

АНАЛИЗ ТЕКСТУР И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ НА НАНОМАСШТАБНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ

Куприянов А.В.

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

Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН

Аннотация

Современные приборы регистрации изображений микро- и наноструктур и методы компьютерной обработки изображений позволяют решать различные задачи анализа текстуры поверхности. Особенности обработки и анализа наномасштабных изображений, получаемых в электронной микроскопии высокого разрешения, показаны на примере решения задачи определения типа кристаллических решёток.

Ключевые слова: наномасштабные изображения, текстура, кристаллическая решётка.

Введение

Понятие текстура обычно относят к объединению признаков, характеризующих расположение составных частей материала в пространстве и относительно друг друга.

Так, геологический словарь даёт следующее определение: Текстура (горных пород) [textura – ткань, сплетение, сложение] – совокупность признаков строения обусловленных ориентировкой и относительным расположением и распределением составных частей породы [1].

Словарь иностранных слов определяет текстуру как особенности строения твёрдого вещества, обусловленные характером расположения его составных частей (кристаллов, зёрен и т.д.) [2].

В своём основном значении структура есть внутреннее устройство чего-либо. По аналогии можно заключить, что понятие «структура» характеризует признаки строения, описывающие величину и форму составных частей, из которых состоит материал.

В случае кристаллических материалов наличие текстуры показывает, что зёрна в них ориентированы не хаотично, а располагаются вдоль некоторых внешних направлений или плоскостей, т.е. структура материала является упорядоченной.

Знание текстуры позволяет рассчитать свойства поликристаллического материала на основе свойств монокристаллов. В ряде случаев наличие определённой текстуры благоприятно влияет на эксплуатационные и технологические свойства материалов. Иногда текстуру, наоборот, стараются устранить, определённым образом воздействуя на структуру расположения зёрен монокристаллов, чтобы получить изотропный материал [3].

На рис. 1 и 2 приведено сравнение структуры базальта и текстуры доломита. Визуально на изображении базальта (рис. 1) можно наблюдать разнообразные включения, имеющие различную ориентацию. На изображениях доломита (рис. 2) ориентация структур выстраивается вдоль определённых направлений, что характеризует собой наличие текстуры. Для сравнения на рис. 2 представлены две

различные текстуры, при этом структура материала остаётся одной и той же.



Рис. 1. Структура базальта

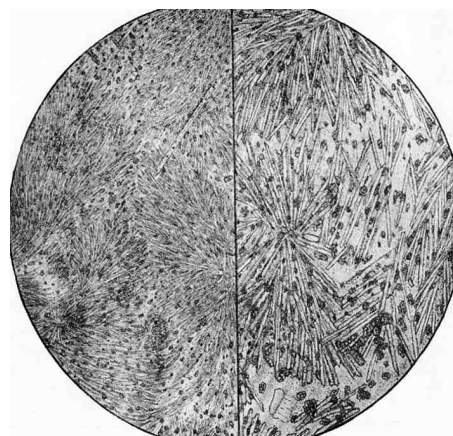


Рис. 2. Текстуры доломита

Харалик отмечал в [4], что, несмотря на повсеместное присутствие в изображениях текстуры, формального подхода к её описанию и определению не существует и методы различения текстур, как правило, разрабатываются отдельно для каждого конкретного случая. Можно выделить два основных подхода к определению термина «текстура».

Во-первых, это интерпретация текстуры как повторения базовых примитивов, имеющих различную ориентацию в пространстве. Примерами в этом слу-

чае могут служить текстуры ткани, кирпичной стены и т.д. Сторонники такого определения ориентировали себя на спектральный анализ и представление текстуры [5].

Во-вторых, текстура рассматривается как некий анархичный и однородный аспект, не обладающий ярко выраженными краями. Для сторонников этого метода не существует заметных образцов или доминирующей частоты в текстуре (например, дёрн, кора, земля и так далее, рассматриваемые с большого расстояния), т.е. они ориентировали себя на вероятностный метод решения проблемы текстуры [6].

Текстурные методы анализа изображений формируют основание для распознавания и классификации объектов на основе выделения текстурных признаков. В работе [7] оцениваются пять различных методов формирования признаков: метод автокорреляции, метод предельной частоты, метод длины примитива, а также методы, основанные на матрицах вероятностного распределения [8 - 10] и мерах текстурной энергии [11, 12].

Как показано в статье [13], наномасштабные изображения позволяют изучать свойства наноматериалов на основе анализа их атомарной структуры. Текстура на таких изображениях определяется характером расположения составных элементов и их ориентацией в пространстве. Проблема сегментации текстур на изображениях электронной микроскопии заключается в том, чтобы различить типы материалов, представленных на изображении, для этого необходимо отыскать зоны, однородные по какому-либо признаку. В настоящей работе предлагается подход к распознаванию текстур на изображениях электронной микроскопии высокого разрешения, основанный на классификации и определении типов фундаментальных составных элементов кристаллических структур – решёток Бравэ.

1. Типы кристаллических решёток

Классическое определение кристалла как однородного твёрдого анизотропного тела, способного самоограничаться, сформулированное ещё тогда, когда о внутреннем строении кристаллов строились лишь гипотезы, подразумевает и главную особенность, отличающую кристалл от некристаллических (аморфных) тел, – трёхмерную периодичность в расположении составляющих его структуру эквивалентных материальных частиц: атомов, ионов, молекул [14].

Расположением атомов в кристалле управляет кристаллическая решётка, являющаяся тем главным элементом симметрии, без которого нельзя представить строение ни одного кристалла [15]. Материальные частицы (атомы, ионы, молекулы), образующие кристаллическую структуру, располагаются в пространстве закономерно, периодически повторяясь в строго определённых направлениях, через строго определённые промежутки. Геометрической схемой, описывающей расположение материальных частиц в кристалле, является пространственная решётка. Для полной характеристики пространственной решётки необходимо вы-

явить все возможные случаи расположения узлов в ячейке. Характеристическая ячейка, наиболее полно отражающая все особенности трёхмерной решётки, имеет минимальную площадь и называется элементарной ячейкой (или ячейкой Бравэ) [15].

Исходя из идеи о периодическом расположении центров масс сферических материальных частиц в кристаллическом веществе, Огюст Бравэ в 1848 году математическим путём доказал, что всё многообразие кристаллических структур можно описать с помощью 14 типов решёток, отличающихся формами элементарных ячеек и симметрией и подразделяющихся на 7 кристаллографических сингоний [15]. Эти решётки были названы решётками Бравэ. Каждая решётка Бравэ – это группа трансляций, характеризующих расположение материальных частиц в пространстве. Все типы решёток Бравэ приведены в табл. 1.

Решётка Бравэ строится на трёх основных некомпланарных трансляциях, или параметрах решётки: a , b , c . В зависимости от величин и взаимной ориентировки трансляций a , b , c пространственные решётки имеют различную симметрию. Три элементарные трансляции решётки определяют элементарную ячейку. В зависимости от соотношения между длинами этих трансляций и углами между ними α , β , γ выделяют семь различных сингоний, которые распадаются на три категории в зависимости от числа равных длин трансляций [15]:

- низшая категория (все трансляции не равны друг другу):
 - триклинная: $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$;
 - моноклинная: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$;
 - ромбическая: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
- средняя категория (две трансляции из трёх равны между собой):
 - тетрагональная: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
 - гексагональная: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$;
- высшая категория (все трансляции равны между собой):
 - тригональная: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$, $\neq 90^\circ$;
 - кубическая: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Если рёбра ячейки Бравэ соответствуют трём последовательным минимальным трансляциям, т.е. узлы решётки располагаются только в вершинах параллелепипеда, то такая «пустая» ячейка (и, соответственно, решётка) называется примитивной.

Если же координатные трансляции ячейки Бравэ не соответствуют трём последовательным минимальным трансляциям, т.е. в ячейке есть более короткие (не координатные) векторы, то в ней, кроме вершинных, окажутся дополнительные узлы. Указанная ячейка (а следовательно, и решётка) будет не примитивной. Ячейки с дополнительными узлами принято называть центрированными. При этом наличие дополнительных узлов не нарушает симметрию решётки и не уменьшает объём ячейки.

Таблица 1. Типы решёток Бравэ

Сингония	Триклинная	Моноклиная	Ромбическая	Тетрагональная	Кубическая	Тригональная	Гексагональная
Примитивная							
Базоцентрированная							
Объёмноцентрированная							
Гранецентрированная							

Если зацентрирована пара противоположных граней, перпендикулярных оси Z ячейки, то такую решётку называют базоцентрированной. Ячейку с дополнительным узлом в центре её объёма называют объёмноцентрированной. Ячейки, в которых центрированы все грани, называются гранецентрированными [15].

2. Анализ изображений кристаллических решёток

На изображениях проекции кристаллических решёток, сделанных с помощью электронного микроскопа высокого разрешения, видны только материальные частицы (атомы, ионы, молекулы). На рис. 3 приведены примеры изображений кристаллов, сделанные с помощью электронного микроскопа при увеличении в 1,5 миллиона раз.

По изображениям электронной микроскопии очень трудно невооружённым глазом определить, какую структуру имеет кристалл. Для того, чтобы определить структуру кристалла, нужно определить зависимость расположения материальных частиц

(атомов, ионов, молекул) в кристаллической решётке, т.е. провести анализ текстуры изображения.

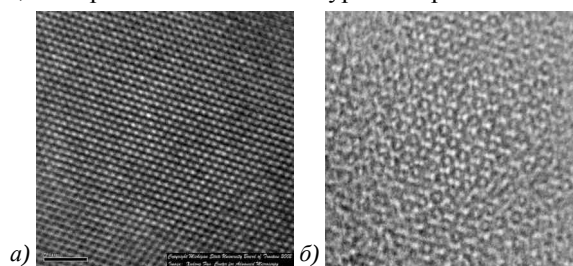


Рис. 3. Изображения кристаллических структур, полученных на электронном микроскопе высокого разрешения: кремний (а), гальваническая медь (б)

Для восстановления проекции расположения атомов в кристалле необходимо определить центры частиц, наблюдаемых на изображении. На рис. 4 показано изображение с выделенными центрами частиц.

Будем предполагать уже решёнными задачи предварительной обработки изображения проекции и определения центров материальных частиц. Следует отметить, что задача определения центров час-

тиц на изображениях проекций является нетривиальной и NP-полной.

Таким образом, исходными данными для обработки являются координаты центров материальных частиц. Для удобства визуального анализа исходные данные могут быть представлены в виде изображений проекций центров. На рис. 5 показаны такие проекции примитивных кристаллических решёток при различных углах поворота.

Для классификации кристаллической решётки Бравэ по изображению её проекции можно использовать распределение зависимости количества одинаковых расстояний от расстояния между материальными частицами.

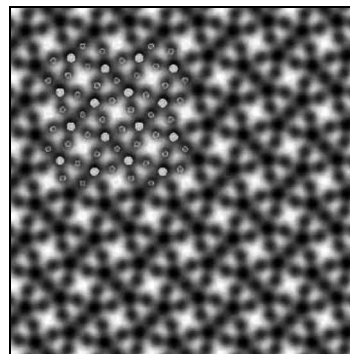


Рис. 4. Изображение кристалла $\text{Ba}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$, сделанное с помощью электронного микроскопа, с выделением структуры материальных частиц

Тип решётки	Угол наблюдения		
	-30°	0°	45°
Триклинная			
Моноклинная			
Ромбическая			
Тетрагональная			
Гексагональная			
Кубическая			

Рис. 5. Обработываемые данные (в виде изображений проекций кристаллических решёток)

Было установлено, что у решёток разных типов в зависимости от угла поворота будет различным характер распределения количества одинаковых расстояний между частицами. Поэтому для того, чтобы определить тип решётки на обрабатываемом изображении, сформируем выборку, состоящую из расстояния между каждой парой частиц, как показано на рис. 6.

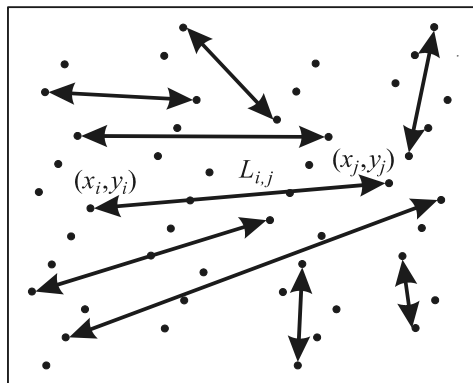


Рис. 6. Определение расстояний между частицами

В качестве признаков классификации были выбраны отсчёты гистограммы распределения расстояний между центрами материальных частиц на изображении. На рис. 7 показаны примеры построенных гистограмм для двух различных решёток.

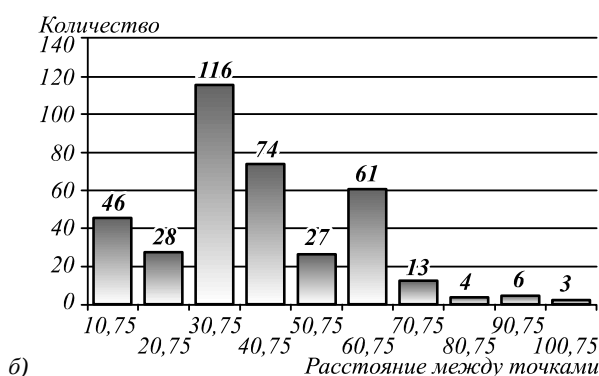
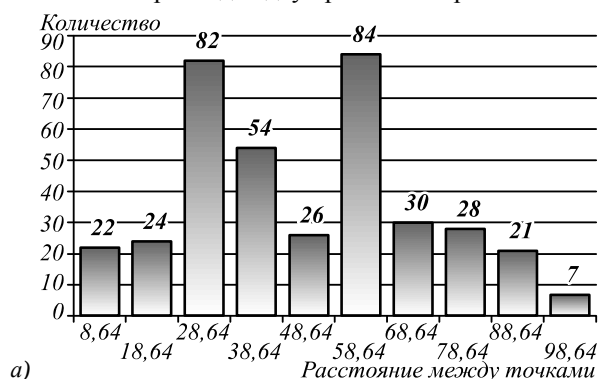


Рис. 7. Пример гистограммы распределения расстояний для триклинной (а) и кубической (б) решёток Бравэ

3. Определение типа кристаллических решёток

В результате проведённых исследований и анализа методов классификации был выбран метод нейронных сетей [16] для классификации решёток

Бравэ как наиболее подходящий конкретно для нашей задачи. Проекция тригональной и кубической решёток при угле поворота, отличном от 0 и 90 градусов, невозможно отличить, основываясь лишь на информации о центрах частиц. Для разделения тригональных и кубических решёток необходима информация об угле наблюдения решётки.

Таким образом, было предложено использовать классификатор, состоящий из 15 нейронных сетей, которые охватывают все возможные попарные перестановки 6 типов примитивных решёток Бравэ. Каждая сеть различает два класса. Результатом классификации является класс, получивший наибольшее число голосов при попарном сравнении. Для каждой нейронной сети была выбрана архитектура с двумя скрытыми слоями и сигмоидальной функцией активации.

Был проведён вычислительный эксперимент для определения ошибки классификации решётки Бравэ в зависимости от угла поворота, задающего ориентацию решётки в пространстве. Эксперименты проводились для всех типов примитивных решёток Бравэ. Было использовано 48 тестовых выборок, т.е. для каждого типа решётки с разными углами поворота от 10 до 90 градусов. Результаты классификации представлены в табл. 2 и 3, значение в таблице показывает, сколько классификаторов при определении типа решётки, указанной в строке, отнесли её к типу, указанному в столбце.

Таблица 2. Результаты классификации решёток при угле поворота 10 градусов (выделены ячейки, набравшие наибольшее количество голосов)

Тип решётки	Количество голосов					
	Триклинная	Моноклинная	Ромбическая	Тетрагональная	Гексагональная	Кубическая
Триклинная	3	2	2	2	3	3
Моноклинная	3	1	3	2	5	1
Ромбическая	3	0	5	4	2	1
Тетрагональная	5	1	2	4	1	2
Гексагональная	5	4	1	3	2	0
Кубическая	2	4	1	1	2	5

Таблица 3. Результаты классификации решёток при угле поворота 70 градусов (выделены ячейки, набравшие наибольшее количество голосов)

Тип решётки	Количество голосов					
	Триклинная	Моноклинная	Ромбическая	Тетрагональная	Гексагональная	Кубическая
Триклинная	5	4	1	2	3	0
Моноклинная	3	5	1	1	3	2
Ромбическая	2	2	5	4	2	0
Тетрагональная	3	2	2	5	3	0
Гексагональная	4	1	2	2	5	1
Кубическая	2	2	1	2	3	5

Больше всего ошибок классификации приходится на угол поворота 10 градусов. Только ромбическая и кубическая решётки были определены правильно. Также было много ошибок классификации при углах 30 и 60 градусов. Классификатор ни разу не ошибся при угле поворота, равном 70 градусам.

В итоге можно сделать вывод, что лучше всего проходят классификацию изображения проекций кубических, тетрагональных и ромбических решёток. Гексагональные и моноклинные решётки Бравэ предложенным способом классифицируются хуже всего. Наибольшее количество ошибок встречается при угле поворота решётки от 10 до 30 градусов.

Для подтверждения возможности использования данного метода на практике был проведён эксперимент с реальным изображением. При проведении этого эксперимента использовалось изображение кристаллической решётки родонита CaMn_4 ($a = 7,68 \text{ \AA}$, $b = 11,82 \text{ \AA}$, $c = 6,71 \text{ \AA}$, $\alpha = 92,4$, $\beta = 93,9$, $\gamma = 105,7$), относящейся к типу примитивной триклинной решётки Бравэ [17]. На изображении родонита, полученном на просвечивающем электронном микроскопе [18], были вручную выделены центры материальных частиц (рис. 8).

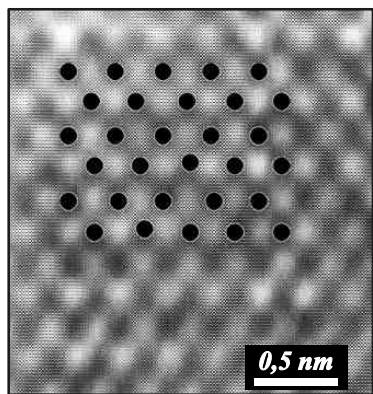


Рис. 8. Изображение решётки родонита с выделенными центрами материальных частиц

В табл. 4 приведён результат классификации родонита с использованием построенного классификатора.

Таким образом, можно считать, что классификация прошла успешно, тип решётки был определён правильно. Триклинная решётка получила больше всего голосов.

Таблица 4. Результаты классификации решётки родонита при попарном сравнении (выделена ячейка, набравшая наибольшее количество голосов)

	Тип решётки					
	Триклинная	Моноклинная	Ромбическая	Тетрагональная	Гексагональная	Кубическая
Количество голосов	5	4	1	2	0	3

Закключение

Предложенный метод классификации, основанный на анализе гистограммы распределения расстояний между материальными частицами на изо-

бражении, можно использовать для классификации решёток Бравэ по изображениям их проекции.

Дополнительные экспериментальные исследования, проведённые в рамках данной работы, также подтвердили работоспособность метода при небольших величинах интенсивности импульсного шума или сдвига частиц. Это показал и эксперимент с реальным изображением.

Метод классификации будет использован в качестве основы для сегментации текстур на изображениях, полученных с использованием электронных микроскопов с высоким разрешением.

Благодарности

Автор выражает благодарность В.С. Лысову и А.И. Пластинину 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), при поддержке российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (грант CRDF PG08-014-1), грантов РФФИ 10-07-00341-а, 10-01-90708-моб_ст, программы РАН «Фундаментальные науки – медицине».

Литература

1. Геологический словарь: в 2-х томах / под ред. К.Н. Паффенгольца [и др.]. – М.: Недра, 1978.
2. Толковый словарь иностранных слов / под ред. Л.П. Крысина. – М.: Русский язык, 1998.
3. 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.
4. Haralick, R.M. Statistical and structural approaches to textures / R.M. Haralick // Proc. IEEE. – 1979. – Vol. 67. – P. 786-804.
5. D'Astous, F. Texture discrimination based on detailed measures of the power spectrum / F. D'Astous and M.E. Jernigan // Proc. Of 7th International Conference on Pattern Recognition, Montreal, July 1984. – P. 83-86.
6. Chen, P.C. Segmentation by Texture Using Correlation / P.C. Chen, T. Pavlidis // PAMI (5). – 1983. – N 1. – P. 64-69.
7. Singh, M. Spatial texture analysis: a comparative study / M. Singh, S. Singh // Int. Conf. Pattern Recognition, 2002. – Vol. 1. – P. 676-679.
8. Haralick, R.M. Textural features for image classification / R.M. Haralick, K. Shanmugam, I. Dinstein // IEEE Trans. on Systems, Man and Cybernetics. – 1973. – V. 3. – P. 610-621.
9. Ильясова, Н.Ю. Классификация кристаллограмм с использованием методов статистического анализа текстурных изображений / Н.Ю. Ильясова, А.В. Куприянов, А.Г. Храмов // Компьютерная оптика. – 2000. – № 20. – С. 122-127.
10. Kupriyanov, A.V. Statistical Features of Image Texture for Crystallogram Classification / A.V. Kupriyanov, A.G. Khramov, N.Yu. Ilyasova // Pattern Recognition and Image Analysis. – 2001. – Vol. 11, N 1. – P. 180-183.
11. Laws, K.I. Rapid Texture Identification / K.I. Laws // SPIE. – 1980. – Vol. 238. – P. 376-380.
12. Куприянов, А.В. Сегментация текстурных изображений на основе оценивания локальных статистических

- признаков / А.В. Куприянов // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва. – 2008. – № 2. – С. 245-251.
13. **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.
 14. **Егоров-Тисменко, Ю.К.** Кристаллография и кристаллохимия / Ю.К. Егоров-Тисменко. – М.: КДУ, 2005. – 592 с.
 15. **Брандон, Д.** Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 384 с.
 16. **Хайкин, С.** Нейронные сети: полный курс / С. Хайкин. – М.: Вильямс, 2006. – 1104 с.
 17. Конспект лекций по дисциплине «Кристаллография, минералогия» / Кафедра геологии, минералогии и петрографии Сибирского федерального университета // Красноярск, 2007. – 355 с. [http://btn.sfu-kras.ru/ebibl/umkd/81/u_lectures.pdf]
 18. **Veblen, D.R.** TEM study of a pyroxene-to-pyroxenoid reaction / David R. Veblen // American Mineralogist. – 1985. – Vol. 70. – P. 885-901.
 7. **Singh, M.** Spatial texture analysis: a comparative study / M. Singh, S. Singh // Int. Conf. Pattern Recognition. – 2002. – Vol. 1. – P. 676-679.
 8. **Haralick, R.M.** Textural features for image classification / R.M. Haralick, K. Shanmugam, I. Dinstein // IEEE Trans. on Systems, Man and Cybernetics. – 1973. – V. 3. – P. 610-621.
 9. **Ilyasova, N.Yu.** Crystallogramm classification with statistical analysis of textural images / N.Yu. Ilyasova, A.V. Kupriyanov, A.G. Khramov // Computer Optics. – 2000. – N 20. – P. 122-127. – (in Russian).
 10. **Kupriyanov, A.V.** Statistical Features of Image Texture for Crystallogram Classification / A.V. Kupriyanov, A.G. Khramov, N.Yu. Ilyasova // Pattern Recognition and Image Analysis. – 2001. – Vol. 11, N 1. – P. 180-183.
 11. **Laws, K.I.** Rapid Texture Identification / K.I. Laws // SPIE. – 1980. – Vol. 238. – P. 376-380.
 12. **Kupriyanov, A.V.** Segmentation of the textural images based on the estimation of local statistical features / A.V. Kupriyanov // Vestnik of the Samara state aerospace university. – 2008. – N 2. – P. 245-251. – (in Russian).
 13. **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).
 14. **Egorov-Tismenko, Yu.K.** Kristallografiya i kristallohimiya / Yu.K. Egorov-Ticmenko. – Moscow: “KDU” Publisher, 2005. – 592 p. – (in Russian).
 15. **Brandon, D.** Microstructural Characterization of Materials / D. Branon, W. Kaplan. – Moscow: “Technosfera” Publisher, 2004. – 384 p. – (in Russian).
 16. **Khaykin, S.** Neural networks: complete course / S. Khaykin // Moscow: “Williams” Publisher, 2006. – 1104 p. – (in Russian)
 17. Lecture course “Kristallografiya i mineralogiya” / Department of the geology, mineralogy and petrography of Siberian federal university // Krasnoyarsk, 2007. – 355 p. [http://btn.sfu-kras.ru/ebibl/umkd/81/u_lectures.pdf]. – (in Russian).
 18. **Veblen, D.R.** TEM study of a pyroxene-to-pyroxenoid reaction / David R. Veblen // American Mineralogist. – 1985. – Vol. 70. – P. 885-901.

References

TEXTURE ANALYSIS AND IDENTIFICATION OF THE CRYSTAL LATTICE TYPE UPON THE NANOSCALE IMAGES

A.V. Kupriyanov

S.P. Korolyov Samara State Aerospace University (National Research University),
Image Processing Systems Institute of the RAS

Abstract

The high end equipment intended for image acquisition of the micro- and nanostructures and various methods of the image processing allows one to solve the problems of surface texture analysis. The specifics of processing and analysis of the nanoscale images obtained via high resolution electronic microscopy are presented as an example solution of the task of crystal lattice type identification.

Key words: nanoscale images, texture, crystal lattice.

Сведения об авторе – см. стр. 144 этого номера.

Поступила в редакцию 4 февраля 2011 г.