

Корреляция значений фрактальных характеристик структуры материала по электронно- микроскопическим фотографиям поверхности образцов со значениями их физико-механических характеристик

И. Е. Красикова, И. В. Красиков, В. В. Картузов

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН
Украины, Киев, e-mail: ira@ipms.kiev.ua

На основе методов мультифрактального формализма построен алгоритм определения фрактальных характеристик двумерных изображений структур материалов. Приведен интерфейс пользователя компьютерной программы для определения упомянутых характеристик. Проведена обработка изображений структуры материалов; полученные фрактальные характеристики структуры различных материалов демонстрируют наличие корреляции с их физическими свойствами.

Ключевые слова: мультифрактальность, электронная микроскопия, обработка изображений, прочность, твердость.

Исследования в области материаловедения имеют отличительную черту. Она заключается в том, что изучение свойств материалов и процессов их производства и эксплуатации опирается не только на измеряемые количественные характеристики, но и на качественные методики, среди которых большую роль играет анализ изображения (в частности, получаемые методами электронной и оптической микроскопии) структур характерных поверхностей представительных образцов изучаемых объектов. Однако в последнее время все чаще утверждается, что получаемые при помощи электронной микроскопии изображения структуры должны давать в первую очередь количественную информацию. Без применения аппаратно-вычислительных комплексов, оснащенных алгоритмами, которые основаны на максимально адекватных физическим процессам математических моделях, это крайне затруднительно, если вообще возможно.

Среди таких математических моделей и теорий все более важная роль отводится анализу, основанному на аппарате фрактальной геометрии [1—7]. Начиная с 1980-х годов в этой области знаний прогрессирует использование представлений о фрактальных структурах. Хотя объекты с дробной геометрической размерностью в математике начали изучать еще в начале XX века, в физико-химических (и, в частности, материаловедческих) исследованиях они практически не рассматривались. Поскольку реальные физические объекты и сигналы, даже обладающие признаками самоподобия, очень редко могут быть адекватно описаны с помощью лишь одной величины фрактальной размерности, в последнее время получил распространение анализ, основанный на теории *мультифракталов* — неоднородных фрактальных объектов. Понятие мультифрактала предоставляет

новые обширные возможности для фрактального анализа сложных стохастических процессов. Идея мультифрактального анализа состоит в разложении исследуемого множества со сложной статистикой по множествам однородных фракталов с четко выраженной фрактальной размерностью.

Несмотря на довольно широкое применение математических методов получения мультифрактальных характеристик изображений [8—11], до сих пор практически нет ни единообразного стабильно воспроизводимого математического (и тем более алгоритмического) подхода к исследованию фрактальных свойств, ни общепризнанного унифицированного программного обеспечения. Из-за этого воспроизведение результатов, полученных одними исследователями, оказывается невозможным для других. Зачастую именно эти причины приводят к определенному неприятию исследователями-материаловедами фрактальных характеристик изображений.

В работах [12—16] достаточно подробно изложен математический аппарат, на основе которого нами было разработано соответствующее программное обеспечение для вычисления мультифрактальных характеристик (программа Fraculator, описанная в работе [16]). Основное окно пользователя приведено на рис. 1.

Одной из особенностей данной программы является возможность предварительной обработки изображений, а именно — изменение порога разделения цветов на черный и белый, а также преобразование изображения в негативное и/или выделение границ (которое можно увидеть на рис. 2).

Принятию программы в качестве определенного стандарта способствует то, что программа в достаточной степени автоматизирована (в частности, предварительная обработка позволяет указать наиболее приемлемый порог преобразования цвета, а также автоматически выбрать предопределенный диапазон кривой для расчетов, полученный с использованием либо максимально широкого участка наклонной полосы, либо

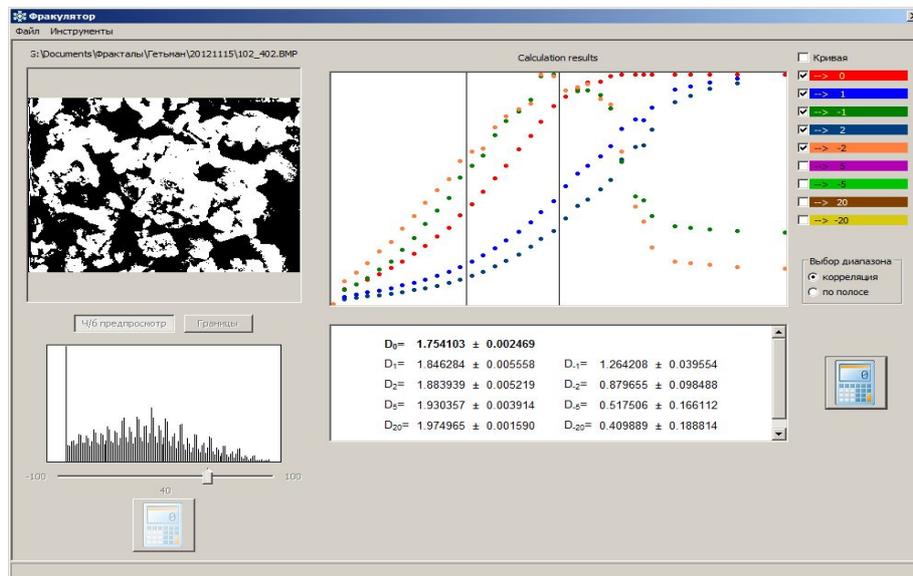


Рис. 1. Общий вид главного окна программы Fraculator.

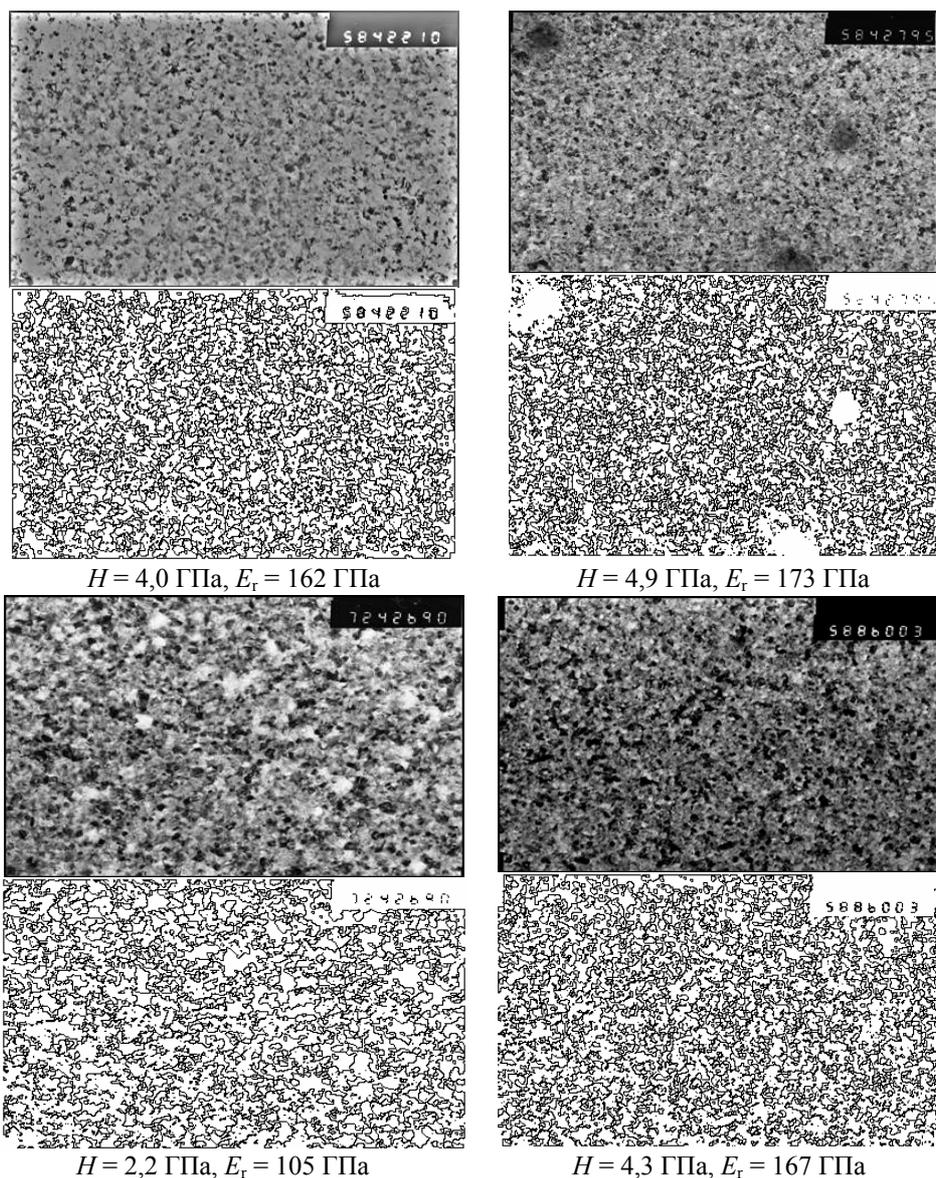


Рис. 2. Микрофотографии образцов структур осажденного титана (фотографии и выделенные границы) и их механические характеристики [17].

диапазона, в котором достигается максимальная точность вычисления размерности D_0).

Программа была применена для обработки изображений некоторых реальных материаловедческих объектов [17, 18] и поиска их мультифрактальных характеристик. Так, были проведены исследования мультифрактальных характеристик электронно-микроскопических изображений осажденного методом магнетронного распыления титана (рис. 2).

Для изучения вопроса о взаимосвязи структурных (фрактальных) и физических характеристик с помощью описанной программы Fraculator определены мультифрактальные характеристики показанных на рис. 2 изображений, а именно размерности D_0 , D_1 , D_2 и D_{-1} , вычисленные как для

микрофотографий со стандартным порогом, так и для обработанных изображений, на которых были выделены границы.

Среди основных характеристик, используемых для сравнения и описания мультифракталов, можно выделить хаусдорфову размерность D_0 , несущую грубую обобщенную информацию о размерности пространства, в которой сформирован мультифрактал, и его несплошности в целом. Показательной величиной является и информационная размерность D_1 , определяемая вероятностью найти необходимую точку в пределах заданной ячейки и характеризующая энтропию фрактального множества, или неоднородность распределения элементов мультифрактала в пространстве. Еще одной существенной характеристикой мультифрактала служит корреляционная размерность D_2 , задаваемая вероятностью нахождения двух точек на определенном расстоянии друг от друга, то есть характеризующая неоднородность распределения элементов мультифрактала в пределах фрактального множества.

Анализ результатов показал наличие корреляции между этими фрактальными характеристиками и механическими свойствами образцов материалов — твердостью H и приведенным модулем упругости $E_r = E/(1-\nu^2)$.

Коэффициент корреляции для двух выборок $x^m = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ и $y^m = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ рассчитывался по формуле

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^m (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^m (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2}},$$

где \bar{x}, \bar{y} — средние указанных выборок. В данном случае роль выборки x играют значения той или иной мультифрактальной характеристики образцов, y — физические свойства образцов, а размер выборки m равен количеству образцов.

Достаточно высокая степень корреляции наблюдается при вычислениях как фрактальной размерности самих микрофотографий, так и выделенных границ. Однако в силу большего диапазона величин фрактальной размерности зависимость физических характеристик от мультифрактальных размерностей проявляется более сильно. Как показали результаты вычислений, приведенные в табл. 1 и 2, с ростом мультифрактальных размерностей структуры материала увеличиваются и значения их прочностных характеристик, что вполне естественно — в силу того, что образцы с более высокой фрактальной размерностью более близки к монолитным, чем образцы с более низкой размерностью. Наиболее сильно проявляется корреляция физических характеристик с размерностью D_1 .

В следующем эксперименте рассматривались мультифрактальные характеристики пленок хрома, осажденных в аргоне на кремниевых подложках, в зависимости от условий их получения [18]. На рис. 3 показаны изображения поверхности пленок хрома, полученных осаждением в аргоне при разной температуре.

Результаты исследования мультифрактальных характеристик образцов пленок хрома, осажденных в аргоне, приведены в табл. 3. Их корреляции с твердостью H соответственно составили: с D_0 — 0,957055; с D_1 —

Т а б л и ц а 1. Мультифрактальные характеристики образцов осажденного магнетронным распылением титана (параметры расчета: выбор границ и корреляционной полосы)

Образец	D_0	D_1	D_2	D_{-1}	H , ГПа	E_r , ГПа
1	1,539	1,547	1,542	1,386	4,0	162
2	1,680	1,658	1,638	1,578	4,9	173
3	1,519	1,548	1,550	1,345	2,2	105
4	1,622	1,612	1,579	1,505	4,3	167

Т а б л и ц а 2. Корреляция мультифрактальных характеристик образцов осажденного магнетронным распылением титана с прочностными

Корреляция	D_0	D_1	D_2	D_{-1}
H	0,838128	0,76729	0,68742	0,863806
E_r	0,73589	0,648767	0,542628	0,771293

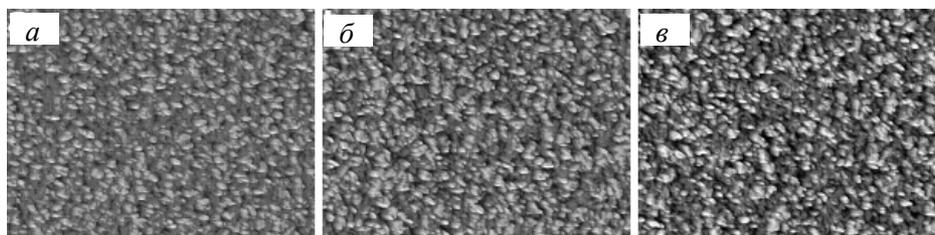


Рис. 3. Морфология поверхности пленок хрома, осажденных при температурах 25 (а), 230 (б) и 400 °С (в) [18].

Т а б л и ц а 3. Мультифрактальные характеристики образцов пленок хрома, осажденных в аргоне

Образец	D_0	D_1	D_2	D_{-1}	H , ГПа
1	1,613	1,618	1,610	1,497	11,0
2	1,617	1,611	1,601	1,516	11,3
3	1,527	1,568	1,577	1,347	10,4

0,894667; с D_2 — 0,825094; с D_{-1} — 0,973513. Как видно из представленных данных, в этом случае также имеется высокая степень корреляции между мультифрактальными (структура материала) и физическими характеристиками пленок (твердость), причем точно такая же, как и в первом эксперименте (с осажденным титаном) — при увеличении фрактальных размерностей структуры выделенных границ растут и значения твердости образцов.

Выводы

Применение разработанного авторами программного обеспечения позволяет стабильно получать мультифрактальные характеристики

структуры различных материаловедческих объектов по их электронно-микроскопическим изображениям.

Показана корреляция получаемых мультифрактальных характеристик структуры материалов и значений их физико-механических характеристик, дающая основания для систематических направленных исследований.

1. *Встовский Г. В.* Мультифрактальный анализ особенностей разрушения приповерхностных слоев молибдена / Г. В. Встовский, А. Г. Колмаков, В. Ф. Терентьев // Изв. РАН. Металлы. — 1993. — № 4. — С. 164—178.
2. *Встовский Г. В.* Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов / Г. В. Встовский, А. Г. Колмаков, И. Ж. Бунин. — Ижевск : НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2001. — 116 с.
3. *Встовский Г. В.* Элементы информационной физики. — М. : МГИУ, 2002. — 260 с.
4. *Иванова В. С.* Мультифрактальный метод тестирования устойчивости структур в материалах / [В. С. Иванова, Г. В. Встовский, А. Г. Колмаков, В. Н. Пименов]. — М. : Интерконтакт Наука, 2000. — 54 с.
5. *Feder J.* Fractals. — New York : Plenum Press, 1988. (Имеется русский перевод — Е. Федер. Фракталы. — М. : Мир, 1991).
6. *Картузов В. В.* Фрактальная размерность поверхности изломов / В. В. Картузов, В. И. Трефилов, Н. В. Минаков // Металловедение и терм. обработка металлов. — 2001. — № 3. — С. 10—14.
7. *Ролдугин В. И.* Фрактальные структуры в дисперсных системах // Успехи химии. — 2003. — **72** (10). — С. 931—959.
8. *Барахтин Б. К.* Цифровая обработка и мультифрактальный анализ дифракционных изображений структур / Б. К. Барахтин, Н. В. Лебедева, У. А. Пазилова // Деформация и разрушение материалов. — 2006. — № 9. — С. 18—23.
9. *Zaiser M.* Fractal analysis of deformation-induced dislocation patterns / M. Zaiser, K. Bay and P. Hähner // Acta Mater. — 1999. — **47**, No. 8. — P. 2463—2476.
10. *Светова Н. Ю.* Численный алгоритм взаимного мультифрактального анализа // Электронный журн. "Исследовано в России", <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2004/185.pdf>, 2004.
11. *Giona M.* Multifractal analysis of chaotic power spectra / M. Giona, P. Piccirilli // J. Phys. A. — 1991. — **24**. — P. 367—373.
12. *Красикова И. Е.* Определение фрактальных характеристик структуры материалов методом мультифрактального анализа изображений / И. Е. Красикова, И. В. Красиков, В. В. Картузов // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. — К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2007. — Вып. 9. — С. 79—84.
13. *Красикова И. Е.* Компьютерная реализация алгоритма вычисления фрактальной размерности структуры материала по изображениям, полученным при помощи электронной микроскопии / И. Е. Красикова, В. В. Картузов, И. В. Красиков // Там же. — 2011. — Вып. 13. — С. 82—89.
14. *Красикова И. Е.* Характеристики компьютерной реализации алгоритма вычисления фрактальной размерности двумерных изображений / И. Е. Красикова, В. В. Картузов, И. В. Красиков // Там же. — 2013. — Вып. 15. — С. 69—73.
15. *Красикова И. Е.* Компьютерная реализация алгоритма вычисления мультифрактальных характеристик структуры материала по двумерным изображениям / И. Е. Красикова, В. В. Картузов, И. В. Красиков // Там же. — 2014. — Вып. 16. — С. 74—79.
16. *Красикова И. Е.* Компьютерная реализация алгоритма определения мультифрактальных характеристик материаловедческих структур по их двумерным изображениям / И. Е. Красикова, В. В. Картузов, И. В. Красиков // Там же. — 2016. — Вып. 18. — С. 30—36.

17. *Основи створення наноструктурних матеріалів як з максимальним зміцненням, так і з регульованим поєднанням твердості та пластичності.* — Звіт ІПМ НАНУ № 0104U006638. — Київ, 2014. — 100 с.
18. *Фирстов С. А.* Механические свойства нанокристаллических пленок хрома с малыми добавками кислорода / [С. А. Фирстов, В. Ю. Куликовский, Т. Г. Роголь, С. Н. Дуб и др.] // *Наноструктурное материаловедение.* — 2011. — № 4. — С. 31—41.

Кореляція значень фрактальних характеристик структури матеріалу по електронно-мікроскопічним фотографіям поверхні зразків зі значеннями їх фізико-механічних характеристик

I. Є. Красікова, I. В. Красіков, В. В. Картузов

На основі методів мультифрактального формалізму побудовано алгоритм визначення фрактальних характеристик двовимірних зображень структур матеріалів. Наведено інтерфейс користувача комп'ютерної програми для визначення цих характеристик. Проведено обробку зображень структури матеріалів; отримані фрактальні характеристики структури різних матеріалів демонструють наявність кореляції з їх фізичними властивостями.

Ключові слова: мультифрактальність, електронна мікроскопія, обробка зображень, міцність, твердість.

Correlation of values of fractal characteristics of the material's structure based on the electron-microscopic images of the sample surface with the values of their physical and mechanical properties

I. E. Krasikova, I. V. Krasikov, V. V. Kartuzov

On the basis of multifractal formalism methods an algorithm determining the fractal characteristics of two-dimensional images of materials structures is built. An user interface of a computer program for determining these characteristics was described. Images of structure of material s were processed; obtained fractal structure characteristics of various materials show a correlation with their physical properties.

Keywords: multifractal, electron microscopy, image processing, strength, hardness.