

# ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ, РАСПОЗНАВАНИЕ ОБРАЗОВ

## О НАБЛЮДАЕМОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК ПО ИЗОБРАЖЕНИЯМ ИХ ПРОЕКЦИЙ

Куприянов А.В.<sup>1,2</sup>, Сойфер В.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт систем обработки изображений Российской академии наук,

<sup>2</sup> Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет)

### Аннотация

В статье рассматривается задача о наблюдаемости трёхмерной кристаллической решётки по её проекциям. Решение предложено искать в рамках теории кинематического движения системы материальных точек на основе дифференциальных кинематических уравнений. В предположении о вращательном характере движения решётки относительно плоскости наблюдения получены необходимые и достаточные условия наблюдаемости кристаллической решётки. Рассмотрены частные случаи – кубическая ячейка и тетраэдр. Получены аналитические выражения для вычисления геометрических параметров кристаллических решёток, определяющих их структуру.

**Ключевые слова:** кристаллическая решётка, группы Бравэ, параметры Эйлера, наблюдаемость, дифференциальные кинематические уравнения.

### Введение

Решение многих фундаментальных и прикладных научных задач требует проведения предельно точных измерений параметров элементарной ячейки различных веществ. Параметры элементарной ячейки являются важными характеристиками кристалла и зависят от химического состава, типа химической связи, температуры, дефектности кристаллической решётки и напряжений, возникающих при деформации кристалла. [1]. В настоящей статье рассматриваются геометрические параметры элементарной ячейки, определяющие структуру кристаллической решётки.

Расположение атомов вещества в кристалле характеризуется периодическим повторением элементарной ячейки. Геометрически элементарную ячейку можно охарактеризовать тремя векторами  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  или шестью скалярными величинами  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  (рис. 1).

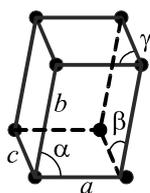


Рис. 1. Параметры элементарной ячейки

В зависимости от соотношения линейных и угловых параметров кристаллы можно разделить на семь систем – сингоний. Если одновременно указать сингонию и возможный способ центровки ячейки, то можно получить все 14 типов кристаллических решёток – решётки Бравэ [2].

Метод рентгенографии, предназначенный для идентификации кристаллических веществ, основан на том, что индивидуальность кристаллической структуры соединения обуславливает индивидуальный вид его рентгенограммы. Кристаллы являются дифракционной решёткой для рентгеновских лучей

и пучков электронов ввиду того, что длины их волн соизмеримы с межатомными расстояниями кристалла. Угол дифракции и длина волны излучения связаны постоянным соотношением, определяемым уравнением Вульфа–Брэгга [3]. Определённое число дифракционных максимумов и их фиксированное положение на рентгенограмме соответствует набору межплоскостных расстояний. Практически нет различных кристаллических веществ, рентгенограммы которых совпадали бы полностью.

Рентгенографический анализ позволяет определить сингонию кристаллической решётки и геометрические параметры элементарной ячейки. Установление соответствия между индексами узлов решётки и дифракционными пиками известных структурных типов проводят путём сопоставления экспериментально полученной рентгенограммы с имеющимися в базах данных или полученными при расчёте теоретической дифрактограммы. Однако успех решения зависит от того, к какой сингонии принадлежит кристалл и насколько много априори известно о его строении, поэтому задача определения геометрических параметров является сложной и не всегда однозначно решаемой [4].

Монокристалльные рентгеновские методы, а также просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) позволяют получать неискажённые изображения узловых сеток, так называемых обратных решёток (рис. 2) [5].

Обратной называется пространственная решётка, которая образована векторами, величины которых равны обратным межплоскостным расстояниям, а направления перпендикулярны семейству плоскостей исходной решётки. Обратная решётка является Фурье-образом прямой кристаллической решётки [2].

Рентгеновские методы позволяют получать фотографии сечений обратной решётки для её различных слоёв (рис. 2а). Особенностью изображений электронной дифракции является то, что все сечения обратной

решётки, полученные при помощи ПЭМ, проходят через начало координат ячейки, при этом фактически наблюдается Фурье-образ решётки (рис. 2б) [6].

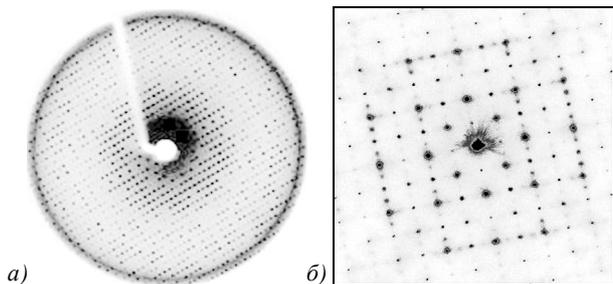


Рис. 2. Электронные изображения обратных решёток: рентгеновская дифракция (а), дифракция электронов (б)

При проведении исследований в электронном микроскопе образец (объект) обычно помещают в специальный держатель на тонкой металлической сетке. Держатель можно электрическим способом плавно перемещать по трём координатным осям. Для изменения наклона образца во время наблюдения используется гониометрическое устройство, которое имеет две взаимно перпендикулярные оси наклона, лежащие в плоскости образца и приспособленные для его вращения на 360°. При наклоне устройство обеспечивает неизменность положения объекта относительно оси микроскопа (рис. 3). В этой статье будем рассматривать только вращательное движение объекта исследования.

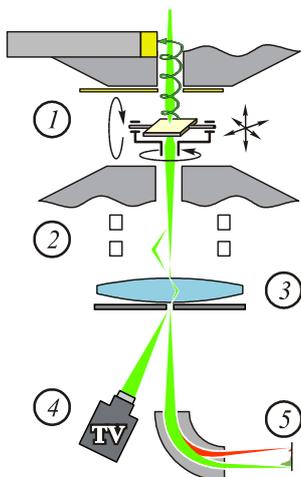


Рис. 3. Схема просвечивающего электронного микроскопа: 1 – держатель объекта, 2 – отклоняющие системы, 3 – система увеличения, 4 – система регистрации, 5 – щель спектрометра

Постановка задачи анализа изображений кристаллических решёток рассматривалась в работах [7] и [8]. Было показано, что при рассмотрении задачи восстановления решётки по проекциям или, в частном случае, определения её параметров, необходимо ввести некоторую характеристику, которая показывала бы, насколько полно рассматриваемый объект представлен на той или иной проекций. Это приводит к постановке новой для математики задачи о наблюдаемости сложной трёхмерной решётки по её проекциям.

Для определения наблюдаемости проекций кристаллических решёток в настоящей работе предла-

гается использовать теорию описания кинематики вращательного движения системы материальных точек с использованием дифференциальных кинематических уравнений и элементы общей теории наблюдения и управления динамическими объектами.

### 1. Преобразование координат

Воспользуемся известными положениями из теории кристаллографии [2]. Для определения декартовых координат узла решётки, индексированного в системе её координат решётки, можно выписать следующие соотношения:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \cos \gamma & c \cos \beta \\ 0 & b \sin \gamma & -c \cos \alpha^* \sin \beta \\ 0 & 0 & 1/c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1^L \\ n_2^L \\ n_3^L \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  – параметры, определяющие элементарную ячейку решётки (рис. 1),  $(n_1^L, n_2^L, n_3^L)$ ,  $n_k^L \in \mathbb{Z}$  – индексы узла,  $(x_1, x_2, x_3)$ ,  $x_k \in \mathbb{R}$  – декартовы координаты узла в системе координат решётки  $X$ , задаваемой базисными векторами  $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3$ , точка  $O$  является началом координат, в которой находится узел с индексами  $(0, 0, 0)$ .

Соответствующие параметры ячейки обратной решётки  $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$  определяются как:

$$\begin{aligned} a^* &= bc \sin \alpha / V, \quad b^* = ac \sin \beta / V, \quad c^* = ab \sin \gamma / V; \\ \cos \alpha^* &= (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) / \sin \beta \sin \gamma; \\ \cos \beta^* &= (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) / \sin \alpha \sin \gamma; \\ \cos \gamma^* &= (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) / \sin \alpha \sin \beta; \end{aligned}$$

где  $V$  – объём ячейки:

$$V = abc \times \sqrt{1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma}.$$

Пример 1: для кубической ячейки ( $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = \pi / 2$ ):

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1^L \\ n_2^L \\ n_3^L \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Пример 2: для моноклинной ячейки ( $\alpha = \gamma = \pi / 2$ ):

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & c \cos \beta \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \sin \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1^L \\ n_2^L \\ n_3^L \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Введём базовую систему координат  $Y$ , определяемую базисными векторами  $\bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \bar{Y}_3$ , точка  $O$  является началом координат и совпадает с началом координат в системе координат, связанной с решёткой.

В начальный момент системы координат  $X$  и  $Y$  совпадают. Далее система координат решётки  $X$  осуществляет произвольный поворот в системе координат  $Y$  относительно начала координат.

Рассмотрим задачу определения декартовых координат узлов решётки, осуществляющей вращение, в базовой системе координат. В соответствии с теоремой Эйлера – Даламбера всякое перемещение системы материальных точек, имеющей одну неподвижную точку, может быть заменено одним конечным поворотом вокруг оси, проходящей через неподвижную точку.

Пусть решётка осуществляет вращение относительно оси конечного поворота, задаваемой вектором  $\bar{\theta}$ , проходящей через точку  $O$ , на произвольный угол  $\varphi$ ,  $\gamma_k$  – угол между осью конечного поворота и осью  $Y_k$ ,  $c_k = \cos \gamma_k$  – направляющие косинусы вектора  $\bar{\theta}$  в системе координат  $Y$  (рис. 4).

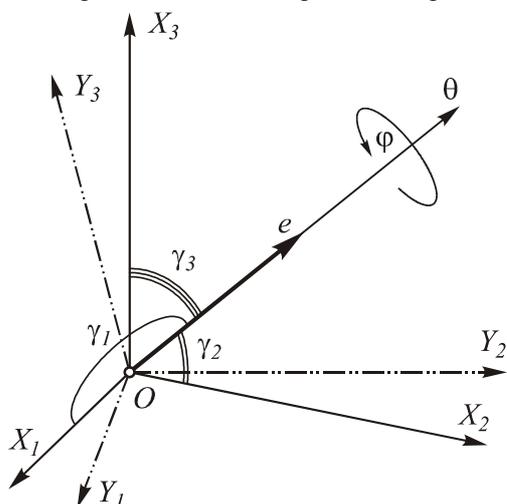


Рис. 4. Схема вращения системы координат решётки  $X$  относительно базовой системы координат  $Y$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_0^2 + \lambda_1^2 - \lambda_2^2 - \lambda_3^2 & 2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_0\lambda_3) & 2(\lambda_1\lambda_3 - \lambda_0\lambda_2) \\ 2(\lambda_1\lambda_2 - \lambda_0\lambda_3) & \lambda_0^2 - \lambda_1^2 + \lambda_2^2 - \lambda_3^2 & 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_0\lambda_1) \\ 2(\lambda_1\lambda_3 + \lambda_0\lambda_2) & 2(\lambda_2\lambda_3 - \lambda_0\lambda_1) & \lambda_0^2 - \lambda_1^2 - \lambda_2^2 + \lambda_3^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

## 2. Уравнение состояния. Уравнения наблюдения. Условие наблюдаемости

В этом разделе будем опираться на теорию кинематического движения системы материальных точек [11, 9]. Рассмотрим систему материальных точек, являющихся узлами кристаллической решётки, осуществляющую вращательное движение. Уравне-

$$\begin{cases} z_1(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (\lambda_0^2 + \lambda_1^2 - \lambda_2^2 - \lambda_3^2)x_1 + 2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_0\lambda_3)x_2 + 2(\lambda_1\lambda_3 - \lambda_0\lambda_2)x_3, \\ z_2(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = 2(\lambda_1\lambda_2 - \lambda_0\lambda_3)x_1 + (\lambda_0^2 - \lambda_1^2 + \lambda_2^2 - \lambda_3^2)x_2 + 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_0\lambda_1)x_3, \\ z_3(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = 2(\lambda_1\lambda_3 + \lambda_0\lambda_2)x_1 + 2(\lambda_2\lambda_3 - \lambda_0\lambda_1)x_2 + (\lambda_0^2 - \lambda_1^2 - \lambda_2^2 + \lambda_3^2)x_3. \end{cases} \quad (10)$$

Уравнение состояния для системы можно записать, используя дифференциальные кинематические уравнения в параметрах Эйлера [11]. Введём функции  $\omega_k(t)$ , являющиеся проекциями угловой ско-

Для описания преобразования координат воспользуемся параметрами Эйлера или Родрига-Гамильтона  $\lambda_j$ ,  $j = 0, 1, 2, 3$ , которые являются одними из основных кинематических параметров углового движения твёрдого тела [9].

$$\lambda_0 = \cos \frac{\varphi}{2}, \lambda_k = c_k \sin \frac{\varphi}{2}, k = 1, 2, 3. \quad (4)$$

Нормировка параметров определяется соотношением:

$$\lambda_0^2 + \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 = 1. \quad (5)$$

Для удобного математического обозначения положения и вращения объектов в пространстве будем использовать описание с использованием кватернионными матрицами [10]. Тогда связь координат узла решётки в декартовой системе координат с координатами в базовой системе координат устанавливается соотношением:

$$(0, y_1, y_2, y_3) = n(\lambda)(m(\lambda))^T (0, x_1, x_2, x_3), \quad (6)$$

где  $m(\lambda)$  и  $n(\lambda)$  – кватернионные матрицы поворота, определяемые на основе параметров Эйлера [9, 10]:

$$m(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda_0 & -\lambda_1 & -\lambda_2 & -\lambda_3 \\ \lambda_1 & \lambda_0 & -\lambda_3 & \lambda_2 \\ \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_0 & -\lambda_1 \\ \lambda_3 & -\lambda_2 & \lambda_1 & \lambda_0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$n(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda_0 & -\lambda_1 & -\lambda_2 & -\lambda_3 \\ \lambda_1 & \lambda_0 & \lambda_3 & -\lambda_2 \\ \lambda_2 & -\lambda_3 & \lambda_0 & \lambda_1 \\ \lambda_3 & \lambda_2 & -\lambda_1 & \lambda_0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Используя (7) и (8), выражение (6) можно записать в виде:

ние наблюдения узла системы можно записать, используя полученные выражения для преобразования координат. Введём функции наблюдения координат узла решётки в базовой системе координат:

$$z_k(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = y_k.$$

Получим систему уравнений наблюдения

рости вращения на оси системы координат  $Y$ . В случае, когда составные угловой скорости вращения являются константами, дифференциальное уравнение вращения можно записать в матричном виде:

$$2 \begin{pmatrix} \dot{\lambda}_0 \\ \dot{\lambda}_1 \\ \dot{\lambda}_2 \\ \dot{\lambda}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_1 & -\omega_2 & -\omega_3 \\ \omega_1 & 0 & \omega_3 & -\omega_2 \\ \omega_2 & -\omega_3 & 0 & \omega_1 \\ \omega_3 & \omega_2 & -\omega_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Здесь параметры Эйлера  $\lambda_j(t)$  представлены как функции, зависящие от времени  $t$ .  $\dot{\lambda}_j$  есть производные параметров  $\lambda_j(t)$  по времени  $t$ .

Таким образом, функции  $z_k$  также являются зависящими от времени  $t$ , и существуют производные  $\dot{z}_k, \ddot{z}_k, \ddot{\ddot{z}}_k, \dots$ , выражение для которых можно записать в матричной форме в виде:

$$\frac{\partial^k z}{\partial t^k} = \frac{\partial z}{\partial \lambda} \frac{\partial^k \lambda}{\partial t^k},$$

где производные  $\partial^k \lambda / \partial t^k$  можно вычислить, используя выражение (11).

Согласно [12], если имеются непрерывные наблюдения за изменением функции  $z(t)$  на интервале  $[t_0, t_1]$ , для вполне наблюдаемой системы можно оп-

$$\frac{\partial \dot{z}}{\partial \lambda} = 2 \begin{pmatrix} -a_2 \omega_2 - a_3 \omega_3 & -a_3 \omega_2 + a_2 \omega_3 & -a_0 \omega_2 + a_1 \omega_3 & -a_1 \omega_2 - a_0 \omega_3 \\ a_1 \omega_1 - a_0 \omega_3 & a_3 \omega_1 - a_1 \omega_3 & a_0 \omega_1 + a_2 \omega_3 & a_1 \omega_1 + a_3 \omega_3 \\ a_3 \omega_1 + a_0 \omega_2 & -a_2 \omega_1 + a_1 \omega_2 & -a_1 \omega_1 - a_2 \omega_2 & a_0 \omega_1 - a_3 \omega_2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Наблюдение решётки будем осуществлять проецированием координат узлов решётки в базовой системе координат  $Y$  на плоскость  $Y_2 O Y_3$ . Поскольку имеются наблюдения только двух координат, то матрицу  $\Phi$  можно записать в виде:

$\Phi^T = (z_2 \quad z_3 \quad \dot{z}_2 \quad \dot{z}_3)$ . Таким образом, матрица якобиана  $I$  примет вид:

$$I = 2 \begin{pmatrix} -a_3 & a_2 & a_1 & -a_0 \\ a_2 & a_3 & a_0 & a_1 \\ a_1 \omega_1 - a_0 \omega_3 & a_3 \omega_1 - a_1 \omega_3 & a_0 \omega_1 + a_2 \omega_3 & a_1 \omega_1 + a_3 \omega_3 \\ a_3 \omega_1 + a_0 \omega_2 & -a_2 \omega_1 + a_1 \omega_2 & -a_1 \omega_1 - a_2 \omega_2 & a_0 \omega_1 - a_3 \omega_2 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Условие наблюдаемости (12) можно записать в виде:

$$\det I = \omega_1 \omega_2 a_1 (a_1 - a_2) (a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2) \neq 0. \quad (17)$$

Проецируя на плоскость наблюдения  $Y_1 O Y_2$ , можно получить аналогичное выражение. Проецируя на плоскость наблюдения  $Y_1 O Y_3$ , можно получить, что определитель  $I$  равен 0, однако добавление в матрицу  $\Phi$  третьей пары наблюдения в виде вторых производных даёт выражение, аналогичное (17).

Следует отметить, что, поскольку максимальное число доступных наблюдений для одного узла решётки равно 4 (координаты точки на плоскости и производные координат точки), использование только двух узлов на проекции даёт возможность определить только 5 параметров наблюдения (включая углы поворота и параметры самой решётки). Если наблюдение кристаллической решётки характеризуется числом параметров больше 5, определить параметры решётки по одной проекции невозможно и требуется использование большего числа проекций. При этом развиваемый подход к исследованию наблюдаемости полностью сохраняется.

ределить значения вектора состояния  $\lambda_j(t)$  в любой момент  $t$ , принадлежащий этому отрезку.

Критерием наблюдаемости является условие – якобиан:

$$I = \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right] \neq 0, \quad (12)$$

где  $\Phi^T = (z^T, \dot{z}^T, \ddot{z}^T, \dots)$ .

Введём обозначения:

$$\begin{cases} a_0 = \lambda_0 x_1 + \lambda_3 x_2 - \lambda_2 x_3, \\ a_1 = \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \lambda_3 x_3, \\ a_2 = \lambda_2 x_1 - \lambda_1 x_2 + \lambda_0 x_3, \\ a_3 = \lambda_3 x_1 - \lambda_0 x_2 - \lambda_1 x_3. \end{cases} \quad (13)$$

Вычислим матрицы производных:

$$\frac{\partial z}{\partial \lambda} = 2 \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & -a_2 & -a_3 \\ -a_3 & a_2 & a_1 & -a_0 \\ a_2 & a_3 & a_0 & a_1 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

Вернёмся к наблюдению одной проекции. Поскольку число параметров наблюдения  $\lambda_j$  равно 4, при ранге матрицы  $I$ , равным 4, выполняется **необходимое условие наблюдаемости** и система, определяющая вращение кристаллической решётки в пространстве вокруг центрального узла, является **наблюдаемой**, в противном случае при ранге матрицы  $I$ , меньше 4, система не будет являться наблюдаемой (будет **ненаблюдаемой**).

Из (17) можно определить условия, при которых система будет ненаблюдаемой. Запишем уравнение  $\det I = 0$ , получим:

$$\omega_1 \omega_2 a_1 (a_1 - a_2) (a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2) = 0. \quad (18)$$

Отметим, что, учитывая (13) и (5),

$$\begin{aligned} & (a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2) = \\ & = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) (\lambda_0^2 + \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2) = \\ & = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2). \end{aligned}$$

В итоге получаем условие, при выполнении которого система будет ненаблюдаемой:

$$\omega_1 \omega_2 a_1 (a_1 - a_2) (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) = 0. \tag{19}$$

Из анализа условия (18) можно сделать следующие выводы:

1) В выбранном начальном положении (узел решётки  $(1,0,0)$  находится на оси  $\bar{X}_1$ ) при наблюдении узла  $(0,0,0)$  система решётки не будет являться наблюдаемой.

2) Если проекции угловой скорости вращения  $\omega_1 = 0$  или  $\omega_2 = 0$ , система также не является наблюдаемой. Это соответствует вращениям вокруг координатных осей, как показано на рис. 5, для кубической ячейки.

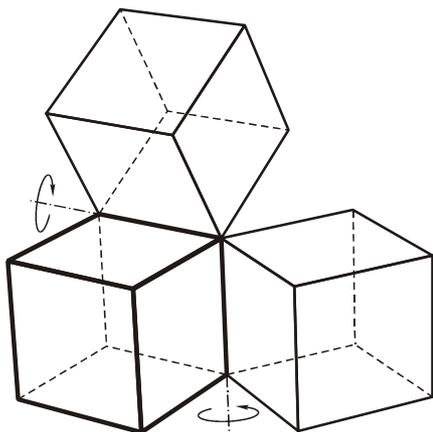


Рис. 5. Схема вращения решётки относительно координатных осей

Нетривиальным условием в выражении (18) является выражение

$$a_1 (a_1 - a_2) = 0. \tag{20}$$

Заметим, что уравнение (20) необходимо разрешать относительно параметров наблюдения  $\lambda_k$ , связь с переменными  $a_k$  задаётся выражениями (13). Рассмотрим решение этого уравнения для некоторых частных случаев.

**3. Анализ достаточных условий наблюдаемости кубической ячейки**

Запишем условие (20), учитывая обозначения (13), (4) и выражение (2) при наблюдении различных узлов кубической ячейки, в виде таблицы соответствий 1.

Наблюдаемость узлов невозможна в случаях:

- 1)  $\sin^2 \frac{\varphi}{2} = 0$ , т.е.  $\varphi = 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$  – соответствует полному обороту решётки.
- 2)  $c_1 c_2 c_3 = 0$  – соответствует вращению вокруг осей координат.
- 3)  $(c_1 + c_2)(c_2 + c_3)(c_1 + c_3)(c_1 + c_2 + c_3) = 0$ ,  
 $\tan \frac{\varphi}{2} = \frac{1}{c_1 \pm c_2 + c_3}$ ,  $\tan \frac{\varphi}{2} = \frac{1}{2c_1 + c_3}$  – соответствуют случаю, когда узлы на проекции выстраиваются по вершинам квадрата, равного грани куба (рис. 6).

Таблица 1. Выражения, определяющие ненаблюдаемость узлов кубической ячейки

Узел	Выражение
$(1,0,0)$	$c_1 \sin^2 \frac{\varphi}{2} (c_1 - c_2) = 0$
$(0,1,0)$	$c_2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} (c_1 + c_2) = 0$
$(0,0,1)$	$c_3 \sin \frac{\varphi}{2} \left( c_3 \sin \frac{\varphi}{2} - \cos \frac{\varphi}{2} \right) = 0$
$(1,1,0)$	$(c_1 + c_2) \sin \frac{\varphi}{2} \left( 2c_1 \sin \frac{\varphi}{2} \right) = 0$
$(0,1,1)$	$(c_2 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} \left( (c_1 + c_2 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} - \cos \frac{\varphi}{2} \right) = 0$
$(1,0,1)$	$(c_1 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} \left( (c_1 - c_2 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} - \cos \frac{\varphi}{2} \right) = 0$
$(1,1,1)$	$(c_1 + c_2 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} \left( (2c_1 + c_3) \sin \frac{\varphi}{2} - \cos \frac{\varphi}{2} \right) = 0$

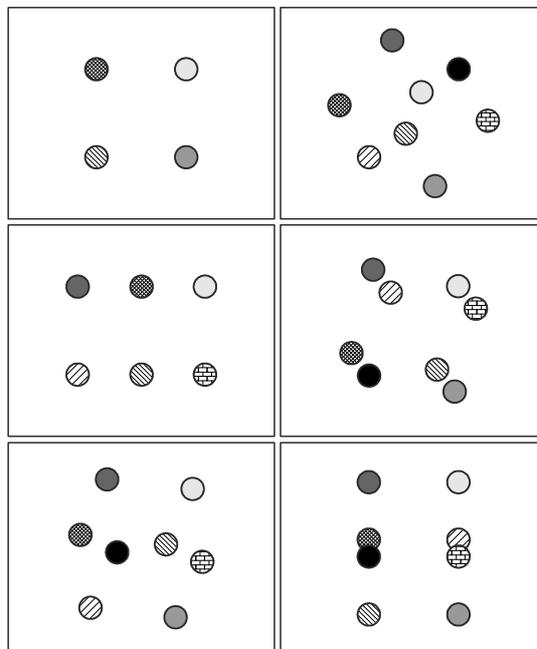


Рис. 6. Схемы проекций узлов кубической ячейки, при которых решётка является ненаблюдаемой

В случаях, когда узлы решётки являются наблюдаемыми, используя (9), можно записать систему алгебраических уравнений второй степени для оценивания параметров наблюдения  $\lambda_k$  и длины стороны  $a$ . Выражение (5) даёт дополнительное уравнение системы, таким образом, для определения параметра решётки достаточно наблюдения двух узлов. Обозначим координаты наблюдаемых узлов  $(z_{11}, z_{12})$  и  $(z_{21}, z_{22})$ , соединённых ребром решётки, тогда можно получить выражение, устанавливающее связь между углом вращения  $\varphi$ , длиной стороны  $a$  и координатами узлов на проекции:

$$a = \frac{z_{11}z_{22} - (z_{12} + z_{21})^2}{\cos \varphi (z_{11} + z_{22})}. \quad (21)$$

Таким образом, для определения стороны кубической решётки в случае её наблюдаемости достаточно измерить координаты двух соседних узлов на плоскости и угол поворота решётки относительно оси вращения.

**4. Анализ достаточных условий наблюдаемости тетраэдра**

Рассмотрим достаточные условия наблюдаемости для конфигурации узлов ячейки, образующей правильный тетраэдр. Из тетраэдров можно образовывать как моноклинные, так и гексагональные кристаллические решётки.

Рассмотрим задачу определения наблюдаемости тетраэдра, вращающегося вокруг произвольной оси, проходящей через одну из его вершин. Таким образом, наблюдению на проекции доступны три вершины тетраэдра, поскольку четвёртая вершина будет совпадать с началом координат  $O$  (рис. 7).

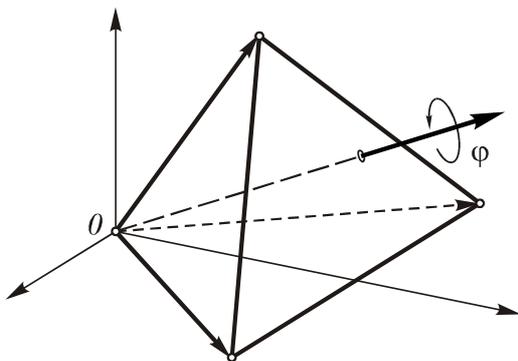


Рис. 7. Схема вращения тетраэдра

Определим начальное положение тетраэдра следующим образом: одно из рёбер совпадает с осью  $\bar{X}_1$ , прилегающая к этому ребру грань лежит в плоскости  $X_1OX_2$ , тогда координаты вершин правильного тетраэдра с длиной ребра  $L$  определяются как:

$$\begin{aligned} (x_{11}, x_{12}, x_{13}) &= (L, 0, 0), \\ (x_{21}, x_{22}, x_{23}) &= \left(\frac{L}{2}, \frac{L\sqrt{3}}{2}, 0\right), \\ (x_{31}, x_{32}, x_{33}) &= \left(\frac{L}{2}, \frac{L}{2\sqrt{3}}, \frac{L\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\right). \end{aligned} \quad (22)$$

Запишем условие (20), учитывая обозначения (13), (4) при наблюдении каждой из вершин правильного тетраэдра (22), в виде таблицы соответствий 2.

Наблюдаемость узлов невозможна в случаях:

- $\sin^2 \frac{\varphi}{2} = 0$ , т.е.  $\varphi = 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$  – соответствует полному обороту тетраэдра.
- $(c_1)(c_1 + c_2\sqrt{3})(c_1\sqrt{3} + c_2 + 2c_3\sqrt{2}) = 0$ ,

$$c_1(\sqrt{3} + 1) + c_2(\sqrt{3} - 1) = 0 \text{ и } \tan \frac{\varphi}{2} = \frac{2\sqrt{2}}{(c_1 - c_2)(\sqrt{3} - 1) + 2\sqrt{2}c_3} \text{ приведены на рис. 8.}$$

Таблица 2. Выражения, определяющие ненаблюдаемость вершин правильного тетраэдра

Узел	Выражение
1	$c_1 \sin \frac{\varphi}{2} (c_1 - c_2) = 0$
2	$(c_1 + c_2\sqrt{3}) \sin^2 \frac{\varphi}{2} (c_1(\sqrt{3} + 1) + c_2(\sqrt{3} - 1)) = 0$
3	$(c_1\sqrt{3} + c_2 + 2c_3\sqrt{2}) \sin \frac{\varphi}{2} * \left( (c_1(\sqrt{3} - 1) + c_2(\sqrt{3} + 1) + 2c_3\sqrt{2}) \sin \frac{\varphi}{2} - 2\sqrt{2} \cos \frac{\varphi}{2} \right) = 0$

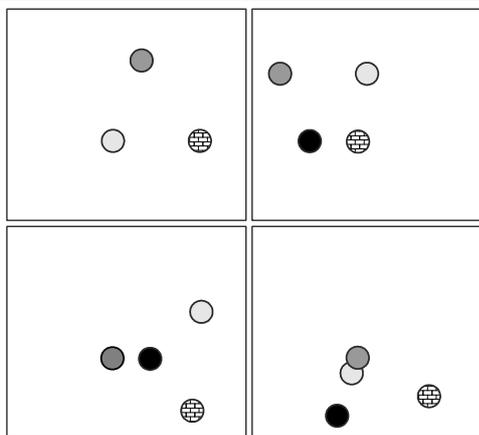


Рис. 8. Схемы проекций узлов правильного тетраэдра, при которых тетраэдр является ненаблюдаемым

В случаях, когда узлы являются наблюдаемыми, используя (9), можно записать систему уравнений второй степени для оценивания параметров наблюдения  $\lambda_k$  и длины ребра  $L$ . Обозначим координаты наблюдаемых узлов  $(z_{11}, z_{12})$  и  $(z_{21}, z_{22})$ , тогда можно получить выражение, устанавливающее связь между углом вращения  $\varphi$ , длиной ребра  $L$  и координатами узлов на проекции:

$$L = \frac{\sqrt{3}z_{11} - 2z_{22} - z_{21} \pm 2\sqrt{z_{11}^2 + z_{12}^2 + z_{21}^2 + z_{22}^2 - z_{11}z_{12} - z_{21}z_{22} - \sqrt{3}(z_{11}z_{22} + z_{12}z_{21})}}{2\sqrt{3} \cos \varphi}. \quad (23)$$

Таким образом, для определения длины ребра правильного тетраэдра достаточно измерить координаты двух вершин на плоскости проекции и угол поворота тетраэдра относительно оси вращения, знак

плюс или минус в выражении (23) выбирается так, чтобы длина ребра была положительной величиной.

### Заключение

На основе теории описания кинематики вращательного движения с использованием дифференциальных кинематических уравнений были получены необходимые и достаточные условия наблюдаемости проекций кристаллических решёток.

Рассмотрены частные случаи для кубической ячейки и правильного тетраэдра. Получены выражения для определения геометрических параметров кристаллических решёток.

Предметом дальнейшего исследования является получение в явном виде достаточных условий наблюдаемости узлов решётки не только для вращательного, но и для поступательного движения решётки, приводящее к использованию сложных операторов проецирования, учитывающих 2 и более слоёв решётки. Необходимо также рассмотреть подходы к решению задачи определения наблюдаемости параметров решётки и их оценивания в общем случае, для большего числа проекций.

### Благодарности

Авторы выражают благодарность профессору Салмину В.В. за консультацию в области кинематики твёрдого тела, а также студентам Васильеву В.В. и Парингеру Р.А. за помощь, оказанную при проведении исследований и подготовке материала для статьи.

Работа выполнялась при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № 02.740.11.0841), гранта РФФИ 12-01-00237-а, гранта Президента РФ поддержки ведущей научной школы НШ-4128.2012.9, программы фундаментальных исследований РАН-ОНИТ6 в рамках выполнения государственного задания № 8.3195.2011 Минобрнауки РФ.

### Литература

1. **Уманский, Я.С.** Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев // М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
2. **Егоров-Тисменко, Ю.К.** Кристаллография и кристаллохимия / Ю.К. Егоров-Тисменко // М.: КДУ, 2005. – 592 с.
3. **Хейкер, Д.М.** Рентгеновская дифрактометрия. Физико-математическая библиотека инженера / Д.М. Хейкер, Л.С. Зевин // М.: Физматгиз, 1963. – 380 с.
4. **Горелик, С.С.** Рентгенографический и электронно-оптический анализ. Учеб. пособие для вузов / С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев. – 3-е изд., доп. и перераб. – М.: МИСИС, 1994. – 328 с.
5. **Брандон, Д.** Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан // М.: Техносфера, 204. – 384 с.
6. **Goodhew, P.J.** Electron microscopy and analysis / P.J. Goodhew [et al.]. – 3d edition. – Taylor&Francis, 2001. – 265 p.
7. **Соифер, В.А.** Анализ и распознавание наномасштабных изображений: традиционные подходы и новые постановки задач / В.А. Соифер, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 136-144.
8. **Куприянов, А.В.** Анализ текстур и определение типа кристаллической решётки на наномасштабных изображениях / А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 151-157.
9. **Челноков, Ю.Н.** Кватернионные и бикватернионные модели и методы механики твёрдого тела и их приложения. Геометрия и кинематика движения / Ю.Н. Челноков // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 512 с.
10. **Бранец, В.Н.** Применение кватернионов в задачах ориентации твёрдого тела / В.Н. Бранец, И.П. Шмыглевский // М.: Наука, 1973. – 320 с.
11. **Robinson, A.C.** On the use of quaternions in simulation of rigid-body motion / A.C. Robinson // WADD Techn. report. – 1957. – N 58-17.
12. **Гроп, Д.** Методы идентификации систем / Д. Гроп // М.: Мир, 1979. – 304 с.

### References

1. **Umansky, Ya.S.** Kristallografiya, rentgenografiya i elektronnaya mikroskopiya / Ya.S. Umanskiy [et al.] // Moscow: "Metallurgiya" Publisher, 1982. – 632 p. – (In Russian).
2. **Egorov-Tismenko, Yu.K.** Kristallografiya i kristallohimiya / Yu.K. Egorov-Tismenko // Moscow: "KDU" Publisher, 2005. – 592 p. – (In Russian).
3. **Hejker, D.M.** X-ray a diffractometry. Physical and mathematical library of the engineer / D.M. Hejker, L.S. Zevin // Moscow: "Fismatgiz" Publisher, 1963. – 380 p. – (In Russian).
4. **Gorelik, S.S.** Radiographic and the electron-optical analysis. Studies. Uchebnoye posobie dlya vuzov / S.S. Gorelik, J.A. Skakov, L.N. Rastorguev. – 3d edition. – Moscow: "MISIS" Publisher, 1994. – 328 p. – (In Russian).
5. **Brandon, D.** Microstructural Characterization of Materials / D. Branon, W. Kaplan // Moscow: "Technosfera" Publisher, 204. – 384 p. – (In Russian).
6. **Goodhew, P.J.** Electron microscopy and analysis / P.J. Goodhew [et al.]. – 3d edition. – Taylor&Francis, 2001. – 265 p.
7. **Soifer, V.A.** Analysis and recognition of the nanoscale images: conventional approach and novel problem statement / V.A. Soifer, A.V. Kupriyanov // Computer Optics. – 2011. – V. 35, N 2. – P. 136-144. – (In Russian).
8. **Kupriyanov, A.V.** Analysis and recognition of the nanoscale images: conventional approach and novel problem statement / A.V. Kupriyanov // Computer Optics. – 2011. – V. 35, N 2. – P. 151-157. – (In Russian).
9. **Shuttles, J.N.** Kvaternionnye i bikvaternionnye models and methods of a mechanics of a solid body and their appendix. Geometry and kinematics of movement / J.N. Shuttles // Moscow: "FISMATLIT" Publisher, 2006. – 512 p. – (In Russian).
10. **Robinson, A.C.** On the use of quaternions in simulation of rigid-body motion / A.C. Robinson // WADD Techn. report. – 1957. – N 58-17.
11. **Branets, V.N.** Primenenie of quaternions in problems of orientation of a solid body / V.N. Branets, I.P. Shmyglevsky // Moscow: "Nauka" Publisher, 1973. – 320 p. – (In Russian).
12. **Grop, D.** Methods of systems identification / D. Grop // Moscow: "MIR" Publisher, 1979. – 304 p. – (In Russian).

**ON THE OBSERVABILITY OF THE CRYSTAL LATTICE  
WITH THE IMAGES OF THEIR PROJECTIONS**A.V. Kupriyanov<sup>1,2</sup>, V.A. Soifer<sup>2</sup><sup>1</sup> Image Processing Systems Institute of the RAS,<sup>2</sup> Samara State Aerospace University named after S.P. Korolyov (national research university)**Abstract**

In presented paper the solution of a problem on observability of a three-dimensional crystalline lattice on its projections, on the basis of use of the theory of the description of kinematics of a rotary motion and the observation and guidance theory dynamic objects is considered. The requirement condition is gained for the observability of a crystalline lattice carrying out a rotary motion in space round the central knot. The fulfillment of conditions for some special cases – a cubic mesh and a tetrahedron is viewed. Expressions for definition of parameters of observable lattices are gained.

**Key words:** a crystalline lattice, Euler's parameters, observability, equation of state, equation of observation.

**Сведения об авторах**

**Куприянов Александр Викторович**, 1978 года рождения. В 2001 году окончил с отличием Самарский государственный аэрокосмический университет (СГАУ). В 2004 году защитил диссертацию на степень кандидата технических наук. В настоящее время работает старшим научным сотрудником в Учреждении Российской академии наук Институте систем обработки изображений РАН и, одновременно, доцентом кафедры технической кибернетики СГАУ. Круг научных интересов включает цифровую обработку сигналов и изображений, распознавание образов и искусственный интеллект, анализ и интерпретацию биомедицинских сигналов и изображений. Имеет более 80 публикаций, в том числе 35 статей и одну монографию, изданную на английском языке (в соавторстве). Член Российской ассоциации распознавания образов и анализа изображений.

E-mail: [akupr@smr.ru](mailto:akupr@smr.ru).

**Alexander Victorovich Kupriyanov**, (b. 1978), graduated (2001) from the 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 SSAU's Technical Cybernetics sub-department. The area of interests includes digital signals and image processing, pattern recognition and artificial intelligence, biomedical imaging and analysis. He's list of publications contains more than 80 scientific papers, including 35 articles and 1 monograph published.

Сведения об авторе **Сойфер Виктор Александрович** – см. стр. 150 этого номера.

Поступила в редакцию 18 марта 2012 г.