

## Секция 2:

# ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ, ГЕОИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ИНФОРМАЦИОННАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ

## ПРИМЕНЕНИЕ ГРАДИЕНТНОГО МЕТОДА НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК

А.С. Широканев<sup>1</sup>, Д.В. Кириш<sup>1,2</sup>, А.В. Куприянов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия

<sup>2</sup> Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия

В настоящей работе рассматривается задача параметрической идентификации трёхмерных моделей кристаллических решёток, представленных набором узлов. Задачу параметрической идентификации предлагается численно решать на основе градиентного метода наискорейшего спуска. Решение, полученное при помощи алгоритма оценивания параметров ячейки Браве, считаем начальным приближением для разработанных алгоритмов. Исследование показало, что целевая функция уменьшается в результате выполнения разработанных алгоритмов. Для сравнения предлагаемых алгоритмов с алгоритмом оценивания параметров ячейки Браве были проведены эксперименты, которые заключаются в сравнении параметров эталонной решётки и параметров искомой решётки при помощи мер схожести сторон и углов. Проведённые эксперименты показывают, что первый алгоритм в 79 % случаев даёт результаты лучше, чем алгоритм оценивания параметров ячейки Браве, а второй алгоритм – в 93 % при условии подбора критериев останова для каждого эксперимента.

**Ключевые слова:** кристаллическая решётка, элементарная ячейка Браве, параметрическая идентификация, градиентный метод наискорейшего спуска, мера схожести.

### Введение

В современное время электронная микроскопия позволяет наблюдать атомарную структуру кристаллической решётки. В различных модификациях линейное разрешение достигает десятой доли нанометра (ангстрем). Большинство наблюдаемых наноструктур имеют кристаллический характер, то есть атомы упорядочены в систему, называемую кристаллической решёткой. Кристаллические структуры присутствуют в основном во всех твёрдых материалах, некоторых аморфных и даже в биологических структурах [1, 2].

Распространённой математической моделью трёхмерной кристаллической решётки является элементарная ячейка Браве, которая описывается тремя векторами трансляции [2]. Несмотря на недостаток неоднозначности выбора элементарной ячейки, такая модель

удобна для представления трёхмерной структуры решётки и реализации наиболее точных алгоритмов параметрической идентификации.

Существуют различные подходы для решения задачи реконструкции и параметрической идентификации кристаллических решёток [3-7]. В работах [8, 9] были предложены методы параметрической идентификации кристаллических решёток, в основе которых лежат элементарная ячейка Браве и ячейка Вигнера-Зейтца. Предложенные методы устраняют недостаток, связанный с высокой погрешностью или низкой эффективностью при сравнении решёток, схожих по форме [3-5].

В результате исследования описанных методов было показано, что точность алгоритмов может быть увеличена за счёт уменьшения ошибки решения, то есть решения задачи оптимизации. Были разработаны два алгоритма параметрической идентификации, основанных на градиентном методе наискорейшего спуска. Предлагаемые алгоритмы характеризуются уточнением решения, полученного менее точным алгоритмом.

## 1. Обзор существующих методов параметрической идентификации

В работах [8, 9] были предложены методы идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве и на основе оценивания объёма ячейки Вигнера-Зейтца.

**Первый метод** основан на вычислении шести основных параметров элементарной ячейки Браве – длин трёх сторон и величин трёх углов между сторонами [8].

Исходными данными для метода идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве является конечное множество радиус-векторов узлов кристаллической решётки. Базовый метод идентификации предполагает поиск трёх некопланарных векторов в исходном множестве узлов: первый вектор имеет минимальную норму; второй не лежит на прямой с направляющим вектором, равным первому вектору; третий вектор не лежит в плоскости, составляемой двумя найденными векторами.

Общий алгоритм предполагает выделение множества элементарных ячеек Браве, входящих в состав решётки; вычисление параметров каждой ячейки; усреднение полученных параметров.

Введены нормированные меры, показывающие схожесть сторон, углов и фундаментальных метрических тензоров выбранных элементарных ячеек.

**Второй метод** основан на вычислении объёма ячейки Вигнера-Зейтца [8]. Для нахождения объёма ячейки Вигнера-Зейтца необходимо построить ограничивающие ячейку плоскости и вычислить её объём с помощью метода Монте-Карло – случайного вбрасывания большого числа точек в область решётки и определения количества точек, попавших внутрь ограниченной области.

Исходными данными для метода идентификации на основе оценивания объёма ячейки Вигнера-Зейтца являются количество вбрасываемых точек  $L$  и множество радиус-векторов узлов кристаллической решётки.

Базовый метод идентификации предполагает вычисление объёма ячейки Вигнера-Зейтца построением плоскостей вида  $p_{k1}x + p_{k2}y + p_{k3}z - |\bar{p}_k|^2 = 0$ ,  $1 \leq k \leq N-1$ ; проведение  $L$  испытаний, в результате которых образуются  $L$  точек; подсчёт количества точек, попавших внутрь ячейки Вигнера-Зейтца; вычисление объёма по формуле  $V \approx (2p_m)^3 \frac{I}{L}$ .

Алгоритм общего метода идентификации состоит из выделения множества ячеек Вигнера-Зейтца, входящих в состав решётки, и вычисления их объёмов. Итоговая величина объёма ячейки Вигнера-Зейтца для всей решётки в целом определяются в ходе анализа полученного множества объёмов.

Мерой схожести двух решёток является величина:  $\|V_1 - V_2\| = 1 - \frac{|V_1 - V_2|}{\max\{V_1, V_2\}}$ .

## 2. Алгоритмы параметрической идентификации на основе градиентного метода наискорейшего спуска

### а. Алгоритм оптимизации векторов трансляции

Известной моделью примитивной кристаллической решётки является модель решётки Браве, описываемая тремя векторами трансляции  $\bar{a}$ ,  $\bar{b}$  и  $\bar{c}$  [1]. Множество узлов идеальной решётки выражается в виде (1).

$$X = \{\bar{x} = i\bar{a} + j\bar{b} + k\bar{c}, (i, j, k) \in \mathbb{Z}^3\}. \quad (1)$$

Как правило, важной характеристикой подобных методов является точность. Точность метода параметрической идентификации может быть увеличена за счёт минимизации ошибки решения, то есть решения задачи оптимизации. В таком случае требуется функция, являющаяся ошибкой решения.

При заданном конечном множестве точек целевая функция выражается в виде (2).

$$E = \sum_{l=1}^L \min_{i,j,k} \|\bar{x}_l - (i\bar{a} + j\bar{b} + k\bar{c})\|^2. \quad (2)$$

Рассматриваемую задачу оптимизации будем решать градиентным методом наискорейшего спуска. Используя обозначение  $\bar{p} = (\bar{a}, \bar{b}, \bar{c})$  – тройка векторов трансляции, представим соответствующий итерационный процесс в виде (3), а градиент и коэффициент наискорейшего спуска – как (4) и (5). Разработанный алгоритм далее будем называть Алгоритм 1.

$$\bar{p}^{n+1} = \bar{p}^n - \lambda_n \nabla E(\bar{p}^n); \quad (3)$$

$$\nabla E(\bar{p}^n) = 2 \left[ \left( \sum_{l=1}^L A_l \right) \bar{p}^n - \left( \sum_{l=1}^L \bar{x}_l \bar{n}_l^T \right) \right], \quad (4)$$

где  $A_l = \bar{n}_l \bar{n}_l^T$ .

$$\lambda_n = \frac{\sum_{l=1}^L (\bar{w}_l^k, \nabla E(P^k) \bar{n}_l)}{2 \sum_{l=1}^L \|\nabla E(P^k) \bar{n}_l\|^2}, \quad (5)$$

где  $\bar{w}_l^n = i_l \bar{a}^n + j_l \bar{b}^n + k_l \bar{c}^n - \bar{x}_l$ .

Преимуществом алгоритма является относительно небольшая вычислительная сложность. Для вычисления градиента и коэффициента спуска требуется небольшое количество векторных операций.

Недостаток алгоритма заключается в зависимости векторов итерационного процесса. Независимо от того, сойдётся ли какой-либо из векторов к решению, количество итераций будет одинаковым для любого из векторов.

### б. Алгоритм оптимизации независимых векторов

Для устранения данного недостатка предлагается подход, разбивающий общую задачу оптимизации на три независимых друг от друга задачи. Для этого рассматривается множество периодически повторяющихся плоскостей. Это множество описывается всего одним вектором, который является элементом базиса, отличного от базиса, построенного на трёх векторах трансляции. Между этими базисами существует биекция, что позволяет от задачи поиска векторов трансляции перейти к задаче поиска векторов  $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \bar{d}_3$ . Разработанный алгоритм далее будем называть Алгоритм 2.

Целевая функция итерационного процесса независимой задачи второго алгоритма выражается в виде (6).

$$E(\bar{d}) = \sum_{l=1}^L \left[ (\bar{x}_l, \bar{d}) + i_l \|\bar{d}\|^2 \right]^2. \quad (6)$$

Соответствующий итерационному процессу градиент находится по формуле (7).

$$\nabla E = 2 \sum_{l=1}^L \left( (\bar{x}_l, \bar{d}) + i_l (\bar{d}, \bar{d}) \right) [\bar{x}_l + 2i_l \bar{d}]. \quad (7)$$

Коэффициент спуска находится из уравнения третьего порядка (8).

$$P_0 + P_1 \lambda + P_2 \lambda^2 + P_3 \lambda^3 = 0, \quad (8)$$

где  $P_0 = \sum_{l=1}^L A_l B_l$ ;

$$P_1 = \sum_{l=1}^L A_l C_l - \sum_{l=1}^L B_l^2;$$

$$P_2 = -2 \sum_{l=1}^L B_l C_l;$$

$$P_3 = -\sum_{l=1}^L C_l^2;$$

$$A_i = (\bar{x}_i - i_i \bar{d}^n, \bar{d}^n);$$

$$B_i = (\bar{x}_i - 2i_i \bar{d}^n, \nabla E(\bar{d}^n));$$

$$C_i = i_i \|\nabla E(\bar{d}^n)\|^2.$$

Связь между базисом векторов трансляции и базисом векторов, образующих независимые итерационные процессы, выражается через три системы линейных уравнений (9) и выражений (10).

$$D\bar{p}_i = \|\bar{d}_i\|^2 \bar{e}_i, i = \overline{1,3}. \quad (9)$$

$$\bar{d}_i = ([\bar{p}_k \times \bar{p}_l], \bar{p}_i) / \|\bar{p}_k \times \bar{p}_l\|^2, k \neq l \neq i = \overline{1,3}. \quad (10)$$

Исходными данными и итоговым решением алгоритма являются векторы трансляции. При помощи выражений (10) вычисляются начальные приближения для независимых итерационных процессов. Решения итерационных процессов переводятся в векторы трансляций через линейные системы (9) для получения конечного результата алгоритма.

### 3. Результаты исследования разработанных алгоритмов параметрической идентификации на основе сравнения результатов

Для проведения исследования алгоритмов параметрической идентификации требуется критерий качества алгоритма. Таким критерием, как правило, является ошибка решения. В качестве ошибки решения выберем целевую функцию (2). Для вычисления этой функции требуются радиус-векторы узлов исходной решётки и полученные другим алгоритмом параметры.

Для проведения экспериментов были смоделированы и искажены модели кристаллических решёток, в основе которых лежат элементарные ячейки с параметрами семи химических элементов. Каждая модель решётки состояла из 125-ти узлов. Искажение осуществлялось путём случайного смещения каждого узла от своего идеального положения на расстояние не дальше, чем на 0,5 Å.

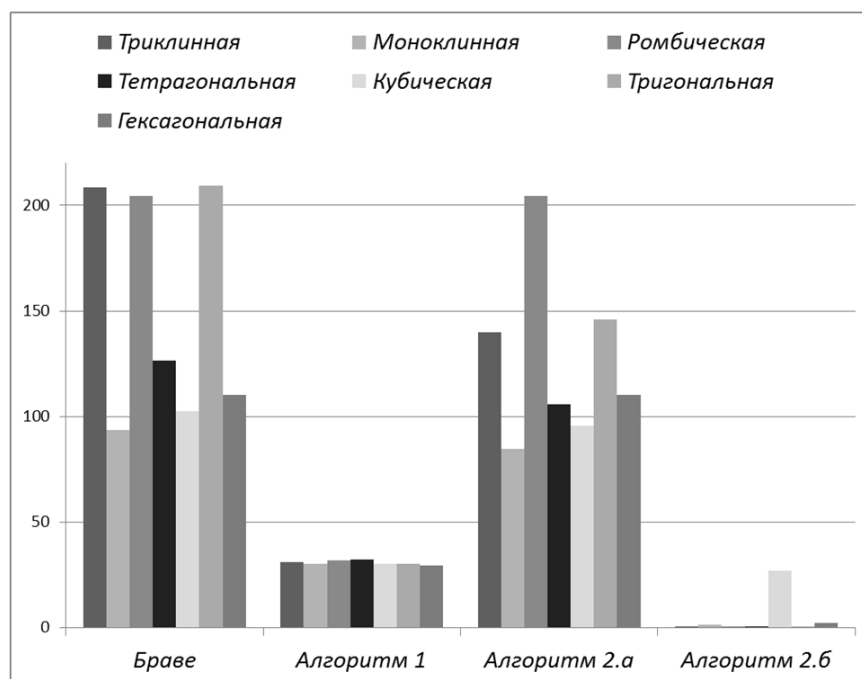


Рис. 1. Результаты исследования

Для каждой смоделированной решётки оценивались параметры элементарной ячейки Браве описанными алгоритмами, и вычислялась ошибка решения. На рис. 1 в виде гистограммы представлены результаты исследования, где в качестве высоты выступают значения целевой функции. Оба разработанных алгоритма существенно уменьшают ошибку, полученную в результате выполнения базового алгоритма идентификации на основе оценивания параметров решётки Браве. Алгоритм 2 реализовывался в двух вариантах: а – использовались стандартные критерии останова, б – критерии останова подбирались специальным образом для каждой смоделированной решётки. Результаты первого варианта алгоритма 2 не сильно отличаются от результатов базового алгоритма. Из рис. 1 видно, что при подборе критериев останова (вариант 2.б) ошибка может существенно уменьшиться по сравнению с первым алгоритмом. При стандартных условиях (случай б.1) второй алгоритм выдаёт плохие результаты.

## Заключение

В ходе настоящей работы было разработано два алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода наискорейшего спуска. Для исследования разработанных алгоритмов было предложено использовать меры схожести параметров элементарных ячеек Браве, предложенных в работе [8].

В результате проведённых экспериментов было показано, что алгоритмы параметрической идентификации лучше справляются с задачей оценивания параметров элементарной ячейки Браве кристаллической решётки: алгоритм оптимизации независимых векторов в 93 % случаев даёт результаты лучше, чем алгоритм оценивания параметров ячейки Браве, когда другой алгоритм оптимизации, основанный на оптимизации самих векторов трансляции – в 79 %.

## Благодарности

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятий Программы повышения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013–2020 годы; грантов РФФИ 14-01-00369-а, 14-07-97040-р\_поволжье\_а, 15-29-03823, 15-29-07077; программы № 6 фундаментальных исследований ОНИТ РАН «Биоинформатика, современные информационные технологии и математические методы в медицине» 2015 г.

## Литература

1. Кларк, Э.Р. Микроскопические методы исследования материалов / Э. Р. Кларк, К. Н. Эберхардт. – М.: Техносфера, 2007. – 367 с.
2. Брандон, Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 384 с.
3. Kessler, E.G. Precision Comparison of the Lattice Parameters of Silicon Monocrystals / E.G. Kessler, A. Henins, R.D. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, №1. – P. 1-18.
4. Smith, William F. Foundations of Materials Science and Engineering / William F. Smith // McGraw-Hill Education, 2004. – 864 p.
5. Patera, J. Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of Algoritmy. – 2005. – P. 309-319.
6. Широканев, А.С. Анализ идентификации трёхмерных моделей кристаллических решёток при помощи мер схожести множеств / Широканев А.С., Кириш Д.В., Куприянов А.В. // XIII Королёвские чтения, С 08-10-2015 по 06-10-2015, Самара, Издательство Самарского государственного аэрокосмического университета, 2015 г. – С. 141-142.
7. Широканев, А.С. Разработка алгоритмов трёхмерной реконструкции кристаллической решётки по изображениям проекций [Текст] / А.С. Широканев, Д.В. Кириш, А.В. Куприянов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2015. – Т. 17, № 2(5). – С. 1170-1175.
8. Куприянов, А.В. Оценка меры схожести кристаллических решеток по координатам их узлов в трехмерном пространстве [Текст] / А.В. Куприянов, Д.В. Кириш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.
9. Кириш, Д.В. Параметрическая идентификация кристаллических решёток на основе оценивания параметров элементарных ячеек Браве и Вигнера-Зейтца // 64 Молодёжная научная конференция, С 08-04-2014 по 10-04-2014, Самара, Издательство Самарского государственного аэрокосмического университета, 2014 г., С. 39-40.