

Разработка векторного алгоритма параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток на основе оценки расстояний между двумерными слоями

А.С. Широканев^а, Д.В. Кириш^{а,б}, А.В. Куприянов^{а,б}

^а Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Московское шоссе, 34, Самара, Россия

^б Институт систем обработки изображений РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 443001, ул. Молодогвардейская, 151, Самара, Россия

Аннотация

Параметрическая идентификация является важной задачей исследования структур трёхмерных кристаллических решёток. Применение градиентного метода с постоянным шагом для решения данной задачи позволило добиться существенного роста точности идентификации. Однако вычислительная сложность применённого алгоритма значительно превышает вычислительную сложность существующих алгоритмов параметрической идентификации, что привело к существенному росту времени выполнения. Для преодоления указанного недостатка в настоящей работе предлагается векторный алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток, реализованный с применением технологии CUDA.

Ключевые слова: решётки Браве; градиентный метод; параметрическая идентификация; параллельный алгоритм; CUDA

1. Введение

В настоящее время задача реконструкции трёхмерных объектов является актуальной, что подтверждается большим количеством публикаций на данную тему [1-4]. Отдельное внимание уделяется задаче трёхмерной реконструкции кристаллических решёток [5-8]. Среди существующих методов оценивания параметров трёхмерной кристаллической решётки можно выделить следующие методы: компаратор национального института [5], идентификация на основе оценивания плотности упаковки решётки [6], метод сравнения изоповерхностей [7]. Для исследования трёхмерной структуры кристаллических решёток удобно применять методы параметрической идентификации [9-16]. Существующие алгоритмы параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток представлены в работах [9-14].

Структуру кристаллической решётки удобно описывать с использованием модели решётки Браве, то есть тремя векторами \vec{p}_1 , \vec{p}_2 и \vec{p}_3 , трансляцией которых можно образовать любой узел трёхмерной решётки [17]. Существует алгоритм параметрической идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве [12], который является наиболее простым по сравнению с алгоритмами, основанными на других моделях решёток, например на основе модели ячейки Вигнера-Зейтца [9-11]. К сожалению, соответствующая задача параметрической идентификации не является корректно поставленной по Адамару, так как решение может быть не единственным – это следствие проблемы неоднозначности определения решётки Браве [17].

Важной характеристикой алгоритмов параметрической идентификации является точность идентификации, которая может быть увеличена различными модификациями известных алгоритмов. В работе [16] представлен алгоритм параметрической идентификации, который позволяет улучшить точность параметрической идентификации по сравнению с алгоритмами, представленными в работах [9-12]. Недостатком разработанного алгоритма является высокая вычислительная сложность и, как следствие, долгое время проведения идентификации. Поэтому цель настоящей работы заключается в разработке векторного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток, который позволит существенно сократить время проведения идентификации по сравнению с последовательным алгоритмом.

2. Существующий метод идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве

Метод идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве заключается в вычислении шести основных параметров элементарной ячейки Браве – длин трёх сторон и величин трёх углов между сторонами [12].

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.

3. Алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода с постоянным шагом

В работах [15,16] обсуждалась идея перехода от базиса векторов трансляции к базису векторов, обеспечивающих разбиение общей задачи оптимизации на три независимые задачи, обладающие меньшими степенями свободы [16]. Данное разбиение осуществляется благодаря свойству, которое заключается в том, что периодически повторяющиеся плоскости могут проходить через все узлы трёхмерной структуры решётки (рис. 1).

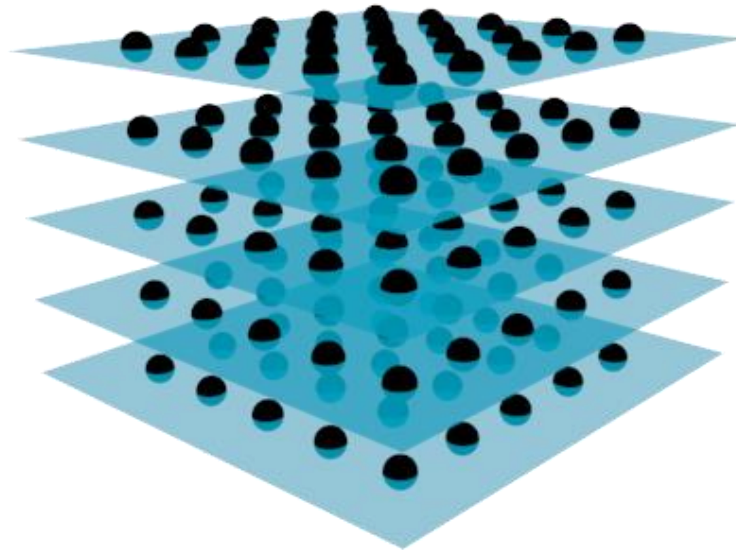


Рис. 1. Периодически повторяющиеся плоскости, проходящие через узлы решётки.

Периодически повторяющиеся плоскости описываются вектором \vec{d} , направление которого совпадает с нормалью к плоскостям, а норма является расстоянием между плоскостями. Для задачи оптимизации вектора \vec{d} [16] целевая функция принимает вид (1).

$$E(\vec{d}) = \sum_{i=1}^L \left[(\vec{x}_i, \vec{d}) - i \|\vec{d}\|^2 \right]^2, \quad (1)$$

где $i_l = \arg \min_i \left[(\vec{x}_i, \vec{d}) - i \|\vec{d}\|^2 \right]$;

\vec{x}_l – l -й узел трёхмерной решётки.

Для целевой функции (1) градиент находится из выражения (2).

$$\nabla E = 2 \sum_{i=1}^L \left((\vec{x}_i, \vec{d}) - i_l (\vec{d}, \vec{d}) \right) [\vec{x}_i - 2i_l \vec{d}]. \quad (2)$$

В настоящей работе рассматривается градиентный метод с постоянным шагом, то есть итерационный процесс, представляющий собой:

$$\vec{d}^{k+1} = \vec{d}^k - \lambda \nabla E(\vec{d}^k). \quad (3)$$

Для перехода от базиса векторов трансляции $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ к базису векторов $\vec{d}_1, \vec{d}_2, \vec{d}_3$ используются следующие преобразования: переход от базиса векторов трансляции к базису независимых векторов осуществляется посредством СЛАУ (4); обратный переход осуществляется через выражения (5).

$$D \vec{p}_i = \|\vec{d}_i\|^2 \vec{e}_i, i = \overline{1,3}, \quad (4)$$

где $D = (\vec{d}_1, \vec{d}_2, \vec{d}_3)^T$,

$$\vec{d}_i = [\vec{p}_k \times \vec{p}_l] \cdot \left\{ \frac{([\vec{p}_k \times \vec{p}_l], \vec{p}_i)}{\|[\vec{p}_k \times \vec{p}_l]\|^2} \right\}, k \neq l \neq i = \overline{1,3}. \quad (5)$$

Используемое описание трёхмерной кристаллической структуры, то есть представление узлов решётки как пересечение периодически повторяющихся плоскостей, напоминает обратную решётку. Связь между векторами предложенного базиса и векторами обратной решётки $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ задаётся в виде: $\vec{b}_i = (2\pi/d) \vec{d}_i, i = \overline{1,3}$.

Следствием проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве является наличие нескольких глобальных минимумов. Искажение структуры решётки может привести к появлению новых локальных минимумов, что ещё больше затрудняет применение градиентных методов. Для детального анализа разработанного алгоритма проведено исследование зависимости ошибки решения от величины искажения. Искажённая решётка формируется путём искажения каждого узла трёхмерной структуры: $\tilde{x} = \bar{x} + \delta\bar{x}$, где $\delta\bar{x}$ - случайный вектор, каждая компонента которого является случайной величиной с равномерным законом распределения $\square[-\delta; \delta]$, δ - величина шума.

Ошибка решения выражается как отклонение полученного решения от исходного множества узлов. Отклонение одного узла решётки от его идеального положения, определяемого векторами трансляции $\bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3$, выражается в виде (6). Тогда отклонение множества узлов от модели решётки Браве выражается суммой таких расстояний (7).

$$d(\bar{x}, \bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3) = \min_{i,j,k} \|\bar{x} - (i\bar{p}_1 + j\bar{p}_2 + k\bar{p}_3)\|; \quad (6)$$

$$\varepsilon = \sum_{l=1}^L d(\bar{x}_l, \bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3) = \sum_{l=1}^L \min_{i,j,k} \|\bar{x}_l - (i\bar{p}_1 + j\bar{p}_2 + k\bar{p}_3)\|. \quad (7)$$

На рисунке 2 представлена зависимость ошибки (7) от величины искажения. Нестабильное поведение алгоритма наблюдается, начиная с величины искажения 0,1 Å.

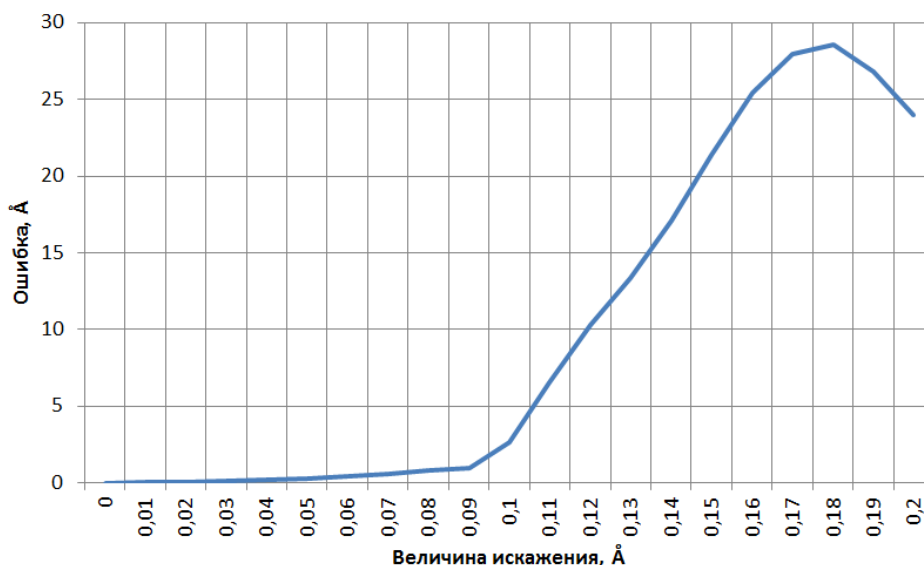


Рис. 2. Зависимость ошибки от величины искажения.

4. Векторный алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток

Применение градиентного метода с постоянным шагом исключает необходимость вычисления на каждой итерации коэффициента спуска λ . Данное упрощение позволяет вычислять элементы сумм в формулах (1) и (2) независимо. В таком случае для зафиксированного узла \bar{x}_i каждая задача векторного алгоритма представляет собой последовательность следующих действий:

$$i_l = \arg \min_i \left[(\bar{x}_i, \bar{d}) - i \|\bar{d}\|^2 \right];$$

$$w_l = (\bar{x}_i, \bar{d}) - i_l (\bar{d}, \bar{d});$$

$$\bar{c}_l = [\bar{x}_i - 2i_l \bar{d}];$$

$$\bar{u}_l = \begin{pmatrix} w_l \bar{c}_l \\ w_l^2 \end{pmatrix}.$$

Каждая задача оценивает положение только одного узла решётки. То есть количество задач совпадает с количеством узлов трёхмерной решётки. После выполнения всех задач необходимо выполнить редукцию результатов, то есть вычислить сумму векторов \bar{u}_l по формулам (8) и (9), чтобы окончательно сформировать результаты целевой функции и градиента.

$$\nabla E = 2 \sum_{l=1}^L w_l \bar{c}_l; \quad (8)$$

$$E = \sum_{l=1}^L w_l^2. \quad (9)$$

Редукция на GPU реализуется по схеме «Разделяй и властвуй» с устранением конфликтов по банкам [18] (рис. 3).

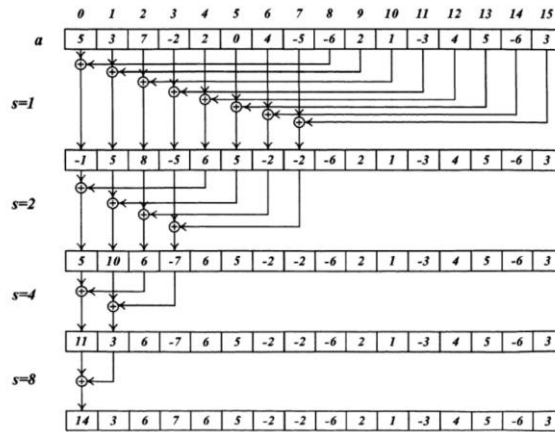


Рис. 3. Распределение данных по нитям для операции редукции.

Основная реализация параллельного алгоритма на GPU предполагает использование глобальной памяти для проведения операции редукции на самой видеокарте и проверки критериев останова.

Помимо реализации CUDA-алгоритма с глобальной памятью был реализован алгоритм, комбинирующий использование CPU и GPU. Функция, выполняемая на GPU, вычисляет локальные суммы для каждого CUDA-блока. Суммирование оставшихся элементов и проверку критериев останова производит CPU. Таким образом, CPU многократно вызывает функцию на GPU, пока не выполняются критерии останова.

5. Исследование ускорения разработанного векторного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток

В разработанном векторном алгоритме декомпозиция по данным осуществляется как разбиение задачи поиска градиента и целевой функции на задачи вычисления элементов суммы для каждого узла. Таким образом, важно провести исследование зависимости ускорения от размерности задачи. Под размерностью задачи будем понимать количество узлов по одной из осей трёхмерной решётки. В результате, общее количество задач векторного алгоритма будет определяться как размерность задачи, возведённая в куб. Эксперименты проводились на видеокарте GeForce NVidia M840 и процессоре Intel Core i7-4710MQ. Результаты исследования приведены на рисунке 4.

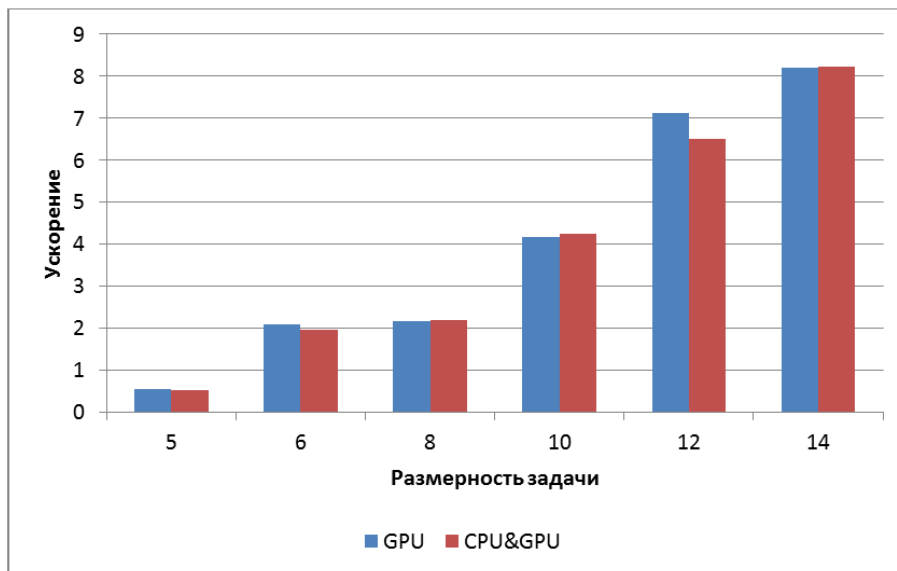


Рис. 4. Зависимость ускорения разработанного векторного алгоритма от размерности задачи.

Для использованных моделей процессора и видеокарты теоретически возможно достижение десятикратного ускорения GPU относительно CPU. Как видно из представленной диаграммы ускорение разработанных алгоритмов доходит, фактически, до 8,2 при высоких размерностях задачи. Вместе с тем, алгоритмы оказываются непригодными при размерностях меньших 6, что соответствует 216 узлам решётки. Следовательно, при количестве узлов меньше 200 целесообразнее использовать обычный последовательный алгоритм.

6. Заключение

Алгоритм параметрической идентификации, основанный на решении задачи оптимизации градиентным методом с постоянным шагом, позволяет достичь существенно более высокой точности по сравнению с существующими

аналогами. Проведённые исследования показали, что алгоритм устойчив к искажению решётки до тех пор, пока величина искажения не превышает $0,1 \text{ \AA}$.

Разработанный векторный алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода с постоянным шагом с применением технологии CUDA продемонстрировал ускорение, близкое к теоретически достижимому для использованных аппаратных средств. Результаты показали, что при большом количестве узлов решётки можно достичь восьмикратного ускорения при теоретическом десятикратном. С другой стороны, при количестве узлов меньше 200 разработанный векторный алгоритм существенно проигрывает последовательному аналогу, следовательно, его использование для данного случая представляется нецелесообразным.

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 № 15-29-03823, № 15-29-07077, № 16-41-630761; № 16-29-11698; программы № 6 фундаментальных исследований ОНИТ РАН «Биоинформатика, современные информационные технологии и математические методы в медицине» 2017 г.

Литература

- [1] Фурсов, В.А. Информационная технология реконструкции цифровой модели местности по стереоизображениям / В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2014. – 38(2). – С. 335-342.
- [2] Котов, А.П. Технология оперативной реконструкции трёхмерных сцен по разноразмерным изображениям / А.П. Котов, В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2015. – 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. – 39(3). – С. 413-415.
- [4] Ильясова, Н.Ю. Оценивание геометрических признаков пространственной структуры кровеносных сосудов / Ильясова Н.Ю. // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38 № 3. – С. 529-538.
- [5] Kessler, E., Henins A., Deslattes R, Nielsen L, Arif M. Precision Comparison of the Lattice Parameters of Silicon Monocrystals. 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, Skala V. Centered cubic lattice method comparison. 17th ALGORITMY Conference on Scientific Computing, 2005. – P. 309–319.
- [8] Shirokanev, A.S., Kirsh D.V., Kupriyanov A.V. Researching methods of reconstruction of three-dimensional crystal lattice from images of projections. CEUR Workshop Proceedings, 2015; 1490. – P. 290-297.
- [9] Kupriyanov, A.V., Kirsh D.V. Estimation of the Crystal Lattice Similarity Measure by Three-Dimensional Coordinates of Lattice Nodes. Optical Memory & Neural Networks (Information Optics), 2015. – 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. Кириш // Компьютерная оптика. – 2012. – 36(4). – С. 590-595.
- [11] Kirsh, D.V., Kupriyanov A.V. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space. Pattern recognition and image analysis, 2015; 25(3): 456-460.
- [12] Kirsh, D.V., Kupriyanov A.V. Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters. CEUR Workshop Proceedings, 2015; 1452: 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. Кириш // Компьютерная оптика. – 2015. – 39(5). – С. 787-795.
- [14] Kirsh, D.V., Kupriyanov A.V. Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space. CEUR Workshop Proceedings, 2015; 1490: 162-170.
- [15] Shirokanev, A.S., Kirsh D.V., Kupriyanov A.V., Application of gradient steepest descent method to the problem of crystal lattice parametric identification. CEUR Workshop Proceedings, 2016; 1638: 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. – Учеб. пособие. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1984. – 376 с.
- [18] Борсков, А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2010. – 232 с.