

## ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АНАЛИЗ ДАННЫХ

### ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМА ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК С ПРИМЕНЕНИЕМ ГРАДИЕНТНОГО МЕТОДА НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА

А.С. Широкаев<sup>1</sup>, Д.В. Кириш<sup>1,2</sup>, А.В. Куприянов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени С.П. Королёва, Самара, Россия,

<sup>2</sup> Институт систем обработки изображений РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Самара, Россия

#### Аннотация

При анализе вещества с кристаллической наноструктурой наибольший интерес представляет задача параметрической идентификации кристаллических решёток. Однако существующие методы решения данной задачи, такие как метод оценивания параметров ячейки Браве и метод оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца, не обеспечивают требуемую точность. В настоящей статье предлагается алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода наискорейшего спуска для решения проблемы низкой точности идентификации. Исследование возможности структурной идентификации проводилось с использованием большого набора искажённых решёток. Полученные результаты показали существенный рост точности по сравнению с существующими методами параметрической идентификации.

**Ключевые слова:** параметрическая идентификация, элементарная ячейка, кристаллическая решётка, ячейка Браве, ячейка Вигнера–Зейтца, градиентный метод наискорейшего спуска.

**Цитирование:** Широкаев, А.С. Исследование алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток с применением градиентного метода наискорейшего спуска / А.С. Широкаев, Д.В. Кириш, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2017. – Т. 41, № 3. – С. 453-460. – DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-3-453-460.

#### Введение

Задачам реконструкции трёхмерных объектов на сегодняшний день уделяется большое внимание [1–4]. К таким задачам относится реконструкция трёхмерной модели кристаллической решётки. Одним из методов определения параметров трёхмерной модели решётки является рентгеноструктурный анализ [5, 6].

С появлением электронной микроскопии стало возможно наблюдать атомарную структуру вещества. Линейное разрешение электронного микроскопа достигает порядка  $0,1\text{Å}$  [7]. Данное достижение приводит к необходимости решения задачи вычисления параметров элементарной ячейки кристаллической решётки по изображениям, полученным с электронного микроскопа.

Определение параметров элементарной ячейки по наномасштабным изображениям, полученным с электронного микроскопа – сложный, многоступенчатый процесс: двумерные изображения предварительно обрабатываются; реконструируется трёхмерная структура узлов кристаллической решётки; решается задача параметрической идентификации, то есть оцениваются параметры элементарной ячейки по трёхмерному набору узлов. Несмотря на существование методов определения параметров ячейки без предварительной реконструкции узлов решётки [8], описанный подход является наиболее универсальным.

Элементарная ячейка в кристаллографии является фундаментальным понятием, которое определяется как минимальный воображаемый объём кристалла, параллельные переносы (трансляции) которого в трёх измерениях позволяют построить трёхмерную кристаллическую решётку в целом [9]. Элементарная

ячейка должна описываться конечным набором параметров и образовывать любую кристаллическую структуру.

Примером элементарной ячейки является ячейка Вигнера–Зейтца [9]. Данная ячейка представляет собой единичную область разбиения диаграммы Вороного, построенной по узлам кристаллической решётки (рис. 1). Так как структура узлов обладает пространственной симметрией, то все области разбиения конгруэнтны. Форма ячейки Вигнера–Зейтца очень сложная и не описывается небольшим числом параметров, которые были бы интуитивно понятны. Для описания такой формы требуется вводить сложные математические объекты. Пожалуй, сложность описания ячейки Вигнера–Зейтца является главным недостатком данной модели.

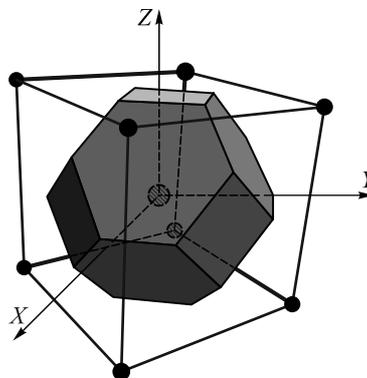


Рис. 1. Элементарная ячейка Вигнера–Зейтца

Широко известной моделью кристаллической решётки является модель, предложенная Огюстом Браве. Модель решётки Браве описывается элементарной

ячейкой Браве, транслируя которую, можно получить всю внутреннюю структуру решётки (рис. 2). По сравнению с ячейкой Вигнера–Зейтца элементарной ячейке Браве свойственна проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки. Проблема заключается в том, что для одной и той же структуры кристаллической решётки элементарную ячейку можно выбрать разными способами (рис. 3). Для решения данной проблемы в кристаллографии вводятся некоторые ограничения [9], обеспечивающие однозначный выбор элементарной ячейки Браве.

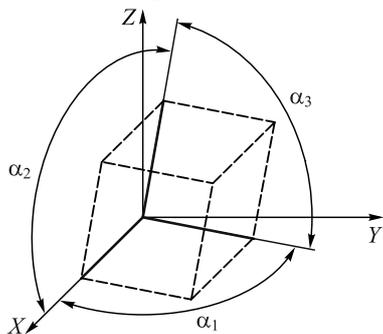


Рис. 2. Элементарная ячейка Браве

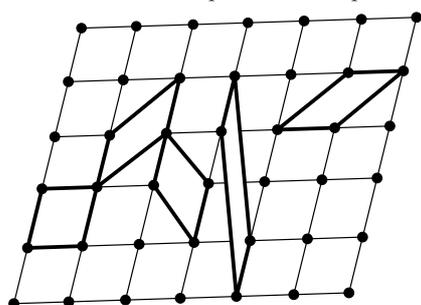


Рис. 3. Проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве

Все элементарные ячейки делятся на семь сингоний в соответствии с параметрами элементарной ячейки Браве (табл. 1). В табл. 2 представлены различные формы для ячейки Браве и ячейки Вигнера–Зейтца.

На практике невозможно получить натурное номасштабное изображение образца, полностью соответствующее идеальной кристаллической решётке. Так или иначе, в структуре естественной кристаллической решётки будут присутствовать искажения (рис. 4), вызванные погрешностями измерений и ошибками распознавания атомов на изображении кристаллической структуры. В таком случае требуется подобрать идеальную решётку, максимально точно соответствующую исходной структуре узлов, то есть решить задачу параметрической идентификации кристаллических решёток.

Среди существующих методов, позволяющих получить решение задачи параметрической идентификации с высокой точностью, выделяются метод идентификации решёток, основанный на оценивании параметров элементарной ячейки Браве [10, 11], и метод идентификации решёток, основанный на оценивании объёма ячейки Вигнера–Зейтца [12].

Табл. 1. Сингонии примитивных решёток

Символ	Сингония кристаллической решётки	Стороны	Углы
aP	Триклинная	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
mP	Моноклинная	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$
oP	Ромбическая	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tP	Тетрагональная	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
cP	Кубическая	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
hR	Тригональная	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
hP	Гексагональная	$a = b = c$	$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

Табл. 2. Формы элементарных ячеек семи сингоний кристаллических решёток

Символ	Ячейка Браве	Ячейка Вигнера–Зейтца
aP		
mP		
oP		
tP		
cP		
hR		
hP		

Помимо задачи определения параметров элементарной ячейки, немаловажной задачей является сравнение двух кристаллических решёток [5, 13–18]. Среди основных методов определения схожести кристаллических решёток выделяются следующие: компаратор НИСТ [19], методы параметрической иден-

тификации, основанные на оценивании плотности упаковки атомов внутри элементарной ячейки [20], и метод оценивания расстояний между изоповерхностями [21]. Основной проблемой приведённых методов является высокая погрешность.

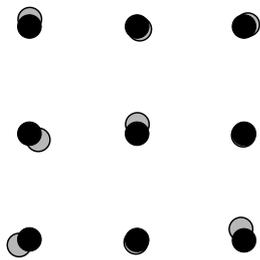


Рис. 4. Идеальная (чёрный цвет) и искажённая (серый цвет) кристаллические решётки

Для уменьшения погрешности сравнения двух кристаллических решёток оцениваются параметры соответствующих элементарных ячеек, а затем вычисляется некоторая мера схожести по вычисленным параметрам. Две решётки считаются схожими, если значение схожести превышает порог достоверности.

В работе предложен алгоритм параметрической идентификации на основе градиентного метода наискорейшего спуска [22], ориентированный на повышение точности идентификации кристаллических решёток. Результатом работы алгоритма являются параметры элементарной ячейки Браве.

**1. Алгоритм параметрической идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве**

Известной моделью примитивной кристаллической решётки является модель решётки Браве, описываемая тремя векторами трансляции  $\bar{p}_1, \bar{p}_2$  и  $\bar{p}_3$  [9]. В работе [10] был предложен метод идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве. Метод предполагает вычисление шести основных параметров элементарной ячейки Браве – длин трёх сторон и величин трёх углов между сторонами [10].

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 по принципу поиска ближайших к центру системы векторов, удовлетворяющих следующим условиям: второй вектор не должен лежать на прямой, направляющим вектором которой является первый найденный вектор; третий вектор не должен лежать в плоскости, образованной из первых двух найденных векторов.

Общий алгоритм предполагает выделение множества элементарных ячеек Браве, входящих в состав решётки; вычисление параметров каждой ячейки; усреднение полученных параметров.

Схожесть параметров элементарных ячеек определяется двумя мерами: мерой схожести сторон и мерой схожести углов:

$$\|\bar{l}_1 - \bar{l}_2\| = 1 - |\bar{l}_1 - \bar{l}_2| / \max\{|\bar{l}_1|, |\bar{l}_2|\} \tag{1}$$

$$\|\bar{\alpha}_1 - \bar{\alpha}_2\| = 1 - \max \left\{ \begin{array}{l} \sin(|\alpha_{11} - \alpha_{21}|) \\ \sin(|\alpha_{12} - \alpha_{22}|) \\ \sin(|\alpha_{13} - \alpha_{23}|) \end{array} \right\} \tag{2}$$

**2. Алгоритм параметрической идентификации на основе оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца**

Метод основан на вычислении объёма ячейки Вигнера–Зейтца [11]. Для нахождения объёма необходимо построить ограничивающую ячейку плоскокарло – случайного вбрасывания большого числа точек в область решётки и определения количества точек, попавших внутрь ограниченной области.

Исходными данными для метода идентификации на основе оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца являются количество вбрасываемых точек  $L$  и множество радиус-векторов узлов кристаллической решётки.

Базовый метод идентификации предполагает вычисление объёма ячейки Вигнера–Зейтца построением плоскостей вида  $p_{k1}x + p_{k2}y + p_{k3}z - |\bar{p}_k|^2 = 0, 1 \leq k \leq N-1$ ; проведение  $L$  испытаний, в результате которых образуются  $L$  точек; подсчёт количества точек, попавших внутрь ячейки Вигнера–Зейтца; вычисление объёма по формуле  $V \approx (2p_m)^3(I/L)$ , где  $I$  – количество точек, попавших внутрь элементарной ячейки Вигнера–Зейтца;  $p_m$  – граница области случайного вбрасывания точек.

Алгоритм общего метода идентификации состоит из выделения множества ячеек Вигнера–Зейтца, входящих в состав решётки, и вычисления их объёмов. Итоговая величина объёма ячейки Вигнера–Зейтца для всей решётки в целом определяется в ходе анализа полученного множества объёмов.

Мерой схожести двух решёток является величина  $\|V_1 - V_2\| = 1 - |V_1 - V_2| / \max\{V_1, V_2\}$ .

Несмотря на то, что объём ячейки Вигнера–Зейтца не обеспечивает достаточной информативности для разделения сингоний решёток, его оценивание может быть эффективно использовано на начальном этапе структурной идентификации для исключения заведомо несхожих решёток [9 – 11].

**3. Алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода наискорейшего спуска**

Структура узлов модели идеальной примитивной кристаллической решётки Браве представляется через векторы трансляции в виде:

$$X = \{\bar{x} = i\bar{p}_1 + j\bar{p}_2 + k\bar{p}_3, (i, j, k) \in \mathbb{Z}^3\} \tag{3}$$

Задача параметрической идентификации кристаллических решёток заключается в поиске векторов трансляции  $\bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3$  [22, 23] для заданного искажённого множества  $\tilde{X}$ , соответствующего множеству

ву (3). Множество  $\tilde{X}$  содержит конечное число искажённых векторов и описывается в виде:

$$\tilde{X} = \{\tilde{x}_i\}_{i=1, \dots, L}. \tag{4}$$

Для достижения высокой точности предлагается решать задачу минимизации ошибки вычисляемого решения.

При заданном конечном множестве точек (4) целевая функция выражается в виде:

$$E = \sum_{i=1}^L \min_{j,k} \|\tilde{x}_i - (i\bar{p}_1 + j\bar{p}_2 + k\bar{p}_3)\|^2. \tag{5}$$

Будем использовать обозначения  $\bar{n}_i = (i \ j \ k)^T$  и  $P = (\bar{p}_1 \ \bar{p}_2 \ \bar{p}_3)$  для сокращённой записи основных формул. С учётом введённых обозначений для целевой функции (5) градиент принимает вид:

$$\nabla E(P) = 2 \left[ \sum_{i=1}^L (P\bar{n}_i - \tilde{x}_i) \bar{n}_i^T \right]. \tag{6}$$

Коэффициент наискорейшего спуска для градиента (6) и целевой функции (5) принимает вид:

$$\lambda = \sum_{i=1}^L (\bar{w}_i \nabla E(P) \bar{n}_i) / 2 \sum_{i=1}^L \|\nabla E(P) \bar{n}_i\|^2, \tag{7}$$

где  $\bar{w}_i = P\bar{n}_i - \tilde{x}_i$ .

Итерационный процесс выражается через формулы (6) и (7) и представляет собой форму:

$$P^{n+1} = P^n - \lambda \nabla E(P^n).$$

Следует отметить, что вследствие проблемы неоднозначного выбора элементарной ячейки Браве поставленная задача оптимизации в случае идеальной структуры узлов имеет множество глобальных минимумов, соответствующих разным элементарным ячейкам Браве. Искажение кристаллической структуры приводит к наличию локальных минимумов, что усложняет решение данной задачи (рис. 5). Однако в отличие от общего метода оценивания параметров ячейки Браве предлагаемый алгоритм представляет собой итерационный процесс, критерием остановки которого является наперёд заданная величина ошибки.

Как и в случае с методом оценивания параметров ячейки Браве, данный алгоритм также предполагает вычисление степени схожести двух решёток при помощи мер (1) и (2).

#### 4. Результаты экспериментальных исследований

Исходными данными для проведения экспериментального исследования выступали 7000 смоделированных примитивных решёток – по 1000 решёток для каждой из семи систем, представленных в табл. 1.

Моделирование примитивных решёток осуществлялось по случайным параметрам элементарных ячеек Браве представленных классов с последующим искажением каждого узла трёхмерного множества узлов кристаллической решётки в соответствии с формулой:

$$X = \{\tilde{x}_i + \bar{\delta}\}_{i=1, \dots, L}, \tag{8}$$

где  $\bar{\delta}$  – непрерывный случайный вектор, имеющий равномерное распределение по сфере с радиусом  $\delta$ .

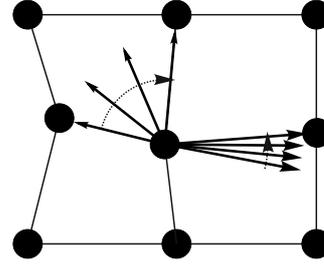


Рис. 5. Сходимость векторов трансляции к решению при использовании разработанного алгоритма

На первом этапе исследования вычислялись параметры решётки, соответствующие трём представленным алгоритмам: алгоритму оценивания параметров ячейки Браве; алгоритму оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца; разработанному алгоритму, основанному на градиентном методе наискорейшего спуска.

На втором этапе каждая решётка попарно сравнивалась со всеми остальными: две решётки считались похожими, если значение мер по сторонам и углам или меры по объёмам ячеек Вигнера–Зейтца были не меньше 0,95. Выбор данного порогового значения связан с тем, что в настоящее время ошибка определения параметров решётки составляет не менее 5 % [7].

Результаты исследования точности структурной идентификации кристаллических решёток алгоритмами оценивания параметров ячеек Браве и Вигнера–Зейтца представлены в табл. 3 и 4. Точность структурной идентификации определяется как процентное отношение количества исследуемых (строка) решёток, совпавших с эталонными (столбец), к общему количеству совпадений для исследуемого класса.

Табл. 3. Точность структурной идентификации решёток алгоритмом оценивания параметров ячейки Браве

	aP	mP	oP	tP	cP	hR	hP
aP	44	28	9	5	0	7	7
mP	21	34	21	13	0	2	9
oP	12	27	31	19	0	1	10
tP	7	21	23	29	3	4	13
cP	2	3	7	28	29	28	3
hR	14	5	2	6	7	44	23
hP	10	17	12	13	0	17	31

Табл. 4. Точность структурной идентификации решёток алгоритмом оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца

	aP	mP	oP	tP	cP	hR	hP
aP	72	14	4	3	0	4	3
mP	10	51	18	13	0	1	7
oP	4	22	46	20	1	0	7
tP	3	16	22	41	4	3	11
cP	0	1	4	25	39	30	1
hR	5	2	1	5	9	64	14
hP	3	12	10	13	1	12	49

Для кубических решёток точность определения достигает наименьшего значения для обоих алгорит-

мов, что объясняется затруднённой классификацией данного класса решёток. Наибольшая точность определения достигается триклинными и тригональными решётками.

В табл. 5 представлены результаты точности определения решёток при использовании разработанного алгоритма параметрической идентификации, основанного на градиентном методе наискорейшего спуска. По данным табл. 5 можно сделать вывод, что точность идентификации существенно повышается при использовании разработанного алгоритма. Максимальное увеличение точности наблюдается для гексагональных решёток: с 31 – 49 % до 95 %.

Табл. 5. Точность структурной идентификации решёток алгоритмом параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода наискорейшего спуска

	aP	mP	oP	tP	cP	hR	hP
aP	98	1	1	0	0	0	0
mP	1	92	3	3	0	0	1
oP	1	3	84	7	2	1	2
tP	0	5	11	68	8	7	1
cP	0	2	8	22	47	21	0
hR	0	1	1	2	2	94	0
hP	0	1	3	1	0	0	95

### Заключение

Разработанный алгоритм параметрической идентификации на основе градиентного метода наискорейшего спуска позволяет достичь высокой точности идентификации по сравнению с алгоритмами оценивания параметров элементарной ячейки Браве и объёма ячейки Вигнера–Зейтца. В результате проведения исследования выяснилось, что наихудшей точностью обладает кубическая сингония, что, в частности, является следствием проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве. Однако следует заметить, что разработанный алгоритм справился с идентификацией кубических решёток лучше, чем даже алгоритм на основе оценивания объёма ячейки Вигнера–Зейтца, которая однозначно определяется в заданной структуре узлов. Наилучшей точностью определения в результате решения задачи параметрической идентификации посредством каждого из рассматриваемых алгоритмов обладает триклинная решётка. Точность структурной идентификации разработанного алгоритма оказалась в 2, а в ряде случаев и в 3 раза выше, чем у существующих алгоритмов параметрической идентификации.

### 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; № 17-01-00972; 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. – Т. 38, № 2. – С. 335-342.
2. **Котов, А.П.** Технология оперативной реконструкции трёхмерных сцен по разноркурсным изображениям / А.П. Котов, В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 600-605. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-600-605.
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. 413-419. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-3-413-419.
4. **Бессмельцев, В.П.** Быстрый алгоритм совмещения изображений для контроля качества лазерной микрообработки / В.П. Бессмельцев, Е.Д. Булушев // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38, № 2. – С. 343-350.
5. **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 // Proceedings of Information Technology and Nanotechnology (ITNT-2015), CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 290-297. – DOI: 10.18287/1613-0073-2015-1490-290-297.
6. **Харитонов, С.И.** Дифференциальный метод расчёта дифракции рентгеновских лучей на кристалле: скалярная теория / С.И. Харитонов, С.Г. Вологовский, С.Н. Хонина, Н.Л. Казанский // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 469-479. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-469-479.
7. **Эгертон, Р.Ф.** Физические принципы электронной микроскопии / Р.Ф. Эгертон. – М.: Техносфера, 2010. – 304 с. – ISBN: 978-5-94836-254-0.
8. **Куприянов, А.В.** Наблюдаемость кристаллических решёток по нескольким узлам на изображениях их проекций / А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 586-589.
9. **Шаскольская, М.П.** Кристаллография: Учебное пособие для вузов / М.П. Шаскольская. – М.: Высшая школа, 1984. – С. 10-14.
10. **Кирш, Д.В.** Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве / Д.В. Кирш, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.
11. **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, Issue 2. – P. 145-151. – DOI: 10.3103/S1060992X15020101.
12. **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, Issue 3. – P. 456-460. – DOI: 10.1134/S1054661815030116.
13. **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. – P. 40-45.
14. **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. 787-794. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-794.
15. **Kirsh, D.V.** Modeling and identification of centered crystal lattices in three-dimensional space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // Information Technology and Nanotechnology (ITNT-2015). – 2015. – P. 162-170.
  16. **Hammond, C.** The basic of crystallography and diffraction / C. Hammond. – 3<sup>rd</sup> ed. – New York: Oxford University Press Inc., 2009. – P. 84-95. – ISBN: 978-0-19-954645-9.
  17. **Брандон, Д.** Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля: Учебное пособие для вузов по направлению "Прикладные математика и физика": пер. с англ. / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 384 с. – (Мир материалов и технологий). – ISBN: 5-948360-18-0. – С. 39-52.
  18. **Andrews, L.C.** Lattices and reduced cells as points in 6-space and selection of Bravais lattice type by projections / L.C. Andrews, H.J. Bernstein // Acta Crystallographica Section A. – 1988. – Vol. 44, Issue 6. – P. 1009-1018. – DOI: 10.1107/S0108767388006427.
  19. **Kessler, E.** Precision comparison of the lattice parameters of silicon monocrystals / E. Kessler, A. Henins, R. Deslat-tes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, Number 1. – P. 1-18.
  20. **Smith W.F.** Foundations of materials science and engineering / W.F. Smith, J. Hashemi. – 3<sup>rd</sup> ed. – Boston, London: McGraw-Hill Publishing Company, 2004. – P. 67-107. – ISBN: 0-072-40233-4.
  21. **Patera, J.** Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of Algorithm 2005: 17<sup>th</sup> Conference on Scientific Computing. – 2005. – P. 309-318.
  22. **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. – DOI: 10.18287/1613-0073-2016-1638-393-400.
  23. **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.

#### Сведения об авторах

**Широкаев Александр Сергеевич**, магистрант Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва; инженер НОЦ-403, Самарский университет. Сфера научных интересов: методы идентификации кристаллических решёток; цифровая обработка изображений; математическое моделирование; численные методы. E-mail: [alexandr-shirokanev@yandex.ru](mailto:alexandr-shirokanev@yandex.ru).

**Кириш Дмитрий Викторович**, магистр прикладной математики и информатики; аспирант Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва; стажёр-исследователь лаборатории математических методов обработки изображений Института систем обработки изображений РАН. Сфера научных интересов: цифровая обработка изображений; методы сравнения кристаллических решёток; классификация кристаллических решёток. E-mail: [limitk@mail.ru](mailto:limitk@mail.ru).

**Куприянов Александр Викторович**, профессор кафедры технической кибернетики Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва; старший научный сотрудник лаборатории математических методов обработки изображений Института систем обработки изображений РАН. Сфера научных интересов: цифровая обработка сигналов и изображений; распознавание образов и искусственный интеллект; анализ и интерпретация биомедицинских сигналов и изображений. E-mail: [alexkopr@gmail.ru](mailto:alexkopr@gmail.ru).

ГРПТИ: 27.41.00

Поступила в редакцию 29 мая 2016 г. Окончательный вариант – 5 июля 2016 г.

## RESEARCH OF AN ALGORITHM FOR CRYSTAL LATTICE PARAMETER IDENTIFICATION BASED ON THE GRADIENT STEEPEST DESCENT METHOD

A.S. Shirokanev<sup>1</sup>, D.V. Kirsh<sup>1,2</sup>, A.V. Kupriyanov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Samara National Research University, Samara, Russia,

<sup>2</sup> Image Processing Systems Institute of RAS, – Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Samara, Russia

### Abstract

In the analysis of a crystalline substance, the problem of crystal lattice parameter identification is of a great interest. However, the existing methods for solving this problem, such as the Bravais cell parameters estimation method and Wigner-Seitz cell volume estimation method, do not provide the required level of accuracy. Aiming to address the problem of low identification accuracy, the paper proposes an algorithm for crystal lattice parameter identification based on the gradient steepest descent method. The study of the feasibility of the structure parameter identification is carried out using a large set of distorted lattices. The results obtained show a significant increase in the identification accuracy in comparison with the above-mentioned parameter identification methods.

**Keywords:** parametric identification, unit cell, crystal lattice, Bravais cell, Wigner-Seitz cell, gradient steepest descent method.

**Citation:** Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Research of an algorithm for crystal lattice parameter identification based on the gradient steepest descent method. *Computer Optics* 2017; 41(3): 453-460. DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-3-453-460.

**Acknowledgements:** This work was partially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation within the Program of increasing the SSAU's competitiveness among the world's leading scientific and educational centers for the years 2013-2020; by the Russian Foundation for Basic Research grants (# 15-29-03823, # 15-29-07077, # 16-41-630761; # 16-29-11698, # 17-01-00972); by the ONIT RAS program # 6 "Bioinformatics, modern information technologies and mathematical methods in medicine" 2017.

### References

- [1] Fursov VA, Goshin YeV. Information technology for digital terrain model reconstruction from stereo images [In Russian]. *Computer Optics* 2014; 38(2): 335-342.
- [2] Kotov AP, Fursov VA, Goshin YeV. Technology for fast 3D-scene reconstruction from stereo images [In Russian]. *Computer Optics* 2015; 39(4): 600-605. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-600-605.
- [3] Kudinov IA, Pavlov OV, Kholopov IS. Implementation of an algorithm for determining the spatial coordinates and the angular orientation of an object based on reference marks, using information from a single camera [In Russian]. *Computer Optics* 2015; 39(3): 413-419. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-3-413-419.
- [4] Bessmeltsev VP, Bulushev ED. Fast image registration algorithm for automated inspection of laser micromachining [In Russian]. *Computer Optics* 2014; 38(2): 343-350.
- [5] Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Researching methods of reconstruction of three-dimensional crystal lattice from images of projections. *CEUR Workshop Proceedings* 2015; 1490: 290-297. DOI: 10.18287/1613-0073-2015-1490-290-297.
- [6] Kharitonov SI, Volotovskiy SG, Khonina SN, Kazanskiy NL. A differential method for calculating X-ray diffraction on crystals: the scalar theory [In Russian]. *Computer Optics* 2015; 39(4): 469-479. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-469-479.
- [7] Egerton RF. *Physical principles of electron microscopy* [In Russian]. Moscow: "Tehnosfera" Publisher; 2010. ISBN: 978-5-94836-254-0.
- [8] Kupriyanov AV. The observability of the crystal lattice by multiple nodes upon the images of their projections [In Russian]. *Computer Optics* 2012; 36(4): 586-589.
- [9] Shaskolskaya MP. *Crystallography: Manual for institutes of higher education* [In Russian]. Moscow: "Higher School" Publisher; 1984.
- [10] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Estimating the similarity measure of crystal lattices by coordinates of their nodes in three-dimensional space [In Russian]. *Computer Optics* 2012; 36(4): 590-595.
- [11] Kupriyanov AV, Kirsh DV. Estimation of the crystal lattice similarity measure by three-dimensional coordinates of lattice nodes. *Optical Memory & Neural Networks (Information Optics)* 2015; 24(2): 145-151. DOI: 10.3103/S1060992X15020101.
- [12] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space // *Pattern recognition and image analysis* 2015; 25(3): 456-460. DOI: 10.1134/S1054661815030116.
- [13] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Identification of three-dimensional crystal lattices by estimation of their unit cell parameters // *CEUR Workshop Proceedings* 2015: 40-45.
- [14] Soldatova OP, Lyozin IA, Lyozina IV, Kupriyanov AV, Kirsh DV. Application of fuzzy neural networks for defining crystal lattice types in nanoscale images [In Russian]. *Computer Optics* 2015; 39(5): 787-794. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-794.
- [15] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Modeling and identification of centered crystal lattices in three-dimensional space // *Information Technology and Nanotechnology (ITNT-2015)* 2015: 162-170.
- [16] Hammond C. *The basic of crystallography and diffraction*. 3<sup>rd</sup> Ed. New York: Oxford University Press Inc.; 2009. ISBN: 978-0-19-954645-9.
- [17] Brandon D, Kaplan WD. *Microstructural Characterization of Materials*. New York: John Wiley & Sons; 1999. ISBN: 0-471-98502-3.
- [18] Andrews LC, Bernstein HJ. Lattices and reduced cells as points in 6-space and selection of Bravais lattice type by projections. *Acta Cryst Sect A* 1988; 44(6): 1009-1018. DOI: 10.1107/S0108767388006427.
- [19] Kessler E, Henins A, Deslattes R, Nielsen L, Arif M. Precision comparison of the lattice parameters of silicon monocrystals. *J Res Natl Inst Stand Technol* 1994; 99(1): 1-18.
- [20] Smith WF, Hashemi J. *Foundations of Materials Science and Engineering*. 3<sup>rd</sup> ed. Boston, London: McGraw-Hill Publishing Company; 2004. ISBN: 0-072-40233-4.
- [21] Patera J, Skala V. Centered cubic lattice method comparison. *Proceedings of Algoritmy* 2005: 309-318.
- [22] Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Application of gradient steepest descent method to the problem of crystal lattice parametric identification. *CEUR Workshop Proceedings* 2016; 1638: 393-400. DOI: 10.18287/1613-0073-2016-1638-393-400.
- [23] Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Development of the crystal lattice parameter identification method based on the gradient steepest descent method. *Computer Science Research Notes* 2016; 2603: 65-68.

### Authors' information

**Aleksandr Sergeevich Shirokanev**, (b. 1993), graduated (2015) with a bachelor's degree in Applied Mathematics and Informatics. At present he is a student of MA course at Samara University. The area of interests includes digital image processing, mathematical modeling, numerical analysis and identification methods of crystal lattices.

**Dmitriy Victorovich Kirsh**, (b. 1990), graduated (2014) with a master's degree in Applied Mathematics and Informatics. At present he is a postgraduate student of Samara University. At present he is a junior researcher at the Image

Processing Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. The area of interests includes digital image processing, methods of mathematical formulation and comparison of crystal lattices, classification of crystal lattices.

**Alexandr Victorovich Kupriyanov**, (b. 1978), graduated (2001) from S.P. Korolyov Samara State Aerospace University (SSAU). He received his PhD in Technical sciences (2004). At present he is a senior researcher at the Image Processing Systems Institute of the Russian Academy of Sciences, and holding a part-time position of Associate Professor at Technical Cybernetics department of Samara University. The area of interests includes digital signals and image processing, pattern recognition and artificial intelligence, biomedical imaging and analysis. His list of publications contains more than 80 scientific papers, including 35 articles and 1 monograph published.

---

*Received May 29, 2016. The final version – July 5, 2016.*

---