

УДК 517.988

Исследование мультифрактальных свойств поверхности кристаллов соляных пород методом клеточного покрытия

В. Ю. Митин

Пермский государственный национальный исследовательский университет
Россия, 614990, Пермь, ул. Букирева, 15
victormitin@ya.ru; 8(342)229-15-35

Приведен и протестирован алгоритм вычисления обобщенных фрактальных размерностей фрактальных множеств и случайных рядов. Показано, что участки поверхности соляных пород, обладающие неоднородной структурой, проявляют более выраженные мультифрактальные свойства.

Ключевые слова: шероховатость; фрактальная размерность; мультифракталы; кристаллы соляных пород.

DOI: 10.17072/1993-0550-2016-3-56-60

Введение

При исследовании шероховатости поверхностей эффективной характеристикой изрезанности ее рельефа является фрактальная размерность. Чем она выше, тем более изрезанным является данное множество. Эта закономерность является наглядной для классических фракталов, например для снежинки Коха с переменным углом при вершине. Подобные фрактальные множества являются регулярными, или монофрактальными, поскольку размерность на любой части множества равна одной и той же величине.

Результаты, полученные в статьях [1, 2] показывают, что для некоторых поверхностей кристаллов соляных пород фрактальная размерность микрорельефа может быть изменчивой, в частности, в тех случаях, когда изучаемая область содержит переход от плоскости спайности к зерну с другой ориентацией, что происходит вследствие эффектов анизотропии, при наличии линейных дефектов кристалла и т.п. Для более подробного исследования неоднородных фрактальных поверхностей используют мультифрактальные модели.

1. Обобщенные фрактальные размерности Реньи и классический подход к их вычислению

Мультифрактальные объекты характеризуются не одной величиной, а множеством фрактальных характеристик.

Одним из вариантов мультифрактального анализа является построение функции D_q , значения которой называются обобщенными размерностями Реньи. В случае монофрактала, $D_q = const$, для мультифракталов функция D_q является переменной.

Существуют различные методы вычисления мультифрактальных параметров. Наиболее часто используются методы детрендированного флуктуационного анализа и максимумов модулей вейвлет-преобразований [3], а также классический клеточный метод, используемый в данной статье.

В классическом методе общий алгоритм действий следующий [4]: рассматриваемое фрактальное множество разбивается на ячейки со стороной ϵ . Для каждой ячейки, содержащей точки множества, определяется ее от-

носительная заселенность $p_i(\varepsilon) = \frac{n_i(\varepsilon)}{N}$, т.е.

отношение количества точек, попавших в эту ячейку, к общему количеству точек. В зависимости от размерности пространства вложения n , ячейки могут представлять собой отрезки ($n=1$), квадраты ($n=2$), кубы ($n=3$).

Далее вычисляется статистическая сумма:

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

Процедура повторяется для различных значений ε из заданного диапазона $[a, b]$ с определенным шагом h . Затем находится скейлинговая функция $\tau(q)$:

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

На практике по данным вычислений строится линия регрессии в двойном логарифмическом масштабе по методу наименьших квадратов. Для функции $\tau(q)$ выполняется асимптотическое соотношение

$$Z(q, \varepsilon) \sim \varepsilon^{-\tau(q)}$$

Значения обобщенных размерностей Реньи вычисляются по формуле $D_q = \frac{\tau(q)}{q-1}$

при $q \neq 1$. Величина D_1 вычисляется по формуле

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

и называется информационной размерностью [5], так как входящая в эту формулу сумма равна абсолютной величине энтропии фрактального множества. При $q=2$ значение D_2 определяет зависимость корреляционного интеграла от ε (корреляционный интеграл выражает вероятность того, что две произвольные точки данного фрактального множества лежат внутри одной ячейки размера ε) и называется корреляционной размерностью. Величина D_0 представляет собой обычную фрактальную размерность.

На практике получаемые оценки фрактальной размерности существенно зависят от:

а) выбора последовательности аппроксимации. Если принять всю длину ряда, равной 1, то значения выбранных параметров равны: $a=0,0101$; $b=0,3$; $h=0,075$, т.е. разбиения области содержали от 4×4 ячейки до 100×100 ячеек (ячейки, частично принадле-

жащие рассматриваемой области, также учитывались).

б) нормировки данных (для фрактальных множеств, представляемых одномерными рядами). Каждая точка t ряда (конечной последовательности) z_t преобразовалась в точку с координатами

$$\left(\frac{t-1}{n-1}, \frac{z_t - \min_t z_t}{\max_t z_t - \min_t z_t} \right),$$

принадлежащую квадрату $[0,1] \times [0,1]$ (минимаксная нормализация).

2. Экспериментальное изучение поверхностей кристаллов соляных пород

Выполнены эксперименты по сканированию микрорельефа поверхностей кристаллов соляных пород Верхнекамского месторождения в нанодиапазоне с помощью зондового сканирующего микроскопа Dimension Icon. Эксперименты проводились на кафедре МСС и ВТ Пермского государственного национального исследовательского университета.

Экспериментальные данные по 4 областям поверхностей кристаллов (по 2 области для карналлита и галита) исследованы методами мультифрактального анализа с помощью обобщенных размерностей Реньи, оценки которых получены с использованием классического (клеточного) подхода.

Изображения микрорельефа экспериментальных областей приведены на рис. 1.

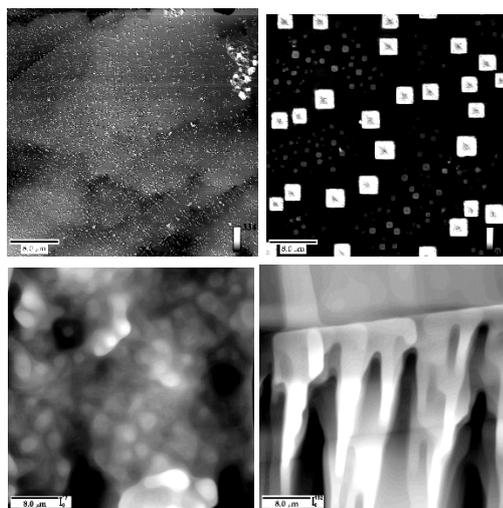


Рис. 1. Изображения микрорельефа областей K1, K2 (сверху), Г1, Г2 (снизу)

К1 – гладкая область поверхности карналлита; К2 – участок поверхности карналлита с хаотически расположенными кристаллами (соли высаливания) правильной формы различных размеров.

Г1 – область поверхности кристалла галита в плоскости спайности; Г2 – часть поверхности кристалла галита, содержащая поверхность спайности и зерно с другой ориентацией.

Области К1 и Г1 визуально более однородны, чем области К2 и Г2. Ранее [2] статистические свойства микрорельефов этих областей исследовались с помощью обычного фрактального анализа (метод минимального покрытия). Неоднородность выражалась в более резких волнообразных перепадах фрактальной размерности (К2) или в ее значительном скачкообразном изменении (Г2).

В связи с этим возникает интерес к исследованию влияния различных особенностей кристаллов на мультифрактальные параметры, которые служат для более глубокого изучения именно неоднородных фрактальных множеств.

3. Тестирование клеточного мультифрактального алгоритма

Вычисление обобщенных фрактальных размерностей Реньи для разнообразных модельных одномерных случайных рядов, фрактальных множеств на прямой и на плоскости показало, что достаточно устойчивые значения D_q получаются в диапазоне $q \in [0, 5]$.

Для рядов, полученных на основе значений гладких функций (прямая, парабола и т.п.) размерности Реньи изменяются в малом диапазоне и отличаются от теоретического значения $D=1$ не более, чем на 1–3 % вследствие вычислительной погрешности.

Для случайных рядов, имеющих равномерное распределение, D_q – монотонно убывающая функция; изменение обобщенных фрактальных размерностей на диапазоне $q \in [0, 5]$ составляет около 5 % от максимального значения.

Величины D_q остаются практически одинаковыми (различия не превышают 1 %) для различных выборок при соответствующих значениях q .

Для неоднородного канторова множества [4] с параметрами $l_1 = \frac{1}{2}; l_2 = \frac{1}{4}$ известны точные теоретические значения D_q и $\tau(q)$:

$$\tau(q) = \frac{\ln \sqrt{1+2^{q+2}}}{\ln 2} - 1; D_q = \frac{\tau(q)}{q-1}$$

На рис. 2 показаны графики теоретических функций D_q и эмпирических функций D_q , рассчитанных при различной длине ряда ($N=512, N=1024, N=2048$). В положительном диапазоне достигается высокое соответствие оценочных значений фрактальной размерности теоретическим даже при малых длинах ряда, например $N=1024$.

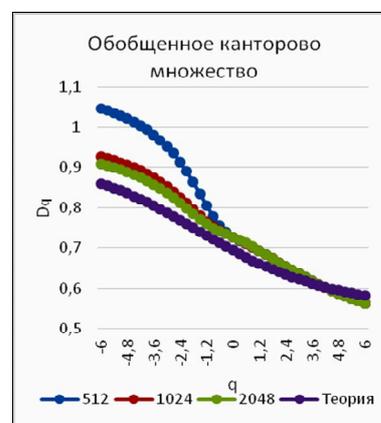


Рис. 2. Теоретические и эмпирические значения D_q для обобщенного канторова множества при $l_1 = \frac{1}{2}; l_2 = \frac{1}{4}$

Аналогичные результаты получены при ряде других значений параметров l_1, l_2 .

Примером двумерного мультифрактального множества является неоднородная салфетка Серпинского.

Последовательность точек, сходящуюся в метрике Хаусдорфа к салфетке Серпинского можно получить методом хаоса следующим образом.

Пусть имеется правильный треугольник ABC и некоторая точка P_0 внутри него. Для построения новой точки P_{i+1} нужно выбрать случайным образом одну из вершин A, B, C и построить середину отрезка между точкой P_i и выбранной вершиной.

Если вершины выбирать с неодинаковыми вероятностями, то получится неоднородная салфетка Серпинского, причем чем более будут различаться эти вероятности, тем выше будет степень выраженности мультифрактальных свойств данного множества.

Были исследованы 2 случая:

- 1) $P(A)=0,4; P(B)=P(C)=0,3$.
- 2) $P(A)=0,6; P(B)=0,3; P(C)=0,1$.

Результаты измерений при длине ряда $N=2000$ приведены на рис. 3. В первом случае оценочное значение D_0 располагается близко к истинному значению фрактальной размерности $D = \frac{\ln 3}{\ln 2} = 0,58$, а зависимость D_q – ближе к постоянной функции. Во втором случае мультифрактальные свойства выражены более существенно.

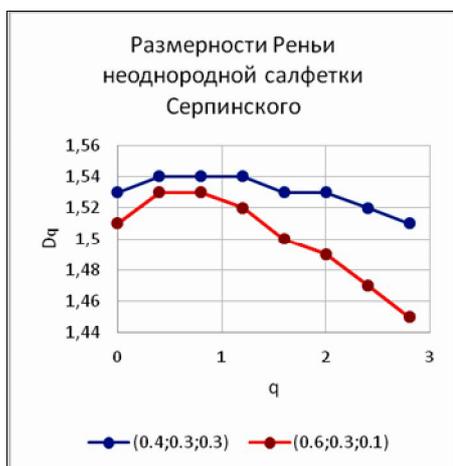


Рис. 3. Зависимость D_q для неоднородной салфетки Серпинского при различных наборах вероятностей выбора вершин исходного треугольника

4. Результаты исследования

Графики зависимости D_q от q , полученные на основе исследования одномерных рядов в изучаемых областях, приведены на рис. 4.

Статистические свойства микрорельефа гладких, однородных поверхностей (К1, С1) близки к монофрактальным, а поверхности участков с неоднородным рельефом в силу различных особенностей кристаллов (включения кристаллов роста, наличие межкристаллических границ) обладают признаками мультифрактальности.

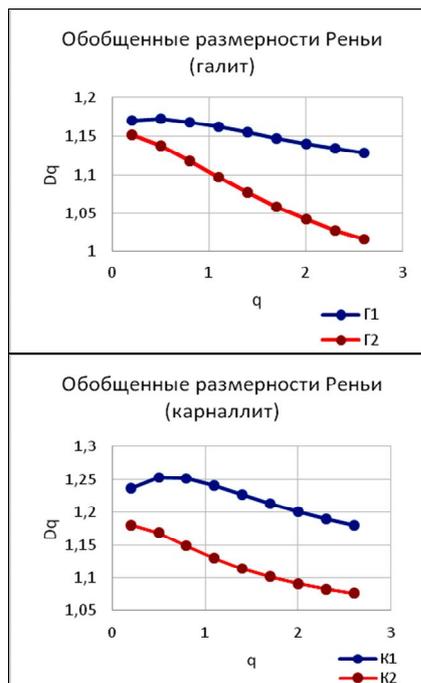


Рис. 4. Фрактальные размерности Реньи поверхностей кристаллов галита и карналлита

Функции D_q являются убывающими за исключением небольших участков.

Степень выраженности мультифрактальных свойств можно выразить численно, например, взяв в качестве меры мультифрактальности величину (вычисляем между

$$D_0, D_1, D_2), \delta D = \frac{D_{\min} - D_{\max}}{D_{\max}}, q \in [0, 2; 2, 8].$$

Полученные данные приведены в таблице.

Характеристики степени мультифрактальности для поверхности кристаллов галита и карналлита

| Область | δD |
|----------------------------|------------|
| К1 (гладкая) | 0,06 |
| К2 (кристаллы роста) | 0,09 |
| Г1 (поверхность спайности) | 0,04 |
| Г2 (граница двух зерен) | 0,12 |

Таким образом, на участке $q \in [0, 2; 2, 8]$ относительное изменение обобщенной фрактальной размерности δD в области, содержащей границу двух зерен, втрое выше, чем на участке, лежащем в плоскости спайности.

Наличие кристаллов роста также увеличивает выраженность мультифрактальных свойств.

Заключение

Таким образом, установлено, что одной и той же фрактальной размерности могут соответствовать множества, имеющие различную структуру и внешний вид, например, салфетки Серпинского с любыми вероятностями выбора вершин треугольника имеют одну и ту же фрактальную размерность $D = \frac{\ln 3}{\ln 2} = 0,58$, отличие между ними проявляется только в мультифрактальных характеристиках.

Классический метод мультифрактального анализа позволяет получать устойчивые значения D_q в диапазоне при $q \in [0,5]$ при использовании выбранной последовательности аппроксимаций.

Неоднородные участки поверхностей кристаллов соляных пород могут проявлять мультифрактальные свойства и наоборот, наличие выраженных мультифрактальных свойств является признаком неоднородности кристалла.

Кроме того, существует взаимосвязь между изменчивостью обычных фрактальных

характеристик микрорельефа поверхности в пределах рассматриваемой области и степенью выраженности мультифрактальных свойств.

Список литературы

1. Аптуков В.Н., Митин В.Ю. Исследование шероховатости поверхности кристаллов шпатового галита на микро- и наноуровне // Вестник Пермского университета. Сер. Математика. Механика. Информатика. 2014. Вып. 1(24). С. 25–30.
2. Аптуков В.Н., Митин В.Ю. Сравнительные характеристики изрезанности рельефа поверхности зерен сильвина, шпатовой соли и карналлита в нанодиапазоне // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых. 2013. № 1. С. 51–60.
3. Павлов А.Н., Анищенко В.С. Мультифрактальный анализ сложных сигналов // УФН. 2007. Т. 177, № 8. С. 859–872.
4. Божокин С.В., Паришин Д.А. Фракталы и мультифракталы. Ижевск: РХД, 2001.
5. Короленко П.В., Маганова М.С., Меснянкин А.В. Новационные методы анализа стохастических процессов и структур в оптике. Фрактальные и мультифрактальные методы, вейвлет-преобразования. М.: МГУ, НИИ ЯФ им. Д.В. Скобельцына, 2004.

Investigation of multifractal properties of salt rock crystal surfaces using the box-counting method

V. Yu. Mitin

Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia
victormitin@ya.ru; 8(342) 229-15-35

The algorithm of generalized fractal dimension estimation is presented, which have been tested for fractal sets and random series. It is shown that the parts of salt rock surface that for some reason have inhomogeneous structure possess stronger multifractal properties.

Keywords: roughness; fractal dimension; multifractals; salt rock crystals.

The investigation of multifractal properties of salt rocks crystal surfaces by using the box-counting method

V. Yu. Mitin

Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia
victormitin@ya.ru; 8(342) 229-15-35

The algorithm of generalized fractal dimension estimation is given and tested. for fractal sets and random series. It is shown that the parts of salt rock surface, which have inhomogeneous structure for any reason, possess stronger multifractal properties.

Keywords: *roughness; fractal dimension; multifractals; salt rock crystals.*