

Параметрическая идентификация кристаллических решёток на основе анализа конфигурации изоповерхностей

Д.В. Кириш^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

²Институт систем обработки изображений РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001

Аннотация. В работе рассматривается подход к идентификации кристаллических решёток на основе анализа конфигурации изоповерхностей. Данный подход позволяет оценивать взаимное расположение узлов внутри элементарной ячейки, что, теоретически, должно обеспечивать благоприятные условия для создания методов идентификации, устойчивых к искажениям структуры. Основная проблема, заключающаяся в высокой вычислительной сложности алгоритма, решается в работе с помощью модификации метода, использующей свойство периодичности структуры кристаллической решётки. Проведённое исследование разработанного метода на большой базе эталонных решёток подтвердило его высокую устойчивость к искажениям структуры вплоть до максимального искажения, составляющего 10 % от размера элементарной ячейки.

1. Введение

Прогресс в области электронной микроскопии [1] и бурное развитие методов трёхмерной реконструкции [2] вывели изучение материи на качественно новый уровень. Сегодня большое внимание уделяется исследованию строения вещества, существенно влияющего на его физико-химические свойства [3]. Особый интерес в данном вопросе вызывают кристаллы – вещества, обладающие периодической структурой.

Наиболее широко распространённый способ описания кристаллических структур был предложен Огюстом Браве [4]. В его основу легло представление структуры в виде множества элементарных ячеек, задаваемых тройкой основных трансляционных векторов или шестью параметрами (длинами трёх сторон и величинами трёх углов между сторонами). Всё многообразие кристаллических решёток Браве разделил на 7 основных кристаллических систем в соответствии с соотношениями сторон и углов элементарных ячеек.

Однако решение задачи идентификации кристаллических решёток представляет особую сложность вследствие как пересечения классов, так и наличия искажений в самой структуре кристалла. Среди существующих методов, позволяющих идентифицировать трёхмерные объекты с периодической структурой, можно выделить метод идентификации изоповерхностей [5]. Данный метод демонстрирует хорошую устойчивость к искажениям объекта, однако его основным недостатком является непомерно большая вычислительная

сложность. Настоящая работа посвящена модификации метода идентификации изоповерхностей, направленной на снижение вычислительной сложности при сохранении высокой устойчивости к искажениям кристаллической решётки.

2. Модификация метода идентификации изоповерхностей

Метод идентификации изоповерхностей основан на построении *индекса*, состоящего из 8 двоичных флагов. Как следствие, *индекс* может принимать 256 возможных значений, соответствующих 256 вариантам построения изоповерхности. Изоповерхность представляет собой набор плоскостей, равноудалённых от узлов с ненулевым флагом *индекса*, и описывается множеством точек $S = \{p_i\}$.

Идея метода идентификации изоповерхностей, применяемого в трёхмерной графике, близка к рассматриваемой задаче идентификации кристаллических решёток. Во-первых, весь объект разбивается на минимальные блоки, что схоже с разбиением кристаллической решётки на элементарные ячейки. А во-вторых, рассматриваются особенности строения самих блоков, а не их расположение внутри всей структуры.

С другой стороны, для анализа кристаллических решёток используемая методом информация является избыточной. В отличие от трёхмерного объекта, описываемого сложной поверхностью, для задания кристаллической решётки достаточно набора вершин – узлов $X = \{\bar{x}_i\}_{i=1}^N, \bar{x}_i \in \square^3$. В связи с этим были предложены следующие модификации:

1. Перейти к плоскостям, проходящим не между узлами, а через них. Таким образом, компоненты *индекса* будет описывать принадлежность узлов изоповерхности (рисунок 1). В компьютерной графике аналогом таких объектов являются полигоны.
2. Задавать изоповерхность не множеством точек её плоскостей, а только вершинами (являющимися узлами кристаллической решётки), так как именно они несут основную информацию о строении ячейки.

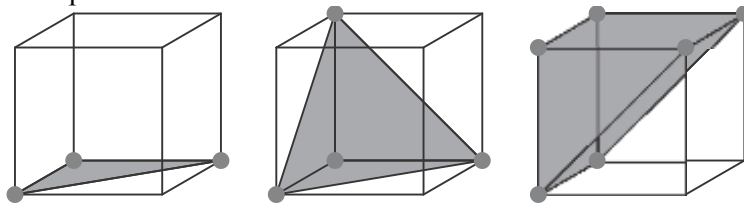


Рисунок 1. Пример построения изоповерхностей для кубической ячейки.

Предложенные модификации позволяют значительно снизить вычислительную сложность метода, при этом сохранив информативность оцениваемых расстояний.

Ещё одной важной проблемой рассматриваемого метода идентификации является выбор элементарной ячейки среди множества узлов кристаллической решётки. С одной стороны, можно было бы воспользоваться разработанным ранее методом идентификации параметров ячеек Браве для поиска основных трансляционных векторов [6]. Однако, данный метод плохо работает в условиях искажения кристаллической структуры, а предложенная его модификация на основе метода градиентного спуска обладает излишней вычислительной сложностью.

Для решения проблемы выбора элементарной ячейки был предложен принципиально новый подход: задание ячейки как набора из M близлежащих узлов относительно выбранного центрального узла $\bar{c}_1 \in X$ в заданной окрестности. Размер окрестности, в которой ищется элементарная ячейки, определяется коэффициентом разброса узлов r .

В качестве параметров, определяющих взаимное расположение изоповерхностей, были выбраны следующие: среднее значение среднеквадратичного расстояния ($\text{avg } d_{\text{RMS}}$); среднее и максимальное расстояния Хаусдорфа ($\text{avg } d_{\text{H}}$ и $\text{max } d_{\text{H}}$) [5].

Опишем основные этапы метода параметрической идентификации кристаллических решёток на основе анализа конфигурации изоповерхностей:

1. Находим узел $\bar{c}_2 \in X$, ближайший к выбранному центральному узлу \bar{c}_1 .

2. Вычисляем максимальный радиус разброса узлов относительно \bar{c}_1 : $R = r|\bar{c}_2 - \bar{c}_1|$.
3. Выбираем из всего множества X не более M узлов, лежащих внутри сферы радиуса R с центром в \bar{c}_1 : $C = \{\bar{c}_k\}_{k=1}^Q$: $\bar{c}_k \subset X$, $Q \leq M$.
4. Строим $2^Q - 1$ изоповерхностей (исключается случай, когда все флаги равны 0).
5. Вычисляем для каждой пары изоповерхностей два расстояния: $d_{\text{RMS}}(S_1, S_2)$, $d_H(S_1, S_2)$.
6. По двум получившимся множествам параметров $\{d_{\text{RMS}k}\}_{k=1}^Q$ и $\{d_{\text{H}k}\}_{k=1}^Q$ оцениваем три итоговых расстояния: $\text{avg } d_{\text{RMS}}$; $\text{avg } d_H$; $\max d_H$.

Введём нормированную меру, показывающую схожесть соответствующих расстояний между изоповерхностями (принимает максимальное значение, равное единице, когда расстояния полностью совпадают):

$$\|d_1 - d_2\| = 1 - \frac{|d_1 - d_2|}{\max\{d_1, d_2\}},$$

где d_1 и d_2 – пара соответствующих расстояний между изоповерхностями.

3. Исследование параметрической идентификации на основе анализа конфигурации изоповерхностей

Для исследования предложенного метода параметрической идентификации был проведён ряд вычислительных экспериментов на большой базе кристаллических решёток, смоделированных с помощью предложенной ранее информационной технологии [7].

Разработанный метод предполагает гибкую настройку благодаря переменным параметрам M и r , выбор которых, несомненно, повлияет на результаты исследований. В рамках данной работы были выбраны следующие значения: $M=7$ и $r=\infty$. Выбор 7 узлов позволит выделить три основные трансляции даже в случае большой разницы между длинами сторон элементарной ячейки (рисунок 2), а коэффициентом разброса узлов можно пренебречь, так как его основная задача – оптимизация декомпозиции по данным для проведения параллельных вычислений.

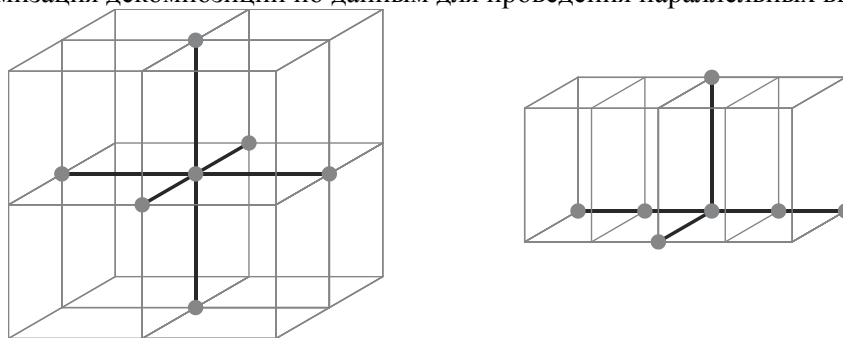


Рисунок 2. Варианты выбора трансляций для ячеек разного размера.

Важным требованием к методам параметрической идентификации кристаллических решёток является требование устойчивости к искажениям координат узлов. Идеальная решётка невозможна в случае реальных кристаллов по причине наличия как искажений в структуре самого кристалла (неоднородности, транслокации), так и погрешностей измерения положения узлов.

Для исследования устойчивости предложенного метода параметрической идентификации было смоделировано 140 000 решёток (по 20 000 решёток на каждую кристаллическую систему), параметры которых идентифицировались в условиях различного уровня шума. Ошибка идентификации параметров определялась с помощью введённых мер схожести параметров.

В качестве величины, определяющей степень искажения решётки по одной из координатных осей, было выбрано отношение длины элементарной ячейки вдоль данной оси к максимальному искажению, равному трём среднеквадратичным отклонениям случайной величины вдоль выбранной оси.

Результаты эксперимента представлены на рисунке 3.

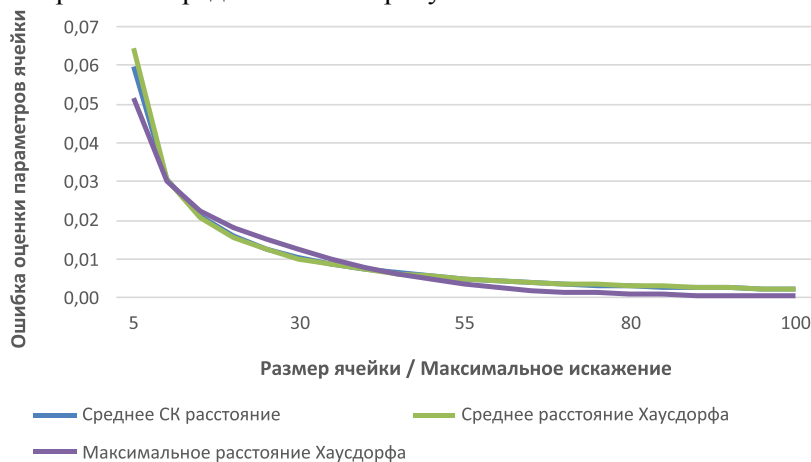


Рисунок 3. Зависимость ошибки определения расстояний между изоповерхностями от величины искажения решётки.

Все три меры схожести расстояний между изоповерхностями оценивают взаимное расположение выбранной группы узлов. Как следствие, искажение решётки примерно в равной степени сказывается на их величинах. Полученные данные подтвердили, что главная особенность исходного метода была сохранена – модифицированный метод параметрической идентификации также можно применять при достаточно больших искажениях решётки.

Следует отметить, что предложенный метод демонстрирует, примерно, в 5 раз лучшую устойчивость к искажениям по сравнению с базовым методом идентификации параметров ячеек Браве, при этом используя в своей основе схожий принцип действия – выделение основных векторов трансляции. Причиной такого результата послужил отказ от оценивания углов ячейки, так как именно они в наибольшей мере подвержены искажению.

4. Заключение

Проведённая модификация метода параметрической идентификации на основе анализа конфигураций изоповерхностей значительно снизила вычислительную сложность метода, сохранив качество идентификации применительно к периодическим структурам. Следствием этого стала возможность проведения детальных исследований на большой базе, составляющей 140 000 смоделированных решёток.

Следует особо отметить, что предложенный метод является инвариантным как к размеру решётки (число трансляций), так и к её положению в пространстве (сдвиг и поворот), что является одним из ключевых требований к методам параметрической идентификации кристаллических решёток.

Предложенный метод параметрической идентификации продемонстрировал высокую устойчивость к искажениям координат узлов решётки. Данный метод может применяться вплоть до максимального искажения, составляющего 10 % от размера элементарной ячейки.

5. Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-37-00418, № 19-29-01135, № 19-31-90160) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания Самарского университета и ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

6. Литература

- [1] Erni, R. Atomic-resolution imaging with a sub-50-pm electron probe / R. Erni, M.D. Rossell, C. Kisielowski, U. Dahmen // *Physical review letters*. – 2009. – Vol. 102(9). – P. 1-4.
- [2] Бессмельцев, В.П. Быстрый алгоритм совмещения изображений для контроля качества лазерной микрообработки / В.П. Бессмельцев, Е.Д. Булушев // *Компьютерная оптика*. – 2014. – Т. 38, № 2. – С. 343-350.
- [3] Сойфер, В.А. Анализ и распознавание наномасштабных изображений: Традиционные подходы и новые постановки задач / В.А. Сойфер, А.В. Куприянов // *Компьютерная оптика*. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 136-144.
- [4] Hammond, C. The basic of crystallography and diffraction / C. Hammond – New York: Oxford University Press Inc., 2009. – P. 84-95.
- [5] Kessler, E. Precision comparison of the lattice parameters of silicon monocrystals / E. Kessler, A. Henins, R. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*. – 1994. – Vol. 99(1). – P. 1-18.
- [6] Kirsh, D.V. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // *Pattern recognition and image analysis*. – 2015. – Vol. 25(3). – P. 456-460. DOI: 10.1134/S1054661815030116.
- [7] Кирш, Д.В. Информационная система моделирования кристаллических решёток в трёхмерном пространстве / Д.В. Кирш // *Перспективные информационные технологии (ПИТ): труды Международной научно-технической конференции – Самара: Издательство Самарского государственного аэрокосмического университета, 2014. – С. 448-452.*

Parametric Identification of Crystal Lattices Based on Isosurface Configuration Analysis

D.V. Kirsh^{1,2}

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

²Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001

Abstract. The paper deals with an approach to crystal lattice identification based on the isosurface configuration analysis. The approach allows us to evaluate the relative position of lattice nodes inside the unit cell. Theoretically, this should provide favourable conditions for creating identification methods that are resistant to structural distortions. The crucial problem with the high computational complexity of the algorithm is solved by modification of the method using the periodicity property of crystal lattice structures. A study of the developed method on a large base of reference lattices confirmed its high resistance to structural distortions up to a maximum distortion of 10 % of unit cell's size.