УДК 004.932

АНАЛИЗ ИДЕНТИФИКАЦИИ ТРЁХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК ПРИ ПОМОЩИ МЕР СХОЖЕСТИ МНОЖЕСТВ

Широканев А. С., Кирш Д. В., Куприянов А. В.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет), г. Самара

Кристаллами называют твёрдые тела с упорядоченным внутренним строением на уровне атомов и молекул, обладающие трёхмерно-периодической пространственной атомной структурой и имеющие вследствие чего при определённых условиях образования форму многогранников [1].

Геометрически трёхмерная периодичность атомной структуры кристаллов может быть описана с помощью кристаллической решётки (или пространственной решётки). Кристаллическая решётка представляет собой набор точек в трёхмерном пространстве, называемых узлами. В реальных структурах кристаллов места узлов кристаллических решёток могут заниматься отдельными атомами, ионами или группами атомов и ионов [2].

В настоящее время существует ряд способов, позволяющих сравнивать кристаллические решётки друг с другом [3]. Все они основаны на выделении у обеих сравниваемых решёток ряда параметров и последующем их сопоставлении с помощью введённых мер схожести. Применительно к решёткам могут быть использованы методы идентификации двух объектов с неупорядоченными отсчётами, основанные на метриках множеств. Задача таких методов заключается в вычислении некоторой меры схожести двух множеств.

Методы идентификации множеств пространственных точек.

Метрика Хаусдорфа. Теоретически выводится из понятия дилатации множества, определяемого через окрестности точки в виде замкнутого или открытого шара. Для случая конечных множеств мера схожести принимает вид:

$$H(E,F) = \max\left\{\max_{i:x_i\in E}\min_{j:y_j\in F} d\left(x_i,y_j\right), \max_{j:y_j\in F}\min_{i:x_i\in E} d\left(x_i,y_j\right)\right\}.$$

Значение метрики схожести представляет собой Хаусдорфово расстояние между множествами.

Метрика, основанная на ортогональности кватернионных сигналов. Первичное изображение объекта аналитически может быть описано кватернионным сигналом Q, задающим пространственный контур изображения. Изображение можно спроецировать на сферу при помощи полиномиальных отображающих функций гиперкомплексного переменного вида:

$$\sum_{m=0}^{M-1} q_n^m a_m = p_n.$$

Коэффициенты находятся из системы линейных уравнений, получаемой в результате решения задачи минимизации ошибки проецирования изображения на сферу непосредственно методом Гаусса. Мера схожести в этом случае принимает вид:

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

При анализе кристаллических решёток мера схожести – неотъемлемое средство исследования реконструкции кристаллических решёток по проекциям. На практике важно, чтобы значение метрики было независимо от сдвига или поворота множества узлов.

В качестве эксперимента берётся пара множеств, представляющих собой примитивные кристаллические решётки, и сравниваемых между собой посредством меры схожести. В качестве эталонного можно брать множество, представляющее собой решётку с заранее известными параметрами.

Детальное исследование описанных мер схожести предполагает анализ зависимости их значения от величины искажения идеальной решётки. На практике эффект искажения проявляется довольно часто. На рисунке 1 представлена пара решёток, среди которых одна является идеальной, вторая – искажённой.

а *б*

Рис. 1. Моделирование пары множеств кристаллических решёток:
а – идеальная решётка; б – искаженная решётка

Исследование проводилось на большом наборе сгенерированных решёток. Одна из решёток была выбрана в качестве анализируемой и сравнивалась с остальными путём вычисления меры схожести. В результате определялось минимальное значение метрики, соответствующее наилучшему совпадению множеств узлов. Для метрики, основанной на ортогональности кватернионных сигналов, значение схожести рассчитывалось с дополнительной нормировкой скалярного произведения с целью получения более наглядных результатов, чем полученных без нормировки [4].

Проведённое исследование показало, что меры схожести двух множеств хорошо подходят для сравнения структур кристаллических решёток. Метрика, основанная на ортогональности кватернионных сигналов, лучше подходит для распознавания и идентификации решёток благодаря инвариантности к вращению и масштабированию, а также более высокой устойчивости к искажениям. Однако в метрике Хаусдорфа отсутствуют аппроксимации, из-за чего метрика является достаточно строгой.

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко, Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия [Текст] / Ю.К. Егоров-Тисменко. – М.: КДУ, 2005. 592 с.

2. Попов, Г.М. Кристаллография [Текст] / Г.М. Попов. – 5-е изд. – М.: Высшая школа, 1972. – 352 с.

3. Куприянов, А.В. Оценка меры схожести кристаллических решеток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве [Текст] / А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.

4. Широканев, А.С. Разработка алгоритмов трёхмерной реконструкции кристаллической решётки по изображениям проекций [Текст] / А.С. Широканев, А.В. Куприянов // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2015): труды Международной научно-технической конференции. – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2015. – Т. 2. – С. 334 – 337.