

УТВЕРЖДАЮ  
И.о. директора НИГП  
АК «АЛРОСА» (ОАО)

  
И.В. Серов  
«\_\_\_» 2014 г.

СОГЛАСОВАНО  
Главный геолог  
АК «АЛРОСА» (ОАО)

  
В.П. Серов  
«\_\_\_» 2014 г.

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ**  
на выполнение научно-исследовательских работ по теме:  
«Разработка программного обеспечения математического анализа  
морфологии трёхмерных моделей кристаллов алмаза»

### **1. Исходные данные**

Минералогическое описание алмазов является основой при районировании территорий и прогнозирования перспективных участков на выявление неоткрытых кимберлитовых т.е. Описание внешней морфологии выполнялось различными исполнителями и в различное время. Сопоставимость результатов различных лет исследований и различных исполнителей могут отличаться до 40% по группам признаков. Для исключения субъективизма при определение гранной морфологии алмаза планируется использование приборов: специального компьютерного 3D сканера/профилометра (Plu Neox) и/или микротомографа (SkyScan 1272). Прибор на основании оптико-интерференционных, зондовых измерений, а также реконструкции рентгеновских томографических срезов создаёт цифровую 3D модель кристалла. Границы представлены треугольными полигонами как на визуальной модели, так и в формате файлов фирм-производителей оборудования (SkyScan, SENSOFAR). Пространственное разрешение аппроксимирующей кристалл 3D модели – 5 мкм

### **2. Цель работ**

Разработка точного инструментального метод описания внешней морфологии алмазов с возможностью гномостреографической и гномонической проекции нормалей и изолиний плотностей нормалей к поверхности зерна кристалла в рамках макроскопического кристалломорфологического описания на современной аппаратурной базе.

### **3. Задачи работ**

Разработать программное средство, позволяющее:

- считывать наиболее распространённые форматы 3D моделей;
- считывать формат файлов 3D-профилометра и компьютерного микротомографа приобретённого в НИГП АК «АЛРОСА»;
- определять площадь и миллеровские индексы полигонов в координатах кубической сингонии;
- строить стандартные гномостереографические проекции граней;
- обеспечить взаимодействие с лабораторной базой данных по хранению цифровых моделей кристаллов и информации по морфологии кристаллов.

### **3. Методика и виды работ**

Предполагается разработка алгоритмов чтения трёхмерных моделей в память компьютера, математического расчёта векторов полигонов, построение плотностных моделей векторов полигонов, индексация направлений векторов в кубической сингонии, создание таблицы кристаллографических направлений, подсчёт площади граней, развитых по различным кристаллографическим направлениям и представление в табличной форме.

Созданные программой таблицы будут проанализированы с выделением не кристаллографических направлений принадлежащим сколам, кристаллографические направления будут пересчитаны для определения места кристалла в существующей классификации.

Возможный алгоритм решения задачи (подробности анализа морфологии кристалла алмаза по его полярному комплексу приведены в работе: Ракин В.И. Морфология алмазов уральского типа /Екатеринбург: РИО УрО РАН, 2013, 396 с.):

### **I этап. Построение гладкой выпуклой поверхности кристалла**

Нахождение центра кристалла ("центра массы" поверхности) по формулам средних значений координат и перенос начала системы координат в центр кристалла.

На основе преобразованных координат точек поверхности зерна  $r(x,y,z)$  находится гладкая, алгебраическая, сшитая (например, сплайнами) аппроксимирующая поверхность зерна  $F(x,y,z)=0$  (две поверхности – верхняя  $-Z>0$  и нижняя  $Z<0$ ), на которой все точки – обычновенные, то есть в каждой точке непрерывны частные производные  $F'_x$ ,  $F'_y$ ,  $F'_z$  и кроме того  $(F'_x)^2 + (F'_y)^2 + (F'_z)^2 \neq 0$  – существует ненулевой вектор нормали к поверхности.

При аппроксимации отклонение вычисленной поверхности от исходных точек  $r(x,y,z)$  не должно превышать заданную величину  $\epsilon$  (например, 1 мкм).

Макроскопическое морфологическое описание определяется условием: расстояние между соседними линиями перегиба поверхности не должно быть менее 30 мкм, что гарантирует отсутствие интерференционной структуры с шагом более чем в  $1^\circ$  при наблюдении поверхности зерна в видимом монохроматическом свете (Ракин, 2013)

### **II этап. Расчет полярного комплекса кристалла**

Из центра зерна направляется изотропный пучок лучей, представляющий собой, например, пучок лучей, проходящих через точки пересечения параллелей и меридианов с заданным шагом ( $0.5, 1.0, 2.0^\circ$ ) на сфере, построенной над центром зерна.

В точке пересечения каждого луча с гладкой поверхностью кристалла вычисляется кривизна поверхности. Если она выпуклая (отрицательная), то для данной точки находится нормаль –  $n(F'_x, F'_y, F'_z)$  к поверхности и на гномостереографической проекции в соответствии с кристаллографическими правилами отмечается положение нормали. Точность нанесения точек должна быть не хуже  $1^\circ$ .

Участки вогнутой поверхности зерна на гномостереографической проекции, выделяются замкнутыми областями.

### **III этап. Построение кристаллографической проекции зерна**

По гномостереографической проекции в произвольной ориентации кристалла оператор находит оси симметрии структуры кристалла (ось наивысшего порядка должна быть новой осью  $OZ$ ), отмечает ее на проекции и затем должен быть произведен перерасчет проекции полярного комплекса из произвольной установки кристалла в правильную кристаллографическую. У алмаза оси  $OX$ ,  $OY$ ,  $OZ$  кристаллографической системы координат должны совпадать с осями четвертого порядка. Нахождение

элементов симметрии полярного комплекса представляет, как нам кажется сложную математическую задачу, и в рамках данного проекта пока не обязательна, но в перспективе она должна решаться автоматически. При этом, оператор находит элементы симметрии кристалла достаточно просто по изображению проекции комплекса нормалей.

На основе гномостереографической проекции рассчитывается гномоническая проекция нормалей, попадающих в заданный телесный угол  $\pi$  (шаровой сектор в форме конуса с осью  $OZ$  и углом образующей в  $60^\circ$ ). По каждому кубическому кристаллу можно построить шесть гномонических кристаллографических проекций в стандартной установке.

**IV этап.** Расчет рельефа поверхности в форме изолиний плотности нормалей на сфере проекции.

По пучку нормалей от поверхности зерна, рассчитывается сферическое распределение нормированной плотности нормалей. Изолинии распределения плотности нормалей с заданным шагом наносятся на гномостереографическую и гномоническую кристаллографические проекции.

Должна быть предусмотрена возможность получения полярного комплекса нормалей по сферической сетке с разным шагом (см. пункт II), для того, чтобы, убедиться в устойчивости решения.

Полученный результат будет аналогом сферического поля интенсивностей отраженного от кристалла света и может свидетельствовать об облике зерна.

В итоге на каждое зерно может быть составлена одна гномостереографическая и шесть гномонических стандартных кристаллографических проекций с изолиниями плотностей нормалей к поверхности – предельно полное кристаллографическое описание кристалла.

Точечные области с аномально высокими плотностями говорят о наличии плоских участков – граней. Линейные области высокой плотности на гномонической проекции свидетельствуют о наличии цилиндрических поверхностей.

#### **4. Ожидаемые результаты**

В результате проведения работ будет разработано программное средство и предложен точный инструментальный метод описания внешней морфологии алмазов в базу данных НИГП.

Ответственный исполнитель  
работ от НИГП



О.Е. Ковальчук