

05;11

К вопросу об определении параметра порядка для морфоанализа двумерных структур

© Е.М. Сальникова, Л.М. Мартюшев

Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург
E-mail: mlm@esko.uran.ru

Поступило в Редакцию 20 ноября 2000 г.

Рассмотрены вопросы, возникающие на практике при определении параметра порядка двумерных структур. Используются два подхода, основанных на спектральных преобразованиях (Фурье и Уолша) и информационной энтропии. По результатам расчета конкретных структур проведено сравнение этих методов, обсуждены их достоинства и недостатки.

Существующие методы описания морфологических особенностей двумерных структур (либо проекций трехмерных объектов) в основном имеют качественный характер и нередко основаны на визуальном анализе. Это затрудняет, а иногда не позволяет сравнить между собой результаты отдельных опытов, особенно при их большом количестве и незначительности морфологических изменений. В последнее время для задач данного типа часто используется количественный параметр — фрактальная размерность [1]. Однако для "достаточно плотных" либо равномерно пористых структур, не являющихся пространственными фракталами, применение фрактальной размерности спорно и точность такого расчета не велика. Поэтому разработка интегральных морфологических параметров, способных количественно охарактеризовать и классифицировать двумерные структуры, является актуальной. Настоящая работа посвящена рассмотрению таких параметров, способных количественно оценить степень "порядка" и "беспорядка" структур на поверхности. Очевидно, введение данного параметра, выполняющего функции параметра порядка (здесь и ниже понимается несколько уже, чем обычно принято в синергетике [2]), может оказаться очень полезным не только для многочисленных материаловедческих приложений, но и

для интенсивно развивающейся в последнее время науки о самоорганизующихся системах [2].

Для осуществления поставленной цели наиболее естественными являются три подхода. Первый основан на использовании традиционного спектрального подхода, в котором в качестве такого параметра порядка принимают число спектральных компонент либо сами компоненты [2,3], однако при отсутствии ярко выраженных одиночных мод практическое использование данного метода проблематично. В этом случае при наличии спектра, близкого к шумовому, для введения параметра порядка часто используется второй подход, связанный с расчетом фрактальной размерности — пространственной наблюдаемой, вычисленной по обобщенному методу Такенса [4]. Основными недостатками данного метода являются необходимость большого размера массивов дискретизации двумерного "снимка" (что не всегда технически реализуемо), а также проведение очень большого числа вычислений (даже при наличии современной вычислительной техники требует значительных временных затрат). Третий метод основан на расчете энтропии Шеннона [2,5], однако он редко используется на практике для введения параметра порядка при анализе поверхности, что связано, по-видимому, с кажущейся его формализованностью.

В настоящей работе рассмотрены два из перечисленных выше подходов к определению параметра порядка поверхности, наиболее приемлемые в настоящее время для практического использования: на основе спектральных преобразований (специально рассмотрен случай большого числа спектральных мод) и с помощью энтропийного метода. Основное внимание в работе уделяется практической стороне данного вопроса и сравнению различных методов между собой.

Исследовались двумерные кристаллические структуры (рис. 1), полученные в модельном компьютерном эксперименте [6], выбор которого был обусловлен чрезвычайно большим многообразием получаемых структур при изменении управляющего параметра (относительной концентрации примеси) C от 7.6 (скелетный кристалл) до 293.9 (гранный) [6]. В работе рассматривались структуры при изменении C на 0.1, что было обусловлено желанием, с одной стороны, максимально полно охватить возможные в модели морфологии, с другой, избежать многократного дублирования одних и тех же структур (в итоге обрабатываемый экспериментальный ряд содержал около 3000 структур). Все представленные ниже расчеты проводились для области в центре

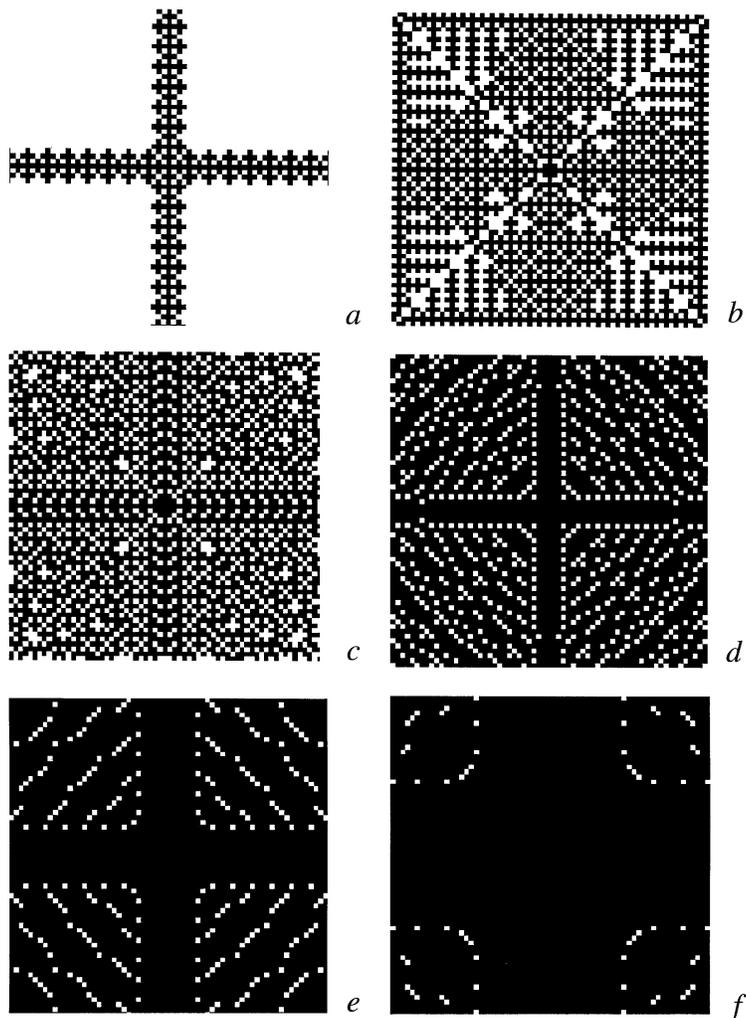


Рис. 1. Основные морфологические типы, полученные в модели при изменении управляющего параметра C : a — $8.9(1.16 \pm 0.05)$; b — $9.5(1.93 \pm 0.05)$; c — $12.0(1.97 \pm 0.01)$; d — $25.0(1.95 \pm 0.02)$; e — $60.0(1.97 \pm 0.03)$; f — $150.0(1.99 \pm 0.01)$. В скобках указаны значения фрактальной размерности соответствующих структур с погрешностью.

структур (рис. 1), чтобы избежать влияния формы внешней границы. Размер области выбрали 64 на 64 клетки (для удобства проведения спектрального анализа). Для практической реализации сформулированных выше методов в настоящей работе не принималось во внимание распределение примеси в кристалле.

Для применения энтропийного подхода каждую структуру представляли графом [5], в котором под вершинами понимали клетки, занятые кристаллом (они черные на рис. 1), а каждую пару ближайших черных клеток считали ребром. На изучаемых структурах можно выделить четыре типа вершин (классов эквивалентности), имеющих одно, два, три, и, наконец, четыре ребра для связи с графом. Далее с помощью формулы Шеннона вводили топологический индекс — информационное содержание (информационная энтропия) $IC = -\sum p_i \log_2 p_i$ (здесь p_i — доля вершин, принадлежащих i -му классу эквивалентности), рассматриваемый в литературе как количественная мера структурной упорядоченности графа [2,5]. Благодаря тому, что входящие в индекс вероятности нормированы на общее число вершин, он позволяет сравнивать между собой упорядоченность графов с разным числом вершин. IC максимально, когда вершина с равной вероятностью принадлежит к одному из четырех классов. Когда все вершины эквивалентны, IC равно нулю.

Для каждой структуры по приведенной выше схеме определяли число вершин каждого типа, а затем по формуле Шеннона вычисляли информационное содержание. Зависимость IC от относительной концентрации приведена на рис. 2, *a*. Кривая информационного содержания имеет куполообразный вид со смещением максимума в сторону малых концентраций. Максимум IC попадает в область управляющего параметра от 10 до 13.7 (для этой области характерной является структура типа рис. 1, *c*). На фоне общего тренда IC (рис. 2, *a*) наблюдаются скачкообразные изменения, наиболее значительные при малых C . Это отражает реальные изменения в модельных структурах [6], у которых именно при малых значениях управляющего параметра происходили значительные, многократные структурные перестройки рис. 1, *a-d*. В отличие от фрактальной размерности, IC позволяет количественно описать различные структуры. Например, для структур на рис. 1, *e, f* фрактальная размерность в пределах погрешности одинакова, а информационное содержание этих структур существенно отличается (0.906 и 0.380 бита соответственно).

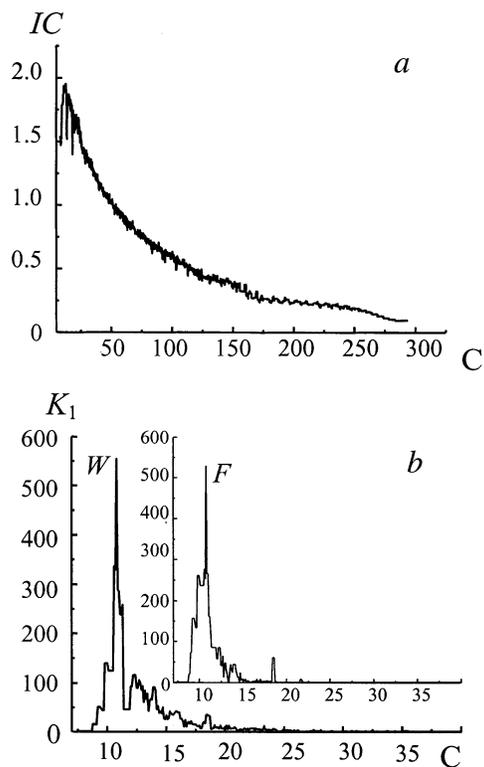


Рис. 2. Графики зависимости информационного содержания IC (a); параметра K_1 (b); параметра K_2 (c) от относительной концентрации C . Буквами F и W обозначены расчетные кривые, полученные с использованием преобразований Фурье и Уолша соответственно.

Для сравнения результатов энтропийного подхода и спектральных методов были выбраны два двумерных преобразования: Фурье и Уолша. Выбор первого связан с его традиционным использованием при анализе двумерных структур [1], благодаря простоте реализации во всех стандартных математических пакетах. Преобразование Уолша по типу базисных функций (бинарные, кусочно-постоянные) должно наиболее подходить для исследуемых структур [7]. В работе используются

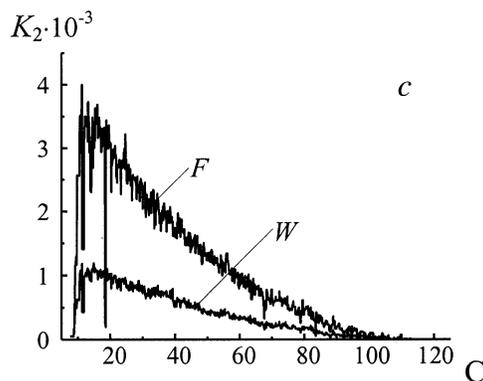


Рис. 2 (продолжение).

Кронекер упорядоченные функции Уолша, так как они легко вводятся с помощью матриц Адамара [7] (последние содержатся MATLAB).

Для реализации спектральных преобразований каждая клетка изображения структуры оцифровывалась четырьмя отсчетами [8]. Клетки кристалла оцифровывались +1, клетки раствора и примеси —1. Так как по числу спектральных мод традиционно оценивается степень порядка структуры, для решения поставленной в работе задачи необходим некоторый интегральный параметр, связанный с числом пиков. Поскольку для сложных спектров с множеством пиков такой универсальный параметр отсутствует, то в работе использовали два. В качестве первого (K_1) выбирали число пиков энергетического спектра, амплитуда которых больше заданного процента амплитуды максимального пика, а второго (K_2) — минимальное число пиков, составляющих определенный процент энергии всего спектра. Очевидно, что чем меньше K_1 и K_2 , тем выше упорядоченность структуры. Общим недостатком предложенных методов является выбор критерия отбора пиков, позволяющего отследить эволюцию, априорно неизвестного.

Каждый параметр имеет свои преимущества при решении поставленной задачи. Например, сравним спектры двух структур, один из которых имеет на шумовом фоне один ярко выраженный пик, а другой — несколько пиков. Значение параметра K_2 для второго спектра будет естественно меньше и соответственно, исходя из анализа только

параметра K_2 , можно было бы сделать вывод о большей хаотичности первой структуры. Однако параметр K_1 и интуиция свидетельствуют об обратном. С другой стороны, если ярко выраженного максимального пика нет, применение K_1 становится слишком субъективным. При сравнении результатов двух используемых спектральных преобразований одной структуры целесообразнее использовать K_2 , поскольку он связан с энергией спектров, а она одинакова для двух спектров [7,8].

При выборе процентов для K_1 и K_2 руководствовались двумя соображениями: параметры должны быть чувствительны к изменению управляющего параметра и не чувствительны к шумовым составляющим спектра. Наиболее оптимальными, как показали проведенные исследования, для данной задачи являются 1% в случае K_1 и 90% для K_2 .

Результаты расчета параметра K_1 представлены на рис. 2, *b*. Как видно, полученные при преобразованиях Фурье и Уолша зависимости имеют качественно подобный вид. Так, максимальное значение коэффициента K_1 приходится на участок концентраций от 10 до 11.5. Однако имеются некоторые отличия: K_1 для спектра Фурье быстрее выходит на постоянный уровень и далее практически не чувствителен к изменениям управляющего морфологией структур параметра. На рис. 2, *c* представлены результаты расчета параметра K_2 . Как и для K_1 , зависимости для преобразований Фурье и Уолша имеют качественно подобный вид с максимумом на участке концентраций от 10 до 16. K_2 для преобразования Фурье в четыре раза превышает K_2 для преобразования Уолша, т.е. параметр, введенный на основе энергетического спектра, дает преимущество преобразования Уолша перед Фурье при C от 12 до 100.

Как следует из выбранных параметров порядка K_1 и K_2 , для структур, подобных приведенным на рис. 1, ни одно из используемых спектральных преобразований не дает значительного преимущества при описании структур. Это можно объяснить тем, что, как показали наши расчеты, преобразование Уолша имеет существенное преимущество для несимметричных структур. Для симметричных структур с неравномерным расположением пор, занятых раствором или примесью (неравномерно-пористых), преимущество преобразования Уолша относительно преобразования Фурье не столь значительно. Наконец, для симметричных, равномерно пористых структур преимущество преобразования Уолша будет определяться оцифровкой сигнала: с увеличением частоты дискретизации число пиков Фурье-спектров будет увеличиваться прямо

пропорционально числу отсчетов, число же пиков на спектрах Уолша останется неизменным (это явное достоинство преобразования Уолша при практической реализации). Так как в нашем случае исследуемые структуры (рис. 1) как раз относились к последнему типу, то существенных преимуществ преобразования Уолша не обнаружилось (рис. 2, *b, c*), а поскольку оцифровку проводили четырьмя отсчетами, преобразование Уолша дало преимущество максимум в четыре раза по сравнению с преобразованием Фурье (рис. 2, *c*).

Сравнение результатов спектрального и энтропийного подхода выявило, что существует непосредственная связь топологического индекса IC и параметров, соотносимых с числом спектральных пиков. Оба подхода выделяют две области, границы которых приблизительно совпадают, а максимум приходится на область концентраций от 10 до 13.7 (рис. 2). В первой при увеличении управляющего параметра происходит хаотизация, а во второй — упорядочение исследуемых структур при изменении C .

Таким образом, из проведенных в работе исследований можно заключить, что для сложных структур, описываемых большим числом спектральных мод, использование в качестве параметра порядка IC более предпочтительно, так как нет необходимости во введении дополнительных оценочных критериев, как это вынуждены делать в спектральных подходах. Отметим, что обнаруженная в работе корреляция между IC и спектральными характеристиками может существовать не всегда, однако это не является ограничением на использование IC , так как сам термин параметра порядка структуры в настоящее время не является строго определенным.

Авторы выражают благодарность Ю.П. Сухареву за обсуждение результатов и конструктивные замечания.

Список литературы

- [1] *Russ J.C.* Fractal Surfaces. NY and London: Plenum Press, 1999. 303 p.
- [2] *Хакен Х.* Синергетика. М.: Мир, 1989. 424 с. (*Haken H.* Synergetics. An Introduction. Berlin, Heidelberg, NY: Springer-Verlag, 1978).
- [3] *Берже П., Помо И., Видаль К.* Порядок в хаосе. М.: 1991. 366 с. (*Berge P., Pomeau Y., Vidal C.* Order Within Chaos. NY: Wiley, 1987).
- [4] *Рабинович М.И., Фабрикант А.Л., Цимринг Л.Ш.* // УФН. Т. 162. № 8. С. 1–42.

- [5] *Химические приложения топологии и теории графов*: Пер. с англ. / Под ред. Кинга Р. М.: Мир, 1987. С. 206–258. (Chemical Applications of Topology and Graph Theory / Eds. R.B. King. University of Georgia, Athens, GA, USA, 1983).
- [6] *Мартюшев Л.М., Селезнев В.Д.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 20. С. 71–77.
- [7] *Залманзон Л.А.* Преобразование Фурье, Уолша, Хаара и их применение в управлении, связи и других областях. М.: Наука, 1989. 496 с.
- [8] *Харкевич А.А.* Спектры и анализ. М.: Гостехиздат, 1957. 236 с.