

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОВ ТРЁХМЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ ПО ИЗОБРАЖЕНИЯМ ПРОЕКЦИЙ

А.С. Широканев¹, А.В. Куприянов²

¹Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет),
²Институт систем обработки изображений РАН

В статье приведены разработанные алгоритмы реконструкции множества узлов кристаллических решёток. Проведено исследование на наборе кристаллических решёток при помощи разработанного метода программного моделирования трёхмерной структуры узлов идеальной кристаллической решётки. Представлены результаты восстановления трёхмерных структур узлов решётки при помощи различных метрик сравнения. Даны сравнительные характеристики точности алгоритмов.

Введение. Важным этапом в изучении атомной структуры вещества стала разработка математических методов восстановления трёхмерной структуры вещества по двумерным изображениям, полученным с помощью электронной микроскопии [1, 2]. Развитие данных методов сыграло особую роль в исследовании материалов, обладающих упорядоченным строением – кристаллов [3].

Целью работы являются разработка алгоритмов реконструкции кристаллической решётки и исследование разработанных алгоритмов при помощи метрик сравнения изображений.

Моделирование идеальной кристаллической решётки. Модель кристаллической решётки может быть описана решёткой Браве. Исчерпывающим описанием решётки Браве является элементарная ячейка, представляемая в виде трёх некопланарных векторов трансляции [4]. В кристаллографии для определения векторов трансляции используют длины векторов a , b , c , и углы между векторами α , β , γ . Дополнительно в качестве исходных параметров для моделирования множества узлов кристаллической решётки определим начальные и конечные индексы узлов по каждой оси I_0, J_0 и K_0 , I_1, J_1 и K_1 .

Для построения модели кристаллической решётки необходимо знать векторы трансляции [5]. Разработанный метод позволяет вычислить векторы трансляции по параметрам, принятым в кристаллографии. Метод позволяет указать диапазоны углов, в которых модель решётки окажется корректной.

Зная векторы трансляции, можем сгенерировать множество точек, соответствующих кристаллической решётке. Это можем сделать, указав диапазон изменения целых чисел I_0, J_0, K_0 и I_1, J_1, K_1 .

Из геометрии элементарной ячейки углы α , β , γ могут принимать значения из диапазонов: $\alpha \in (0, \pi)$, $\beta \in (0, \pi)$, $\gamma \in \{\varphi: \cos \varphi \in (\cos(\alpha + \beta), \cos(\alpha - \beta))\} \cap (0, \pi)$.

Ограничение на угол γ представимо в виде (1).

$$\gamma \in [\min(a_1, a_2), \max(a_1, a_2)], \quad (1)$$

где $a_1 = (\{2\pi - (\alpha + \beta)\} \cup \{\alpha + \beta\}) \cap (0, \pi)$, $a_2 = |\alpha - \beta|$.

Условие (1) ограничивает угол γ на отрезке, что позволяет сгенерировать случайную решётку по заданным параметрам, принятым в кристаллографии.

Разработанный метод позволяет генерировать трёхмерное множество узлов, представляющее собой решётку Браве [4]. На практике метод полезно применять для

исследования большого набора кристаллических решёток. Набор генерируется автоматически, и выявляются решётки, с которыми алгоритм работает некачественно.

Алгоритмы реконструкции множества узлов кристаллической решётки. Алгоритм обратного проецирования – процесс, обратный алгоритму проецирования трёхмерного изображения на плоскости. Алгоритм реконструкции в качестве входных данных получает изображения проекций и их положение в пространстве. Результатом работы алгоритма является некоторое трёхмерное изображение, представляющее собой набор точек в пространстве или, выражаясь математически, конечное множество точек трёхмерного пространства [6].

Основная задача алгоритмов реконструкции – восстановить изображение, аппроксимирующее «суммарное изображение».

Восстановленное множество представляет собой некоторое распределение вероятностей. С учетом этого множество может быть подвержено фильтрации, чтобы получить конечную оценку исходного множества. В работе был применён фильтр, основанный на алгоритме кластеризации, выделяющим «облака» точек.

Первый алгоритм обратного проецирования, основанный на сеточном разбиении прямой, основывается на разбиении каждой прямой, восстанавливаемой из ненулевой точки заранее выбранной проекции. Узлы сетки проецируются на остальные проекции, и считается количество проекций, в которые попадает узел [6].

Алгоритм обладает рядом недостатков. Дискретизация прямой приводит к неточности алгоритма, а уменьшение шага дискретизации влияет на скорость работы алгоритма.

Второй алгоритм устраняет указанные недостатки. Построение алгоритма основывается на решении задачи минимизации расстояния от точки ненулевой интенсивности некоторой проекции до прямой, проецируемой на плоскость этой проекции из прямой, восстанавливаемой из ненулевой точки некоторой опорной проекции [6].

Алгоритм работает с точками ненулевой интенсивности, что позволяет повысить скорость восстановления кристаллической решётки. За счёт аналитического вычисления восстанавливаемых точек алгоритм обладает большей точностью, чем первый.

Метрики сравнения множеств пространственных точек. Среди метрик сравнения множеств известна метрика, называемая расстоянием Хаусдорфа или метрикой Хаусдорфа [7]. Пусть E и F – непустые компактные подмножества R^n . Расстояние Хаусдорфа между E и F будет определяться по формуле (2):

$$H(E, F) = \max \{d(E, F), d(F, E)\}, \quad (2)$$

где $d(E, F) = \sup_{x \in X} \inf_{y \in Y} d(x, y)$.

Для того, чтобы вычислить метрику Хаусдорфа для конечных множеств, достаточно произвести вычисления по формуле (3).

$$H(E, F) = \max \{\bar{d}(E, F), \bar{d}(F, E)\}, \quad (3)$$

где $\bar{d}(E, F) = \max_{i: x_i \in E} \min_{j: y_j \in F} d(x_i, y_j)$.

Помимо метрики Хаусдорфа была проанализирована метрика, основанная на кватернионных сигналах [8]. Метрика основывается на поиске коэффициентов полиномов, представляющих собой полиномиальные отображающие функции гиперкомплексного переменного.

Коэффициенты полинома a_m могут быть найдены с помощью метода наименьших квадратов. Решая задачу минимизации общей погрешности аппроксимации, получаем систему линейных кватернионных уравнений, которая решается непосредственно

методом Гаусса или сводится к решению системы уравнений с действительными коэффициентами [8].

В качестве величины, характеризующей меру схожести объектов, может выступать результат скалярного произведения коэффициентов проецирующего полинома эталонного и обрабатываемого объектов, определяемого по формуле (4).

$$\eta = \sum_{m=0}^{M-1} a_m a_m^{*(\vartheta)}. \quad (4)$$

Исследование алгоритмов реконструкции. Для проведения эксперимента множество проецируется на плоскости проекций, затем выполняется алгоритм реконструкции. Результирующее множество сравнивается с эталонным при помощи метрики сравнения. По результатам эксперимента можно делать выводы о качестве работы алгоритма.

Результатом алгоритма обратного проецирования определим «псевдо-изображение». Каждый узел восстановленной решётки имеет псевдоцвет, то есть цвет, соответствующий количеству проекций, в которые узел может быть спроецирован [6].

На рисунке 1 приведены результаты реконструкции первым и вторым алгоритмами на примере триклинной решётки. Синий цвет соответствует узлу, который попадает в две проекции из трёх, а красный – во все три проекции. Результат, восстановленный при помощи первого алгоритма, содержит ошибки, связанные с разбиением прямой. Второй алгоритм качественнее восстанавливает узлы решётки.

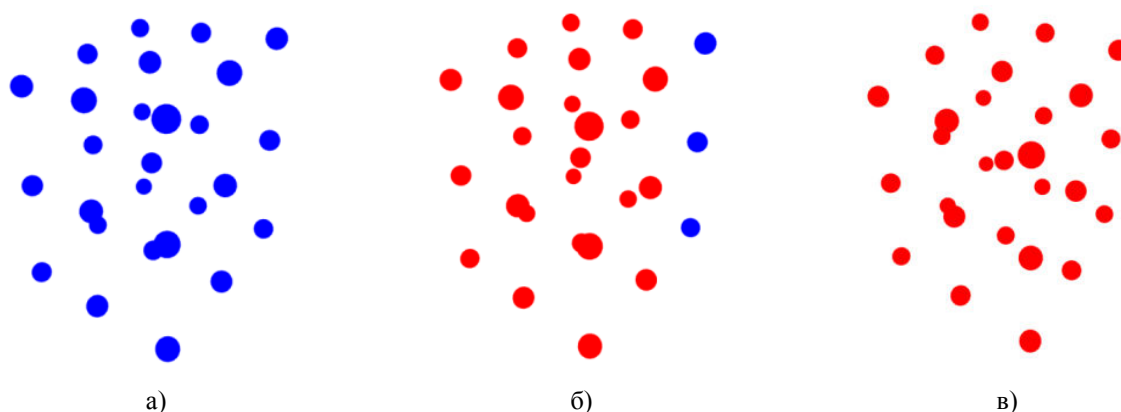


Рисунок 1 – Сравнение работы алгоритмов реконструкции: а) эталонное изображение; б) восстановленное изображение посредством алгоритма, основанного на сеточном разбиении; в) восстановленное изображение посредством алгоритма, основанного на минимизации расстояния

Используемый фильтр, основанный на алгоритме кластеризации, хорошо работает на примерах решёток, в которых обнаруживаются частые скопления (облака) узлов. На рисунке 2 представлен результат работы алгоритма кластеризации на примере триклинной решетки.

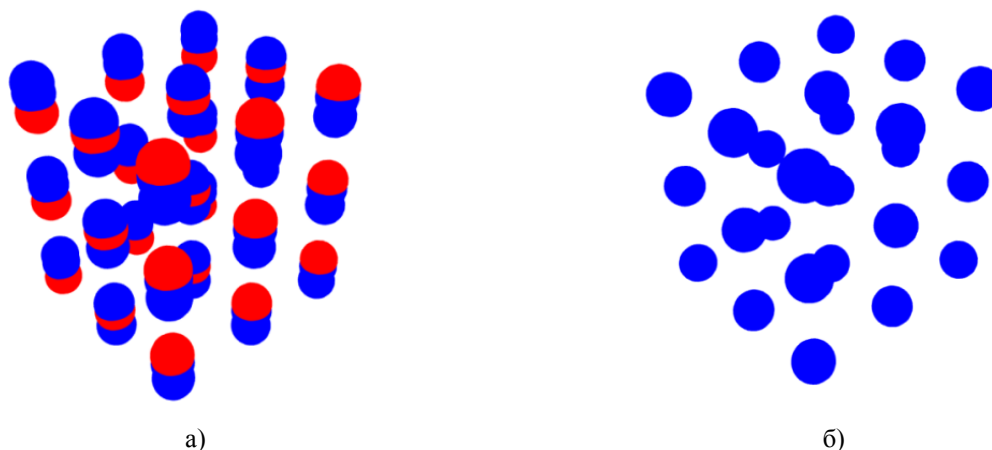


Рисунок 2 – Результат обработки изображения посредством фильтра, основанного на алгоритме кластеризации: а) восстановленное изображение алгоритмом реконструкции; б) обработанное изображение

Анализ двух первых алгоритмов на всех сингониях решёток с использованием обеих метрик, рассмотренных в данной работе, представлен в виде количественных результатов восстановления структуры узлов решётки каждым алгоритмом (Таблица 1).

Таблица 1. Исследование алгоритмов реконструкции

Сингония примитивной решетки	Метрика Хаусдорфа		Метрика кватернионных сигналов	
	Алгоритм, основанный на сеточном разбиении	Алгоритм, основанный на поиске минимального расстояния	Алгоритм, основанный на сеточном разбиении	Алгоритм, основанный на поиске минимального расстояния
Кубическая	0,100	0,000	0,0007	0,0000
Тетрагональная	0,100	0,000	0,0008	0,0000
Гексагональная	1,001	1,001	0,0008	0,0003
Тригональная	0,480	0,480	0,0007	0,0002
Ромбическая	0,100	0,000	0,0010	0,0001
Моноклинная	1,870	0,751	0,0007	0,0003
Триклинная	0,110	0,107	0,0005	0,0002

Сравнивая результаты первого и второго столбцов с метрикой Хаусдорфа, третьего и четвертого столбцов с метрикой кватернионных сигналов таблицы 1, можем убедиться, что второй алгоритм восстанавливает изображение точнее, нежели первый. Обе метрики в целом показывают меньшее значение для случая второго алгоритма. Это значит, что восстановленное изображение в случае второго алгоритма более схоже с эталонным.

Результаты исследований. В результате проведенных исследований было показано, что алгоритм, основанный на минимизации расстояния, реконструирует структуру решётки точнее, чем алгоритм, основанный на сеточном разбиении прямой. Алгоритмы реконструкции могут применяться для восстановления трёхмерных моделей кристаллических решеток. Модификации процедур восстановления в ряде случаев позволяют увеличить точность реконструкции объекта. Кристаллическая решетка, являясь, по сути, множеством узлов, хорошо сочетается с алгоритмами, работающими с множеством точек, а не с сетками прямых.

Литература

1. Rad L.B., Feng H., Ye J., Pease R.F.W. Computational scanning electron microscopy // Proceedings of the 2013 international conference on frontiers of characterization and metrology for nanoelectronics, Gaithersburg. – 2007, P. 512 – 517.
2. Frank J. Electron tomography. – 2nd ed. – Albany: Springer Science+Business Media, 2006, 455 p.
3. Куприянов. А.В., Сойфер В.А. О наблюдаемости кристаллических решеток по изображениям их проекций // Компьютерная оптика. – 2012, Т. 36, № 2, С. 249 – 256.
4. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. – М.: КДУ, 2005, 592 с.
5. Куприянов А.В., Кирш Д.В. Оценка меры схожести кристаллических решеток по координатам их узлов в трехмерном пространстве // Компьютерная оптика. – 2012, Т. 36, № 4, С. 590 – 595.
6. Широкаев А.С., Куприянов А.В. Разработка алгоритмов трехмерной реконструкции кристаллической решетки по изображениям проекций // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2015), труды Международной научно-технической конференции. – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2015, Т. 2, С. 334 – 337.
7. Кроновер Р.М. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. – М.: Постмаркет, 2000, С. 92 – 94.
8. Рожнецв А.А., Баев А.А., Наумов А.С. Оценка параметров и распознавание изображений трехмерных объектов с неупорядоченными отсчетами // Автометрия. – Йошкар-Ола, 2010, Т. 2, № 1, С. 57 – 69.