



2. Куприянов. А.В. О наблюдаемости кристаллических решеток по изображениям их проекций [Текст] / А.В. Куприянов, В.А. Соيفер // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 2. – С. 249-256.

3. P. Stadelmann Image Calculation Techniques, Lausanne, Switzerland, 1993. – P. 1-27.

4. Earl J. Kirckland Advanced computing in electron microscopy, Cornell University Ithaca, N.Y. 2006 P. 77-93, P. 115-198

А.С. Широканев, А.В. Куприянов

## РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ТРЁХМЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПО ИЗОБРАЖЕНИЯМ ПРОЕКЦИЙ

(Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика  
С.П. Королева (национальный исследовательский университет))

### Введение

Электронная микроскопия (ЭМ) даёт в различных модификациях линейное разрешение до десятой доли нанометра (ангстрем). При увеличении в миллионы раз в твёрдых материалах можно наблюдать текстуры различного рода, атомарную структуру кристаллической решётки, в биологических – молекулы, белок, бактерии. Для изучения свойств наноматериалов необходимо знать атомарную структуру, то есть определить типы атомов, являющихся строительными блоками, и их взаимное расположение в пространстве. 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

С точки зрения формирования изображений кристаллических наноструктур наибольший интерес представляет *просвечивающая электронная микроскопия* (ПЭМ, Transmission electron microscopy) (рис. 1).

ПЭМ является наиболее универсальным классическим методом исследования структурных дефектов кристаллов, используется непосредственно для описания трёхмерной структуры материала, анализа морфологических особенностей, для определения ориентации дефектов и их размеров [1].

Анализ кристаллических наноструктур осуществляется на основе обработки изображений проекций трёхмерной кристаллической решётки [2]. Задача реконструкции кристаллической решётки заключается в восстановлении трёхмерного изображения решётки, наблюдаемой в ПЭМ.

В настоящей работе рассматриваются алгоритмы обратного проецирования, позволяющие восстанавливать трёхмерную структуру кристаллической решётки по плоским изображениям ориентированным в пространстве.

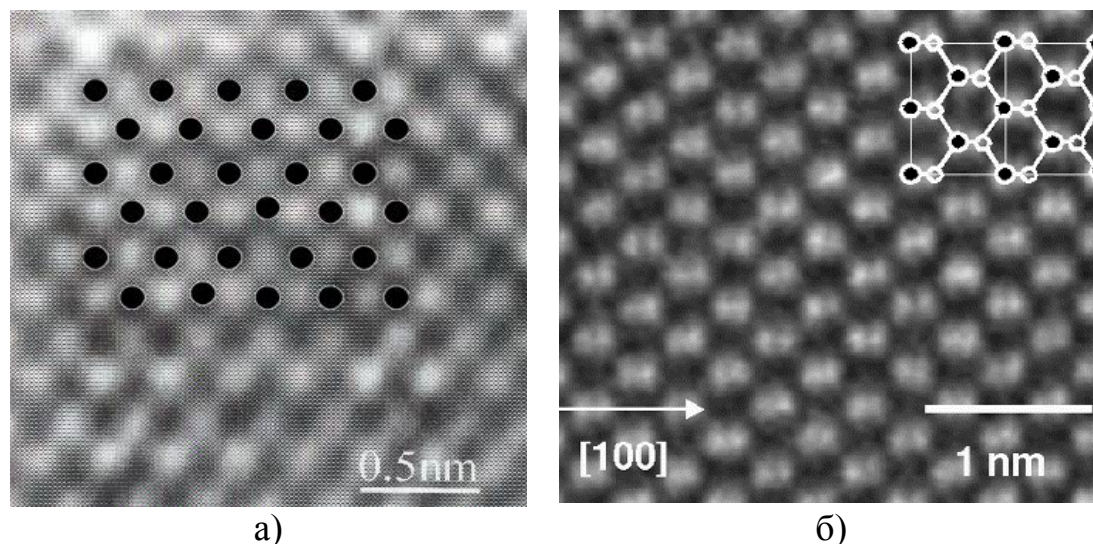


Рис. 1. Пример НМИ кристаллических решёток:  
а) родонита б) арсенида галлия

### 1 Моделирование идеальной кристаллической решётки

Алгоритм обратного проецирования – процесс, обратный алгоритму проецирования трехмерного изображения на плоскости. Для анализа и оценки его работоспособности необходимо иметь набор идеальных кристаллических решёток и их проекций. По степени схожести эталонной решётки и полученной в результате обратного проецирования можно оценивать качество работы алгоритма.

Исходными данными алгоритма обратного проецирования являются двумерные изображения, ориентированные в пространстве. Однако с учетом выбранной задачи в роли исходных данных должны быть параметры, описывающие модель кристаллической решётки. Такая модель может быть описана тремя векторами трансляции, представляющими элементарную ячейку Браве [1]. В кристаллографии для определения векторов трансляции используют длины векторов  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , и углы между векторами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . Дополнительно в качестве исходных параметров для моделирования кристаллической решётки определим количество узлов по каждой оси  $N_x$ ,  $N_y$ ,  $N_z$ .

Моделирование решётки заключается в расчёте тройки векторов трансляции [3]. Из геометрии элементарной ячейки углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  не могут принимать любые значения. Они находятся в установленных диапазонах:  $\alpha \in (0, \pi)$ ,  $\beta \in (0, \pi)$ ,  $\gamma \in \{\varphi : \cos \varphi \in (\cos(\alpha + \beta), \cos(\alpha - \beta))\} \cap (0, \pi)$ . На практике при использовании этой модели наиболее корректные кристаллические решетки получаются при выборе углов, которые от точной верхней или нижней границы своего диапазона отличаются не меньше, чем на один градус. Это дает право утверждать, что данная модель отлично подходит для генерации решеток.

### 2 Обратное проецирование кристаллической решётки

Результатом алгоритма обратного проецирования определим «псевдо-изображение». Каждый узел восстановленной решетки имеет псевдоцвет, то



есть цвет, соответствующий количеству проекций, в которые узел может быть спроецирован.

Рассмотрим первый алгоритм обратного проецирования.

1. Выбираем основную проекцию.
2. Для каждой ненулевой точки (т.е. точки принадлежащей узлу кристаллической решётки) на этой проекции:
  - Определяется прямая, перпендикулярная к проекции и проходящая через эту точку;
  - Вычисляется функцию  $u(\vec{x})$  – показывающую количество проекций, на которых проекция прямой пересекает узлы решётки
$$u(\vec{x}) = \left| \left\{ k : R_k(\varphi_k \vec{x}) > 0 \wedge k = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, n \right\} \right|, \vec{x} \in X$$

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

Второй алгоритм устраняет указанные недостатки. Суть его работы в следующем:

1. Выбираем основную проекцию.
2. Переводим все ненулевые двумерные точки каждой проекции в пространство
3. Для каждой точки из проекции, взятой за опору
  - Вычисляем значения  $t_i$ , участвующих в параметрическом задании прямой

для точек на остальных проекциях по формуле  $t_i = \frac{(\vec{n}_i, \vec{x}_0)(\vec{n}_i, \vec{n}_0) - (\vec{x}_0 - \vec{x}_i, \vec{n}_0)}{(\|\vec{n}_0\|^2 - (\vec{n}_i, \vec{n}_0)^2)}$

- Вычисляем точку, которая может быть восстановлена в пространстве  $\vec{x}' = \vec{n}_0 t + \vec{x}_0$
- Вычисляем расстояние  $d^2 = \|\vec{x}_i - \vec{x}'\|^2 - (\vec{n}_i, \vec{x}')^2$ , которое является минимальным расстоянием от точки на проекции до точки, которая может быть спроецирована на проекцию из всех возможных
- Если выполняется условие:  $d^2 < \varepsilon^2$ , то точка в пространстве восстанавливается
- При этом, если параметры  $t_i$  и  $t_{i+1}$  оказались с некоторой точностью равны, то, значит, восстанавливаемая точка уже была рассчитана ранее и попала еще в одну проекцию

Алгоритм работает с ненулевыми точками, что позволяет повысить точность и скорость восстановления кристаллической решётки.

Результат сравнения двух алгоритмов для восстановления триклинной кристаллической решётки приведён на рисунке 2. Алгоритм с дискретизацией прямой удалил некоторые узлы, когда второй алгоритм с наибольшей точностью восстановил трёхмерную структуру.

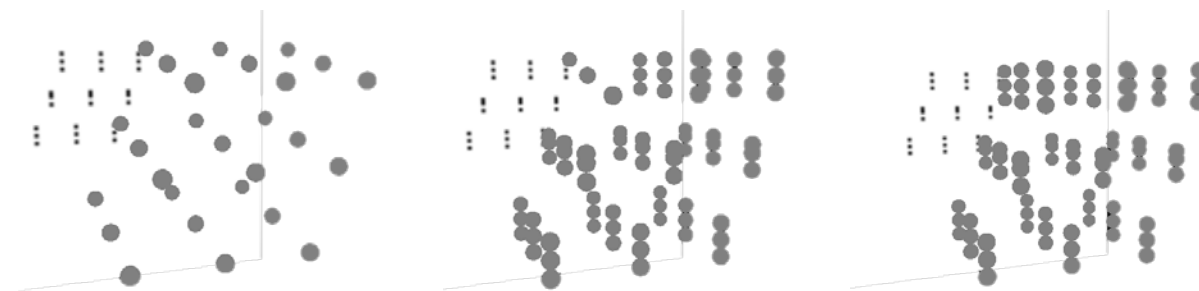


Рис. 2. Сравнение алгоритмов. а) эталонное изображение; б) алгоритм с дискретизацией прямой; в) алгоритм с выбором минимального расстояния

### Заключение

Алгоритмы обратного проецирования действительно могут применяться для реконструкции 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.

Таким образом, методы трёхмерной реконструкции кристаллических решеток по проекциям позволяют получать изображения решеток для их дальнейшего исследования. Качество алгоритма может определяться не только точностью и скоростью работы, но также и устойчивостью к шумам и случайным трансформациям эталонной кристаллической решетки.

### Литература

1. Кларк, Э. Р. Микроскопические методы исследования материалов / Э. Р. Кларк, К. Н. Эберхардт. – М.: Техносфера, 2007. – 367 с.
2. Куприянов, А.В. О наблюдаемости кристаллических решеток по изображениям их проекций [Текст] / А.В. Куприянов, В.А. Соيفер // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 2. – С. 249-256.
3. 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.

А. Г. Юдинцев

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХФАЗНОГО ИНВЕРТОРА С ВЕКТОРНОЙ ШИМ

(Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Научно-исследовательский институт Автоматики и электромеханики Томского  
государственного университета систем управления и радиоэлектроники)

В настоящее время, несмотря на развитый рынок готовых решений трёхфазных автономных преобразователей, изготавливаемых для питания оборудования электропривода переменного тока, а также для систем электропитания