



## ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

<b>Název:</b>	Integrace metody ITO do nástroje ParaCell
<b>Student:</b>	Bc. Michal Čermák
<b>Vedoucí:</b>	doc. Ing. Ivan Šimeček, Ph.D.
<b>Studijní program:</b>	Informatika
<b>Studijní obor:</b>	Teoretická informatika
<b>Katedra:</b>	Katedra teoretické informatiky
<b>Platnost zadání:</b>	Do konce zimního semestru 2021/22

### Pokyny pro vypracování

- 1) Seznamte se základními pojmy a fyzikálními modely v oblasti krystalických látek. Zaměřte se na vlastnosti rentgenového záření ve spojení s metodou práškové difrakce používané pro získání strukturních parametrů zkoumané krystalické látky [1].
- 2) Nastudujte tzv. přímé metody pro řešení krystalové struktury využívající globální optimalizaci strukturního modelu a kompletního difrakčního obrazu.
- 3) Nastudujte vnitřní architekturu nástroje ParaCell [2], jehož autorem je vedoucí práce.
- 4) Navrhněte a implementujte vícevláknový algoritmus pro extrakci reálných mřížkových parametrů z naměřených hodnot obsažených v difrakčním záznamu pomocí metody ITO [3]. Diskutujte vhodnost použití různých datových struktur.
- 5) Algoritmus otestujte na klastru STAR pro data z volně dostupných vzorků experimentálně naměřených práškovou difrakcí a vyhodnoťte škálovatelnost implementovaného algoritmu.

### Seznam odborné literatury

[1] M. Rulf: Algoritmy výpočetní krystalografie DP ČVUT FIT, 2014

[2] ParaCell home page <https://sourceforge.net/projects/paracell/>

[3] J. W. Visser: "A fully automatic program for finding the unit cell from powder data", Journal of Applied Crystallography, vol.2, no.3, p. 89-95, 1969.

doc. Ing. Jan Janoušek, Ph.D.  
vedoucí katedry

doc. RNDr. Ing. Marcel Jiřina, Ph.D.  
děkan

V Praze dne 7. června 2020





**FAKULTA  
INFORMAČNÍCH  
TECHNOLÓGIÍ  
ČVUT V PRAZE**

Diplomová práce

## **Integrace metody ITO do nástroje ParaCell**

*Bc. Michal Čermák*

Katedra Teoretické Informatiky

Vedoucí práce: doc. Ing. Ivan Šimeček, Ph.D.

27. června 2021



---

# Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona, ve znění pozdějších předpisů. V souladu s ust. § 2373 odst. 2 zákona č. 89/2012 Sb., občanský zákoník, ve znění pozdějších předpisů, tímto uděluji nevýhradní oprávnění (licenci) k užití této mojí práce, a to včetně všech počítačových programů, jež jsou její součástí či přílohou a veškeré jejich dokumentace (dále souhrnně jen „Dílo“), a to všem osobám, které si přejí Dílo užít. Tyto osoby jsou oprávněny Dílo užít jakýmkoli způsobem, který nesnižuje hodnotu Díla a za jakýmkoli účelem (včetně užití k výdělečným účelům). Toto oprávnění je časově, teritoriálně i množstevně neomezené. Každá osoba, která využije výše uvedenou licenci, se však zavazuje udělit ke každému dílu, které vznikne (byť jen zčásti) na základě Díla, úpravou Díla, spojením Díla s jiným dílem, zařazením Díla do díla souborného či zpracováním Díla (včetně překladu) licenci alespoň ve výše uvedeném rozsahu a zároveň zpřístupnit zdrojový kód takového díla alespoň srovnatelným způsobem a ve srovnatelném rozsahu, jako je zpřístupněn zdrojový kód Díla.

V Praze dne 27. června 2021

.....

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta informačních technologií

© 2021 Michal Čermák. Všechna práva vyhrazena.

*Tato práce vznikla jako školní dílo na Českém vysokém učení technickém v Praze, Fakultě informačních technologií. Práce je chráněna právními předpisy a mezinárodními úmluvami o právu autorském a právech souvisejících s právem autorským. K jejímu užití, s výjimkou bezúplatných zákonných licencí a nad rámec oprávnění uvedených v Prohlášení na předchozí straně, je nezbytný souhlas autora.*

### **Odkaz na tuto práci**

Čermák, Michal. *Integrace metody ITO do nástroje ParaCell*. Diplomová práce. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta informačních technologií, 2021.

---

# Abstrakt

Tato práce se zabývá zpracováním dat získaných pomocí metody práškové difrakce. Konkrétně se zabývá jednou z metod indexace těchto dat, ITO. Práce obsahuje základní pojmy z oblasti krystalografie a s ní spjatou metodou práškové difrakce. Dále obsahuje popis metody ITO a také její implementace do programu ParaCell a výsledky jejího testování.

**Klíčová slova** Krystalografie, Prášková difrakce, OpenMP

---

# Abstract

The main topic of this thesis is the processing of data obtained through powder diffraction. In particular, this thesis focuses on the ITO method. This thesis contains basic crystallographic terminology and that of a related method called powder diffraction. Furthermore, it contains a description of the ITO method, its implementation in the ParaCell program and test results of said implementation.

**Keywords** Crystallography, Powder diffraction, OpenMP





---

# Obsah

Úvod	1
<b>1 Cíle práce a Základní pojmy</b>	<b>3</b>
1.1 Cíle práce . . . . .	3
1.2 Skupenství látek . . . . .	3
1.2.1 Pevné látky . . . . .	3
1.3 Krystalografie . . . . .	4
1.3.1 Krystal . . . . .	4
1.3.2 Krystalová mřížka . . . . .	4
1.3.2.1 Bravaisovy typy mřížek . . . . .	4
1.3.3 Mřížová rovina . . . . .	4
1.3.4 Reciproká mřížka . . . . .	5
1.4 Prášková difrakce . . . . .	5
1.4.1 Braggova rovnice . . . . .	5
1.4.2 Metody pro nalezení krystalové struktury z difrakčního záznamu . . . . .	6
<b>2 Metoda ITO</b>	<b>7</b>
2.1 Hledání zón . . . . .	7
2.2 Úprava nalezených zón . . . . .	8
2.3 Kombinace zón . . . . .	9
2.4 Alternativní kombinace zón . . . . .	9
<b>3 Implementace</b>	<b>11</b>
3.1 ParaCell . . . . .	11
3.2 Metoda ITO . . . . .	11
3.3 Paralelizace . . . . .	12
<b>4 Testování</b>	<b>13</b>
4.1 Testovací platforma . . . . .	13

4.2	Testovací data . . . . .	13
4.3	Měření kvality výsledků . . . . .	13
4.4	Škálovatelnost implementace . . . . .	14
	<b>Závěr</b>	<b>17</b>
	<b>Literatura</b>	<b>19</b>
	<b>A Seznam použitých zkratk</b>	<b>21</b>
	<b>B Obsah příloženého CD</b>	<b>23</b>

---

## Seznam obrázků

4.1	Kvalita výsledků . . . . .	14
4.2	Škálovatelnost implementace . . . . .	15



---

# Úvod

Lidé se odjakživa snaží porozumět světu, ve kterém žijí. Mezi to patří i např. určování vlastností látek a mezi ty patří i jejich struktura. Tato práce se zabývá strukturou krystalických látek, konkrétně parametry jejich krystalových mřížek.

K určování těchto parametrů využívá dat získaných pomocí metody zvané prášková difrakce. Ty obsahují záznamy o úhlech, pod kterými se od nějakého prášku krystalické látky odrazily nejintenzivnější paprsky rentgenového záření. Z těchto úhlů jsou pak pomocí různých metod vypočítány parametry krystalické látky, jejíž vzorek byl podroben právě práškové difrakci.

Tato práce se zaměřuje na jednu z těchto metod, konkrétně metodu ITO. Metoda ITO byla navržena J. W. Visserem v roce 1969 v jeho článku. Cílem je integrace této metody do programu ParaCell. Tento program slouží právě k indexaci dat z práškové difrakce a tedy k určování parametrů krystalových mřížek daných látek.



---

# Cíle práce a Základní pojmy

Tato kapitola obsahuje základní pojmy z krystalografie a další pojmy užívané v této práci.

## 1.1 Cíle práce

Cílem této práce je implementace metody ITO do programu ParaCell pro indexaci krystalických látek z dat získaných pomocí práškové difrakce.

## 1.2 Skupenství látek

Obvykle rozlišujeme 3 základní látková skupenství:

- pevné
- kapalné
- plynné

Někdy se jako 4. druh skupenství uvádí plazma.

### 1.2.1 Pevné látky

Informace o pevných látkách jsou čerpány z [1]. Pevné látky rozdělujeme na amorfní a krystalické. Rozdílem mezi těmito dvěma typy je pravidelnost uspořádání částic látky.

U amorfních látek lze pozorovat pravidelnost přibližně do 10 nm.

Krystalické látky dále dělíme na monokrystaly a polykrystaly. V monokrystalu se uspořádání částic periodicky opakuje. Polykrystal se skládá z mnoha krystalů s rozměry od 10  $\mu\text{m}$  do několika mm.

## 1.3 Krystalografie

Krystalografie je věda, která se zabývá krystalickými pevnými látkami a jejich strukturou. Informace v této a následující sekci jsou čerpány z [2].

### 1.3.1 Krystal

Krystal je periodicky se opakující struktura částic. Při abstrakci se používá tzv. ideální krystal, který je nekonečný a jeho struktura se tedy periodicky opakuje do nekonečna. Reálné krystaly však nejsou nekonečné a jejich periodicitu je tedy narušena přinejmenším na jejich okrajích.

### 1.3.2 Krystalová mřížka

Krystalová mřížka je způsob abstrakce periodicity částic v rámci ideálního krystalu. Je charakterizována 6 parametry  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ , kde  $a, b, c$  jsou délky vektorů  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  a  $\alpha, \beta, \gamma$  úhly svírané mezi nimi ( $\alpha$  označuje úhel mezi  $\vec{b}$  a  $\vec{c}$  atd.). Periodicita je tak vyjádřena jako přičítání celočíselných násobků vektorů  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  k počátku.

#### 1.3.2.1 Bravaisovy typy mřížek

Typicky dělíme mřížky na několik typů, označované Bravaisovy typy. Rozlišují se na těchto 7 základních typů:

- triklinická:  $a \neq b \neq c$
- monoklinická:  $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma, \beta > 90^\circ$
- ortorombická:  $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- tetragonální:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- trigonální:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- hexagonální:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- kubická:  $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

### 1.3.3 Mřížová rovina

Mřížová rovina je rovina, která je jednoznačně dána 3 různými body z krystalové mřížky a reprezentuje tak řez napříč krystalem. Množiny mřížkových rovin, které jsou navzájem rovnoběžné a pro každé 2 sousední roviny v nich platí, že mají mezi sebou stejnou vzdálenost  $d$ , označujeme jako osnovu rovin.

K označení osnov rovin se používají Millerovy indexy, tj. 3 celá čísla označovaná jako  $h, k$  a  $l$ . Osnova rovin  $hkl$  obsahuje mřížkové roviny, které jsou rovnoběžné s rovinou, která protíná 3 body určené vektory  $\frac{\vec{a}}{h}, \frac{\vec{b}}{k}$  a  $\frac{\vec{c}}{l}$ .



### 1.3.4 Reciproká mřížka

Reciproká mřížka se zavádí kvůli zjednodušení některých výpočtů. Reciprokou mřížku tvoří body ležící na normálových vektorech osnov rovin  $hkl$  v odpovídající vzdálenosti  $d_{hkl}$  (vzdálenost  $d$  mezi sousedními rovinami v osnově  $hkl$ ).

Reciproká mřížka je charakterizována obdobně jako krystalová mřížka 6 parametry označovanými  $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ , kde  $a^*, b^*, c^*$  jsou délky vektorů  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$  a  $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$  úhly svírané mezi nimi. Platí následující vztahy:

- $a^* = \frac{1}{d_{100}}, b^* = \frac{1}{d_{010}}, c^* = \frac{1}{d_{001}}$
- $\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, \cos \beta^* = \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \sin \gamma}, \cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}$

## 1.4 Prášková difrakce

Prášková difrakce je metoda používána pro určení parametrů krystalové mřížky nějakého reálného krystalu. Při této metodě je používána krystalická látka v práškové formě, efektivně tedy ve formě mnoha velmi malých krystalů (polykrystal). Na tento prášek je vysíláno např. rentgenové záření a je sledováno a zaznamenáno pod jakými úhly dopadá nejintenzivnější záření. V takovém případě totiž dochází ke konstruktivní interferenci (tj. počátky vln odražených paprsků jsou od sebe vzdáleny nějaký násobek jejich periody a mají stejný směr, což vede ke zvýšení amplitudy těchto vln) 2 nebo více odražených paprsků. Při použití krystalické látky ve formě prášku je pak tedy velmi pravděpodobné, že bude obsahovat krystaly správně orientované pro pozorování tohoto jevu.

### 1.4.1 Braggova rovnice

Braggova rovnice popisuje podmínky, kdy dochází ke konstruktivní interferenci při odrazech rentgenového záření v krystalu.

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (1.1)$$

V rovnici 1.1  $n\lambda$  označuje nějaký celý násobek vlnové délky použitého rentgenového paprsku,  $d$  označuje vzdálenost mezi rovinami odrazu  $hkl$  a  $\theta$  je úhel odrazu. Difrakční záznam pak obsahuje tyto úhly  $\theta$ , pro které byla intenzita dopadlého rentgenového záření nejvyšší. Z této rovnice se dále odvozuje a označuje hodnota  $Q$ :

$$Q = \frac{1}{d^2} = \left( \frac{2 \sin \theta}{\lambda} \right)^2 \quad (1.2)$$

### 1.4.2 Metody pro nalezení krystalové struktury z difrakčního záznamu

Mezi tyto metody patří např. Treor, Dicvol, McMaille a také metoda ITO, na kterou se zaměřuje tato práce.

Dále je také možné problém řešit také např. pomocí systematického prohledávání parametrů mřížky (přímých nebo i reciprokových parametrů), tzv. Grid search. To se realizuje tak, že pro každý z parametrů se určí nějaký interval a krok mezi hodnotami v tomto intervalu. Řešení se pak hledá mezi všemi kombinacemi možných hodnot parametrů, které jsou voleny z daných intervalů.

## Metoda ITO

Tato práce vychází z metody ITO popsané v [3]. Následující kapitola obsahuje volný překlad z tohoto článku.

Metoda vychází z rovnice:

$$Q_{hkl} = h^2 A + k^2 B + l^2 C + klD + hlE + hkF \quad (2.1)$$

kde:

$$A = a^{*2}, B = b^{*2}, C = c^{*2}, D = b^* c^* \cos \alpha^*, E = a^* c^* \cos \beta^*, F = a^* b^* \cos \gamma^*$$

Základem metody je uvažování rovin kde jedno z  $h, k, l$  je rovné 0. Rovnice 2.1 se pak redukuje na:

$$Q_{m,n} = m^2 Q' + n^2 Q'' + mnR \quad (2.2)$$

kde  $m$  a  $n$  může odpovídat libovolné dvojici z  $h, k, l$  a  $Q', Q'', R$  pak odpovídajícím proměnným  $A \dots F$ .

Úpravou rovnice 2.2 získáme rovnost pro  $R$ :

$$R = (Q_{m,n} - m^2 Q' - n^2 Q'') / mn \quad (2.3)$$

### 2.1 Hledání zón

Za  $Q'$  a  $Q''$  postupně dosazujeme do rovnice 2.3 všechny možné naměřené  $Q$  hodnoty. Pro každou z těchto dvojic nalezneme potenciální hodnoty  $R$  následujícím způsobem. Pro několik kladných celých hodnot  $m$  a  $n$  dosadíme do rovnice za  $Q_{m,n}$  naměřené  $Q$  hodnoty a uložíme si absolutní hodnotu  $|R|$  (stačí uvažovat pouze absolutní hodnotu, jelikož  $m$  nebo  $n$  může být i záporné). Hodnoty  $|R|$ , které se pro danou dvojici vyskytují opakovaně, uložíme společně s danou dvojicí  $Q'$  a  $Q''$  jako jednu z možných zón. Uvažujeme pouze hodnoty, které se opakují alespoň  $r$ -krát, kde  $r$  je nějaká konstanta.

Vzhledem k nepřesnostem při měření  $Q$  hodnot nelze předpokládat, že spočítané  $|R|$  hodnoty si budou přesně rovny, proto je potřeba přidat nějakou toleranci. Původní článek navrhuje např. vynásobit  $|R|$  nějakou kladnou konstantou, zaokrouhlit na nejbližší celé číslo a poté uvažovat hodnoty za rovné, pokud rozdíl těchto hodnot je menší než nějaká další konstanta.

## 2.2 Úprava nalezených zón

Takto nalezené zóny, tedy trojice  $Q', Q''$  a  $R$ , jsou následně upraveny podle následujících pravidel:

- Pokud  $Q' = Q''$ :

$$Q' = \frac{2Q' - R}{4}, Q'' = \frac{2Q'' + R}{4}, R = 0$$

- Pokud  $R = Q'$ :

$$Q' = \frac{Q' + R}{8}, Q'' = Q'' - \frac{Q' + R}{8}, R = 0$$

- Pokud  $R = Q''$ :

$$Q' = Q' - \frac{Q'' + R}{8}, Q'' = \frac{Q'' + R}{8}, R = 0$$

- Pokud  $R > Q'$ :

$$Q' = Q', Q'' = Q' + Q'' - R, R = 2Q' - R$$

Parametry upravených zón jsou nadále vylepšeny pomocí metody nejmenších čtverců. Tedy pro hodnoty  $m$  a  $n$ , pro které je vypočtená hodnota  $Q_{m,n}$  v toleranci nějaké naměřené hodnoty  $Q$ , minimalizujeme chybu  $(Q_{m,n} - Q)^2$ .

Dále je pro všechny zóny vypočtena pravděpodobnost, že byly nalezeny náhodou, která je použita pro kvalitativní ohodnocení dané zóny. Označíme tuto pravděpodobnost  $C$  a počítáme následujícím způsobem:

$$C = \frac{N_c!}{N_o!(N_c - N_o)!} p^{N_o} (1 - p)^{N_c - N_o} \quad (2.4)$$

kde  $p = \frac{\sum \Delta Q}{Q_{max}}$ ,  $N_c$  je počet dvojic  $m$  a  $n$ , pro které vypočtená hodnota  $Q_{m,n}$  je v toleranci nějaké naměřené hodnoty  $Q$ , a  $N_o$  je celkový počet testovaných dvojic  $m$  a  $n$ . Inverzní hodnotu této pravděpodobnosti  $\frac{1}{C}$  označíme jako kvalitu dané zóny.

## 2.3 Kombinace zón

Pro všechny dvojice zón, které dosahují nějaké požadované podmínky na jejich kvalitu  $\frac{1}{C}$ , se pokusíme najít jejich průnik a tedy parametry  $A \dots F$ . To je provedeno tak, že pro každou zónu jsou spočítány 4 nejmenší Q hodnoty, konkrétně  $Q', Q'', Q' + Q'' - R, Q' + Q'' + R$ . Tyto hodnoty jsou porovnány. Pokud je nalezena společná Q hodnota, lze definovat průnik těchto zón jako:

$$A = Q_c, B = Q_{1,1}, C = Q_{2,1}, E = Q_c + Q_{2,1} - Q_{2,2}, F = Q_c + Q_{1,1} - Q_{1,2}$$

kde  $Q_c$  je nalezená společná hodnota,  $Q_{1,1}, Q_{2,1}$  jsou nejmenší Q hodnoty 1. a 2. zóny různé od  $Q_c$ , obdobně  $Q_{1,2}, Q_{2,2}$  jsou 2. nejmenší hodnoty.

Dále je nutné dopočítat parametr  $D$ . Ten je spočítán podobným způsobem jako  $R$ , ale z upravené rovnice 2.1:

$$D = (Q - h^2A - k^2B - l^2C - hlE - hkF)/(kl) \quad (2.5)$$

Za hodnoty  $h, k, l$  dosazujeme:

$$h \in \langle -2, 2 \rangle, k \in \{-2, -1, 1, 2\}, l \in \{1, 2\}$$

Na závěr jsou provedeny tyto úpravy:

- Pokud  $A = B$  a  $F = 0$ :

$$A' = \frac{A + B - F}{4}, B' = \frac{A + B + F}{4}, C' = C,$$

$$D' = \frac{D - E}{2}, E' = \frac{D + E}{2}, F' = 0$$

- Pokud  $F = A$  nebo  $F = B$ :

$$A' = \frac{A}{4}, B' = B - \frac{A}{4}, C' = C, D' = D - \frac{E}{2}, E' = \frac{E}{2}, F' = 0$$

Obdobně pak pro kombinace  $A, C, E$  a  $B, C, D$ .

## 2.4 Alternativní kombinace zón

Hledat průnik zón je také možné převedením reciprokových parametrů  $Q', Q'', R$  na přímé mřížkové parametry. Tím získáme parametry  $x, y, \omega$ . V tomto případě uvažujeme trojice skupin těchto parametrů, které interpretujeme jako  $a, b, \gamma$ ,  $a, c, \beta$  a  $b, c, \alpha$  resp. Pokud nastává přibližná rovnost mezi parametry  $a, b, c$  napříč všemi těmito trojicemi, našli jsme potenciální parametry mřížky.



---

# Implementace

Implementace byla provedena v jazyce C++, ve kterém je implementován nástroj ParaCell.

## 3.1 ParaCell

ParaCell je nástroj pro indexaci dat práškové difrakce, dostupný z [4]. Hlavním autorem je doc. Ing. Ivan Šimeček, Ph.D., vedoucí této práce. Aktuální verze ParaCellu obsahuje algoritmy MGLS, DICVOL, TREOR a Grid search. Cílem této práce je rozšířit ParaCell o metodu ITO.

Implementaci ParaCellu lze rozdělit do 3 hlavních modulů. První modul se stará o čtení vstupních dat a konfiguračního souboru. Druhým jsou pak implementace různých metod, které ze vstupních dat vypočítají kandidáty krystalové mřížky odpovídající vstupním datům. Třetí modul pak tyto kandidáty vyhodnotí.

## 3.2 Metoda ITO

V rámci této práce byla pro program ParaCell implementována metoda ITO popsaná v kapitole 2.

Hledání potenciálních R hodnot bylo implementováno tímto způsobem. Pole s potenciálními R hodnotami je seřazeno. Poté se hledají skupiny sousedních prvků, které obsahují nějaký zvolený minimální počet prvků a pro prvky této skupiny platí, že jejich rozdíl od průměru skupiny je menší než nějaká zvolená konstanta. Stejným způsobem jsou hledány i hodnoty parametru D.

Vylepšením oproti originálnímu algoritmu je, že za  $Q'$  a  $Q''$  se při hledání parametrů  $Q'$ ,  $Q''$  a  $R$  dosazují kromě naměřených  $Q$  hodnot také hodnoty  $\frac{Q}{4}$ ,  $\frac{Q}{9}$  a  $\frac{Q}{16}$ . To protože některé difrakční záznamy neobsahují reflexe rovin  $hkl$  typu 001 atp. Mohou ale obsahovat např. reflexe 002, z tohoto důvodu má smysl uvažovat hodnoty  $\frac{Q}{4}$  atd.

### 3.3 Paralelizace

K paralelizaci byla využita technologie OpenMP, která je použita i v ostatních částech ParaCellu. OpenMP umožňuje paralelizaci C++ kódu pomocí direktiv překladače.

K paralelizaci byla využita direktiva `#pragma omp parallel for`, která umožňuje paralelizaci for cyklů. Pomocí této direktivy byly paralelizovány vnější cykly 2 hlavních částí implementovaného algoritmu, tj. hledání trojic  $Q', Q'', R$  a následné sestavování mřížkových parametrů z těchto trojic.



---

# Testování

## 4.1 Testovací platforma

Program byl testován na školním clusteru *star.fit.cvut.cz*. Jeho specifikace jsou:

- CPU: 2× Intel Xeon 2620 v2
- 32 GB RAM
- GPU: Tesla P100, GeForce RTX 2080 Ti, Tesla K40c, GeForce GTX 780 Ti a GeForce GTX 750

## 4.2 Testovací data

Program byl testován na datech získaných z [5]. Konkrétně se jednalo o 6 záznamů s kubickou, 9 s hexagonální, 25 s monoklinickou, 18 s ortorombickou, 7 s tetragonální a 35 s triklinickou mřížkou.

## 4.3 Měření kvality výsledků

K měření kvality výsledků se používá  $F_N$  index popsáný v [6]. Počítá se následujícím způsobem:

$$F_N = \frac{N}{|\Delta 2\theta| N_c} \quad (4.1)$$

kde  $N$  je počet naměřených reflexí,  $N_c$  je počet možných vypočítaných reflexí až do hodnoty reflexe s indexem  $N$  a  $|\Delta 2\theta|$  je průměrný rozdíl mezi naměřenými a vypočítanými reflexemi.

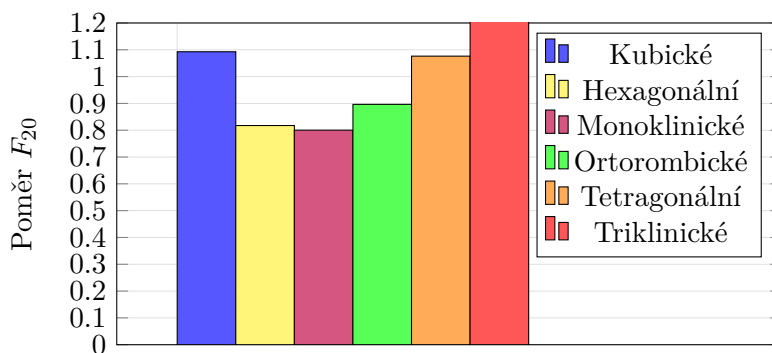
K měření kvality výsledků je použit poměr hodnot  $F_{20}$  dosažené metodou ITO ku  $F_{20}$  pro parametry mřížek uvedené v záznamech z [5]. Tyto záznamy neuvádí konkrétní hodnotu  $F_{20}$ , ale pouze parametry krystalových mřížek.

## 4. TESTOVÁNÍ

---

Hodnoty  $F_{20}$  tedy byly vypočítány pomocí programu ParaCell při použití těchto mřížkových parametrů.

Naměřené hodnoty pro jednotlivé typy krystalových mřížek lze vidět na obrázku 4.1. Reprezentují průměrný poměr popsany v předchozím odstavci na testovacích datech. Pro triklinické typy mřížek byl naměřen průměrný poměr 86,6. Důvodem je, že u triklinických mřížek se nejvíce projeví i ty nejmenší změny parametrů mřížky, protože jich mají nejvíce neznámých. Např. z testovací sady u záznamu minerálu vauxit se spočítané přímé parametry lišily od těch uvedených v záznamu o jednotky tisícín a jen ve 4 ze 6 parametrů. I přesto byl podíl hodnot  $F_{20}$  rovný  $\frac{407,1}{27,8} \approx 14,64$ . Z podobných důvodů lze pak pozorovat poměr větší než 1 i u ostatních typů mřížek.

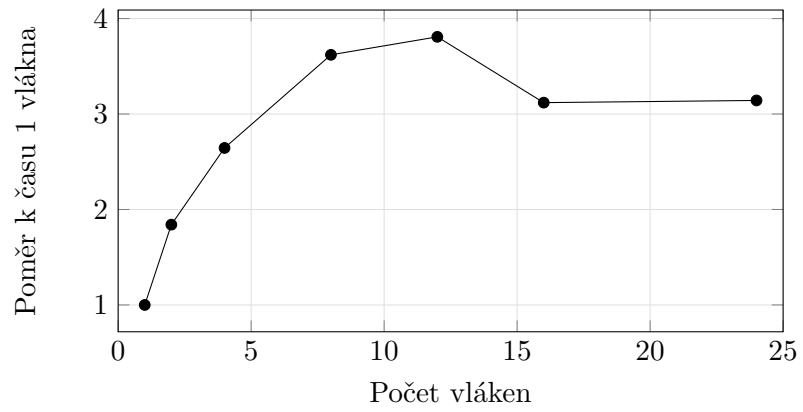


Obrázek 4.1: Kvalita výsledků

Z výsledků lze tvrdit, že tato implementace metody ITO je vhodná hlavně pro kubické, tetragonální a triklinické typy mřížek. Pro ostatní je metoda také použitelná, ale nemusí nalézt správné řešení.

### 4.4 Škálovatelnost implementace

Na obrázku 4.2 je vyobrazen poměr času běhu implementace při daném počtu vláken ku době trvání běhu s 1 vláknem. Škálovatelnost není ani přibližně lineární. Zároveň si lze všimnout, že při použití technologie Hyper-Threading (technologie pro běh 2 vláken na jednom fyzickém jádře) dochází dokonce ke zpomalení výpočtu.



Obrázek 4.2: Škálovatelnost implementace



---

## Závěr

Cílem této práce byla implementace metody ITO do programu ParaCell. Tato metoda byla implementována a kvalitativně vykazovala uspokojivé výsledky. Škálovatelnost této implementace na více jader procesoru však byla méně úspěšná, dosahovala méně než 4× rychlejších časů při použití 12 jader.



---

## Literatura

- [1] Krystalické a amorfni látky. Dostupné z: <http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/622-krystalicke-a-amorfni-latky>, [cit. 2021-06-27].
- [2] Učebnice mineralogie pro bakalářské studium. Dostupné z: [http://mineralogie.sci.muni.cz/obsah\\_uceb.htm](http://mineralogie.sci.muni.cz/obsah_uceb.htm), [cit. 2021-06-27].
- [3] Visser, J. W.: A fully automatic program for finding the unit cell from powder data. *Journal of Applied Crystallography*, ročník 2, č. 3, Aug 1969: s. 89–95, doi:10.1107/S0021889869006649. Dostupné z: <https://doi.org/10.1107/S0021889869006649>
- [4] ParaCell download — SourceForge.net. <https://sourceforge.net/projects/paracell/>, [cit. 2021-06-27].
- [5] American Mineralogist Crystal Structure Database. Dostupné z: <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>, [cit. 2021-06-27].
- [6] Smith, G. S.; Snyder, R. L.:  $F_N$ : A criterion for rating powder diffraction patterns and evaluating the reliability of powder-pattern indexing. *Journal of Applied Crystallography*, ročník 12, č. 1, Feb 1979: s. 60–65, doi:10.1107/S002188987901178X. Dostupné z: <https://doi.org/10.1107/S002188987901178X>





## Seznam použitých zkratk

**CPU** Central processing unit

**RAM** Random access memory



## Obsah přiloženého CD

<code>src</code>	
├── <code>impl</code> .....	zdrojové kódy implementace
├── <code>thesis</code> .....	zdrojová forma práce ve formátu $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$
└── <code>text</code> .....	text práce
├── <code>DP_Cermak_Michal_2020.pdf</code> .....	text práce ve formátu PDF