

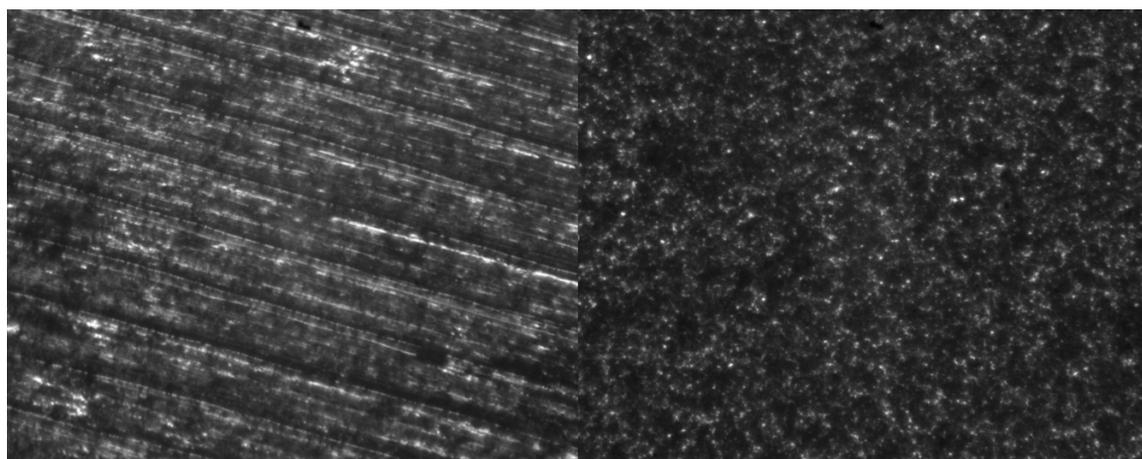


Рис. 3-4. Оптичне металографічне зображення ТЕМ на основі Bi-Te р-типу

Вимірювання термоЕРС та електропровідності виконуються експрес-методом «гарячого зонда»: зразок встановлюють на термостатований робочий столик (з контрольованою температурою основи), а нагрітий зонд із вмонтованою термопарою

локально торкається поверхні й створює невеликий перепад температур (типово 10–15 К), внаслідок чого в матеріалі виникає термоЕРС, яку реєструють відносно другого (нерухомого) зонда та за співвідношенням $\alpha = E/\Delta T$ обчислюють коефіцієнт термоЕРС. Координатний столик забезпечує точне позиціонування точки контакту для зняття розподілів по зразку з точністю в 1 мм, а для дисків електропровідність визначають пропусканням стабілізованого струму через зразок і вимірюванням спадів напруги між коаксіальними зондами в заданих конфігураціях, що дає змогу отримувати компоненти провідності та одночасно (за потреби) термоЕРС центральних зондів із нагрівачем і термопарами, при цьому всі виміряні значення (температури, напруги/ЕРС, координати та розраховані α і σ) автоматично збираються в автоматизовану базу на комп'ютері для зручного вимірювання, подальшого аналізу та побудови карт розподілу параметрів.

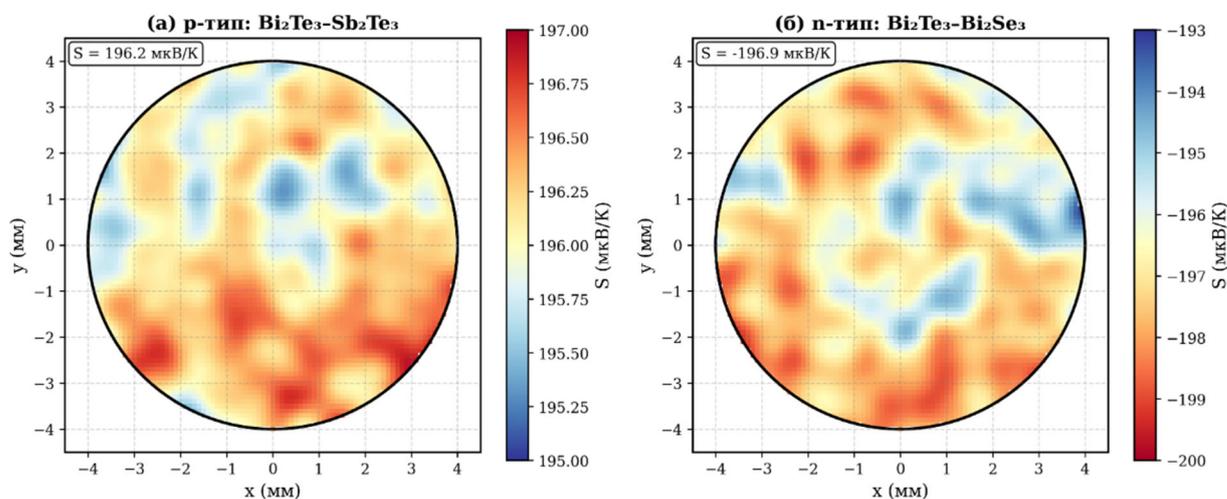


Рис. 5. Карта розподілу термоЕРС для диску термоелектричного матеріалу p- та n-типу провідності

Ключовим розробленим компонентом є програмний інструмент ThermoDB Nuclea, який виконує алгоритм конвеєра із чотирьох послідовних етапів по систематичному збору, попередній обробці та нормалізації, анотуванні та зв'язуванні отриманих даних в мультимодальну структуру. На першому етапі здійснюється імпорт інформації з різних джерел, а саме: хімічний склад, виміряні термоелектричні властивості, АСМ і металографічні зображення та формується запис у базі даних MySQL. На другому етапі відбувається попередня обробка цих даних для сумісності з алгоритмами МН: нормалізація числових значень, корекція сегментації фону для виділення зразка на металографічних зображеннях, вирівнювання площини методом найменших квадратів та фільтрацію шуму для АСМ даних. Для третього етапу анотування спочатку застосовуються «чорнові» автоматичні методи сегментації (Watershed та Otsu) для попередньої розмітки, яку пізніше експерт з допомогою графічного інтерфейсу на базі LabelMe [15] має можливість скоригувати. До результатів сегментування збережених у форматі png. масок сегментації належать: матриця зерна, межі зерен, дислокації,

нанопреципітати, пори та тріщини. На останньому етапі підготовки навчального набору даних, застосовується аргументація даних для розширення кількості прикладів CycleGAN [16] та геометричні трансформації. Навчальні набори містять 80 % навчальних, 15 % валідаційних та 5 % тестових даних. Інструмент конвеєра реалізовано на мові Python з використанням фреймворка Flask із графічним інтерфейсом реалізованим на фреймворку Angular на рис. 6.

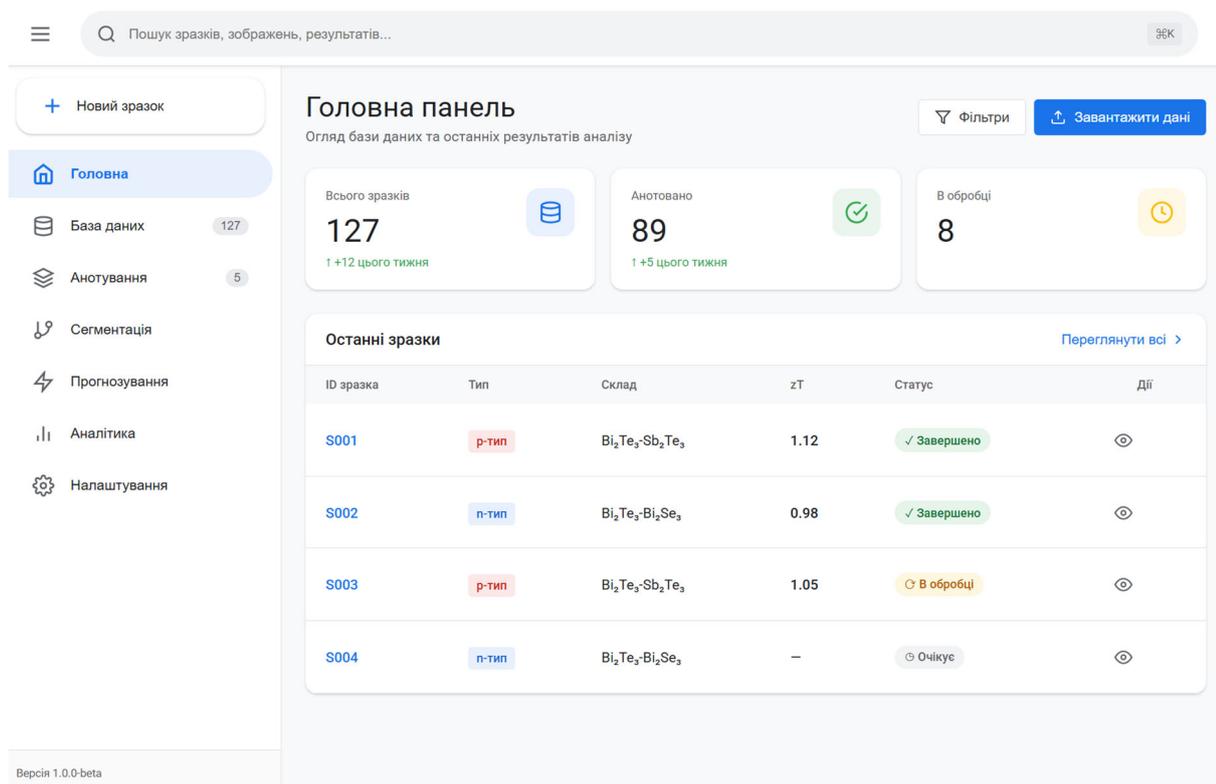


Рис. 6. Графічний інтерфейс інструмента для обробки, зберігання та проведення аналізу TEM

3. Моделі машинного навчання для сегментації дефектів та мультимодального прогнозування властивостей

3.1 Архітектура моделі для семантичної сегментації структурних особливостей поверхні

Було розроблено спеціалізований програмний компонент для сегментації структурних особливостей TEM на енкодер-декодерній структурі U-NET [17] із прямими (skip) з'єднаннями. Енкодер створено на основі попередньо навченої мережі ResNet-34 [18] та складається із 4 блоків з поступовим збільшенням кількості каналів та зменшенням просторової роздільної здатності. Перший згортковий шар модифікується для одноканального вхідного зображення шляхом усереднення ваг для трьох кольорних каналів для попередньо навченої моделі. В свою чергу декодер, є симетричний енкодеру та містить 4 блоки, які включають збільшення роздільної здатності, поєднання через пряме з'єднання із ознаками енкодера та згорткові шари. Для покращення сегментації

дрібних дефектів, застосовано Attention Gates [19] для фокусу уваги на релевантних областях зображення.

Для поєднання даних із різного масштабу, застосовано модель Feature Pyramid Network (FPN) [20]. Даний модуль дозволяє об'єднати ознаки різних рівнів декодера, для мультимасштабного представлення для покращення детекції великих та дрібних структур поверхні. Додатково було інтегровано Boundary Class Semantic Segmentation (BCSS) [21], що підвищує точність сегментації меж зерен, передбачення контурів меж та в результаті через зважену навчальну суму поєднується із результатом сегментації. Для уникнення проблеми затухаючих градієнтів та стабілізації процесу навчання застосовуються додаткові функції втрат, які обчислюються на проміжних рівнях декодера. В результаті комбінована функція втрат для навчання моделі сегментації, описується формулою 1.

$$L_{\text{заг}} = \lambda_1 L_{CE} + \lambda_2 L_D + \lambda_3 L_B + \lambda_4 L_F \quad (1)$$

де, λ_1 - λ_4 – вагові коефіцієнти, L_{CE} – стандартна крос-ентропійна функція втрат для класифікації пікселів, для вимірювання різниці між передбачуваними ймовірностями класу та істинними мітками, L_D – функція враховує дисбаланс класів та обчислює перекриття між прогнозованою та істинною маскою, L_B – функція втрат для покращення точності меж сегментації та зменшення неточності виділення контурів об'єктів, L_F – функція втрат для оптимізації підвищення уваги до рідкісних класів та концентрації на складних прикладах [22–23]. Було вибрано 6 класів сегментації: зерна, межі зерен, дислокації, нанопреципітати вторинних фаз, пори та мікротріщини.

3.2 Мультимодальна модель для прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів

Вхідні зображення є монохромними та одноканальними із різними роздільними здатностями. АСМ зображення $256 \times 256 \times 1$ пікселів, та представляє собою топографічну карту висот на нанорівні. Металографічний мікроскоп має камеру PixeLINK PL-A741, що дозволяє отримати монохромні зображення мікроструктури поверхні. Оскільки обидва типи зображень є одноканальними та відображають мікроструктуру різного масштабу, застосовується архітектура зі спільними вагами. Обидва потоки зображень обробляються одним енкодером ResNet-34. Металографічні зображення попередньо масштабуються до 256×256 пікселів із збереженням співвідношення сторін через обрізання зображення з основою в центрі. Перший згортковий шар модифікується для одноканального входу шляхом усереднення ваг, діленням на 3. Вихідний глобальний вектор ознак має розмірність 1792, яка зменшується до 256 через щільний шар з нормалізацією та ReLU активацією. Результатом є латентні представлення $Z_{\text{асм}} (R^{256})$ та $Z_{\text{мет.}} (R^{256})$. Додаткова інформація про хімічний склад, технологічні параметри синтезу та обробки обробляються багат шаровою нейронною мережею у вигляді вхідні параметри, 64 нейрони, 128 нейронів і вихідний шар в 128 нейронів. Кожен шар цієї мережі включає нормалізацію BatchNorm та активаційну функцію ReLU. Вихідне латентне представлення $Z_{\text{дата}} (R^{128})$.

Для узагальнення моделлю взаємозв'язків між модальностями застосовується механізм cross-modal attention на основі Трансформера [24]. Поєднання $Z_{мет.}$ та $Z_{дата}$ використовується як ключ та значення «відповідей» від металографічних даних та інформації про хімічний склад та технологічні режими. Механізм «багатоголової уваги» (4 голови) паралельно відстежує різні типи взаємозв'язків між модальностями та продукує вектор із 512 ознак, що містить інформацію з усіх джерел. Фінальне об'єднання модальностей здійснюється через адаптивний модель із вагами α , β , γ для кожної модальності за формулою 2:

$$Z = \alpha Z_{асм} + \beta Z_{мет.} + \gamma Z_{дата} \quad (2)$$

Нормалізація ваг здійснюється формулою softmax ($\alpha + \beta + \gamma = 1$) та здійснюють навчання разом із рештою мережі для можливості моделі автоматично визначати важливість кожної конкретної модальності для прогнозування конкретної властивості. Для покращення вирівнювання представлень одного зразку з різних модальностей застосовується контрастивне навчання [25]. Позитивні пари формуються з $Z_{асм}$, $Z_{мет.}$ одного зразку, щоб вектори були близькими у латентному просторі, відповідно негативні пари формуються з різних зразків, щоб вектори були віддаленими. До загальної функції втрат додається контрастна складова InfoNCE, яка навчає модель зближувати вектори одного зразка з різних джерел і відштовхувати вектори різних зразків. Це підвищує стійкість моделі, коли одне з джерел даних відсутнє. Для кожної прогнозованої властивості (коефіцієнт Зеебека, електропровідність, теплопровідність, фактор потужності, добротність) використовується окрема регресійна голова із структурою 256 вхідних нейронів, 128 та 64 відповідно для прихованих шарів на 1 нейрон у вихідному шарі. Всі ці властивості прогнозуються паралельно. Це дозволяє моделі вивчати специфічні для кожної властивості залежності від мікроструктури. Функцією втрат на основі середньоквадратичної похибки використовується під час навчання моделі з можливістю адаптації залежно від важливості ознаки.

Для забезпечення інтерпретованості прогнозів використовується методика візуалізації областей зображення Grad-CAM [26], що дозволяє генерувати теплову карту, де відображаються області з високим та низьким впливом різними кольорами, для перевірки точності моделі [27]. Додатково аналіз ваг модальностей дозволяє встановити, яка з них є найбільш важливою для певної властивості. Реалізація платформи має потенціал забезпечити глибше розуміння фізичних механізмів впливу мікроструктури на транспортні властивості, а також надати практичний інструмент для прискореної оптимізації термоелектричних матеріалів.

Висновки

1) Представлено концепцію інструмента для комплексної мультимодальної системи аналізу встановлення кореляційних взаємозв'язків між структурою та термоелектричними властивостями та його детальний опис. Платформа включає три ключові компоненти: інструмент для створення анотованої бази даних з

- систематичним зв'язуванням зображень, складу та властивостей, архітектуру нейронної мережі для автоматизованої сегментації мікроструктурних дефектів та мультимодальну модель зі спільними вагами енкодера для прогнозування термоелектричних властивостей на основі злиття монохромних зображень різної роздільної здатності з даними про хімічний склад та технологічні режими синтезу.
- 2) Створено першу ановану базу даних термоелектричних матеріалів у поєднанні АСМ та металографічних зображень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те.
 - 3) Запропонований інструмент дозволяє скоротити час аналізу зразка матеріалу на 1–2 порядки у порівнянні із ручним методом.

Інформація про авторів

Короп М.М. – Аспірант кафедри термоелектрики та медичної фізики ЧНУ ім. Ю. Федьковича, м.н.с. інституту термоелектрики НАН України та МОН України.

Прибила А.В. – Кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри термоелектрики та медичної фізики ЧНУ ім. Ю. Федьковича.

Лисько В.В. – Кандидат фізико-математичних наук, виконує обов'язків директора Інституту термоелектрики.

Пилипко В.Г. – Доктор філософії, завідувач лабораторії Науково-дослідного центру «Технологія функціональних матеріалів», Навчально-наукового інституту біології, хімії та біоресурсів, Чернівецького національного університету імені Ю. Федьковича.

Халавка Ю.Б. – Доктор хімічних наук, доцент, проректор з наукової роботи Чернівецького національного університету імені Ю. Федьковича.

Література

1. Snyder G.J., & Toberer E. S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature Materials*, 7(2), 105–114. <https://doi.org/10.1038/nmat2090>
2. Pei Y., Shi X., LaLonde A., Wang H., Chen L., & Snyder G. J. (2011). Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics. *Nature*, 473(7345), 66–69. <https://doi.org/10.1038/nature09996>
3. Kim S. I., Lee K. H., Mun H. A., Kim H. S., Hwang S. W., Roh J. W., Yang D. J., Shin W. H., Li X. S., Lee Y. H., Snyder G. J., & Kim S. W. (2015). Dense dislocation arrays embedded in grain boundaries for high-performance bulk thermoelectrics. *Science*, 348(6230), 109–114. <https://doi.org/10.1126/science.aaa4166>
4. DeCost B. L., & Holm E. A. (2015). A computer vision approach for automated analysis and classification of microstructural image data. *Computational Materials Science*, 110, 126–133. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.08.011>
5. Azimi S. M., Britz D., Engstler M., Fritz M., & Mücklich F. (2018). Advanced steel microstructural classification by deep learning methods. *Scientific Reports*, 8(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-20037-5>

6. Wang Z., Yokoyama Y., Onda T., Adachi Y., & Chen Z. (2019). Improved thermoelectric properties of hot-extruded Bi–Te–Se bulk materials with Cu doping and property predictions via machine learning. *Advanced Electronic Materials*, 5(6). <https://doi.org/10.1002/aelm.201900079>
7. Wang Z., Adachi Y., & Chen Z. (2019). Processing optimization and property predictions of hot-extruded Bi–Te–Se thermoelectric materials via machine learning. *Advanced Theory and Simulations*, 3(1). <https://doi.org/10.1002/adts.201900197>
8. Wang Z.-L., Funada T., Onda T., & Chen Z.-C. (2023). Knowledge extraction and performance improvement of Bi₂Te₃-based thermoelectric materials by machine learning. *Materials Today Physics*, 31, 100971. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2023.100971>
9. Sheng Y., Deng T., Qiu P., Shi X., Xi J., Han Y., & Yang J. (2021). Accelerating the discovery of Cu–Sn–S thermoelectric compounds via high-throughput synthesis, characterization, and machine learning-assisted image analysis. *Chemistry of Materials*, 33(17), 6918–6924. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c01856>
10. Ling J., Hutchinson M., Antono E., DeCost B., Holm E. A., & Meredig B. (2017). Building data-driven models with microstructural images: generalization and interpretability (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1711.00404>
11. Pei Z., Rozman K. A., Doğan Ö. N., Wen Y., Gao N., Holm E. A., Hawk J. A., Alman D. E., & Gao M. C. (2021). Machine-learning microstructure for inverse material design. *Advanced Science*, 8(23). <https://doi.org/10.1002/advs.202101207>
12. Pregowska A., Roszkiewicz A., Osial M., & Giersig M. (2024). How scanning probe microscopy can be supported by Artificial Intelligence and quantum computing (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2406.19397>
13. Zhang X., et al. (2013). Nano-thermoelectric Seebeck coefficient in-situ quantitative characterization device based on AFM. *WO Patent WO2013189111A1*.
14. Moon, J., et al. (2021). Compliant three-dimensional thermoelectrics. *US Patent US20210175406A1*.
15. Russell B. C., Torralba A., Murphy K. P., & Freeman W. T. (2007). LabelMe: A database and Web-based tool for image annotation. *International Journal of Computer Vision*, 77(1–3), 157–173. <https://doi.org/10.1007/s11263-007-0090-8>
16. Zhu J.-Y., Park T., Isola P., & Efros A. A. (2017). Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks (Version 7). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1703.10593>
17. Ronneberger O., Fischer P., & Brox T. (2015). U-Net: convolutional networks for biomedical image segmentation (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1505.04597>
18. He K., Zhang, X. Ren S., & Sun J. (2015). Deep residual learning for image recognition (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1512.03385>
19. Oktay O., Schlemper J., Folgoc L. L., Lee M., Heinrich M., Misawa K., Mori K., McDonagh S., Hammerla N. Y., Kainz B., Glocker B., & Rueckert D. (2018). Attention U-Net: learning where to look for the pancreas (Version 3). arXiv.

- <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1804.03999>
20. Lin T.-Y., Dollar P., Girshick R., He K., Hariharan B., & Belongie S. (2017). Feature pyramid networks for object detection. In 2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) (pp. 936–944). *2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. IEEE. <https://doi.org/10.1109/cvpr.2017.106>
 21. Fotos G., Campbell A., Murray P., & Yakushina E. (2023). Deep learning enhanced Watershed for microstructural analysis using a boundary class semantic segmentation. *Journal of Materials Science*, 58(36), 14390–14410. <https://doi.org/10.1007/s10853-023-08901-w>
 22. Sudre C. H., Li W., Vercauteren T., Ourselin S., & Cardoso M. J. (2017). Generalised Dice overlap as a deep learning loss function for highly unbalanced segmentations. arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1707.03237>
 23. Lin T.-Y., Goyal P., Girshick R., He K., & Dollar P. (2017). Focal loss for dense object detection. In 2017 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV) (pp. 2999–3007). *2017 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*. IEEE. <https://doi.org/10.1109/iccv.2017.324>
 24. Yaslioglu M. M. (2025). Attention is all you need until you need retention (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2501.09166>
 25. Chen T., Kornblith S., Norouzi M., & Hinton G. (2020). A simple framework for contrastive learning of visual representations (Version 3). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2002.05709>
 26. Selvaraju R. R., Cogswell M., Das A., Vedantam R., Parikh D., & Batra D. (2016). Grad-CAM: Visual explanations from deep networks via gradient-based localization. arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1610.02391>
 27. Lundberg S., & Lee S.-I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions (Version 2). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1705.07874>

Submitted: 15.12.25

M.M. Korop¹ (<https://orcid.org/0009-0000-4921-3419>),
A.V. Prybyla¹ (<https://orcid.org/0000-0003-4610-2857>),
V.V. Lysko^{1,2} (<https://orcid.org/0000-0001-7994-6795>),
V.H. Pylypko¹ (<https://orcid.org/0009-0003-8379-4802>),
Yu.B. Khalavka¹ (<https://orcid.org/0000-0002-6832-447X>)

¹Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynskiy str., Chernivtsi, 58012, Ukraine;

²Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine

Computer Vision as a Tool for Correlation Analysis of Images of the Microstructure of Bi-Te-Based Thermoelectric Materials

This paper presents the concept of a multimodal computer vision and machine learning tool for establishing correlations between the surface microstructure of extruded Bi-Te-based thermoelectric materials and their thermoelectric properties. The platform integrates data from atomic force microscopy (AFM), metallographic microscopy, chemical composition, thermoelectric properties, and synthesis process conditions into a single database for further deep learning. The developed tool for creating an annotated database, a neural network architecture for automated defect segmentation, and a multimodal data fusion model for predicting thermoelectric properties are described.

Keywords: thermoelectric materials, semiconductors, Bi-Te, artificial intelligence, machine learning, computer vision, defect segmentation, multimodal learning, deep learning, modeling, kinetic coefficients, atomic force microscopy, optical metallographic studies.

Надійшла до редакції 15.12.25