

## ПРИМЕНЕНИЕ НЕЧЁТКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТИПА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК, НАБЛЮДАЕМЫХ НА НАНОМАСШТАБНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ

О.П. Солдатова<sup>1</sup>, И.А. Лёзин<sup>1</sup>, И.В. Лёзина<sup>1</sup>, А.В. Куприянов<sup>1,2</sup>, Д.В. Кириш<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва  
(национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия,

<sup>2</sup> Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия

### Аннотация

В данной статье для определения пересекающихся классов кристаллических решёток предлагается использовать нечёткие нейронные сети. Рассматриваются нечёткая нейронная сеть Такаги–Сугено–Канга и разработанная авторами модификация нечёткой нейронной сети Ванга–Менделя. Предложена трёхэтапная методика обучения нейронных сетей. Показана эффективность использования моделей нечётких нейронных сетей для определения типов кристаллических решёток.

**Ключевые слова:** распознавание образов, наномасштабные изображения, наноструктуры, кристаллическая решётка, нечёткие нейронные сети, сеть Такаги–Сугено–Канга, сеть Ванга–Менделя.

**Цитирование:** 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. – Т. 39, № 5. – С. 787-795. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-794.

### Введение

Классификация наномасштабных изображений (НМИ) имеет ряд особенностей. В НМИ проявляются определённые свойства строения материи, имеющей кристаллическую структуру, при которой атомы упорядочены в кристаллические решётки. Фундаментальным понятием кристаллографии является понятие решёток Бравэ, размеры которых определяются величиной порядка ангстрем, из которых строятся все кристаллы. Любой материал конструируется из этих решёток в различных модификациях.

Пространственная решётка является математической абстракцией. Разные кристаллы могут иметь одинаковые решётки. Базовых решёток Бравэ 14. В зависимости от пространственной симметрии все кристаллические решётки подразделяются на семь кристаллических систем – это триклинная, моноклинная, тригональная, гексагональная, ромбическая, тетрагональная и кубическая [1]. На рис. 1 представлен общий вид элементарных ячеек Бравэ (минимальных структурных элементов) для каждой кристаллической системы.

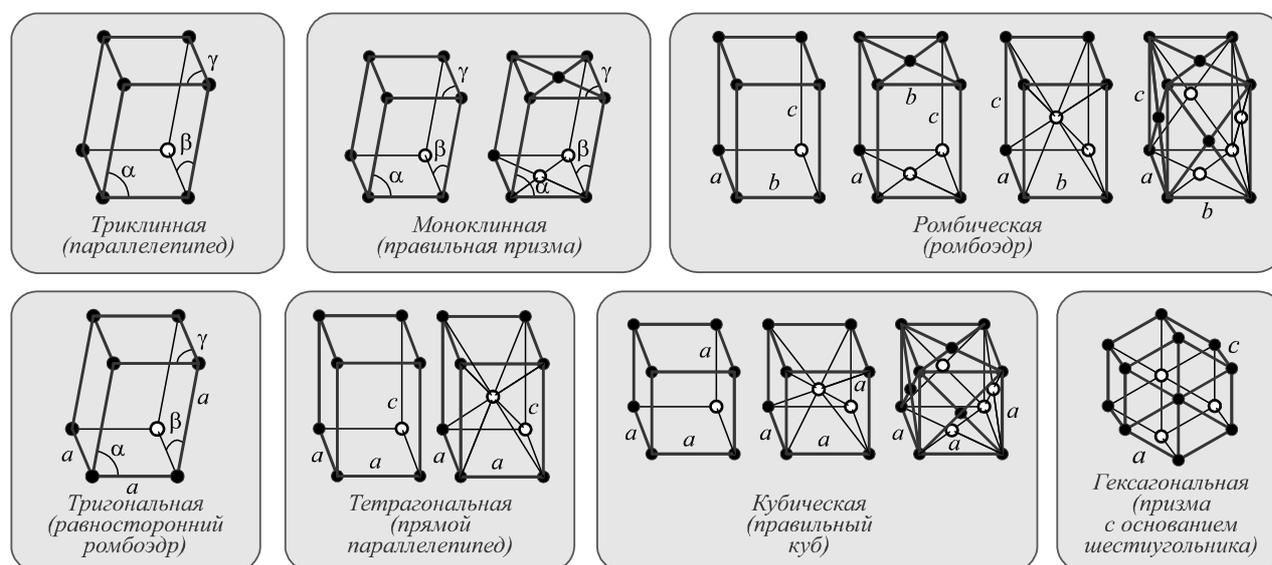


Рис. 1. Элементарные ячейки семи кристаллических систем

Характеристиками, однозначно определяющими тип кристаллической системы, являются шесть параметров элементарной ячейки Бравэ: длины трёх сторон и величины трёх углов между сторонами (табл. 1).

Задачу распознавания НМИ, представляющих собой проекции кристаллических решёток, можно свести к определению типа кристаллической решётки.

Среди основных методов для определения типа кристаллических решёток можно выделить следующие: компаратор Национального Института стандартов и технологий [2], идентификация на основании эффективности упаковки решётки [3] и идентификация, основанная на построении изоповерхностей [4].

Табл. 1. Структура файла с параметрами элементарных ячеек кристаллических решёток моноклинного типа

Название (обозначение)	Длины сторон	Величины углов
Триклинная ( <i>aP</i> )	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3$
Моноклинная ( <i>mP</i> )	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = 90^\circ \neq \alpha_3$
Тригональная ( <i>hR</i> )	$l_1 = l_2 = l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 \neq 90^\circ$
Гексагональная ( <i>hP</i> )	$l_1 = l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = 120^\circ; \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Ромбическая ( <i>oP</i> )	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Тетрагональная ( <i>tP</i> )	$l_1 = l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Кубическая ( <i>cP</i> )	$l_1 = l_2 = l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$

Однако указанные методы обладают рядом недостатков, ограничивающих область их применения: сложность подготовки кристаллов (необходимость тщательной полировки и монтажа), низкая эффективность при сравнении решёток, схожих по форме или объёму, высокая чувствительность к малым искажениям координат узлов решёток.

Основной проблемой при решении данной задачи становится неоднозначность выбора двухмерной элементарной ячейки для заданной проекции (рис. 2) [5].

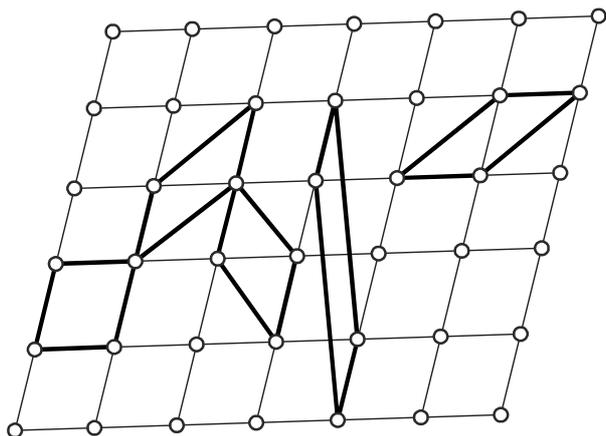


Рис. 2. Варианты выбора двухмерной элементарной ячейки

Детальный анализ данной проблемы был проведён в работах [6, 7], в которых использовалось представление решётки Бравэ в виде уникального пространства признаков, позволяющего разложить любое НМИ на элементарные структуры.

Один из возможных подходов к решению описываемой проблемы был предложен в работе [8], в которой для определения типа кристаллической решётки сначала оценивались параметры исследуемой решётки, а затем проводилось их попарное сравнение с заранее заданной базой эталонных параметров. В результате, вывод о принадлежности решётки к тому или иному типу делался на основании наибольшего числа совпадений её параметров с параметрами эталонных решёток данного типа.

Другой подход к решению рассматриваемой задачи предложен в работе [9]. Для классификации кристаллической решётки Бравэ по изображению её проекции было использовано распределение зависимости

количества одинаковых расстояний от расстояния между центрами материальных частиц и углами наблюдения решётки. Для классификации решёток Бравэ было предложено использовать классификатор, состоящий из 15 нейронных сетей, которые охватывают все возможные попарные перестановки примитивных решёток Бравэ. Каждая сеть различала два класса. Результатом классификации являлся класс, получивший наибольшее число голосов при попарном сравнении. Для каждой нейронной сети была выбрана архитектура с двумя скрытыми слоями и сигмоидальной функцией активации.

Так как классы кристаллических решёток Бравэ являются пересекающимися, в данной работе предложено использовать нечёткие нейронные сети. Данные модели сочетают в себе способности нейронных сетей к обучению и обобщению знаний, операции нечёткой логики, позволяющие определить степень принадлежности объекта к заданному классу в виде вещественного числа в интервале от 0 до 1, и возможности классификации нечётких продукционных баз правил. Результатом классификации является класс, получивший наибольшее значение степени принадлежности.

Среди основных методик решения задачи классификации при помощи нечётких нейронных сетей можно выделить следующие: определение параметров классификации по результатам экспериментов и экспертная оценка параметров. В работах [10–15] приведены результаты исследований подобного класса нейронных сетей для решения задач классификации с использованием параметров по результатам экспериментов. При этом в работе [15] используется авторская модификация сети Такаги–Сугено–Канга (ТСК) – рекуррентная ТСК. Введение рекуррентности позволило автоматизировать процесс формирования нечётких правил, но увеличило вычислительную сложность алгоритма обучения. В работе [16] описано решение задачи классификации с использованием нечёткой нейронной сети ТСК, в которой для отбора наиболее информативных классифицирующих признаков и формирования нечётких правил вывода применена методика экспертной оценки. В работе [17] подобные методики использованы для обучения авторской модификации сети Ванга–Менделя. Недостатком предложенного подхода является использование субъективных оценок достаточного большого числа экспертов и необходимость оценки их согласованности.

Классические модели нечётких продукционных нейронных сетей и модифицированные авторами модели сетей ТСК и Ванга–Менделя в качестве нечёткой логической операции конъюнкции используют алгебраическое произведение или логическое произведение в форме минимума. Соответственно, в качестве нечёткой логической операции дизъюнкции данные модели используют алгебраическую сумму или логическое сложение в форме максимума [15, 17, 18, 19]. В то же время проведённые в работе [20] иссле-

дования позволяют сделать вывод об эффективности использования в моделях нейронных сетей нечётких логических операций алгебр Гёделя, Гогэна и Лукашевича. В работе [21] предложены и исследованы модификации сети Ванга–Менделя, позволяющие работать с нечёткими логическими операциями, заданными данными алгебрами.

Модель нечёткой нейронной сети ТСК и модификация модели сети Ванга–Менделя (сеть Мамдани–Заде с операциями алгебры Гёделя) исследовались на выборке из 7000 параметров элементарных ячеек кристаллических решёток Бравэ, принадлежащих 7 классам кристаллических систем.

**1. Модели нечётких сетей**

Пример структуры нечёткой сети ТСК с несколькими выходами приведён на рис. 3.

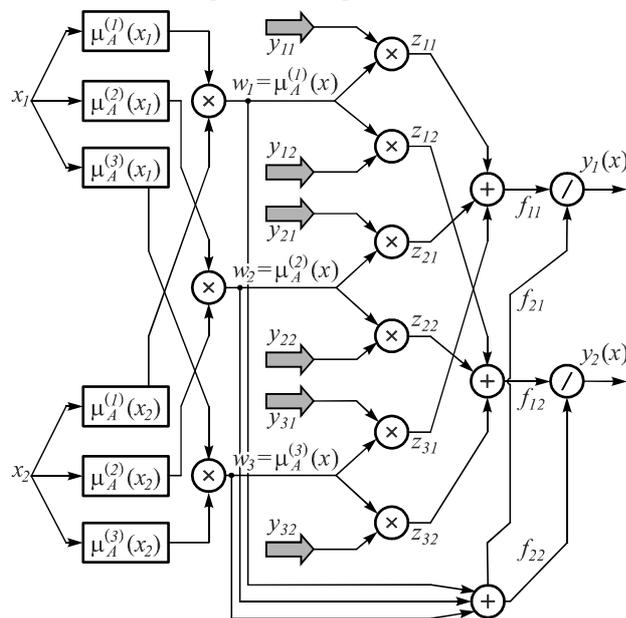


Рис. 3. Структура нечёткой нейронной сети ТСК с двумя входами, тремя правилами вывода и двумя выходами

При этом в качестве функции фуззификации для каждой переменной \$x\_j\$ используется обобщённая функция Гаусса:

$$\mu_A^{(i)}(x_j) = \frac{1}{1 + \left( \frac{x_j - c_j^{(i)}}{\sigma_j^{(i)}} \right)^{2b_j^{(i)}}}, \quad (1)$$

где \$\mu\_A^{(i)}(x\_j)\$ – значение коэффициента принадлежности в соответствии с применяемой функцией фуззификации Гаусса с параметрами \$(c\_j^{(i)}, \sigma\_j^{(i)}, b\_j^{(i)})\$.

Для агрегации условия \$i\$-го правила используется операция нечёткой конъюнкции в виде алгебраического произведения:

$$\mu_A^{(i)}(x) = \prod_{j=1}^N \mu_A^{(i)}(x_j). \quad (2)$$

При \$M\$ правилах вывода агрегирование выходного результата сети производится по формуле (3), которую можно представить в виде:

$$y(x) = \left( 1 / \sum_{i=1}^M w_i \right) \times \sum_{i=1}^M w_i y_i(x), \quad (3)$$

где \$y\_i(x) = p\_{i0} + \sum\_{j=1}^N p\_{ij} x\_j\$ – агрегация импликации, а \$p\_{ij}(i = 1, 2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N)\$ – коэффициенты полинома функции ТСК. Присутствующие в этом выражении веса \$w\_i\$ интерпретируются как компоненты \$\mu\_A^{(i)}(x)\$, определённые формулой (2).

Первый слой сети выполняет фуззификацию каждой входной переменной \$x\_j(j = 1, 2, \dots, N)\$, определяя для каждого \$i\$-го правила вывода значение коэффициента принадлежности \$\mu\_A^{(i)}(x\_j)\$. Это параметрический слой с параметрами \$(c\_j^{(i)}, \sigma\_j^{(i)}, b\_j^{(i)})\$, подлежащими адаптации в процессе обучения.

Второй слой выполняет агрегирование отдельных переменных \$x\_j\$, определяя результирующее значение коэффициента принадлежности \$w\_i = \mu\_A^{(i)}(x)\$ для вектора \$x\$ в соответствии с формулой (2). Третий слой представляет собой генератор функции ТСК, рассчитывающий значения \$y\_i(x) = p\_{i0} + \sum\_{j=1}^N p\_{ij} x\_j\$. В этом слое также происходит умножение сигналов \$y\_i(x)\$ на значения \$w\_i\$, сформированные в предыдущем слое. Это параметрический слой, в котором адаптации подлежат линейные веса \$p\_{ij}(i = 1, 2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N)\$.

Четвёртый слой составляют два нейрона-сумматора, один из которых рассчитывает взвешенную сумму сигналов \$y\_i(x)\$, а второй определяет сумму весов \$\sum\_{i=1}^M w\_i\$.

Пятый слой состоит из нескольких выходных нейронов – это нормализующий слой, в котором веса подвергаются нормализации в соответствии с формулой (3). Выходные сигналы \$y\_s(x)\$ определяются выражением:

$$y_s(x) = f_s(x) = f_{1s} / f_{2s}. \quad (4)$$

Пример структуры сети Мамдани–Заде, являющейся модификацией известной сети Ванга–Менделя, приведён на рис. 4.

Это четырёхслойная структура, в которой первый слой аналогичен первому слою сети ТСК. Второй слой выполняет попарное агрегирование отдельных переменных \$x\_j\$, определяя результирующее значение коэффициента принадлежности \$w\_i = \mu\_A^{(i)}(x)\$ для вектора \$x\$ в соответствии с определением операции нечёткой конъюнкции в виде минимума (5).

Этот слой непараметрический.

$$w_i = \mu_A^{(i)}(x_k) \otimes \mu_A^{(k)}(x_k) = \min \{ \mu_A^{(i)}(x_k), \mu_A^{(k)}(x_k) \}. \quad (5)$$

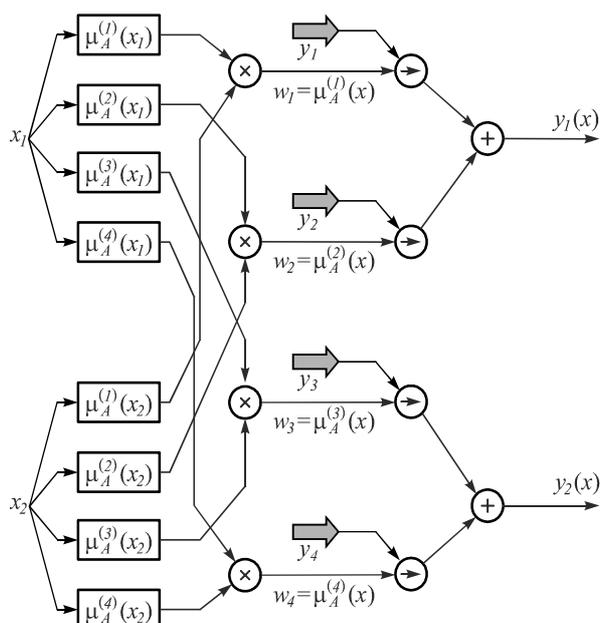


Рис. 4. Структура нейронной нечёткой продукционной сети Мамдани–Заде с двумя входами, четырьмя правилами вывода и двумя выходами

Третий слой реализует операцию нечёткой импликации в соответствии с формулой (6), в которой переменные  $v_i$  означают заключения правил вывода, формируемые в процессе обучения. Это параметрический слой.

$$\mu_{A \rightarrow B}(w_i, v_i) = \begin{cases} 1, & \text{если } w_i \leq v_i \\ v_i, & \text{если } w_i > v_i \end{cases} \quad (6)$$

Четвёртый слой состоит из нескольких выходных нейронов, которые реализуют операцию нечёткой дизъюнкции в виде максимума (формула 7), в которой переменные  $z_i$  и  $z_k$  соответствуют результатам импликации  $i$ -го и  $k$ -го правил вывода.

$$z_i \oplus z_k = \max\{z_i, z_k\}. \quad (7)$$

### 2. Методика обучения

Для обучения нейронных сетей были использованы данные о сгенерированных элементарных ячейках кристаллических решёток 7 различных типов. Генерация проводилась с использованием системы моделирования кристаллических решёток, описанной в работах [22, 23], при следующих условиях:

- число решёток на каждую кристаллическую систему – 1000;
- минимально допустимое различие сторон ячейки – 0,050 Å;
- минимально допустимое различие углов ячейки – 1 °.

Параметры генерации элементарных ячеек:

- диапазон длин сторон – 1-5 Å;
- диапазон величин углов – 10-90 °.

Для генерации решёток количество узлов по каждому из направлений было задано равным трём.

Предварительный анализ исходных данных позволил разделить 7 типов кристаллических решёток

на 4 группы в соответствии с количеством и порядковыми номерами информативных (ненулевых) столбцов в файлах данных:

- 1) триклинная, тригональная;
- 2) гексагональная;
- 3) моноклинная;
- 4) ромбическая, тетрагональная, кубическая.

Далее было проведено обучение и тестирование нейронных сетей ТСК и Мамдани–Заде в три этапа:

- 1) попарное обучение и тестирование нейронных сетей для распознавания 2 типов решёток;
- 2) обучение и тестирование нейронных сетей для распознавания всех 7 типов решёток;
- 3) обучение и тестирование нейронных сетей для распознавания типов решёток в подгруппах 1 и 4.

### 3. Определение типа кристаллических решёток

Относительная погрешность классификации при всех проведённых исследованиях считалась как процент неверно определённых типов кристаллических решёток на тестовой выборке. При исследованиях, проведённых на первом этапе, на вход нейронных сетей ТСК и Мамдани–Заде подавались 6-мерные вектора обучающих данных двух различных типов, выходной слой состоял из двух нейронов, в соответствии с числом распознаваемых классов. Для обеих сетей были получены практически идентичные результаты погрешности классификации, которые приведены в табл. 2.

Табл. 2. Значения относительной погрешности классификации типов кристаллических решёток, полученные при попарном обучении сетей ТСК и Мамдани–Заде (в процентах)

	hR (1)	hP (2)	mP (3)	oP (4)	tP (4)	cP (4)
aP (1)	10	0	0	0	1	1
hR (1)		0	0	0	0	2
hP (2)			15	15	43	12
mP (3)				42	16	10
oP (4)					16	8
tP (4)						12

Сравним полученные результаты с классификацией кристаллических решёток на три категории в зависимости от числа равных трансляций и углами между ними, приведённой в работе [9]. Типы решёток нижней категории – моноклинная и ромбическая – определяются нейронными сетями как похожие (погрешность классификации составляет 42 %), а триклинная решётка, принадлежащая к той же категории, определяется как совершенно от них отличная (погрешность классификации составляет 0 %). Данные результаты объясняются тем, что у моноклинной и ромбической кристаллических решёток совпадают 2 из трёх углов, а у триклинной все углы отличаются от первых двух типов решёток, и нейронные сети эти отличия в процессе обучения уловили.

Типы решёток средней категории – тетрагональная и гексагональная – обеими моделями нейронных сетей определены как похожие (погрешность классификации составляет 43 %). Типы решёток высшей категории – тригональная и кубическая – обеими моделями нейронных сетей определены как различные (погрешность классификации составляет 2 %), так как у них есть явное различие в значении третьего угла.

Особый интерес представляет сравнение полученных значений относительной погрешности классификации с результатами, полученными в работах [24, 25], в которых определение типа решётки осуществлялось с помощью методов параметрической идентификации. Для примера возьмём наилучший результат классификации, достигнутый при совместном оценивании параметров элементарных ячеек Бравэ и объёмов ячеек Вигнера–Зейтца (табл. 3).

Табл. 3. Значения относительной погрешности классификации типов кристаллических решёток, полученные при использовании методов параметрической идентификации (в процентах)

	<i>hR</i> (1)	<i>hP</i> (2)	<i>mP</i> (3)	<i>oP</i> (4)	<i>tP</i> (4)	<i>cP</i> (4)
<i>aP</i> (1)	0	0	1	0	0	0
<i>hR</i> (1)		0	0	2	3	26
<i>hP</i> (2)			7	0	0	0
<i>mP</i> (3)				22	10	0
<i>oP</i> (4)					34	15
<i>tP</i> (4)						26

Проведённое сравнение показало, что применение нейронных сетей позволяет существенно снизить значения погрешности классификации для следующих типов решёток:

- тригональная и кубическая – с 26 до 2 %;
- ромбическая и тетрагональная – с 34 до 16 %;
- тетрагональная и кубическая – с 26 до 12 %;
- ромбическая и кубическая – с 15 до 8 %.

С другой стороны, в задаче отделения моноклинных и гексагональных решёток от решёток 3-й и 4-й подгрупп нейронные сети продемонстрировали куда более слабые результаты, чем методы параметрической идентификации. В частности, при отделении гексагональных решёток от тетрагональных значение относительной погрешности возросло с 0 до 43 %.

На втором этапе исследований обе модели нейронных сетей были обучены на выборках данных, определяющих все 7 типов кристаллических решёток. На вход нейронных сетей ТСК и Мамдани–Заде подавались 6-мерные вектора обучающих данных 7 различных типов, выходной слой состоял из 7 нейронов, в соответствии с числом распознаваемых классов. В результате проведённых исследований обе модели нейронных сетей распознали с погрешностью, равной 0 %, кристаллические решётки гексагонального и моноклинного типов (2 и 3 подгруппы), что объясняется отличиями от других типов решёток сочетаниями нулевых и ненулевых столбцов в обучающих данных. Дру-

гими словами, нейронные сети определили решётки указанных типов как непересекающиеся классы.

Для определения типов кристаллических решёток, принадлежащих 1-й и 4-й подгруппам, были проведены дополнительные исследования третьего этапа. При этом для определения решёток 1-й подгруппы применялись модели сетей ТСК и Мамдани–Заде с 6 входами и 2 выходами, а для определения решёток 4-й подгруппы применялись модели нейронных сетей с 3 входами, соответствующими ненулевым столбцам исходных данных, и 3 выходами. Сеть ТСК показала погрешность классификации 10 % при определении типа решёток из 1-й подгруппы и 25 % при определении типа решёток из 4-й подгруппы. Сеть Мамдани–Заде показала погрешность классификации 4 % при определении типа решёток из 1-й подгруппы и 12 % при определении типа решёток из 4-й подгруппы, что существенно лучше, чем в случае использования стандартной архитектуры сети ТСК.

Что касается довольно невысокого результата по 4-й подгруппе решёток, то он обусловлен геометрическим пересечением классов. Множество решёток кубического типа (белая линия на рис. 5) лежат на одной прямой в 3-мерном пространстве. Данная прямая лежит в плоскости, содержащей элементы тетрагонального типа (тёмно-серая область на рис. 5). Данная плоскость, в свою очередь, лежит в параллелепипеде, образованном элементами ромбического типа (светло-серый куб на рис. 5).

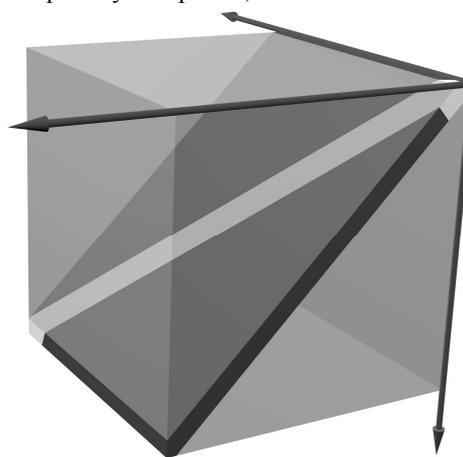


Рис. 5. Иллюстрация пересечения классов типов решёток 4-й подгруппы

### Заключение

В работе была предложена трёхэтапная методика обучения нейронных сетей: на первых двух этапах происходит разделение кристаллических решёток на непересекающиеся классы, а на последнем этапе – распознавание кристаллических решёток, принадлежащих пересекающимся классам.

Сравнение с существующими методами параметрической идентификации показало, что применение нейронных сетей позволяет значительно снизить погрешность классификации.

Проведённое исследование задачи классификации кристаллических решёток в трёхмерном пространстве

на основе параметров элементарных ячеек Бравэ показало, что нечёткие нейронные сети являются наиболее подходящими для решения задачи определения типа трёхмерной решётки.

### 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 14-01-00369-а, 14-07-97040-р\_поволжье\_а, 15-29-03823, 15-29-07077; программы № 6 фундаментальных исследований ОНИТ РАН «Биоинформатика, современные информационные технологии и математические методы в медицине» 2015 г.

### Литература

1. **Tilley, R.** Crystals and crystal structure / R. Tilley. – West Sussex: John Wiley & Sons Ltd, 2006. – P. 17-32.
2. **Kessler, E.G.** Precision comparison of the lattice parameters of silicon monocrystals / E.G. Kessler, A. Henins, R.D. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, N 1. – P. 1-18.
3. **Smith, W.F.** Foundations of Materials Science and Engineering / W. F. Smith. – NY: McGraw-Hill, 2004. – P. 67-107.
4. **Patera, J.** Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of algorithmy. – 2005. – P. 309-319.
5. **Hammond, C.** The basic of crystallography and diffraction, 3rd ed. / C. Hammond // Oxford University Press, 2009. – P. 55-83.
6. **Сойфер, В.А.** Анализ и распознавание наномасштабных изображений: традиционные подходы и новые постановки задач / В.А. Сойфер, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 136-144.
7. **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.
8. **Куприянов, А.В.** Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве / А.В. Куприянов, Д.В. Кириш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.
9. **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.
10. **Лёзина, И.В.** Исследование идентифицирующих свойств нечёткого многослойного персептрона / И.В. Лёзина, А.Е. Краснов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2014. – Т. 16, № 4(2). – С. 340-343.
11. **Лёзин, И.А.** Автоматизированная система классификации конструкторско-технологических элементов деталей с использованием баз знаний / И.А. Лёзин, Д.Е. Маркелов // Главный механик. – 2014. – № 5. – С. 38-41.
12. **Солдатова, О.П.** Многофункциональный имитатор нейронных сетей / О.П. Солдатова // Программные продукты и системы. – 2012. – № 3. – С. 27-31.
13. **Солдатова, О.П.** Решение задачи классификации при принятии управленческих решений в условиях нечёткости исходных данных с использованием гибридного нейронно-чёткого классификатора / О.П. Солдатова, А.Н. Даниленко

// Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2014. – Т. 16, № 4(2). – С. 350-358.

14. **Солдатова, О.П.** Классификация потока системных ошибок с помощью гибридной модификации нейронной сети Ванга–Менделя / О.П. Солдатова, Е.М. Пудикова // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2014. – Т. 16, № 4(2). – С. 359-366.
15. **Vineetha, S.** MicroRNA-mRNA interaction network using TSK-type recurrent neural fuzzy network / S. Vineetha, C.C.S. Bhat, S.M. Idicula // Gene. – 2013. – Vol. 515, Issue 2. – P. 385-390.
16. **Кипер, А.В.** Разработка нечеткого классификатора на базе нечеткой системы Сугено для определения ранга пожара на территории морского порта / А.В. Кипер, Т.С. Станкевич // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Морская техника и технология. – 2012. – № 2. – С. 18-25.
17. **Катасёв, А.С.** Математическое обеспечение и программный комплекс формирования нечётко-продукционных баз знаний для экспертных диагностических систем / А.С. Катасёв // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 10(9). – С. 1922-1927.
18. **Осовский, С.** Нейронные сети для обработки информации / С. Осовский; пер. с польского И.Д. Рудинского. – М.: Финансы и статистика, 2002. – 344 с.
19. **Рутковская, Д.** Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечёткие системы / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский, пер. с польского И.Д. Рудинского. – М.: «Горячая линия – Телеком», 2006. – 452 с.
20. **Новак, В.** Математические принципы нечёткой логики / В. Новак, И. Перфильева, И. Мочкорж; пер. с англ. – М.: Физматлит, 2006. – 352 с.
21. **Солдатова, О.П.** Решение задачи классификации с использованием нечётких нейронных продукционных сетей на основе модели вывода Мамдани–Заде / О.П. Солдатова, И.А. Лёзин // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2014. – № 2(35). – С. 136-148.
22. **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 // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 290-297.
23. **Kirsh, D.V.** Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 162-170.
24. **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.
25. **Kirsh, D.V.** Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // Supplementary Proceedings of the 4th International Conference on Analysis of Images, Social Networks and Texts (AIST'2015). – 2015. – P. 40-45

### References

- [1] Tilley R. Crystals and crystal structure. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd; 2006.
- [2] Kessler EG, Henis A, Deslattes RD, 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; 99(1): 1-18.

- [3] Smith WF. Foundations of Materials Science and Engineering. NY: McGraw-Hill; 2004.
- [4] Patera J, Skala V. Centered cubic lattice method comparison. Proceedings of algoritmy 2005; 309-19.
- [5] Hammond C. The basic of crystallography and diffraction, 3rd ed. Oxford University Press, 2009.
- [6] Soifer VA, Kupriyanov AV. Analysis and recognition of the nanoscale images: conventional approach and novel problem statement [In Russian]. Computer Optics 2011; 35(2): 136-44.
- [7] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space. Pattern recognition and image analysis 2015; 25(3): 456-60.
- [8] Kupriyanov AV, Kirsh DV. Estimating the similarity measure of crystal lattices by coordinates of their nodes in three-dimensional space. Computer Optics 2012; 36(4): 590-95.
- [9] Kupriyanov AV. Texture analysis and identification of the crystal lattice type Upon the nanoscale images [In Russian]. Computer Optics 2011; 35(2): 151-7.
- [10] Lyozina IV, Krasnov AE. Researching the multi-layer perceptron identification abilities [In Russian]. Proceedings of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences 2014; 16-4(2): 340-3.
- [11] Lyozin IA, Markelov DE. Automated classification system of design and technological elements by using knowledge bases [In Russian]. Chief mechanical engineer 2014; 5: 38-41.
- [12] Soldatova OP. Multifunctional neural network simulator [In Russian]. Programming products and systems 2012; 3: 27-31.
- [13] Soldatova OP, Danilenko AN. Solving the classification problem in management decisions in a blurred source data by using the hybrid neural fuzzy classifier [In Russian]. Proceedings of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences 2014; 16-4(2): 350-8.
- [14] Soldatova OP, Pudikova EM. Classifying the system errors by using the hybrid versions of the Wang-Mendel's neural network [In Russian]. Proceedings of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences 2014; 16-4(2): 359-66.
- [15] Vineetha S, Bhat CCS, Idicula SM. MicroRNA-mRNA interaction network using TSK-type recurrent neural fuzzy network. Gene 2013; 515(2): 385-90.
- [16] Kiper AV, Stankevich TS. Designing of fuzzy classifier based on fuzzy system Sugeno for definition of the fire rank of the territory of seaport [In Russian]. Bulletin of the Astrakhan State Technical University. Series "Marine engineering and technology" 2012; 2: 18-25.
- [17] Katasev AS. Mathematical and software for fuzzy-productions knowledge bases generation of the expert diagnostic systems [In Russian]. Basic Research 2013; 10(9): 1922-7.
- [18] Osowski S. Sieci neuronowe do przetwarzania informacji.– Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej [In Polish]. Warszawa; 2000.
- [19] Rutkowska D, Pilinski M, Rutkowski L. Sieci neuronowe, algorytmy genetyczne i systemy rozmyte. [In Polish]. Warszawa: "Wydawnictwo Naukowe PWN" Publisher; 1999.
- [20] Novak V, Perfilieva I, Mockor J. Mathematical principles of fuzzy logic. Kluwer International Series in Engineering and Computer Science volume 1999; 517.
- [21] Soldatova OP, Lyozin IA. Solving the classification problem by using neural fuzzy production based network models of Mamdani-Zadeh [In Russian]. Bulletin of the Samara State Technical University. A series of physical and mathematical sciences 2014; 35(2): 136-48.
- [22] Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Researching methods of reconstruction of three-dimensional crystal lattice from images of projections. CEUR Workshop Proceedings 2015; 1490: 290-7.
- [23] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space. CEUR Workshop Proceedings 2015; 1490: 162-70.
- [24] 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): 145-51.
- [25] Kirsh DV, Kupriyanov AV. Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters. Supplementary Proceedings of the 4th International Conference on Analysis of Images, Social Networks and Texts (AIST'2015) 2015; 40-5.

## APPLICATION OF FUZZY NEURAL NETWORKS FOR DEFINING CRYSTAL LATTICE TYPES IN NANOSCALE IMAGES

O.P. Soldatova<sup>1</sup>, I.A. Lyozin<sup>1</sup>, I.V. Lyozina<sup>1</sup>, A.V. Kupriyanov<sup>1,2</sup>, D.V. Kirsh<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Samara State Aerospace University, Samara, Russia,

<sup>2</sup> Image Processing Systems Institute, Russian Academy of Sciences, Samara, Russia

### Abstract

The article proposes the application of neural fuzzy networks for defining the overlapping classes of crystal lattices. We discuss the following neural fuzzy networks: Takagi-Sugeno-Kung network and a modification of Wang-Mendel neural fuzzy network proposed by the authors. A three-step scheme of neural network training is proposed. The results prove the efficiency of the proposed approach for the determination of crystal lattice types.

**Keywords:** pattern recognition, nanoscale images, nanostructures, crystal lattice, neural fuzzy networks, Takagi-Sugeno-Kung network, Wang-Mendel network.

**Citation:** Soldatova OP, Lyozin IA, Lyozina IV, Kupriyanov AV, Kirsh DV. Application of fuzzy neural networks for defining crystal lattice types in nanoscale images. Computer Optics: 2015; 39(5): 787-94. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-94.

**Acknowledgments:** This work was partially supported by the RF Ministry of Education and Science under the 2013-2020 Program of SSAU competitiveness enhancement among the top world universities; by the Russian Foundation for Basic Research grants (# 14-01-00369-a, # 14-07-97040-p\_povolzh'e\_a, # 15-29-03823, # 15-29-07077); by the ONIT RAS program # 6 "Bioinformatics, modern information technologies and mathematical methods in medicine" 2015.

### *Сведения об авторах*

**Солдатова Ольга Петровна**, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королёва. Сфера научных интересов: применение нейронных и нейронечётких сетей для решения задач распознавания и прогнозирования; применение нечёткой логики и систем нечёткого вывода в нейросетевых моделях; проектирование нейроимитаторов.

E-mail: [op-soldatova@yandex.ru](mailto:op-soldatova@yandex.ru).

**Olga Petrovna Soldatova**, is a Candidate of Science in Engineering and an associate Professor at the sub-department of Information Systems and Technologies of Samara State Aerospace University. Currently, her main areas of research include application of neural and neuro-fuzzy networks in recognition and forecasting problems; application of fuzzy logic and fuzzy conclusion systems in neural network models; designing of neurosimulators.

**Лёзин Илья Александрович**, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королёва. Сфера научных интересов: применение нейронных и нейронечётких сетей для решения задач распознавания и прогнозирования; применение нечёткой логики и систем нечёткого вывода в нейросетевых моделях; двумерная аппроксимация.

E-mail: [ilyozin@yandex.ru](mailto:ilyozin@yandex.ru).

**Ilya Alexandrovich Lyozin**, is a Candidate of Sciences in Engineering and an associate Professor at the sub-department of Information Systems and Technologies of Samara State Aerospace University. Currently, his main areas of research are in application of neural and neuro-fuzzy networks in recognition and forecasting problems; application of fuzzy logic and fuzzy conclusion systems in neural network models; two-dimensional approximation.

**Лёзина Ирина Викторовна**, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королёва. Сфера научных интересов: применение нейронных и нейронечётких сетей для решения задач классификации и прогнозирования; применение нечёткой логики и систем нечёткого вывода в нейросетевых моделях; аппроксимация.

E-mail: [chuchyck@yandex.ru](mailto:chuchyck@yandex.ru).

**Irina Viktorovna Lyozina**, is a Candidate of Sciences in Engineering and an associate Professor at the sub-department of Information Systems and Technologies of Samara State Aerospace University. Currently, her main areas of research include the application of neural and neuro-fuzzy networks for solving classification and forecasting problems; application of fuzzy logic and fuzzy conclusion systems in neural network models; approximation.

**Куприянов Александр Викторович**, профессор кафедры технической кибернетики Самарского государственного аэрокосмического 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: [akupr@smr.ru](mailto:akupr@smr.ru).

**Alexander Victorovich Kupriyanov**, DrSC; he is an associate Professor of the Technical Cybernetics sub-department, Samara State Aerospace University and a senior Researcher of the Laboratory of Mathematical Methods of Image Processing, Image Processing Systems Institute. Currently, his main areas of research include digital signal and image processing; pattern recognition and artificial intelligence; biomedical imaging and analysis.

**Кирш Дмитрий Викторович**, магистр прикладной математики и информатики; аспирант Самарского государственного аэрокосмического 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).

**Dmitriy Victorovich Kirsh** has a Master's degree in applied mathematics and computer science; currently he is a postgraduate student at the Technical Cybernetics Department, Samara State Aerospace University and a trainee researcher at the Laboratory of Mathematical Methods of Image Processing, Image Processing Systems Institute of the RAS. Currently, his main areas of research include digital image processing; crystal lattice comparison methods; classification of crystal lattices.

---

*Поступила в редакцию 14 марта 2015 г.  
Окончательный вариант – 9 июня 2015 г.*