

УДК 517.2:593.43:669.017

И.Е. Красикова, И.В. Красиков, В.В. Картузов*Институт проблем материаловедения НАН Украины***ОПРЕДЕЛЕНИЕ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗОБРАЖЕНИЙ СТРУКТУР МАТЕРИАЛОВ**

Рассмотрено применение мультифрактального формализма для практического определения мультифрактальных характеристик изображений структур материаловедческого характера. Описано разработанное программное обеспечение для определения мультифрактальных характеристик цифровых изображений; показана его применимость для решения практических задач материаловедения.

Ключевые слова: мультифрактальный формализм, обработка изображений, структура, программное обеспечение

І.Є. Красікова, І.В. Красіков, В.В. Картузов*Інститут проблем матеріалознавства НАН України***ВИЗНАЧЕННЯ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЗОБРАЖЕНЬ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ**

Розглянуто застосування мультифрактального формалізму для практичного визначення мультифрактальних характеристик зображень структур матеріалознавчого характеру. Описано розроблене програмне забезпечення для визначення мультифрактальних характеристик цифрових зображень; показано можливість його застосування для вирішення практичних задач матеріалознавства.

Ключові слова: мультифрактальний формалізм, обробка зображень, структура, програмне забезпечення

I.E. Krasikova, I.V. Krasikov, V.V. Kartuzov*Institute for problems of materials science NASU***DETERMINATION OF MULTIFRACTAL CHARACTERISTICS OF THE MATERIALS' STRUCTURE IMAGES**

The application of multifractal formalism for the practical determination of multifractal characteristics of images of material science structures was discussed. Developed software to determine multifractal characteristics of digital images was discussed. Its applicability to solve practical problems of materials science was demonstrated.

Keywords: multifractal formalism, image processing, structure, software

Введение. В последнее время в современном материаловедении при описании структурных свойств материала все более широко используются его фрактальные характеристики. Изображения структур и характерных поверхностей, получаемые при помощи электронной и оптической микроскопии, должны обеспечивать не только качественные характеристики, но и количественную информацию. Однако для решения таких задач требуется программное обеспечение, реализующее алгоритмы, основанные на максимально адекватных математических моделях.

Мультифрактальный анализ в материаловедении по сути представляет собой математический алгоритм определения численных параметров, пригодных для описания характеристик таких структур, как поверхности изломов, пористые структуры покрытий, зоны разрушения, структурные границы вязкохрупкого перехода и т.д.

Описание мультифрактального формализма. Начнем с общего определения мультифрактала. Пусть имеется некоторый фрактальный объект, который занимает ограниченную область ζ размера L в евклидовом пространстве размерности d . Будем рассматривать его как множество из $N \gg 1$ распределенных в этой области точек.

Разобьем всю область ζ на кубические ячейки (условие кубичности не является обязательным и принято исключительно для упрощения рассмотрения) со стороной $\varepsilon \ll L$ объемом ε^d . Далее рассмотрим только занятые ячейки, то есть те ячейки, в которых содержится хотя бы одна точка объекта. Пусть номера занятых ячеек i находятся в пределах от 1 до $N(\varepsilon)$ — суммарного количества занятых ячеек, зависящего от размера ячейки ε .

Обозначим через $n_i(\varepsilon)$ собой количество точек в i -й ячейке. Тогда величина

$$p_i(\varepsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i(\varepsilon)}{N} \quad (1)$$

представляет собой вероятность того, что наугад взятая точка из исходного множества находится в ячейке с номером i , так что вероятности p_i характеризуют относительную заполненность ячеек. Из условия нормировки вероятности следует, что

$$\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i(\varepsilon) = 1 \quad (2)$$

Стандартный метод мультифрактального анализа основан на рассмотрении *обобщенной статистической суммы* $Z(q, \varepsilon)$, где показатель степени q может принимать любые значения в интервале $-\infty < q < +\infty$:

$$Z(q, \varepsilon) = \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^q(\varepsilon) \quad (3)$$

Спектр *обобщенных фрактальных размерностей* D_q (размерностей Реньи), который характеризует данное распределение точек в области ζ , можно определить с помощью соотношения

$$D_q = \frac{\tau(q)}{q-1} \quad (4)$$

Показанная здесь нелинейная функция $\tau(q)$ (*скейлинговая экспонента*) имеет вид

$$\tau(q) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln Z(q, \varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (5)$$

Таким образом, окончательная формула для значения D_q имеет следующий вид:

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^q(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (6)$$

В случае, когда $D_q = D = const$ для всех значений q , исследуемое множество точек представляет собой *монофрактал*, характеризующийся единственной фрактальной размерностью D . Если же D_q является некоторой функцией от q , то рассматриваемое множество точек является *мультифракталом*. Функция D_q показывает, насколько неоднородным является исследуемое множество точек ζ . Мультифрактал, таким образом, в общем случае характеризуется скейлинговой экспонентой $\tau(q)$, определяющей поведение статистической суммы $Z(q, \varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Что касается физического смысла обобщенных фрактальных размерностей D_q для некоторых конкретных значений q , то здесь можно сказать, что особый интерес представляют размерности при значениях $q = 0, 1, 2$.

При $q = 0$ из выражения (4) с учетом (6) получается соотношение $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{D_0}$. Это означает, что величина D_0 представляет собой обычную хаусдорфову размерность множества ζ . Она является наиболее грубой характеристикой мультифрактала и несет обобщенную информацию о размерности пространства и его несплошности в целом.

Для $q = 1$ путем предельных преобразований формулы (6) при $q \rightarrow 1$ получаем следующую формулу для вычисления D_1 :

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i(\varepsilon) \ln p_i(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (7)$$

Информационная размерность D_1 , определяемая вероятностью найти интересующую нас точку в пределах определенной ячейки, характеризует энтропию фрактального множества, или неоднородность распределения элементов мультифрактала в пространстве.

При $q = 2$ получаем формулу для вычисления корреляционной размерности D_2 :

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^2(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (8)$$

Корреляционная размерность D_2 , определяемая вероятностью нахождения двух точек на определенном расстоянии друг от друга, характеризует неоднородность распределения элементов мультифрактала в пределах фрактального множества.

Таким образом, получение мультифрактальных характеристик изображений (для которых $d=2$) как набора значений D_q основывается на вычислении для конкретного изображения обобщенной статистической суммы $Z(q, \varepsilon)$ и вычислении на ее основе значений D_q путем определения угла наклона графика зависимости $Z(q, \varepsilon)$ от ε в логарифмических координатах с применением метода наименьших квадратов.

Программное обеспечение для вычисления фрактальных характеристик изображений.

По сути, все программные решения, реализующие вычисления фрактальных характеристик изображений, основаны на статистическом подходе, т.е. на разбиении изображения на пробные боксы того или иного размера, подсчете количества черных и белых (деление это в определенной степени условное) пикселей в боксах и вычислении тех или иных статистических характеристик — в первую очередь обобщенной статистической суммы $Z(q, \varepsilon)$. Затем, по набору статистических данных строится соответствующая зависимость от размера пробных боксов и на ее основе при помощи методов линеаризации и наименьших квадратов вычисляются значения обобщенных фрактальных размерностей D_q .

Одной из основных трудностей такого подхода (и одним из основных отличий одного решения от другого) является подбор разбиения изображений на пробные боксы. Идеальным случаем является квадратное изображение, длина стороны которого составляет p^N пикселей. Тогда это изображение легко разбивается на точные квадраты — один квадрат размером $p^N \times p^N$, четыре квадрата $p^{N-1} \times p^{N-1}$, и далее, до 2^{2N} квадратов 1×1 — всего на кривой зависимости статистической характеристики от размера пробного бокса получается N точек.

В случае произвольного размера изображения основным применяемым подходом является подбор размеров квадратных боксов, при которых эти боксы покрывают не менее определенной доли (скажем, 90%) площади всего изображения. Этот подход более-менее подробно представлен в работе [1], где рассмотрены три разных методики выбора размеров пробного бокса.

В работе [2] авторами было показано, что такой выбор пробных боксов, реализованный в программе MFRDrom, приводит к неустойчивым результатам при определении фрактальных характеристик изображений, а потому от него следует отказаться.

Первый подход к разработке алгоритма разбиения изображения на пробные боксы, который бы 1) охватывал все изображение полностью и при этом 2) давал устойчивые результаты, можно описать следующим образом. Исходим из параметра разбиения, который представляет собой количество точек на кривой зависимости статистической характеристики от размера пробного бокса. При линеаризации кривой рассматривается не значение размера бокса, а его логарифма, поэтому для достижения максимально равномерного распределения точек вдоль оси абсцисс использовался следующий способ: если нам требовалось получить M экспериментальных точек на функции $\ln N = f(\ln \Delta x)$, то соответствующие значения Δx должны были представлять собой величины

$$\Delta x_i = \left[e^{\frac{\ln S}{M-1} i} \right], \quad i = \overline{0, M-1}$$

Здесь S — максимальный размер изображения, M — общее количество экспериментальных точек. (Заметим, что реальное общее количество экспериментальных точек может оказаться меньше M , если после округления для разных значений i значение Δx_i окажется одинаковым).

Поскольку округленные до целого значения размеры боксов не всегда обеспечивали полное покрытие изображения, прибегаем в таких случаях к следующему приему: сканируя изображение слева направо и сверху вниз, просчитываем только те боксы, которые полностью попадали в изображение, после чего повторяли процедуру, обходя изображение справа налево и снизу вверх, начиная с правого нижнего угла. Полученные при двух сканированиях значения усреднялись и пересчитывались с учетом доли покрытой пробными боксами площади на все изображение [3].

Этот подход позволил получить программное обеспечение, корректно вычисляющее фрактальную размерность D_0 изображений, и обладающее высокой устойчивостью к

преобразованиям изображения — как, например, поворотам, смещениям или изменениям размера изображения [4].

Однако при дальнейшем развитии программы оказалось, что в силу нелинейности, характерной для других, отличных от $Z(0, \varepsilon)$ обобщенных статистических сумм, вычисление мультифрактальных характеристик не приводило к желаемым результатам.

В связи с этим в новой версии программного обеспечения был полностью изменен подход к выборам размеров пробных боксов. Теперь в программе используется деление изображения на боксы одинакового размера при условии 100% покрытия исходного изображения; при этом сами боксы не обязательно имеют целочисленные размеры. Соответствующим образом изменена и расчетная часть — теперь при вычислении значений $p_i(\varepsilon)$ учитываются не только пиксели, полностью входящие в пробный бокс, но и те пиксели, которые попадают в такой бокс лишь частично (т.е. теперь значение $n_i(\varepsilon)$ не обязано быть целым числом). Для таких пикселей вычисляется часть площади, попадающая в пробный бокс, и именно это дробное значение включается в итоговое суммирование для получения значения $n_i(\varepsilon)$.

Такой подход оправдан, поскольку хотя пиксель по сути представляет собой минимальную неделимую единицу информации компьютерной реализации изображения (откуда и ведет происхождение его название — picture element, т.е. элемент изображения), само изображение представляет собой нечто большее, чем простое объединение пикселей — существенна также информация об их относительном расположении. Например, сами мультифрактальные характеристики определяются статистическими свойствами такого расположения.

Описанный метод можно рассматривать как разделение на боксы с целочисленным размером в пикселях масштабированного изображения. Применение реального масштабирования при малых размерах боксов даст лишний “хвост” на экспериментальной кривой для вычисления мультифрактальных характеристик, так что предварительное явное масштабирование изображения практического смысла не имеет.

Таким образом, если мы планируем получить N экспериментальных точек на кривой, определяющей фрактальную размерность, то при минимальной стороне изображения L пикселей мы выполняем разбиения на боксы размером

$$\varepsilon_i = 1, \sqrt[N]{L}, \sqrt[N]{L^2}, \dots, L$$

При этом на логарифмической шкале, необходимой для линеаризации и вычисления мультифрактальных характеристик с помощью метода наименьших квадратов, точки будут находиться на равных расстояниях одна от другой.

Применение этого подхода дает гораздо более стабильные результаты, чем использовавшийся ранее с подходом, основанным на сканировании изображения в разных направлениях. При новом подходе нестабильность проявляется только при сравнительно больших по модулю отрицательных значениях q (что легко объясняется тем, что при больших отрицательных степенях малые дробные значения $n_i(\varepsilon)$ дают существенный вклад при вычислении $p_i^q(\varepsilon)$, превалирующий над вкладом, вносимым большими значениями).

Описанный алгоритм получения размеров пробных боксов и основанный на нем алгоритм вычисления мультифрактальных характеристик были реализованы нами в виде компьютерной программы, написанной на языке программирования Visual C++ 2015 с использованием свободно распространяемой библиотеки графического интерфейса пользователя wxWidgets. Программа работает под управлением операционной системы MS Windows (работа программы гарантируется для версии MS Windows 7 и старше).

Общий вид главного окна программы приведен на рис. 1.

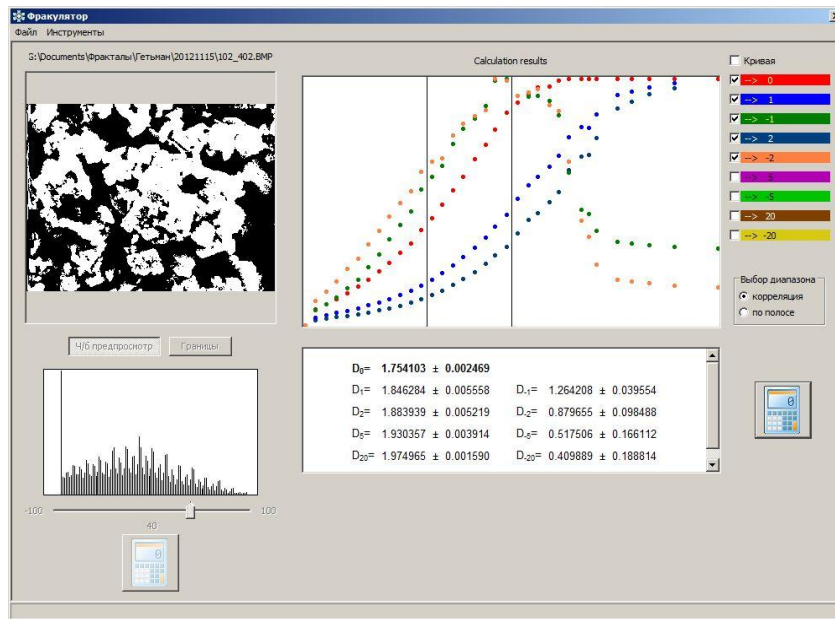


Рис. 1.- Общий вид окна программы Fraculator.

Программа обеспечивает гибкую систему настроек (сохраняющихся в реестре операционной системы и, таким образом, действующую и при последующих запусках программы), показанных на рис. 2. Как видно из приведенной копии экрана, программа позволяет самостоятельно задавать набор интересующих значений q , для которых будут вычисляться мультифрактальные размерности D_q .

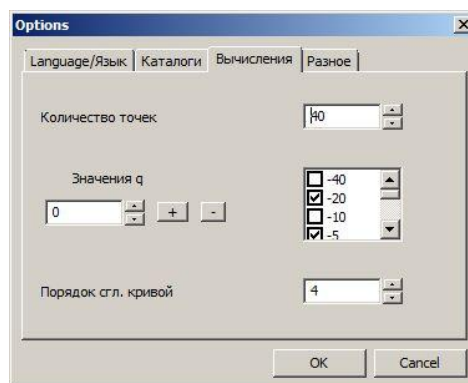


Рис. 2. - Окно настроек программы

Программа может работать с изображениями в распространенных графических форматах (таких как JPG, BMP, TIFF, PNG), а в тестовых и демонстрационных целях может генерировать различные модельные изображения фракталов — такие как ковер Серпинского или снежинка Коха.

Программа выполняет автоматическое преобразование цветных изображений в изображения в оттенках серого цвета по стандартному алгоритму, когда пиксель со значениями красного, зеленого и синего соответственно R, G и B преобразуется в пиксель серого оттенка с уровнем яркости $0.299 \times R + 0.587 \times G + 0.114 \times B$ (в соответствии с рекомендацией ITU-R BT.601). На экран выводится гистограмма, указывающая относительное количество пикселей изображения с той или иной яркостью.

Затем изображение преобразуется в черно-белое (1 бит на пиксель), которое и является основой для дальнейших вычислений. При выполнении преобразования этим процессом можно управлять, указывая пороговое значение (в процентах или в абсолютных единицах от 0 до 256); все пиксели с яркостью, превышающей пороговое значение, будут преобразованы в белые, а ниже порога — в черные. Выбор порогового значения осуществляется при помощи ползунка; если при

этом установлен флаг предпросмотра, пользователь может тут же увидеть на экране (масштабированное) результирующее изображение, позволяющее уточнить автоматический выбор порогового значения.

При первой загрузке изображения программа вычисляет рекомендуемое пороговое значение, основанное на гистограмме таким образом, чтобы пиксели изображения делились на черные и белые поровну. Исходя из имеющегося опыта, такое рекомендованное значение, как правило, оказывается наилучшим.

Следует отметить, что возможны и другие варианты преобразования полутонового изображения в черно-белое. Так, в работе [5] описывается вариант с применением двух пороговых значений, когда все точки с оттенками, попадающие между указанными значениями, становятся белыми, а прочие — черными. Возможны и более сложные преобразования, однако выбор при этом основывается на знаниях предметной области (какие именно детали изображения важны, что следует подчеркнуть, а что, напротив, удалить из изображения) — такие преобразования не могут быть частью программы, выполняющей обобщенный поиск фрактальной размерности изображения, и должны выполняться при помощи других программ, предназначенных для работы с графической информацией, специфичной для поставленной задачи (например, для анализа серии изображений, полученных посредством электронной микроскопии). В связи со сказанным выше не были реализовываны иные специфические способы преобразования изображения из серого в черно-белое.

После получения черно-белого изображения пользователь имеет возможность выбора — работать ли с полученным черно-белым изображением или с изображением, на котором будут только выделенные соответствующей подпрограммой границы (рис. 3).

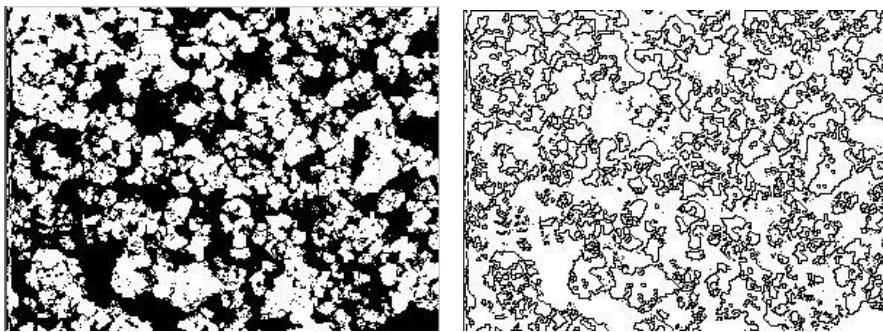


Рис. 3. - Исходное изображение структуры и изображение той же структуры после выделения границ

После настройки и выполнения графических преобразований запускается процесс вычисления мультифрактальных характеристик изображения (по возможности, в многопроцессорных или многоядерных устройствах программа использует возможности мультипроцессорной обработки для ускорения работы [6]), которая существенно ускоряет вычисления — так, на четырехъядерном процессоре вычисления ускоряются примерно в 3.6 раза).

Полученные результаты в виде соответствующих экспериментальных кривых выводятся в правой части основного окна программы (рис. 1), причем, как уже говорилось, настройки программы (рис. 2) позволяют указать любой пользовательский набор значений q , для которых вычисляются размерности D_q (до 64 значений); на экран при этом выводятся только до 10 из них.

Пользователь может оперативно включать и отключать вывод тех или иных кривых.

Щелчками мыши на графике пользователь может указать левую и правую границы диапазона (либо выбрать предопределенный диапазон, рассчитанный по одному из алгоритмов — использующему максимальную наклонную полосу либо диапазон, в котором достигается максимальная точность вычисления D_0), в котором будут рассчитаны численные значения мультифрактальных размерностей изображения. Рассчитанные значения выводятся на экран, а также могут быть сохранены в файл или выведены на печать. Программа может использоваться и в автоматическом пакетном режиме, используя текущие настройки и сохраняя результаты расчетов в указанный файл.

Как уже упоминалось выше, среди основных характеристик, используемых для сравнения и описания мультифракталов, следует выделить хаусдорфову размерность D_0 , несущую грубую обобщенную информацию о размерности пространства, в котором сформирован мультифрактал, и о его несплошности в целом. Показательной величиной является также информационная размерность D_1 , определяемая вероятностью найти определенную точку в пределах определенной ячейки, и характеризующая энтропию фрактального множества, или неоднородность распределения элементов мультифрактала в пространстве. Еще одной существенной характеристикой мультифрактала является корреляционная размерность D_2 , определяемая вероятностью нахождения двух точек на определенном расстоянии друг от друга, и тем самым характеризующая неоднородность распределения элементов мультифрактала в пределах фрактального множества.

Для демонстрации возможностей разработанной программы рассмотрим, например, мультифрактальные характеристики образцов осажденного магнетронным распылением титана [7], изображения которых показаны на рис. 4.

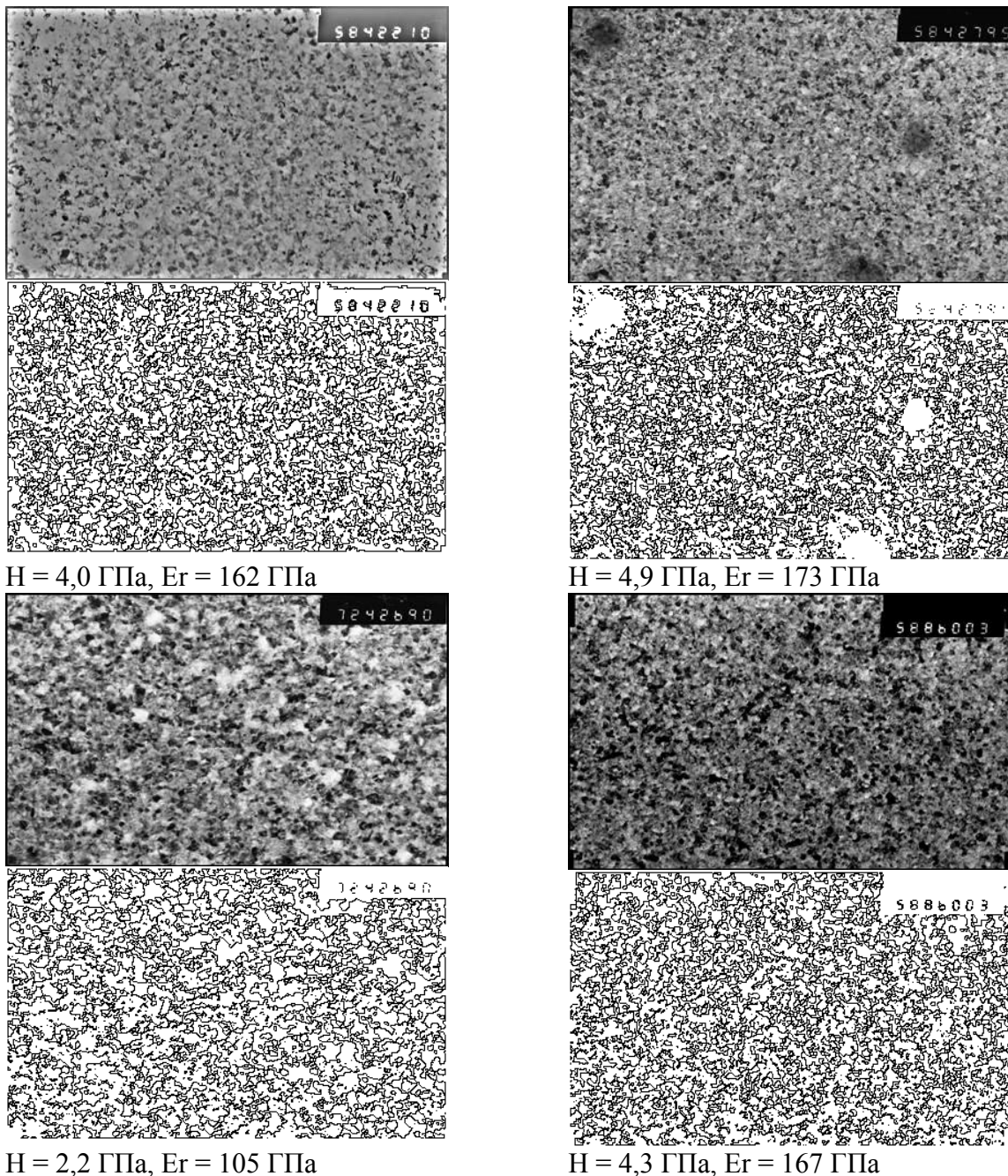


Рис. 4. - Микрофотографии образцов структур осажденного титана (фотографии и выделенные границы) и их механические характеристики [7]

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} — выборочные 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 как при вычислениях фрактальной размерности самих микрофотографий, так и для изображений выделенных границ. Однако в силу большего диапазона величин фрактальной размерности зависимость физических характеристик от мультифрактальных размерностей проявляется более сильно. Как показывают результаты вычислений, приведенные в табл. 1 и 2, с ростом значений мультифрактальных размерностей структуры материала растут 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 ярко проявляется корреляция физических характеристик с размерностью D_{-1} .

Таблица 1.

Мультифрактальные характеристики образцов осажденного магнетронным распылением титана (параметры просчета: 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

Таблица 2.

Корреляция мультифрактальных характеристик образцов осажденного магнетронным распылением титана с прочностными характеристиками

Корреляция	D_0	D_1	D_2	D_{-1}
с H	0.838128	0.76729	0.68742	0.863806
с E_r	0.73589	0.648767	0.542628	0.771293

Выводы. На основании мультифрактального формализма разработаны методы определения мультифрактальных характеристик по двумерным изображениям материаловедческих структур. Разработанное на основании этих алгоритмов программное обеспечение позволяет получать надежные и устойчивые результаты расчетов.

Полученные мультифрактальные характеристики реальных материалов и их корреляция с физико-техническими характеристиками дают основания для оптимистических прогнозов и дальнейших исследований в данной области материаловедения.

Литература:

1. В.В. Лотиш, П.В. Разкевич. Алгоритми генерації мір розбиття при аналізі зображення методом мультифрактальної параметризації. // Міжвузівський збірник "Наукові нотатки". Луцьк, 2010. Випуск № 27, с. 186–191.
2. И.Е. Красикова, И.В. Красиков, В.В. Картузов. Определение фрактальных характеристик структуры материалов методом мультифрактального анализа изображений. Вычислительный эксперимент на модельных объектах. — В сб. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Вып. 9: Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины. Серия "Моделирование в материаловедении". — Киев, 2007, с. 79–84.
3. И.Е. Красикова, В.В. Картузов, И.В. Красиков. Компьютерная реализация алгоритма вычисления фрактальной размерности структуры материала по изображениям, полученным при помощи электронной микроскопии. — В сб. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Вып. 13: Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины. Серия "Моделирование в материаловедении". — Киев, 2011, с. 82–89.
4. И.Е. Красикова, В.В. Картузов, И.В. Красиков. Характеристики компьютерной реализации алгоритма вычисления фрактальной размерности двумерных изображений. — В сб. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Вып. 15: Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины. Серия "Моделирование в материаловедении". — Киев, 2013, с. 69–73.
5. Б.К. Барахтин, Н.В. Лебедева, У.А. Пазилова. Цифровая обработка и мультифрактальный анализ дифракционных изображений структур. — Деформация и разрушение материалов, №9, 2006. — с. 18–23.
6. И.Е. Красикова, В.В. Картузов, И.В. Красиков. Применение средств распараллеливания вычислений в реализации алгоритма вычисления фрактальной размерности двумерных изображений. // International Journal of Open Information Technologies ISSN: 2307-8162 vol. 3, no. 12, 2015. — P.7-12.
7. Основи створення наноструктурних матеріалів як з максимальним зміцненням, так і з регульованим поєднанням твердості та пластичності. — Звіт ІПМ НАНУ №0104U006638. — Київ, 2014. — 100 с.

Стаття надійшла до редакції 09.03.2017