



УДК 519.21

© 2008

В. И. Большаков, В. Н. Волчук, Ю. И. Дубров

## Особенности применения мультифрактального формализма в материаловедении

*(Представлено академиком НАН Украины М. И. Гасиком)*

*The necessity to develop methods of qualitative evaluation of the characteristics of materials with the use of the multifractal formalism which enables to make algorithms of their definition is formulated.*

Большое количество исследований, встречающихся в прикладных и фундаментальных науках, может интерпретироваться как поиск метрики, присущей пространству состояний объекта идентификации. При этом существующие методы идентификации, например, математическое программирование, часто оказываются непригодными, так как их применение вызывает серьезные математические трудности, связанные, прежде всего, с предположением о том, что пространство состояний объекта идентификации линейное и поэтому имеет одинаковые свойства в каждой точке и по любому направлению.

Синтез моделей, адекватных нелинейным пространствам состояний объектов идентификации, возможен с применением тензорного анализа [2]. Однако, для неэлементарного многообразия, которым можно интерпретировать область переменных объекта идентификации, невозможно в целом ввести координатную систему с обычными требованиями взаимной однозначности и непрерывности соответствия (как, например, это показано в [3, 4]). Поэтому вся геометрия многообразия должна быть извлечена из задания в нем множества координатных систем, связанных между собой произвольными взаимно однозначными преобразованиями, что для практических применений представляется чрезвычайно сложным [4].

К задачам, близким по сложности, можно отнести многие задачи материаловедения, формализация которых с помощью традиционного математического аппарата представляется затруднительной, а иногда и невозможной [2]. К таким относится, например, задача определения качественных характеристик материала с учетом его состава и особенностей микроструктуры.

Направивается вывод, аналогичный известной гипотезе С. Уолфрема [5]. Согласно этой гипотезе, некоторые процессы, при моделировании которых наблюдаются трудности в их

идентификации (хаотические турбулентные течения, вихри в атмосфере, экономические системы, биологическая эволюция), описываются только неприводимыми алгоритмами. Результаты применения этих алгоритмов невозможно предсказать, не выполнив их полностью. Задачи, которые решаются только с помощью таких алгоритмов, естественно называть численно неприводимыми. Гипотезу о численной неприводимости задачи идентификации качественных характеристик материалов можно сформулировать следующим образом: разрешающую функцию, областью определения которой является множество растровых изображений шлифов материала, а областью значений — множество векторов качественных характеристик материала, можно построить лишь путем применения алгоритма полного перебора. Вполне очевидно, что, учитывая технические и организационные трудности на этом пути, на данном этапе научно-технического прогресса следует, по крайней мере, искать новые нетрадиционные пути решения этой задачи. Одним из подходов, позволяющих компенсировать невозможность формализации сложной задачи, являются результаты, полученные в нелинейной динамике Такенсом [6], некоторые пути их решения показаны в [6].

Проводя параллель с выводами, полученными из теоремы Такенса, естественно рассмотреть в качестве инструмента для решения задачи идентификации свойств материала язык фрактальной геометрии. Попытка решения данной проблемы в области материаловедения привела к лавинообразному увеличению количества публикаций, в которых как в теоретических, так и в прикладных аспектах, используется язык фрактальной геометрии, поскольку практически все структуры материалов фрактальны [7].

В ряде работ было показано (см., например, [8, 9]), что фрактальная размерность структуры может являться индикатором ее качественных характеристик. На основе этого факта был разработан метод определения механических свойств металла [10]. Применимость языка фрактальной геометрии для идентификации структуры металла приведена также в работе [11], где показана корреляция между зеренной структурой металла и его качественными характеристиками. При фрактальном анализе всегда предполагается, что изучаемому фрактальному объекту, независимо от масштаба его представления, присуще свойство самоподобия, которое заключается в том, что в любом масштабе его структуре присущи одни и те же геометрические особенности. Конечно, для реального природного фрактала, которым, безусловно, является структура многих металлов, существует некоторый масштаб длины  $l$ , такой, что при увеличениях, несколько меньших или больших этого масштаба, свойство самоподобия пропадает. Поэтому свойство самоподобия природных фракталов рассматриваются на масштабах

$$l_{\min} \leq l \leq l_{\max}. \quad (1)$$

На каждом масштабном уровне выявляются новые особенности структуры материала, характеризующие то или иное его качество. Так, например, в сталях на микроструктурном уровне выявляются особенности зеренной структуры, параметры которой в значительной степени влияют на прочностные свойства металла [13].

Таким образом, для выбора масштаба представления, например зеренной структуры стали, для определения ее фрактальной размерности необходимо определить интервал (1), в котором соблюдается ее самоподобие и на этом интервале выбрать тот единственный масштаб, на котором вычисление фрактальной размерности даст наиболее точный результат.

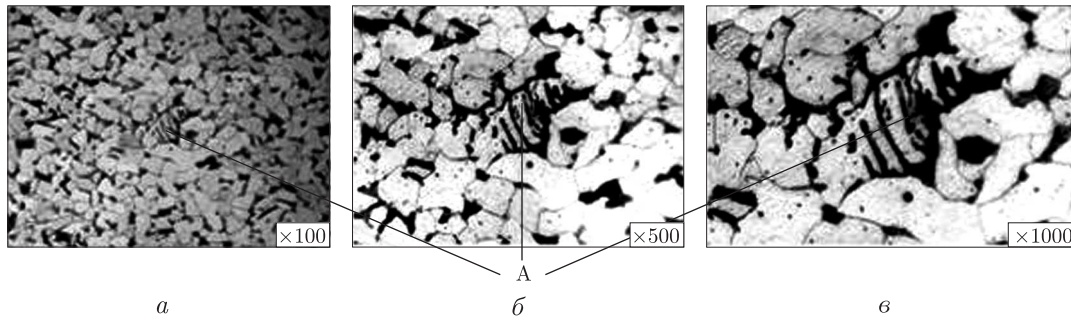


Рис. 1. Структура шлифа стали Ст3пс

Для этого эмпирически задается некоторый шаг  $\Delta l$  изменения масштаба от  $l_{\min}$  до  $l_{\max}$ . Затем в интервале (1) вычисляются оценки фрактальных размерностей в точках масштабов

$$l_{\min} + (l_{\min} + \Delta l) + (l_{\min} + 2\Delta l) + \dots + (l_{\min} + n\Delta l), \quad (2)$$

где  $n = (l_{\max} - l_{\min})/\Delta l$ .

За оптимальный масштаб представления структуры принимается тот, при котором, как минимум в двух рядом стоящих точках из ряда (2), фрактальные размерности минимально различаются между собой. Последнее объясняется тем, что при этом наилучшим образом соблюдается свойство самоподобия структуры. Ниже приведен пример выбора масштаба увеличения феррито-перлитной структуры малоуглеродистой стали Ст3пс на интервале от  $\times 100$  до  $\times 1000$  с  $\Delta l = 100$ .

Из рис. 1 видно, что самоподобие в указанном интервале масштабов сохраняется. За оптимальный масштаб представления структуры был выбран масштаб  $\times 550$ , поскольку в двух рядом стоящих масштабах ( $\times 500$ ,  $\times 600$ ) фрактальные размерности минимально различались между собой — 1,617, 1,651 соответственно.

Самоподобие структуры можно проверить не только визуально, но и аналитически. Для этого достаточно выбрать одну или несколько характерных геометрических фигур на шлифе и проверить их геометрическое подобие. Например, на рис. 1 выбрана фигура А. Соотношение размеров границ этой фигуры на всех масштабах увеличения сохраняется, что подтверждает факт самоподобия структуры.

Вопрос, который может возникнуть при определении связи фрактальной размерности структуры металла с его качественными характеристиками, может заключаться в сложности идентификации неоднородных фрактальных объектов, это не только композиты, но и некоторые металлы, отличающиеся неоднородностью структуры. При исследовании подобных структур должен наблюдаться целый спектр фрактальных размерностей, поскольку эти структуры, наряду с чисто геометрическими характеристиками, обладают некоторыми статистическими свойствами. Это связано с тем, что полученные для истинных структур оценки фрактальных размерностей выполняются лишь приближенно и поэтому в силу вступает не детерминированная модель определения фрактальной размерности, а вероятностная ее модель. При синтезе такой модели мультифрактал мы идентифицируем как структуру, которая порождается существованием разнородных фаз, включений, каждая из которых имеет свою фрактальную размерность. Другими словами, имеется спектр фрактальных размерностей, состоящий из фрактальных размерностей каждого элемента структуры (например, феррита, перлита, бейнита, мартенсита) и т. д. [11]. Такое определение мультифрактала не противоречит принятому, поскольку при мультифрактальном анализе спектр

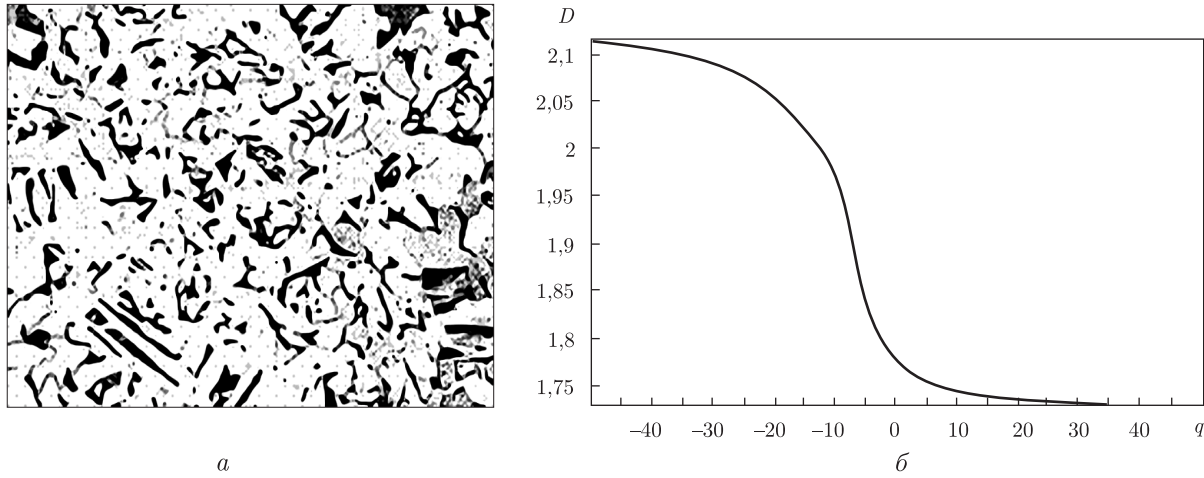


Рис. 2. Феррито-перлитная структура стали СтЗпс ( $\times 100$ ) (а); спектр обобщенных статистических размерностей на интервале  $-50 < q < 50$  (б)

размерностей  $D(q)$  может изменяться в зависимости от величины показателя степени  $q$ , который может принимать значения на интервале от  $-\infty$  до  $+\infty$ , и естественно, что в этом интервале могут находиться элементы спектра любого генерирующего его объекта [14]

$$D(q) = \frac{1}{q-1} \lim_{\delta \rightarrow \infty} \frac{\ln \sum_{i=1}^N p_i^q}{\ln \delta}, \quad (3)$$

где  $\delta$  — ячейка, являющаяся единичным элементом квадратной сетки, которой покрывают исследуемый объект для вычисления его размерности [14];  $p_i$  представляет собой вероятность попадания точки, находящейся на исследуемом объекте, в  $i$ -ю ячейку квадратной сетки с размером  $\delta$ ;  $\sum_{i=1}^N p_i^q$  — обобщенная статистическая сумма, характеризуемая показателем степени  $q$ , который может принимать любые значения в диапазоне от  $-\infty$  до  $+\infty$ .

Обозначив через  $D_0, D_1, D_2, D_\infty, D_{-\infty}$  фрактальные размерности, характеризующие соответственно:  $D_0$  — однородный фрактал при  $q = 0$  (размерность Хаусдорфа–Безиковича);  $D_1$  — информационную размерность при  $q = 1$  (информационную энтропию), характеризующую скорость роста количества информации и показывающую, как возрастает информация, необходимая для определения местоположения точки, находящейся на объекте исследования, при стремлении размера ячейки  $\delta$  к нулю;  $D_2$  — корреляционную размерность, при  $q = 2$  характеризующую вероятность нахождения в одной и той же ячейке сетки двух точек, находящихся на объекте наблюдения;  $D_\infty$  — размерность, характеризующую наиболее разреженное пространство в объекте наблюдения;  $D_{-\infty}$  — размерность, характеризующую наиболее концентрированное пространство, наблюдаемое в этом объекте.

Таким образом, для определения принадлежности конкретной структуры к мультифракталу достаточно вычислить спектр ее размерностей по формуле (3).

Так, например, на рис. 2, а приведена феррито-перлитная структура стали СтЗпс при ее увеличении ( $\times 100$ ), а на рис. 2, б — спектр обобщенных статистических размерностей этой структуры, вычисленный по формуле (3) на интервале  $-50 < q < 50$  и полученный из рис. 2, б (табл. 1).

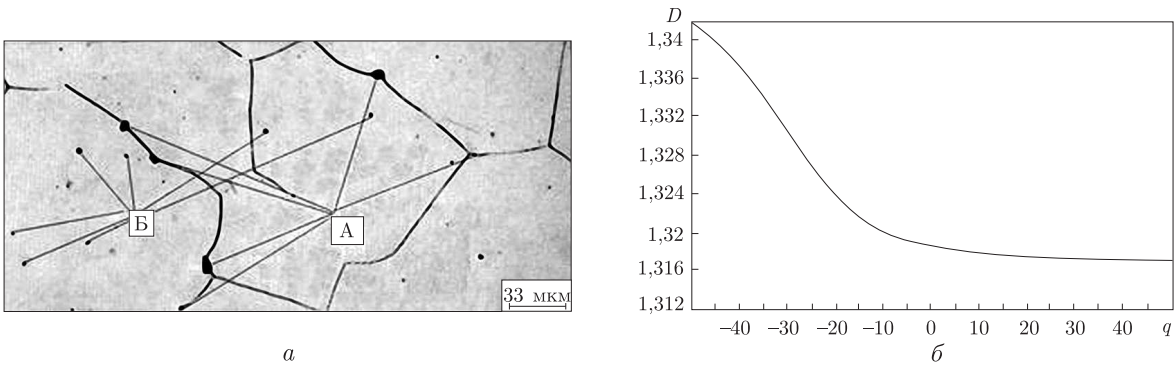


Рис. 3. Границы зерен аустенита стали 4X14N14D2M, полученные после закалки при температуре 1100 °С ( $\times 300$ ) [15] (а); спектр статистических размерностей в диапазоне  $-50 < q < 50$  (б)

Физический смысл данного примера заключается в том, что максимальной разреженности мультифрактального множества будет соответствовать размерность структуры феррита (светлые участки структуры на фотоснимке 2, а), а наиболее концентрированной — перлита, который характеризуется повышенным содержанием углерода (темные участки структуры на рис. 2, а).

Если мы имеем дело с однофазной структурой (фракталом), такой как, например, на рис. 3, а, то линия спектра размерностей, вычисленного по формуле (3), как это следует из рис. 3, б, вырождается в прямые на участках от  $-50$  до  $0$  и от  $0$  до  $50$ . На участке от  $-50$  до  $0$  значения размерности изменяются в узком диапазоне, причиной тому могут служить включения как по границам зерен стали (А на рис. 3, а), так и по всему объему (Б на рис. 3, б), которые вносят собственный вклад в размерность темных участков структуры. На участке от  $0$  до  $50$  значения размерности практически не изменяются, что свидетельствует о том, что мы имеем дело с монофракталом. Такая структура характеризуется одной фрактальной размерностью границ зерен аустенита:  $D_0 = 1,318$ , которая по определению вычисляется как тангенс угла наклона прямой [7].

В настоящее время мультифрактальный формализм начинает широко применяться для идентификации структуры металла и ее связи с его качественными характеристиками. К примеру, в данной работе исследовалась связь между спектром фрактальных статистических размерностей структуры и качественными характеристиками металла (конструкционной стали СтЗпс). Микроструктура стали исследовалась с применением оптической микроскопии. Спектр размерностей структуры вычислялся при ее увеличении 550. При этом было отобрано три образца конструкционной стали СтЗпс. Структура каждого образца исследовалась в трех точках (на расстоянии  $R = 0$ ;  $R = 0,5$  и  $R = 1$  от центра). Для подтверждения воспроизводимости опытов проводилось по три измерения в каждой точке структуры, т. е. в каждой намеченной точке структуры выбиралось три “поля”, с которых были получены фотоснимки. В итоге с каждого образца было получено по девять фото-

Таблица 1

Размерность максимальной разреженности элементов структуры, $D_{50}$	Корреляционная размерность, $D_2$	Информационная размерность, $D_1$	Фрактальная размерность, $D_0$	Размерность максимальной концентрации элементов структуры, $D_{-50}$
1,695	1,732	1,734	1,741	2,110

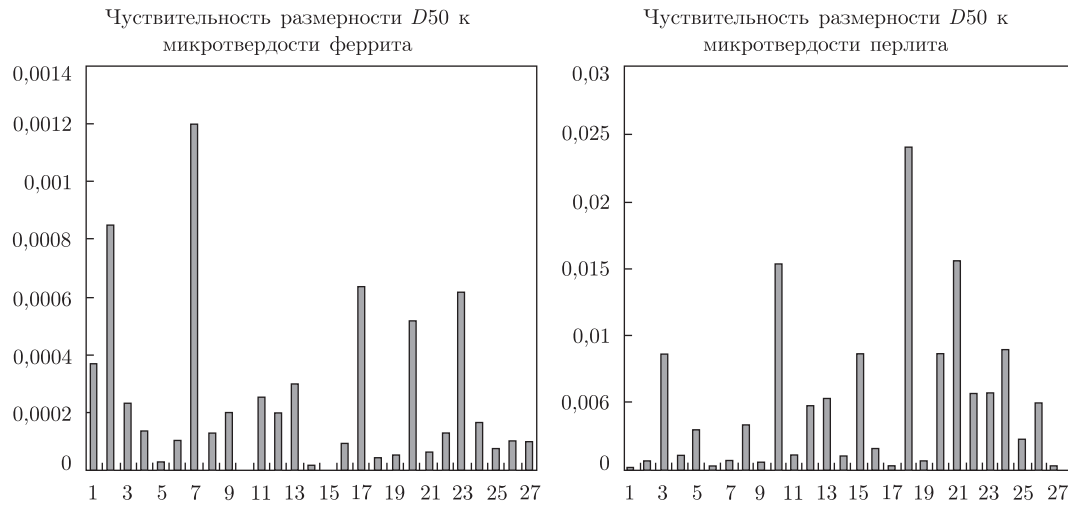


Рис. 4. Чувствительность размерностей феррито-перлитной структуры стали СтЗпс к ее микротвердости: фото 1–9 — для образца № 1; фото 10–18 — для образца № 2; фото 19–27 — для образца № 3 (фото структур приведены в табл. 2)

снимков (см. табл. 2). Спектр статистических размерностей феррито-перлитной структуры стали СтЗпс приведен в табл. 2, откуда видно, что уменьшение размерности  $D_{50}$ , характеризующей светлые участки структуры (на фотоснимке — феррит), связано с уменьшением микротвердости. Физически этот факт объясняется тем, что феррит представляет структуру с пониженными прочностными характеристиками и низким содержанием углерода, что приводит к понижению твердости. Соответственно, увеличение разреженности пространства, характеризуемое увеличением светлых участков, приводит к уменьшению прочности. Аналогично, увеличение размерности  $D_{-50}$ , характеризующей наиболее концентрированное пространство (темные участки структуры — перлит), связано с большей твердостью перлита, благодаря увеличенному процентному содержанию углерода, по сравнению с ферритом.

На основании анализа этих данных были получены гистограммы чувствительности спектра обобщенных фрактальных размерностей к микротвердости феррита и перлита, которая определялась из соотношения

$$K_i = \frac{|D_i - D_{i+1}|}{|X_i - X_{i+1}|} [10], \quad (4)$$

где  $K_i$  — чувствительность;  $D_i$  — фрактальная размерность в  $i$ -й точке шлифа;  $X_i$  — качественная характеристика в  $i$ -й точке шлифа.

В качестве примера на рисунке 4 приведены гистограммы чувствительности обобщенной фрактальной размерности  $D_{50}$  и  $D_{-50}$  к феррито-перлитной структуре.

Поэтому при установлении связи качественных характеристик металла с фрактальными размерностями элементов его структуры имеет смысл в самом начале исследований определять спектр статистических размерностей. Затем, определив чувствительность каждого элемента этого спектра к конкретной характеристике качества и взяв за основу самый чувствительный элемент этого спектра, устанавливать зависимость между фрактальной размерностью и соответствующей качественной характеристикой.

При этом наблюдалась для феррита высокая чувствительность фрактальной размерности  $D_0$  к микротвердости, вычисленной по фотоснимкам № 2, 7, 12 и 17 (табл. 2); для

Таблиця 2

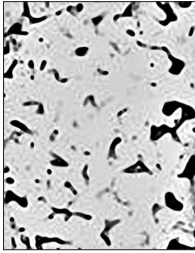

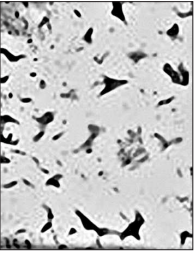
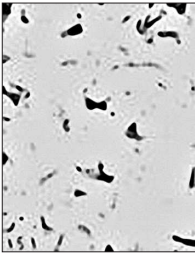
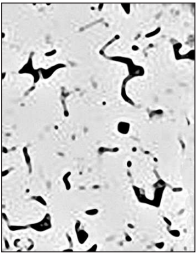
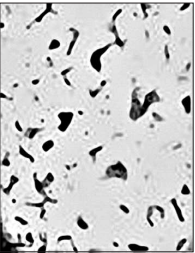
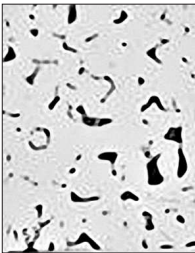
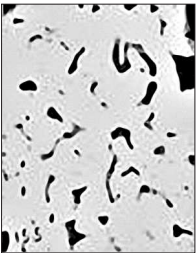
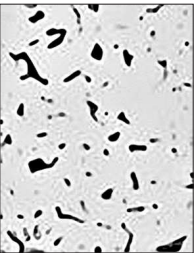


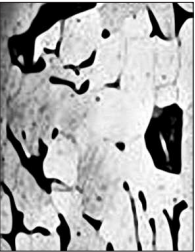
Расстояние от центра образца $R$ , мм	Спектр размерностей мультифрактала				
	$D_0$	$D_1$	$D_2$	$D_{50}$	$D_{-50}$
1	2	3	4	5	6
Образец № 1. Сталь СтЗпс, круг $\varnothing 24$ мм. В состоянии поставки					
$R = 0$					
					
фото 1	фото 2	фото 3			
	1,672	1,672	1,67	1,65	2,491
	1,668	1,668	1,665	1,64	2,425
	1,670	1,671	1,66	1,638	2,22
$R = 6$					
					
фото 4	фото 5	фото 6			
	1,698	1,691	1,69	1,683	2,465
	1,678	1,672	1,671	1,657	2,155
	1,677	1,675	1,669	1,654	2,57
$R = 12$					
					
фото 7	фото 8	фото 9			
	1,697	1,688	1,687	1,674	2,24
	1,684	1,68	1,679	1,661	2,99
	1,679	1,670	1,67	1,656	2,45
Образец № 2. Сталь СтЗпс, круг $\varnothing 24$ мм. Режим термообработки: нагрев до $930^{\circ}\text{C}$ , воздух					
$R = 0$					
					
фото 10	фото 11	фото 12			
	1,595	1,581	1,58	1,56	2,67
	1,605	1,588	1,585	1,57	2,86
	1,586	1,565	1,562	1,54	3,29

Таблица 2. Продолжение

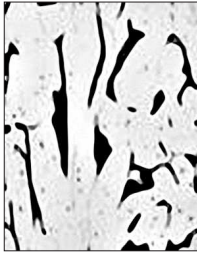
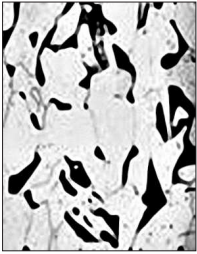
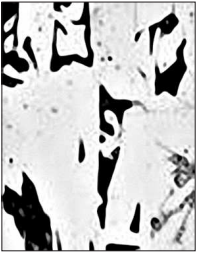
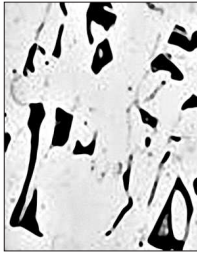
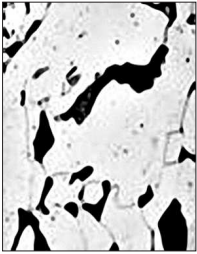


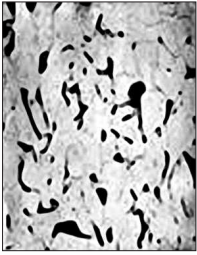
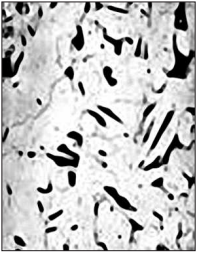
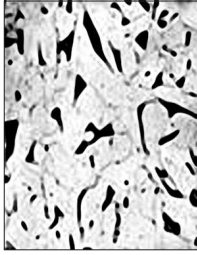


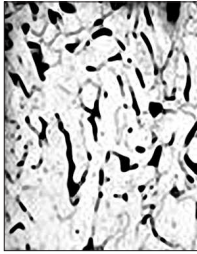
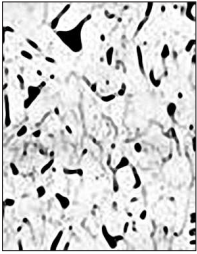

1			2	3	4	5	6
$R = 6$							
			1,587	1,582	1,579	1,56	3,13
			1,602	1,583	1,58	1,551	2,95
			1,59	1,575	1,573	1,54	3,48
фото 13	фото 14	фото 15					
$R = 12$							
			1,58	1,561	1,56	1,539	2,81
			1,586	1,572	1,568	1,552	2,795
			1,594	1,57	1,568	1,54	3,05
фото 16	фото 17	фото 18					
Образец № 3. Сталь СтЗпс, круг $\varnothing 24$ мм. Режим термообработки: вода: 930–650°C, воздух							
$R = 0$							
			1,71	1,692	1,689	1,658	2,69
			1,696	1,685	1,683	1,663	2,81
			1,684	1,676	1,673	1,654	2,82
фото 19	фото 20	фото 21					
$R = 6$							
			1,687	1,674	1,672	1,65	2,763
			1,688	1,675	1,668	1,637	2,723
			1,697	1,685	1,679	1,648	2,355
фото 22	фото 23	фото 24					



Таблица 2. Окончание

1	2	3	4	5	6
$R = 12$					
					
фото 25	фото 26	фото 27			
	1,683	1,674	1,667	1,645	3,105
	1,700	1,692	1,69	1,674	3,06
	1,687	1,677	1,668	1,64	2,802

информационной размерности  $D_1$  — по фотоснимкам № 6, 7, 12 и 17; для корреляционной  $D_2$  — по фотоснимкам № 13, 18, 20, 23 и т. д. Наименьшая чувствительность фрактальной размерности  $D_0$  к микротвердости перлита наблюдается на фотоснимках № 2, 4, 6, 9, 11, 22 и 27. Чувствительность будет максимальной в тех точках структуры шлифа, где наблюдается максимальное изменение свойств металла.

Приведенный пример показывает, что чувствительность спектра размерностей к элементам структуры достаточно высокая и этот факт можно использовать при идентификации, например, механических свойств металла, в частности твердости.

1. Лобачевский Н. И. Полное собрание сочинений. — Москва; Ленинград: Гостехиздат, 1949. — Т. 11. — С. 158–159.
2. Рашевский П. К. Риманова геометрия и тензорный анализ. — Москва: Наука, 1969. — 664 с.
3. Турбин А. Ф., Працевитый Н. В. Фрактальные множества, функции, распределения. — Киев: Наук. думка, 1992. — 207 с.
4. Працевитый М. В. Фрактальный підхід у дослідженнях сингулярних розподілів — Київ.: Нац. пед. ун-т ім. М. П. Драгоманова, 1998. — 295 с.
5. Капица С. П., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г. Синергетика и прогнозы будущего. — Москва: Эдиториал УРСС, 2001. — 288 с.
6. Управление риском. Риск. Устойчивое развитие. Синергетика // URL: <http://www.Keldysh.ru/papers/2002/source/book/gmalin/gl11.htm>.
7. Федер Е. Фракталы. — Москва: Мир, 1991. — 261 с.
8. Иванова В. С., Баланкин А. С., Бунин И. Ж., Оксогоев А. А. Синергетика и фракталы в материаловедении. — Москва: Наука, 1994. — 383 с.
9. Бунин И. Ж., Колмаков А. Г., Встовский Г. В., Терентьев В. Ф. Концепция фрактала в материаловедении. Сообщ. 1. Фрактальная параметризация структур материалов // *Материаловедение*. — 1999. — № 2. — С. 19–27.
10. Большаков В. И., Дубров Ю. И. Об оценке применимости языка фрактальной геометрии для описания качественных трансформаций материалов // *Доп. НАН України*. — 2002. — № 4. — С. 116–121.
11. Большаков В. И., Волчук В. Н., Дубров Ю. И. Разработка и исследование метода определения механических свойств металла на основе анализа фрактальной размерности его микроструктуры // *Металлознавство та терм. обробка металів*. — 2004. — № 1. — С. 43–54.
12. Дубров Ю. Наука як система, що самоорганізується // *Вісн. НАН України*. — 2000. — № 2. — С. 16–22.
13. Большаков В. И. Упрочнение строительных сталей. — Днепропетровск: Січ, 1992. — 332 с.
14. *Фракталы в физике*: Тр. 6-го междунар. симп. по фракталам в физике. — Москва: Мир, 1988. — 672 с.
15. Лозинский М. Г. Высокотемпературная металлография. — Москва: Машгиз, 1956. — 312 с.

Приднепровская государственная академия  
строительства и архитектуры, Днепропетровск

Поступило в редакцию 15.04.2008