

Исследование проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве в задаче идентификации трёхмерных кристаллических решёток

А.С. Широканев^{1,2}, Д.В. Кириш^{1,2}

¹Институт систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001

²Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Благодаря наличию особых механических, электрических, магнитных и оптических свойств вещества с кристаллической структурой применяются в самых различных областях: медицина, транспорт, биоинженерия. Кристаллические вещества применяют для конструирования прочных корпусов и наноматериалов. Зачастую анализируется геометрическая модель кристаллической решётки, как наиболее простая для исследования. Наипростейшей моделью кристаллической решётки является элементарная ячейка Браве. Однако в связи с наличием проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки данная модель используется редко. В настоящей работе предлагается технология, ориентированная на устранение указанной проблемы за счет использования метрики, инвариантной к эквивалентности решёток. Проводится исследование на устойчивость на большой базе смоделированных решёток.

1. Введение

Реконструкция трёхмерных объектов – задача, представляющая большой интерес во многих областях науки [1-4]. Не менее важная задача связана с трёхмерной реконструкцией кристаллических решёток [5-8]. Ключевым результатом трёхмерной реконструкции кристаллической решётки являются параметры элементарной ячейки, которые являются основной характеристикой кристаллического вещества. Для оценивания параметров элементарной ячейки на настоящий момент применяют один из следующих методов: компаратор национального института [5], идентификация на основе плотности упаковки решётки [6], метод сравнения изоповерхностей [7]. Для повышения точности оценивания параметров было предложено решать задачу параметрической идентификации кристаллических решёток по восстановленным узлам трёхмерной структуры [9-16]. Основные ранее разработанные алгоритмы параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток представлены в работах [9-14].

Среди основных моделей кристаллических решёток наипростейшей является решётка Браве. Элементарная ячейка Браве описывается тремя векторами трансляции, по которым формируется вся трёхмерная кристаллическая структура [17]. Ключевой алгоритм, ориентированный на оценивание параметров элементарной ячейки Браве, вычисляет параметры ячейки на основе усреднения построенных элементарных ячеек на неограниченных узлах

трехмерной структуры решётки [12]. Однако метод параметрической идентификации элементарных ячеек Браве обеспечивает недостаточную точность структурной идентификации в связи с проблемой неоднозначности выбора ячеек Браве.

Проблема неоднозначности выбора элементарных ячеек Браве заключается в том, что элементарную ячейку можно выбрать множеством способов на заданной структуре узлов (Рисунок 1). Таким образом одна и та же структура может быть описана множеством различных параметров Браве, соответствующих разным кристаллическим решёткам. В кристаллографии принято накладывать условия на выбор элементарной ячейки, чтобы устранить неоднозначность её определения. Однако в связи со сложностью таких условий решение не может удовлетворять им.

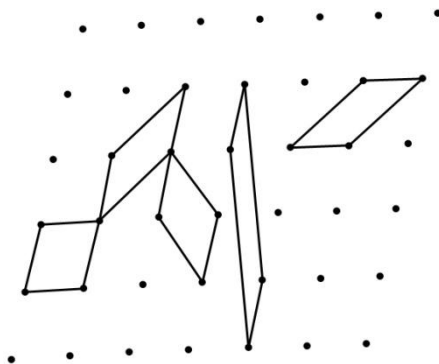


Рисунок 1. Проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве.

В работах [9-11] предложен алгоритм оценивания параметров элементарной ячейки Вигнера-Зейтца. Ячейка Вигнера-Зейтца представляет собой более сложную модель, однако не обладает проблемой неоднозначности выбора элементарной ячейки. Точность структурной идентификации метода идентификации параметров ячеек Вигнера-Зейтца выше, чем у метода идентификации параметров ячеек Браве.

Метод идентификации решёток инвариантный к эквивалентным решёткам, представленный в настоящей работе, позволяет достичь большей точности структурной идентификации [18-20].

2. Метод сравнения эквивалентных элементарных ячеек Браве

Две разные ячейки могут образовывать одну и ту же структуру кристаллической решётки. Сравнение ячеек без учета структур приводит к отсутствию инвариантности к эквивалентности структур. Эквивалентность решёток может быть установлена при помощи правила $X_1 = X_2 \Leftrightarrow X_1 \subseteq X_2 \wedge X_2 \subseteq X_1$. На основе критерия вложенности (1), доказанного в рамках работы [18], выводится метрика сравнения кристаллических решёток (2).

$$X_2 \subseteq X_1 \Leftrightarrow \exists i_1 j_1 k_1 i_2 j_2 k_2 i_3 j_3 k_3 \in \mathbb{Z}^3 : \begin{cases} \vec{a}_2 = i_1 \vec{a}_1 + j_1 \vec{b}_1 + k_1 \vec{c}_1 \\ \vec{b}_2 = i_2 \vec{a}_1 + j_2 \vec{b}_1 + k_2 \vec{c}_1 \\ \vec{c}_2 = i_3 \vec{a}_1 + j_3 \vec{b}_1 + k_3 \vec{c}_1 \end{cases} \quad (1)$$

$$\mu(\vec{a}_1, \vec{b}_1, \vec{c}_1, \vec{a}_2, \vec{b}_2, \vec{c}_2) = \max \left\{ \left\| \Delta p_{21} \right\|, \left\| \Delta p_{12} \right\| \right\}, \quad (2)$$

$$\Delta p_{21} = \begin{pmatrix} \left\| \Delta a_{21} \right\|^2 \\ \left\| \Delta b_{21} \right\|^2 \\ \left\| \Delta c_{21} \right\|^2 \end{pmatrix}, \quad \left\| \Delta a_{21} \right\|^2 = \min_{i,j,k} \left\| \vec{a}_2 - (i\vec{a}_1 + j\vec{b}_1 + k\vec{c}_1) \right\|^2, \quad \left\| \Delta b_{21} \right\|^2 = \min_{i,j,k} \left\| \vec{b}_2 - (i\vec{a}_1 + j\vec{b}_1 + k\vec{c}_1) \right\|^2,$$

где

$$\left\| \Delta c_{21} \right\|^2 = \min_{i,j,k} \left\| \vec{c}_2 - (i\vec{a}_1 + j\vec{b}_1 + k\vec{c}_1) \right\|^2.$$

Метрика, описанная в виде (2), не инвариантна к вращениям решёток, определяемых векторами трансляции элементарной ячейки Браве. Если 2 кристаллические структуры имеют разные параметры вращения, то метрику следует вычислять через задачу оптимизации (3).

$$\mu(\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1, M_\varphi \bar{a}_2, M_\varphi \bar{b}_2, M_\varphi \bar{c}_2) \rightarrow \min_\varphi \quad (3)$$

где M_φ - аффинное преобразование; φ - параметры вращения.

3. Метод параметрической идентификации кристаллических решёток

Точность параметрической идентификации может быть улучшена за счет оптимизации векторов трансляции [20]. По заданной структуре узлов может быть вычислена мера вложенности данной структуры в модель решётки Браве. При наличии векторов трансляции, определяющих модель решётки, для заданного узла в пространстве можно найти ближайший узел модели и вычислить расстояние между ними. Суммарное расстояние будет определять вложенность заданной структуры в модель, определяемую векторами $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ (4).

$$E = \sum_{l=1}^L \min_{i,j,k} \left\| \bar{x}_l - (i\bar{a} + j\bar{b} + k\bar{c}) \right\|^2 \quad (4)$$

Будем рассматривать функцию (4) как целевую функцию. Другими словами нужно найти такие вектора $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$, при которых функция (4) будет минимальной.

Введем следующие обозначения:

$$P = (\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}) = \begin{pmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{pmatrix};$$

$$A_l = \begin{pmatrix} i_l^2 & i_l j_l & i_l k_l \\ j_l i_l & j_l^2 & j_l k_l \\ k_l i_l & k_l j_l & k_l^2 \end{pmatrix};$$

$$\bar{w}_l^n = i_l \bar{a}^n + j_l \bar{b}^n + k_l \bar{c}^n - \bar{x}_l; \quad \bar{n}_l = (i_l \quad j_l \quad k_l)^T.$$

С учетом новых обозначений получаем формулы (5) и (6) для градиента и коэффициента спуска.

$$\nabla E(P) = 2 \left[P \left(\sum_{l=1}^L A_l \right) - \left(\sum_{l=1}^L \bar{x}_l \bar{n}_l^T \right) \right] \quad (5)$$

$$\lambda_n = \frac{\sum_{l=1}^L (\bar{w}_l^k, \nabla E(P^k) \bar{n}_l)}{2 \sum_{l=1}^L \left\| \nabla E(P^k) \bar{n}_l \right\|^2} \quad (6)$$

Итерационный процесс будет задаваться формулой (7).

$$P_{k+1} = P_k - \lambda_n \nabla E(P_k) \quad (7)$$

Алгоритм требует начальное приближение. Для этого достаточно воспользоваться базовым алгоритмом оценивания параметров ячейки Браве [20]. Однако векторы должны быть некомпланарными. Для этого в базовом алгоритме векторы следует перебирать до тех пор, пока все векторы не будут образовывать линейно-независимый базис.

Алгоритм обладает высокой вычислительной сложностью, в связи с чем в работах [21] предложена параллельная версия.

4. Исследование устойчивости метрики схожести Браве

Предложенный метод сравнения элементарных ячеек Браве демонстрирует инвариантность к эквивалентным решеткам по сравнению с мерами схожести по углам и сторонам, а также с

мерой схожести в пространстве G6. На рисунке 3 демонстрируется зависимость значений предложенного метода сравнения от отклонений решётки, приводящих структуру в эквивалентную решетку. Другие меры с проблемой эквивалентности не справляются.



Рисунок 3. Значение схожести структур, образуемых случайным смещением узлов, преобразующих одни типы структур в другие.

Даже небольшое искажение может сильно повлиять на точность получаемого решения. Структура может быть искажена так, что решетка начинает соответствовать уже другому типу структуры. На рисунке 4 представлены результаты исследования устойчивости предложенного метода при анализе различных сингоний решётки.

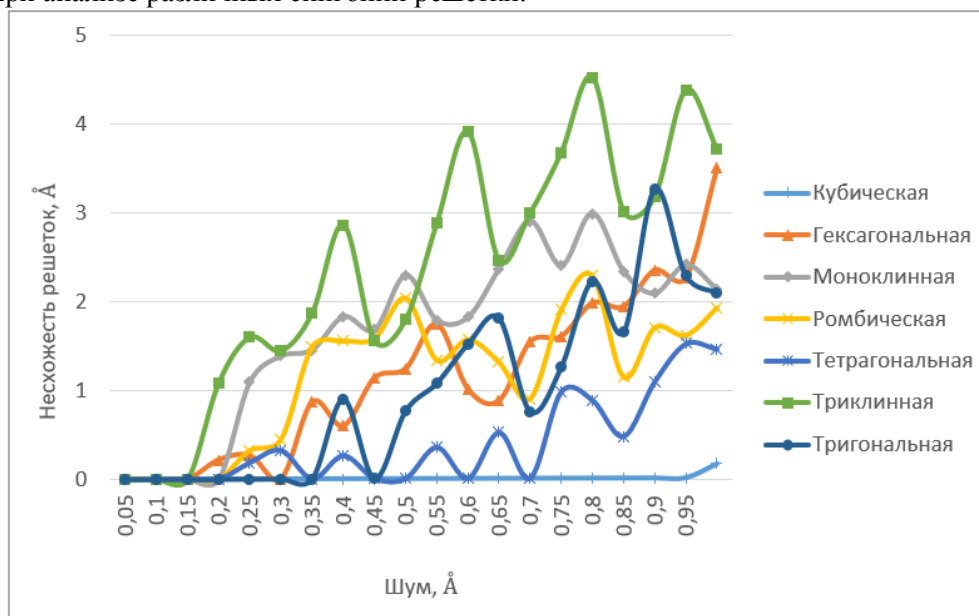


Рисунок 4. Устойчивость предложенного метода схожести элементарных ячеек Браве.

Наиболее устойчивой структурой является кубическая решётка. Даже достаточно высокое искажение не приводит к большой погрешности решения. Триклинная решётка оказалась самой неустойчивой. Случайные изменения в структуре в триклинной решётке могут привести к решению, которое будет соответствовать другой сингонии. Это связано со сложностью модели

триклинной решётки. Структура может оказаться такой, что в процессе выполнения градиентного метода наискорейшего спуска векторы трансляции сойдутся в другом локальном минимуме, соответствующем другому типу решётки. Большой интерес представляет гексагональная структура, так как она часто используется в производстве. Данная структура до 0,3 обладает достаточно большой устойчивостью по сравнению с остальными типами решёток.

5. Заключение

По сравнению с существующими мерами схожести элементарных ячеек предложенный метод схожести ячеек Браве позволяет устранить проблему неоднозначности выбора ячейки Браве. Алгоритм параметрической идентификации, основанный на градиентном методе наискорейшего спуска, позволяет существенно улучшить результаты структурной идентификации.

Предложенный метод структурной идентификации устойчиво работает на кубической решётке. Даже при достаточно сильных искажениях метод достаточно точно идентифицирует кубическую сингонию. Наименее устойчивой оказалась триклинная сингония. Слабая устойчивость данного типа решётки объясняется сложностью модели. Гексагональная сингония, представляющая большой интерес, обладает хорошей устойчивостью по сравнению с триклинной, моноклинной и тригональной сингониями.

6. 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.

7. Литература

- [1] Фурсов, В.А. Информационная технология реконструкции цифровой модели местности по стереоизображениям / В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38, № 2. – С. 335-342.
- [2] Котов, А.П. Технология оперативной реконструкции трёхмерных сцен по разноракурсным изображениям / А.П. Котов, В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 600-605.
- [3] Кудинов, И.А. Реализация алгоритма определения пространственных координат и угловой ориентации объекта по реперным точкам, использующего информацию от одной камеры / И.А. Кудинов, О.В. Павлов, И.С. Холопов // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 3. – С. 413-415.
- [4] Ильясова, Н.Ю. Оценивание геометрических признаков пространственной структуры кровеносных сосудов // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38, № 3. – С. 529-538.
- [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. – P. 1-18.
- [6] Smith, W. Foundations of Materials Science and Engineering // McGraw-Hill, 2004. – P. 67-107.
- [7] Patera, J. Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // 17th ALGORITHMY Conference on Scientific Computing, 2005. – P. 309-319.
- [8] Shirokanev, A.S. Researching methods of reconstruction of three-dimensional crystal lattice from images of projections / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 290-297.
- [9] Kupriyanov, A.V. Estimation of the Crystal Lattice Similarity Measure by Three-Dimensional Coordinates of Lattice Nodes / A.V. Kupriyanov, D.V. Kirsh // Optical Memory & Neural Networks (Information Optics). – 2015. – Vol. 24(2). – P. 145-151.

- [10] Куприянов, А.В. Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве / А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.
- [11] 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.
- [12] Kirsh, D.V. Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1452. – P. 40-45.
- [13] Солдатова, О.П. Применение нечётких нейронных сетей для определения типа кристаллических решёток, наблюдаемых на наномасштабных изображениях / О.П. Солдатова, И.А. Лёзин, И.В. Лёзина, А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 5. – С. 787-795. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-794.
- [14] Kirsh, D.V. Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 162-170.
- [15] Shirokanev, A.S. Application of gradient steepest descent method to the problem of crystal lattice parametric identification / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2016. – Vol. 1638. – P. 393-400.
- [16] Shirokanev, A.S. Development of the crystal lattice parameter identification method based on the gradient steepest descent method / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // Computer Science Research Notes. – 2016. – Vol. 2603. – P. 65-68.
- [17] Шаскольская, М.П. Кристаллография – М.: Высш. шк., 1984. – 376 с.
- [18] Широканев, А.С. Разработка метода идентификации кристаллических решёток для решения проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве / А.С. Широканев // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2016): Междунар. науч.-техн. конф., 2016. – С. 974-978.
- [19] Shirokanev, A. Development of Crystal Lattice Comparison Method Invariant to Bravais Unit Cell Choice / A. Shirokanev, D. Kirsh, A. Kupriyanov // IEEE Xplore, 2017. – P. 125-129.
- [20] Широканев, А.С. Разработка векторного алгоритма параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток на основе оценки расстояний между двумерными слоями / А.С. Широканев, Д.В. Кирш, А.В. Куприянов // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ). – Самара: Новая техника, 2017. – С. 1615-1619.
- [21] Широканев, А.С. Исследование эффективности высокопроизводительного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток, основанного на технологии CUDA / А.С. Широканев, Д.В. Кирш, А.В. Куприянов // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ). – Самара: Новая техника, 2019. – С. 72-77.

Study of the ambiguity problem of Bravais unit cell choice in three-dimensional crystal lattice identification task

A.S. Shirokanev^{1,2}, D.V. Kirsh^{1,2}

¹Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001

²Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. Crystal lattices are applied in many fields: medicine, transport, bioengineering. Crystalline substances are used to design durable housings and nanomaterials. Often, the geometric model of the crystal lattice is analyzed, as the simplest for research. The simplest model of the crystal lattice is the Bravais lattice. However, due to the presence of the ambiguity problem of Bravais unit cell choice, this model is rarely used. In this paper, we propose a technology that will allow eliminating this problem by using a metric that is invariant to the equivalence of lattices. A stability study is being conducted on a large base of simulated gratings.