

УДК 669.01: 530.1: 539.4

## МЕТОДОЛОГИЯ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ СТРУКТУР МАТЕРИАЛОВ

© И.Ж. Бунин, А.Г. Колмаков, Г.В. Встовский, В.Ф. Терентьев

Россия, Москва, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН

Bunin I.J., Kolmakov A.G., Vstovsky G.V., Terent'ev V.F. The Multifractal Parameterization of Materials Structures Methodology. The authors propose a method of quantitative description (parameterization) of structures in materials based on advances in multifractal analysis. On the basis of an original information-theoretical interpretation of multifractal formalism they introduce new multifractal characteristics of the materials structures. A specific computer algorithm for calculating the estimates of multifractal characteristics of structures in different materials is proposed. These computations may be used to obtain additional information on self-organization even in processes not observed directly.

Одной из важнейших задач современного материаловедения является разработка методов количественного описания (параметризации) внешне хаотических (сложных) структур и субструктур материалов, например, границ зерен, скоплений дислокаций, совокупностей точечных дефектов, пор, мелкодисперсных частиц вторичных фаз, а также структур поверхностей разрушения и др. Под параметризацией понимается способ описания различных систем с помощью некоторых количественных характеристик. Введение таких характеристик, позволяющих так или иначе различать подобные друг другу системы, является мощным инструментом научного исследования, которое полностью определяется способом и уровнем описания объекта исследования.

Адекватно выбранный способ параметризации структур материалов позволяет перейти к решению задачи оптимизации их свойств. Кроме того становится возможным выявление скрытых процессов эволюции структур материалов при обработках и внешних воздействиях. Важнейшим аспектом, необходимым образом возникающим при исследовании процессов структурообразования реальных материалов, является задача установления связи между их микроскопической структурой и макроскопическими свойствами. Одним из перспективных путей решения задач количественного описания структур материалов является их параметризация, основанная на использовании теории фракталов [1 - 3].

Фрактальная геометрия за свою сравнительно короткую историю обнаружила чрезвычайную эффективность в поиске новых путей описания, построения и предсказания поведения объектов исследования в различных областях науки. В целом связь фракталов с реальными природными объектами уже не вызывает сомнения. Открытая Б.Б. Мандельбротом общая закономерность геометрических свойств физического мира, проявляющаяся в самоподобии его строения, нашла многочисленные приложения в материаловедении [2 - 6 и др.], в частности, открыла новые возможности для описания внешне неупорядоченных микроструктур материалов и поверхностей разрушения в строгих количественных терминах [3 - 6]. На сегодняшний день твердо установлен непреложный факт: для адекватного

описания самоподобия природных и многих модельных структур недостаточно использования одной лишь величины фрактальной размерности. Широкие возможности в этом отношении предоставляет мультифрактальный формализм [1 - 7], нашедший множество различных применений, в том числе в материаловедении [2 - 6].

Традиционно структуры материалов, а также процессы их формирования и эволюции изучаются с использованием количественных параметров, характеризующих отдельные элементы структуры. Привлечение концепции мультифракталов, основанной на использовании общего понятия меры, позволяет давать количественную оценку конфигурации исследуемой структуры в целом, а также вводить характеристики однородности и скрытой упорядоченности, что существенно дополняет традиционные методы количественной металлографии [4 - 7].

Основой мультифрактального подхода к количественному описанию структур различной природы является построение тем или иным способом меры множества  $\{P_i\}$ , аппроксимирующего изучаемую структуру. Разбиение пространства, охватывающего множество, на элементарные гипер-ячейки и суммирование непустых, т.е. содержащих элементы множества, ячеек в определенном смысле эквивалентно покрытию исследуемого множества, называемого носителем меры. Разбивая на ячейки евклидово пространство, охватывающее изучаемую структуру, можно приписать каждой ячейке свою меру (вес)  $P_i$  соответственно природе объекта (доли массы, площади, энергии и пр.). В системе, описываемой распределением  $\{P_i\}$ , мультифрактальное описание можно получить из рассмотрения некоторой меры порядка  $(I_{mf})$  [4 - 7]. Нулевое значение  $I_{mf}(q)$  отвечает полному беспорядку в системе, когда все  $P_i$  равны друг другу, а преобразование меры не изменяет этого распределения. При этом все  $f_q$  также равны друг другу. Малейшая неоднородность распределения  $\{P_i\}$  будет сказываться на величинах  $f_q$ ,  $\alpha_q$ ,  $D_q$  при достаточно больших  $q$  заметным образом. Это позволяет рассматривать величины  $f_q$  и  $\Delta_q = D_1 - D_q$  при некотором фиксированном  $q = Q > 0$  в качестве эффективных мер однородности и порядка: чем значение  $f_q$  больше, тем структура более однородна; чем значение

$\Delta_q$  больше, тем больше в структуре периодической составляющей, и тем более она упорядочена. С увеличением  $Q$  указанные величины становятся более чувствительны к свойствам распределения  $\{P_i\}$ , описывающего изучаемую систему.

Для количественного анализа структур материалов разработана методика цифровой мультифрактальной параметризации структур, основу которой составляет оригинальная теоретико-информационная интерпретация мультифрактального формализма [4 - 7]. Методика позволяет рассчитывать мультифрактальные характеристики двумерных (2D) изображений структур - спектр размерностей Реньи  $D(q)$  и  $f(\alpha)$ -спектр и количественно оценивать характеристики однородности  $f(q \rightarrow \infty) \cong f(q = 40) = f_{40}$  и скрытой упорядоченности (периодичности)  $\Delta_{40} = D_1 - D_{40}$  структур. Полное описание методики и лежащей в ее основе теоретико-информационной интерпретации мультифрактального формализма имеется в работах [4 - 7 и др.]. Кратко суть методики сводится к выполнению двух этапов: 1) получению изображений структур с использованием современных средств ввода и предобработки изображений и последующей сегментацией образов исследуемых структур; 2) расчету мультифрактальных характеристик структур (разновидность корреляционного анализа изображений) с дальнейшим сопоставлением полученных характеристик с механическими и другими физико-химическими свойствами материалов и/или параметрами, контролирующими характер развития процессов. На первом этапе компьютерное изображение структуры представляется в виде двумерного массива подходящего размера  $L \times L$  бит (bitmap), состоящего из совокупности нулей (белая ячейка) и единиц (черная ячейка). В этом случае каждый элемент массива принимает только два возможных значения «1», если на ячейку приходится единичный элемент рассматриваемого сегмента изображения или «0» в противном случае. Полученные таким образом совокупности нулей и единиц представляют собой дискретные аппроксимации характеристических функций изучаемых фрагментов изображений. Затем с использованием специально разработанных программ двумерные матрицы размером  $L \times L$ , представляющие собой монохромные изображения структур: 1) разбиваются на более крупные ячейки размера  $l_k \times l_k$ , при наборе

масштабов  $l_k$  как правило, кратном двум  $l_k = 2^{(k+1)}$ ,  $k = 1, \dots, n$ ; 2) для каждого разбиения строится характеристическая мера в виде равноячеечного распределения единиц  $P_i \{P_i = M_i / \sum M_i\}$ , где  $M_i$  - число единиц в  $i$ -ой крупной ячейке,  $\sum M_i$  - общее количество единиц в матрице крупных ячеек,  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ ,  $N = [L/l_k]^2$ ; 3) для набора величин  $q$  из интервала  $[-40; 40]$  аппроксимируется зависимость обобщенной корреляционной функции  $\chi(q) = \sum (P_i)^q \sim (l_k)^{\tau(q)}$  от размеров крупных ячеек  $l_k$  по методу наименьших квадратов, то есть определяется наклон  $\tau(q)$  зависимости  $\ln \chi(q)$  от  $\ln(l_k)$ . Численно беря производную  $d\tau/dq$ , по формулам  $\alpha = d\tau/dq$ ,  $f(\alpha) = q\alpha - \tau(q)$  и  $D_q = \tau(q)/(q - 1)$  получают традиционные характеристики мультифрактального анализа:  $f(\alpha)$ -спектр и  $D_q$ -спектр размерностей Реньи.

Данная методика, нашедшая применение при анализе зеренных структур, геометрических структур поверхности, структур поверхностей металлических материалов, а также поровых структур покрытий, представляет собой простейший из возможных случаев мультифрактальной параметризации. Гораздо большие возможности количественного описания структур открываются с применением многоточечных корреляций мультифрактальных структур [7].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Mandelbrot B.B. The Fractal Geometry of Nature. N.-Y., 1983. 480 p.
2. Олемской А.И., Флат А.Я. Использование концепции фрактала в физике конденсированной среды // Успехи физ. наук. 1993. Т. 163. № 12. С. 1-50.
3. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогов А.А. Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994. 383 с.
4. Встовский Г.В., Колмаков А.Г., Терентьев В.Ф. Мультифрактальный анализ особенностей разрушения приповерхностных слоев молибдена // Металлы. 1993. № 4. С. 164-178.
5. Vstovsky G.V., Bunin I.Zh. Multifractal Parametrization of structures in materials science // J. Adv. Mater. 1994. V. 1. № 3. P. 230-240; Перспективные материалы. 1995. № 3. С. 13-21.
6. Встовский Г.В., Бунин И.Ж., Колмаков А.Г. и др. Мультифрактальный анализ поверхностей разрушения твердых тел // Докл. РАН. 1995. Т. 343. № 5. С. 613-615.
7. Vstovsky G.V. Transform Information // Foundations of Physics. 1997. V. 27. № 10. P. 1413-1444.

БЛАГОДАРНОСТИ: Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 96-15-98243.