

Алгоритм реконструкции трёхмерной структуры кристалла по двумерным проекциям

Д.В. Кириш^{1,2}, А.С. Широканев^{1,2}, А.В. Куприянов^{1,2}

¹ ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 443001, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 151;

² Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, 443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, д. 34

Аннотация

В статье рассматривается задача трёхмерной реконструкции кристаллической решётки, являющаяся важным этапом рентген-структурного анализа вещества. От качества реконструкции напрямую зависит точность параметрической и структурной идентификации кристалла. Предлагаемый алгоритм реконструкции трёхмерной кристаллической решётки основан на минимизации расстояний от узла до прямой, спроецированной на заданную плоскость. В качестве исходных данных используются три набора двумерных координат узлов решётки, полученные по трём двумерным проекциям. Также произведено аналитическое вычисление ошибки реконструкции, позволяющее оценить точность проведённой реконструкции. Результаты, полученные в ходе вычислительного эксперимента, подтвердили высокое качество предложенного алгоритма реконструкции и его устойчивость к возможным искажениям исходных координат узлов. Кроме того, выявлена проблема разделимости моноклинных, ромбических и тетрагональных решёток, точность идентификации которых составила 34%, 53% и 10% соответственно.

Ключевые слова: трёхмерная реконструкция, двумерная проекция, кристаллическая решётка, элементарная ячейка, обработка изображений, компьютерная томография, структурная идентификация, метрика Хаусдорфа.

Цитирование: Кириш, Д.В. Алгоритм реконструкции трёхмерной структуры кристалла по двумерным проекциям / Д.В. Кириш, А.С. Широканев, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2019. – Т. 43, № 2. – С. 324-331. – DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-2-324-331.

Введение

На сегодняшний день большое внимание уделяется задаче реконструкции трёхмерных объектов по двумерным проекциям [1–4]. Существует два основных класса проекций: перспективные и параллельные. Перспективные проекции применяются зачастую для восстановления трёхмерного объекта по его разноракурсным фотографиям. В случае же двумерных снимков, полученных в результате частичного прохождения сигнала сквозь исследуемый объект (рентгеновское излучение) или же отражения сигнала от поверхности объекта (оптическая когерентная томография), говорят о параллельной проекции.

В частности, для изучения внутренней структуры вещества активно применяется электронная микроскопия: электрон выступает в роли сигнала, проходящего сквозь кристалл. Такой способ позволяет формировать двумерные изображения, являющиеся параллельными проекциями кристаллической решётки с заранее заданной ориентацией наноструктуры в пространстве.

Основной задачей рентген-дифракционного (рентген-структурного) анализа вещества является определение параметров модели его кристаллической решётки [5, 6].

С появлением электронной микроскопии стало возможно наблюдать атомарную структуру вещества с высокой степенью точности. В настоящее время линейное разрешение электронного микроскопа достигает порядка $0,1\text{Å}$ [7]. В результате работы электронного микроскопа формируются двумерные изображе-

ния, представляющие собой параллельные проекции кристаллической решётки.

Однако из-за того, что двумерное изображение решётки обладает заведомо более низкой информативностью, чем её трёхмерная модель, анализ её параметров по одиночной проекции представляет значительную сложность. Кроме того, в одной из предыдущих работ [8] была разработана модель наблюдаемости кристаллической решётки на двумерной проекции и доказано, что в ряде случаев (нарушение условия наблюдаемости) параметры решётки априори не могут быть оценены верно. Следовательно, разработка метода реконструкции трёхмерной структуры вещества по двумерным проекциям является актуальной задачей, которая позволит значительно повысить точность рентген-структурного анализа.

Модели трёхмерных кристаллических решёток

Элементарная ячейка в кристаллографии является фундаментальным понятием. Она представляет собой особую область кристалла, являющуюся минимальным строительным блоком: всю кристаллическую решётку можно образовать с помощью данной ячейки путём её параллельного переноса (трансляции) по направлениям трёх основных векторов трансляции [9].

Примером элементарной ячейки является ячейка Вигнера–Зейтца [9]. Данная ячейка представляет собой единичную область разбиения диаграммы Вороного, построенной на узлах кристаллической решётки (рис. 1). Так как структура узлов обладает пространственной симметрией, то все области разбиения кон-

груэнтны. Однако, несмотря на простоту, универсальность, отражение свойств симметрии кристалла и однозначность построения, трёхмерная ячейка Вигнера–Зейтца является крайне сложным объектом с точки зрения его математического описания. Как следствие, она плохо подходит для оценки индивидуальных параметров кристаллической решётки.

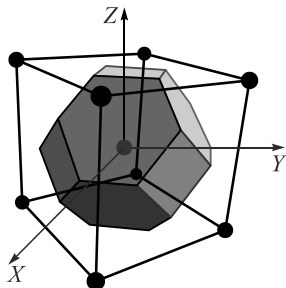


Рис. 1. Элементарная ячейка Вигнера-Зейтца

В связи с возникшими сложностями описания ячейки Вигнера–Зейтца было решено обратиться к другому виду элементарных ячеек – элементарным ячейкам Браве (рис. 2). В отличие от ячейки Вигнера–Зейтца, ячейка Браве является значительно более простым объектом с точки зрения математического

описания: шести параметров (трёх длин трансляционных векторов и трёх углов между векторами) достаточно для задания элементарной ячейки Браве.

Всё множество кристаллических решёток подразделяют на 7 основных кристаллических систем или сингоний (рис. 3). При этом каждая сингония характеризуется не только геометрическими, но и соответствующими физико-химическими свойствами.

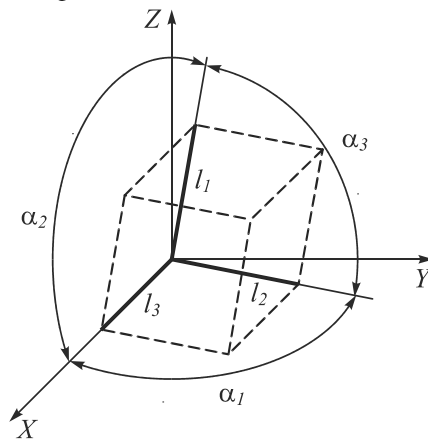


Рис. 2. Элементарная ячейка Браве

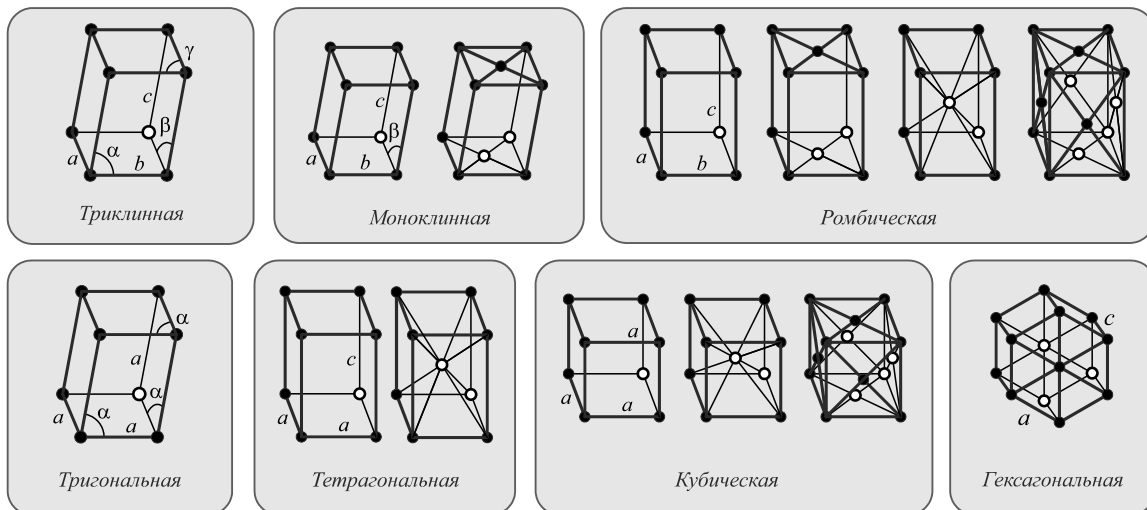


Рис. 3. Элементарные ячейки основных кристаллических систем

Однако элементарная ячейка Браве обладает и существенным недостатком по сравнению с ячейкой Вигнера–Зейтца: возникает проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки [9]. Проблема заключается в том, что для одной и той же структуры кристаллической решётки элементарную ячейку можно выбрать множеством различных способов (рис. 4).

Отсюда возникает основная сложность точного определения параметров элементарной ячейки при анализе кристаллической структуры вещества [10–15]. Для повышения точности определения параметров элементарной ячейки требуется, в первую очередь, обеспечить высокую точность восстановления трёхмерной структуры решётки, по которой и будет производиться параметрическая идентификация [16–22].

В связи с этим сложно переоценить важность этапа реконструкции трёхмерной решётки для решения задачи анализа кристаллической структуры вещества.

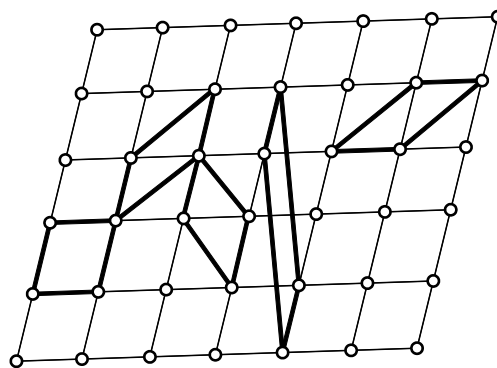


Рис. 4. Варианты выбора элементарной ячейки

Метод трёхмерной реконструкции кристаллической решётки

Кристаллическая решётка задаётся набором узлов в трёхмерном пространстве $X = \{\bar{x}_l\}$, $l = \overline{1, \infty}$. По определению кристаллической решётки данное множество образуется путём параллельных переносов элементарной ячейки и в общем случае является бесконечным:

$$\bar{x}_l = i_l \bar{a}_1 + j_l \bar{a}_2 + k_l \bar{a}_3,$$

где $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ – основные трансляционные вектора, $i_l, j_l, k_l \in \mathbb{Z}$ – коэффициенты трансляции.

На практике же, так как известно общее правило формирования решётки, можно ограничиться конечным множеством узлов.

В процессе обработки двумерных снимков электронной микроскопии получают параллельные проекции решётки, состоящие из набора узлов. Каждая проекция характеризуется положением плоскости в пространстве. Теорема компьютерной томографии о лучевом преобразовании гласит, что любой трёхмерный объект может быть восстановлен по бесконечному количеству лучевых преобразований [23]. Однако кристаллическая решётка формируется по правилу трансляции, поэтому для трёхмерной структуры информативными являются 4 соседних узла, образующие тройку некопланарных векторов – основных векторов трансляции (все три вектора имеют начало в одном и том же узле). Отсюда следует предположение, что для восстановления трёхмерной структуры кристаллической решётки достаточно использовать три проекции (лучевых преобразования).

В процессе формирования изображения, состоящего из двумерных узлов, возникает погрешность ϵ , которая включает как погрешность самого микроскопа, так и погрешность определения центров узлов.

Введём обозначение: $P = (\{\bar{z}_l\}_{l=1}^L, \Phi)$ – проекция, содержащая L двумерных точек и заданная в пространстве матрицей Φ . Для удобства будем считать, что проекция, лежащая в плоскости XOY, имеет матрицу $\Phi = E$. Проекция представляет собой плоскость в пространстве, проходящую через нулевой вектор линейного пространства и задаваемую вектором-нормалью. Тогда нормаль плоскости для заданной проекции будет определяться следующим выражением:

$$\bar{n} = \Phi(0 \ 0 \ 1)^T. \tag{1}$$

Если матрица Φ задаёт ориентацию плоскости проекции в трёхмерном пространстве, то обратная матрица Φ^{-1} будет переводить из двумерного пространства плоскости проекции в стандартное трёхмерное пространство, то есть двумерные узлы переводятся в трёхмерное пространство с использованием выражения:

$$\bar{y} = \Phi^{-1}(z_1 \ z_2 \ 0)^T. \tag{2}$$

Рассмотрим две проекции P_1 и P_2 . Пусть \bar{n}_1 и \bar{n}_2 – нормали соответствующих плоскостей.

Выберем точку \bar{y}_1 на проекции P_1 . Проведём прямую с направляющим вектором \bar{n}_1 через точку \bar{y}_1 . Уравнение прямой будет задаваться следующим выражением:

$$\bar{x} = \bar{n}_1 t + \bar{y}_1. \tag{3}$$

Выберем точку \bar{y}_2 на проекции P_2 . Спроецируем прямую на плоскость другой проекции и рассмотрим 3 ключевых расстояния (рис. 5): расстояние d от спроецированной прямой до точки \bar{y}_2 , расстояние D_γ от точки \bar{y}_2 до прямой (3), расстояние D от прямой (3) до спроецированной прямой. Заметим, что расстояние от прямой (3) до спроецированной прямой есть расстояние от прямой (3) до плоскости проекции P_2 .

По представленной схеме можно вывести расстояние d^2 , которое будет зависеть от свободной переменной t . Переменная t определяет точку на прямой (3). Интерес вызывает только такая точка, которая обеспечивает минимум d^2 . Если точка \bar{y}_2 окажется достаточно близкой до прямой (3), то есть $d < \epsilon$, то соответствующую точку на прямой (3) будем считать кандидатом на восстанавливаемый узел решётки.

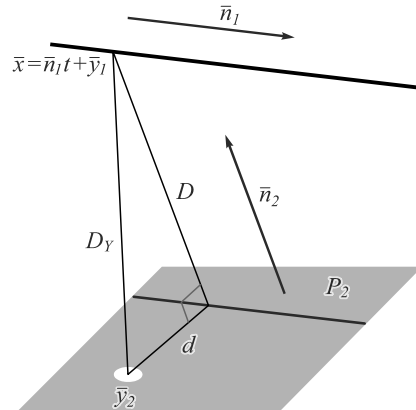


Рис. 5. Проецирование прямой на плоскость проекции и иллюстрация ключевых расстояний

После вычисления всех кандидатов на восстанавливаемые узлы решётки необходимо исключить дублирующие узлы, которые образовались при восстановлении с разных пар проекций, но при этом представляют один и тот же узел в пространстве с учётом заданной погрешности ϵ .

Таким образом, метод реконструкции на основе минимизации расстояния до узла на проекции заключается в выполнении следующих этапов:

- выбор опорной проекции P_k ;
- для каждой пары проекций (P_1, P_2) :
 - вычислить векторы нормалей к плоскостям проекций \bar{n}_1 и \bar{n}_2 ;
 - выбрать узел z_1 на проекции P_1 и узел z_2 на проекции P_2 , вычислить векторы \bar{y}_1 и \bar{y}_2 с помощью обратной матрицы Φ^{-1} ;
 - сформировать множество узлов в трёхмерном пространстве \hat{X} , соответствующее трёхмерной структуре кристаллической решётки:
 - $s_1 = \bar{n}_1^T \bar{n}_2$;

- $t_1 = (s_1 \bar{n}_1^T \bar{y}_1 - \bar{n}_1^T (\bar{y}_1 - \bar{y}_1)) / (1 - s_1^2)$;
- $\bar{x}_1 = \bar{n}_1 t_1 + \bar{y}_1$;
- $D = \bar{n}_2^T \bar{x}_1$;
- $d^2 = \|x_1 - y_1\|^2 - D^2$;
- если $d^2 < \delta_d^2$, то $\hat{X} = \hat{X} \cup \{\bar{x}_1\}$;
- объединить все узлы из множества \hat{X} , для которых верно $d(\bar{x}_i, \bar{x}_j) < \delta_d$, в кластеры $D_q : q = 1, Q$, где Q – количество найденных кластеров;
- для каждого множества D_q произвести усреднение:

$$\bar{x}_q = \frac{1}{|D_q|} \sum_{\bar{x} \in D_q} \bar{x}.$$

Таким образом, формируем множество

$$\hat{X} = \{\bar{x}_q\}_{q=1, Q}.$$

Множество \hat{X} будет содержать восстановленные узлы с учётом заданной допустимой ошибки ϵ . Полученное множество может использоваться в дальнейшем для проведения параметрической и структурной идентификации кристаллических решёток в трёхмерном пространстве [18–22].

Оценка погрешности реконструкции

Для узла \bar{y} , переведённого из двумерной плоскости в пространство действием матрицы Φ^{-1} на соответствующий двумерный узел проекции, искажение представляет собой выражение:

$$\tilde{\bar{y}} = \bar{y} + \bar{\delta}, \text{ где } \|\bar{\delta}\| \leq \delta. \tag{4}$$

Введём обозначение:

$$c = \frac{1}{\|\bar{n}_1\|^2 - \bar{n}_2^T \bar{n}_1}.$$

Подставляя искажённый узел в формулу для t , получаем следующее выражение:

$$\tilde{t}_1 = t_1 + c \left(\bar{n}_1^T \left[\bar{n}_2 \left(\bar{n}_2^T \bar{\delta}_2 \right) - \bar{\delta}_1 + \bar{\delta}_2 \right] \right), \tag{5}$$

где $\bar{\delta}_k$ – погрешность определения узла \bar{y}_1 ; $\bar{\delta}_l$ – погрешность определения узла \bar{y}_2 ; t_k – точное значение параметра t .

Искажённый восстанавливаемый узел представляет собой выражение:

$$\tilde{\bar{x}}_1 = \bar{n}_1 \tilde{t}_1 + \tilde{\bar{y}}_1. \tag{6}$$

Подставляя (4) и (5) в (6), получаем:

$$\tilde{\bar{x}}_1 = \bar{n}_1 \left(t_1 + c \left(\bar{n}_1^T \left[\bar{n}_2 \left(\bar{n}_2^T \bar{\delta}_2 \right) - \bar{\delta}_1 + \bar{\delta}_2 \right] \right) \right) + \bar{y}_1 + \bar{\delta}_1. \tag{7}$$

Отбрасывая точное значение в (7), получаем формулу вектора ошибки (8).

$$\bar{\delta}_d = c \bar{n}_1 \left(\bar{n}_1^T \left[\bar{n}_2 \left(\bar{n}_2^T \bar{\delta}_2 \right) - \bar{\delta}_1 + \bar{\delta}_2 \right] \right) + \bar{\delta}_1. \tag{8}$$

Оценивая норму вектора (8), получаем следующую общую оценку для погрешности:

$$\|\bar{\delta}_d\| \leq \delta + \frac{3\delta}{\|\bar{n}_1\|^2 - \bar{n}_2^T \bar{n}_1}. \tag{9}$$

Для ортогональных проекций норма (9) ограничивается значением 4δ . Допустимое расстояние между точкой на проекции и спроецированной прямой ограничивается таким же значением, поскольку максимальное отклонение восстанавливаемого узла $\tilde{\bar{x}}_1$ совпадает с максимальным отклонением соответствующего узла на проекции. Таким образом, для ортогональных проекций $\epsilon = 4\delta_d$.

Исследование точности трёхмерной реконструкции кристаллических решёток

Для проведения экспериментов были сгенерированы 7000 решёток – по 1000 решёток каждой кристаллической системы: триклинной – aP , моноклинной – mP , ромбической – oP , тригональной – hR , тетрагональной – tP , гексагональной – hP , кубической – cP . При моделировании длины сторон элементарных ячеек варьировались от 1 Å до 10 Å, величины углов – от 5° до 175°. Каждая смоделированная решётка проецировалась на 3 ортогональные проекции, узлы которой искажались на значение $\delta_d = 0,1$. К сформированным проекциям применялся описанный выше алгоритм реконструкции кристаллической структуры.

Для анализа точности реконструкции кристаллических решёток необходимо сравнить полученную трёхмерную структуру с исходной смоделированной структурой [16, 17, 24]. Будем использовать метрику Хаусдорфа для сравнения множеств узлов.

Кристаллические решётки подразделяются на семь основных кристаллических систем. Проведём анализ делимости типов кристаллических систем. Для каждой восстановленной решётки и всеми исходными решётками вычислим расстояние Хаусдорфа. Будем относить восстановленную решётку к тому типу, расстояние до которой оказалось минимальным. Такой анализ относится к задачам структурной идентификации [16, 18, 19].

Схему предлагаемого вычислительного эксперимента можно разделить на 4 этапа (рис. 6):

1. Моделирование двумерных проекций.
2. Восстановление трёхмерной структуры решёток.
3. Идентификация параметров элементарных ячеек.
4. Проведение структурной идентификации путём сравнения с базой эталонных параметров.

Результаты проведения экспериментов представлены в табл. 1.

Полученные результаты показали, что в 6 случаях из 7 тип реконструированной решётки определяется верно, а, следовательно, сам процесс реконструкции прошёл с достаточной точностью. В случае моноклинных решёток произошло критическое падение точности идентификации до 34%. Однако если посмотреть на рис. 1, то можно увидеть, что ромбиче-

ские решётки являются вырожденным типом моноклинных – данный факт и был подтверждён в ходе исследований, так как система в 53% случаев определила восстановленную моноклинную решётку как ромбическую.

Кроме того, особое внимание привлекает факт несимметричности таблицы результатов. Наиболее ярко данное свойство прослеживается для моноклинных и гексагональных решёток. Казалось бы, во всех экспериментах используется один и тот же набор решёток, однако причина подобной несимметричности кроется

в геометрических особенностях разделения решёток на классы. Например, ромбическая решётка при искажении может «потерять» свою главную отличительную особенность, – прямой угол, – и стать моноклинной. В обратную сторону такое событие почти невозможно, так как вероятность того, что при случайном искажении непрямого угла ячейки станет прямым, чрезвычайно мала. Следовательно, выявленная особенность лишь подтверждает корректность постановки эксперимента.

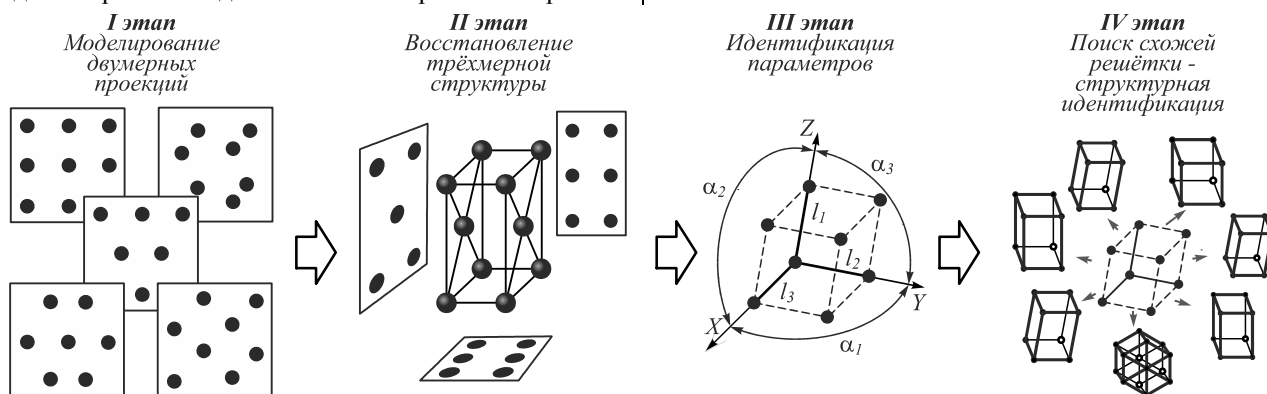


Рис. 6. Схема проведения эксперимента

Табл. 1. Результаты структурной идентификации реконструированных кристаллических решёток

Реконструированная решётка	Смоделированная решётка						
	<i>cP</i>	<i>hP</i>	<i>mP</i>	<i>oP</i>	<i>tP</i>	<i>aP</i>	<i>hR</i>
<i>cP</i>	99,9	0	0	0	0	0	0,1
<i>hP</i>	0	100	0	0	0	0	0,0
<i>mP</i>	0,2	0	34,1	53,1	10,3	2,1	0,2
<i>oP</i>	0	0	0	100	0	0	0
<i>tP</i>	0	0	0	0	100	0	0
<i>aP</i>	0	0,2	0,8	0,2	0	98	0,8
<i>hR</i>	3,7	0	0	0,1	0	1,5	94,7

Следует отметить, что указанную несимметричность таблицы можно устранить только одним путём – моделированием такого количества решёток, которое бы равномерно заполнило всё пространство параметров элементарных ячеек с шагом, меньшим, чем допустимая величина ошибки идентификации. Однако данный подход, с одной стороны, привёл бы к непомерному росту вычислительной сложности (увеличение выборки на несколько порядков), а с другой стороны, внёс лишний «шум» в виде огромного количества триклинных решёток (на которые, в общем случае, похожи решётки всех остальных типов).

Таким образом, в ходе эксперимента было получено два важных результата: во-первых, доказано высокое качество восстановления трёхмерной структуры решётки с помощью разработанного алгоритма. А во-вторых, показана проблема делимости моноклинных и ромбических решёток, где единственное отличие первых – это наличие угла «не равного 90°».

С другой стороны, следует также отметить, что сама метрика Хаусдорфа не учитывает проблемы плохой делимости кристаллических систем, что

является следствием проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве. В связи с этим для проведения исследований делимости кристаллических систем рекомендуется либо исключать из общей выборки «похожие» решётки (что является, вообще говоря, нетривиальной задачей), либо использовать метрику схожести, способную учитывать описанную особенность кристаллических решёток. Именно на втором подходе и планируется сконцентрировать внимание в дальнейшем.

Заключение

Рассмотренный алгоритм реконструкции кристаллических решёток по двумерным проекциям позволяет восстановить трёхмерную структуру решётки на основе трёх проекций. Для сравнения, стандартные методы компьютерной томографии вынуждают использовать более сотни проекций, однако такой подход избыточен в случае кристаллов с периодической структурой. Кроме того, он требует существенно больших объёмов вычислений, не предоставляя большей точности восстановления, так как не учитывает периодический характер кристаллической решётки.

Проведённое исследование показало высокое качество восстановления трёхмерной структуры: для 6 из 7 кристаллических систем восстановленные решётки совпали с исходными. Побочным результатом исследований стало обнаружение факта плохой разделимости моноклинных, ромбических и тетрагональных решёток, вызванного недостатками используемой метрики Хаусдорфа, которая не может бороться с проблемой неоднозначности выбора элементарных ячеек.

Благодарности

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятий Программы повышения конкурентоспособности Самарского университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013–2020 годы; грантов РФФИ № 16-41-630761, № 17-01-00972, № 18-37-00418, в рамках госзадания по теме № 0026-2018-0102 «Оптоинформационные технологии получения и обработки гиперспектральных данных».

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 разноразмерным 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 // 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. Волоотовский, 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. **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. – Vol. 1490. – P. 162-170. – DOI: 10.18287/1613-0073-2015-1490-162-170.
11. **Hammond, C.** The basic of crystallography and diffraction / C. Hammond. – 3rd ed. – New York: Oxford University Press Inc., 2009. – P. 84-95. – ISBN: 978-0-19-954645-9.
12. **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. – С. 39-52. – ISBN: 5-948360-18-0.
13. **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.
14. **Kessler, E.** Precision comparison of the lattice parameters of silicon monocrystals / E. Kessler, A. Henins, R. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, Number 1. – P. 1-18.
15. **Smith, W.F.** Foundations of materials science and engineering / W.F. Smith, J. Hashemi. – 3rd ed. – Boston, London: McGraw-Hill Publishing Company, 2004. – P. 67-107. – ISBN: 0-072-40233-4.
16. **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.
17. **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.
18. **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.
19. **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. – Vol. 1452. – P. 40-45.
20. **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.
21. **Широканев, А.С.** Исследование алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток с применением градиентного метода наискорейшего спуска / А.С. Широканев, 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.
22. **Kirsh, D.V.** Parallel implementations of parametric identification algorithms for three-dimensional crystal lattices // D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2016. – Vol. 1638. – P. 451-459. – DOI: 10.18287/1613-0073-2016-1638-451-459.
23. **Троицкий, И.Н.** Статистическая теория томографии / И.Н. Троицкий. – М.: Радио и связь, 1989. – 240 с. – ISBN: 5-256-00182-5.
24. **Patera, J.** Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of Algorithm 2005: 17th Conference on Scientific Computing. – 2005. – P. 309-318.

Сведения об авторах

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.

Широканев Александр Сергеевич, 1993 года рождения, аспирант Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва; инженер кафедры технической кибернетики, Самарский университет. Сфера научных интересов: методы идентификации кристаллических решёток; цифровая обработка изображений; математическое моделирование; численные методы. E-mail: alexandrshirokanev@gmail.com.

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: alexkupr@gmail.ru.

ГРНТИ: 28.23.15

Поступила в редакцию 14 ноября 2018 г. Окончательный вариант – 30 марта 2019 г.

Algorithm of reconstruction of a three-dimensional crystal structure from two-dimensional projections

D.V. Kirsh^{1,2}, A.S. Shirokanev^{1,2}, A.V. Kupriyanov^{1,2}

¹ *IPSI RAS – Branch of the FSRC “Crystallography and Photonics” RAS,
Molodogvardeyskaya 151, 443001, Samara, Russia;*

² *Samara National Research University, Moskovskoye shosse, 34, 443086, Samara, Russia*

Abstract

The article deals with a problem of three-dimensional crystal lattice reconstruction, which is an important stage in the X-ray structural analysis. The accuracy of parametric and structural identification of crystals directly depends on the quality of crystal lattice reconstruction. The proposed algorithm of reconstruction of a three-dimensional crystal lattice is based on minimizing the distances from each node to a line projected onto a specified plane. Three sets of two-dimensional node coordinates, obtained from three two-dimensional projections, are used as input data. We performed an analytical calculation of the reconstruction error, allowing the total reconstruction accuracy to be estimated. The results of computational experiments confirmed the high quality of the proposed reconstruction algorithms and its stability against the distortion of node coordinates. In addition, we revealed a problem of lattice system separability, with the identification accuracy for monoclinic, rhombic and tetragonal systems found to be 34%, 53% and 10%, respectively.

Keywords: three-dimensional reconstruction, two-dimensional projection, crystal lattice, unit cell, image processing, computed tomography, structural identification, Hausdorff metric.

Citation: Kirsh DV, Shirokanev AS, Kupriyanov AV. Algorithm of reconstruction of a three-dimensional crystal structure from two-dimensional projections. *Computer Optics* 2019; 43(2): 324-331. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-2-324-331.

Acknowledgements: This work was partly funded by the Federal Agency for Scientific Organizations under agreement No 007-Г3/Ч3363/26; the Ministry of Education and Science of the Russian Federation as part of the Program of Samara University's competitiveness enhancement among the world's leading scientific and educational centers in 2013-2020; the Russian Foundation for Basic Research under grants ## 16-41-630761, 17-01-00972, and 18-37-00418; and under the state task # 0026-2018-0102 "Optoinformation Technologies for Obtaining and Processing Hyperspectral Data".

References

- | | |
|--|--|
| <p>[1] Fursov VA, Goshin YeV. Information technology for digital terrain model reconstruction from stereo images. <i>Computer Optics</i> 2014; 38(2): 335-342.</p> <p>[2] Kotov AP, Fursov VA, Goshin YeV. Technology for fast 3D-scene reconstruction from stereo images. <i>Computer</i></p> | <p><i>Optics</i> 2015; 39(4): 600-605. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-600-605.</p> <p>[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.</p> |
|--|--|

- Computer Optics 2015; 39(3): 413-415. 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. Computer Optics 2014; 38(2): 343-350.
- [5] Широкаев АС, Кириш ДВ, Куприянов АВ. 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: scalar theory. Computer Optics 2015; 39(4): 469-479. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-469-479.
- [7] Egerton R. Physical principles of electron microscopy. Moscow: "Tehnosfera" Publisher; 2010.
- [8] Куприянов АВ. The observability of the crystal lattice by multiple nodes upon the images of their projections. Computer Optics 2012; 36(4): 586-589.
- [9] Shaskolskaya MP. Crystallography: Manual for institutes of higher education [In Russian]. Moscow: "Vysshaya Shkola" Publisher; 1984: 10-14.
- [10] Кириш ДВ, Куприянов АВ. Modeling and identification of centered crystal lattices in three-dimensional space. Information Technology and Nanotechnology (ITNT-2015) 2015; 1490: 162-170. DOI: 10.18287/1613-0073-2015-1490-162-170.
- [11] Hammond C. The basic of crystallography and diffraction. New York: Oxford University Press Inc; 2009: 84-95.
- [12] Brandon D, Kaplan WD. Microstructural characterization of materials. 2nd ed. Chichester: John Wiley and Sons Ltd; 2008.
- [13] Andrews LC, Bernstein HJ. Lattices and reduced cells as points in 6-space and selection of Bravais lattice type by projections. Acta Crystallographica Section A 1988; 44(6): 1009-1018. – DOI: 10.1107/S0108767388006427.
- [14] Kessler E, Henins A, Deslattes R, 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.
- [15] Smith W. Foundations of materials science and engineering. Boston, London: McGraw-Hill; 2004: 67-107.
- [16] Куприянов АВ, Кириш ДВ. Estimating the similarity measure of crystal lattices by coordinates of their nodes in three-dimensional space. Computer optics, 2012; 36(4): 590-595.
- [17] Куприянов АВ, Кириш ДВ. 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.
- [18] Кириш ДВ, Куприянов АВ. 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.
- [19] Кириш ДВ, Куприянов АВ. Identification of three-dimensional crystal lattices by estimation of their unit cell parameters. CEUR Workshop Proceedings 2015; 1452: 40-45.
- [20] Широкаев АС, Кириш ДВ, Куприянов АВ. 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.
- [21] Широкаев АС, Кириш ДВ, Куприянов АВ. 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.
- [22] Кириш ДВ, Куприянов АВ. Parallel implementations of parametric identification algorithms for three-dimensional crystal lattices. CEUR Workshop Proceedings 2016; 1638: 451-459. DOI: 10.18287/1613-0073-2016-1638-451-459.
- [23] Троицкий И.Н. Statistical theory of the tomography [In Russian]. Moscow: "Radio i Svyaz" Publisher; 1989.
- [24] Patera J, Skala V. Centered cubic lattice method comparison. Proceedings of Algorithmy 2005: 17th Conference on Scientific Computing 2005: 309-318.

Author's information

Dmitriy Victorovich Kirsh (b. 1990) completed (2018) the postgraduate program in Computer Science and Computer Engineering. At present, he is a lecturer at the Technical Cybernetics department of Samara University and also a junior researcher at the IPSI RAS – Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS. The area of interests includes digital image processing and pattern recognition, methods of mathematical formulation and comparison of crystal lattices, classification of crystal lattices. E-mail: limitk@mail.ru.

Aleksandr Sergeevich Shirokaev, (b. 1993), graduated (2017) 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, mathematical modeling, numerical analysis and identification methods of crystal lattices. E-mail: alexandr-shirokaev@yandex.ru.

Alexandr 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 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. E-mail: alexkupr@gmail.ru.

Received November 14, 2018. The final version – March 30, 2019.