

Информационные системы и технологии

УДК 621.317

А.Б. Завгородний

Современные методы исследования структурно-информационных свойств естественных систем

Предложено приложение метода количественной оценки степени упорядоченности наноразмерных структур на основе параметра фрактальной размерности. Освещена возможность применения методов и методик анализа структурно-морфологических свойств объектов на основе параметра фрактальной размерности в изображениях, полученных методом газоразрядной визуализации.

A new application of a method which allows a quantitative assessment of the nanostructure order was offered. The possibility of the application of methods and techniques for structural-morphologic analysis based on the fractal dimension of the images obtained by gas discharge visualization was highlighted.

Ключевые слова: *фрактальная размерность; фрактал; показатель Херста, структурно-морфологический анализ*

Введение

Интерес к исследованию структурных свойств естественных систем с размерами элементов в области нанометров и большой плотностью концентрации таких элементов ($10^{11}...10^{12}$ на 1 см^2) проявился в 90-х годах прошлого столетия в связи с возникновением ряда теорий, более подробно изложенных в работах [1, 2] и говорящих о том, что различные вещества при определенных условиях способны воспринимать и довольно продолжительное время сохранять в виде изменений своей структуры различные информационные воздействия.

В частности, С.В. Зениным была разработана детальная теория структурно-информационных свойств воды. Согласно работе [1], структурно-информационное свойство воды – это способность ее молекул образовывать кластеры, в структуре которых закодирована информация о взаимодействиях, происходивших или происходящих с данным образцом воды [3].

Открытие информационно-фазового состояния воды заключается в обнаружении и строгом доказательстве с помощью современных физико-химических средств наличия стабильных ассоциатов, состоящих из 912 молекул воды. Эти

ассоциаты оказались неразрушаемыми структурными элементами строгой геометрической формы в виде шестигранников с гранями-ромбами с углом 60° . Отсутствие возможности образования комплементарных водородных связей между соответствующими центрами на гранях структурных элементов объясняет чрезвычайно лабильный характер их взаимодействия, природа которого обусловлена дальними кулоновскими силами, определяющими новый вид зарядово-комплементарной связи. Именно за счет этого вида взаимодействий осуществляется построение структурных элементов воды в ячейки (клатраты) размером до $0,5...1\text{ мкм}$, непосредственно наблюдаемые при помощи контрастно-фазового микроскопа. Подобное самокодируемое расположение структурных элементов в ячейке оказывается, таким образом, строго специфическим, своего рода информационно-фазовым состоянием вещества. Термин «фазовое состояние» имеет прямой смысл, поскольку превращение определенного самокодируемого расположения элементов в другое построение, т. е. составленное по другому закону, приводит к качественно иной по своим свойствам воде. Практически наблюдается переход к новому состоянию и происходит он, как и положено при фазовых превращениях, скачкообразно [1].

Не менее подробно разработаны кластерные теории строения вещества и в отношении полупроводниковых GaAs-структур на основе кластеров $\text{Ga}_4\text{As}_5\text{H}_9$ и др. [3].

Постановка задачи

В последнее время для решения задач выявления наличия в структуре объектов определенных информационных свойств, т. е. структурно-морфологических закономерностей, часто используется количественный параметр *фрактальная размерность* (ФР). До недавнего времени понятие «размерность» использовалось лишь в трех значениях:

- размерность евклидова пространства ($E = 1, 2, 3, \dots$);
- топологическая размерность объекта: $d_T = 0$ (точка), $d_T = 1$ (отрезок прямой),

$d_T = 2$ (плоская фигура) и т. д. Топологическая размерность не превосходит размерность евклидова пространства, в котором находится данное множество;

- количество переменных, описывающих данную динамическую систему ($N = 1, 2, 3, \dots$).

Все эти размерности могут быть лишь целыми числами.

В качестве меры геометрической сложности множества (объекта) в работе [4] предложено использовать фрактальную размерность d , показывающую, насколько плотно и равномерно элементы данного множества заполняют евклидово пространство.

Размерность подобия

$$N = r^d \text{ или } N = \delta^{-d},$$

где N – количество уменьшений в r раз копий, необходимое для заполнения исходного объекта (либо же, при измерении объекта «уменьшенной линейкой» $\delta = 1/r$). Размерность подобия

$$d_S = \frac{\ln(N)}{\ln(r)} \text{ или } d_S = -\frac{\ln(N)}{\ln(\delta)}$$

для евклидовых объектов выражается целым числом, что совпадает с топологической размерностью $d_T = 0$.

Фрактальная размерность не зависит от масштаба рассмотрения:

$$d_S = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\ln(N)}{\ln(\delta)}.$$

Целью данной работы является обзор возможных методов измерения и расчета ФР, а также анализ возможности применения этого параметра для выявления факта наличия информационных свойств у различных веществ.

Измерения и расчет ФР

ФР, как отмечается в работе [5], является характеристикой формы объектов системы и может быть измерена различными экспериментальными методами (сканирующая зондовая микроскопия, рентгеновские методы). Процесс вычисления ФР условно можно разбить на два этапа: получение экспериментальных данных и математическая обработка экспериментальных данных. В мировой литературе опубликовано множество работ, посвященных описанию математических методов определения ФР. Среди них – метод подсчета ячеек [6], метод высотно-высотной корреляционной функции [5], метод структурной функции [7]. Авторам работы [8] был предложен метод определения ФР, основанный на вычислении дисперсии высоты.

Подробнее следует остановиться на методе расчета ФР трехмерных изображений, полученных с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), предложенном в работе [9] авторами Гомес-Родригесом и др. Самоподобная поверхность рассекается с помощью компьютерного моделирования в горизонтальном направлении, образуя на поверхности образца «островки», или «озера». Затем вычисляется зависимость периметра L от площади A для каждого из островков. L и A для объектов в системе связаны соотношением

$$L(\delta) = \gamma d' A^{d'/2},$$

где γ – константа; d' – фрактальная размерность береговой линии озер; δ – величина измерения. Величина измерения (число пикселей в 1 нм) будет равна общей длине сканирования, разделенной на число пикселей в каждом направлении. Фрактальная размерность трехмерной поверхности d связана с d' соотношением

$$d' = d - 1.$$

Периметр, площадь, а следовательно, и ФР при расчете этим методом зависят от выбора величины измерения. Тем не менее, фрактальная размерность d' представляет собой коэффициент МНК-прямой (метод наименьших квадратов), построенной на логарифмическом графике зависимости L от A , независимо от величины измерения. Основным условием является то, что для точного вычисления небольших объектов цифрового изображения величина измерения d должна быть достаточно малой. Этот метод может быть использован для определения ФР упорядоченных и неупорядоченных структур [5].

При изначально известном проценте упорядоченности в системе можно определить фрактальную размерность, используя для этого различные методы (например, метод Гомес-Родригеса). Выбор метода не имеет принципиального значения, поскольку фрактальная размерность является неизменной характеристикой системы для выбранного состояния и результаты, полученные различными способами, хорошо согласуются.

Метод Гомес-Родригеса применим для анализа данных, полученных с помощью сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ). Однако существуют и другие экспериментальные методы, позволяющие количественно определять фрактальные параметры образцов [5].

В работе [10] предложен способ моделирования рассеяния рентгеновского излучения шероховатой поверхностью на основании фрак-

тального подхода в рамках динамической теории рассеяния рентгеновского излучения (приближения Борна для искаженных волн (DWBA)). Для описания поверхности в расчете используется корреляционная функция

$$C(R) = \sigma^2 \exp(-[R/\xi^{2h}]),$$

где σ – интегральный параметр, который является среднеквадратичной суммой высот шероховатости в области воздействия рентгеновского излучения; R – шаг (радиус) корреляции; h – экспонента шероховатости (в разных источниках – параметр Хелдера [11], параметр Хаста); ξ – длина корреляции шероховатости.

Величина h описывает фрактальные свойства поверхности (текстуру) и связана с фрактальной размерностью поверхности соотношением

$$D = |3 - h|.$$

Значение параметра h может меняться от 0 до 1, и в случае h , близкого к 0, поверхность будет сильно искаженной (зазубренной), а в случае h , близкого к 1, поверхность будет более гладкой со слабыми осцилляциями. Следует отметить, что параметр h не зависит от значения σ и описывает морфологические особенности поверхности.

Очень важным является тот факт, что картина рассеяния рентгеновского излучения от упорядоченной структуры будет существенно отличаться от случая неупорядоченной системы. Авторами работы [12] проводились исследования самоорганизованных упорядоченных проволок SiGe с помощью рентгеновского рассеяния. Топография поверхности исследуемого образца, полученная с помощью атомно-силового микроскопа, показана на рис. 1. Как видно из рисунка, на поверхности образца наблюдаются упорядоченные холмы.

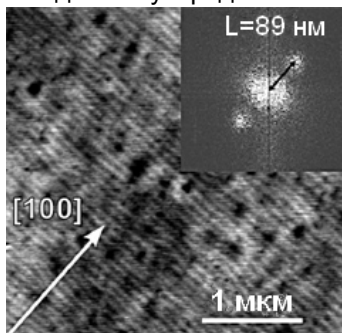
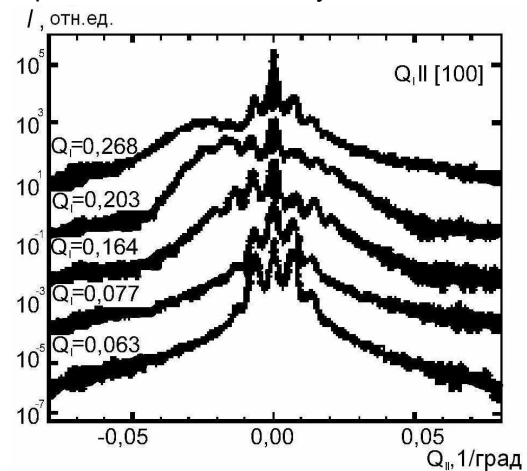


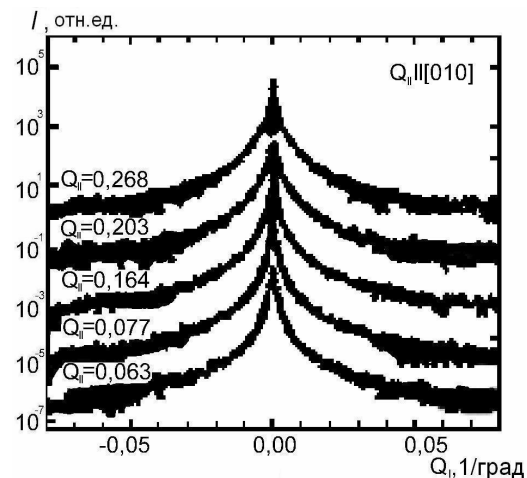
Рис. 1. Изображение образца с проволоками SiGe, полученное методом атомно-силовой микроскопии (образец имеет поверхностный слой Si толщиной 10 нм). Во вставке представлено 2D-Фурье-преобразование [5]

На рис. 2 представлены графики, показывающие зависимость интенсивности рассеяния рентгеновского излучения от параметра A (где

$A \approx 1/Q_z$; Q_z – угол скольжения), полученные для случаев упорядоченной (рис. 2, а) и неупорядоченной (рис. 2, б) структур. Даже на основании визуального анализа можно сделать вывод, что метод рассеяния рентгеновских лучей является чувствительным к наличию упорядоченности или неупорядоченности в исследуемых системах.



а



б

Рис. 2. Зависимость рассеяния рентгеновского излучения от угла скольжения: а – при наличии периодических проволок; б – при их отсутствии. Для случая а была использована дополнительная глубина $A = 1000$ нм [5]

Авторами работы [11] проводилось сравнение экспериментальных методов определения фрактальных параметров поверхности образцов Si, подвергавшихся окислению с различным временным интервалом. В результате исследований показано, что рентгеновские и зондовые методы являются мощными инструментами, позволяющими получать сведения о фрактальных свойствах поверхности, а фрактальные параметры, полученные с помощью различных экспериментальных методов, совпадают между собой в случае $\sigma < 5$ нм. Отсутствие приемлемого совпадения при значениях $\sigma > 5$ нм авторы

объясняют ограничениями модели Синха, одно из которых заключается в том, что распределение высот в исследуемой области образца должно быть гауссовым. Однако, в настоящее время существуют модели, позволяющие учитывать и не гауссово распределение высот, для которых нет подобного рода ограничений.

Экспериментальные исследования СТМ-изображений поверхности Si, облученной ионами Co^{2+} , показали, что данные, полученные фрактальным и Фурье-анализом, коррелируют между собой. А фрактальная размерность является самостоятельной величиной, не зависит от размеров, перепада высот на поверхности и шероховатости и позволяет судить о структуре и особенностях деталей поверхности [5].

До настоящего времени количественный параметр использовался лишь для контроля формы объектов на поверхности. Как показано ниже, на основе ФР возможно проведение количественного анализа упорядоченности в системах на поверхности.

Автором работы [13] разработана модель анализа упорядоченности на примере двумерных систем, состоящих из различных типов объектов. Суть модели заключается в определении методом Гомес-Родригеса фрактальной размерности системы идеальных двумерных объектов, расположенных с заданным процентом упорядоченности, и отслеживании динамики ее изменения при варьировании геометрического местоположения объектов в системе. Элементарными объектами в этой работе были выбраны окружности и квадраты. Совокупность таких элементов представлялась как горизонтальный срез трехмерной структуры. Изменяя начальные параметры в системе (процент упорядоченности, количество элементов и т. д.), можно контролировать форму получаемых

объектов и, соответственно, фрактальную размерность всей системы в целом. Чем сложнее форма полученных объектов, тем выше фрактальная размерность.

Моделируемая система подвергается геометрическим преобразованиям, суть которых заключается в сближении центров объектов без изменения их формы. Для каждого случая весь процесс разбивается на определенное количество шагов I , и для каждого шага подсчитывается величина фрактальной размерности D и количество объектов N . Каждый следующий шаг является приближением центров на 1 % от начального расстояния между объектами. Результаты моделирования представлены на рис. 3.

Показатель Херста и определение случайности ряда

Существуют различные способы определения фрактальных размерностей, на основании которых определяется показатель Херста [14]. Этот показатель имеет широкое применение в анализе временных рядов благодаря своей устойчивости. Однако его можно применить и для морфологического анализа структуры поверхности. Он содержит минимальные предположения об изучаемой системе и может классифицировать временные ряды; может отличить случайный ряд от неслучайного, даже если случайный ряд негауссовский (то есть не является нормально распределенным).

Для сравнения различных типов временных рядов Херст ввел следующее соотношение:

$$R/S = (aN)^H,$$

где R/S – нормированный размах от накопленного среднего; N – число наблюдений; a – некоторая константа; H – показатель Херста.

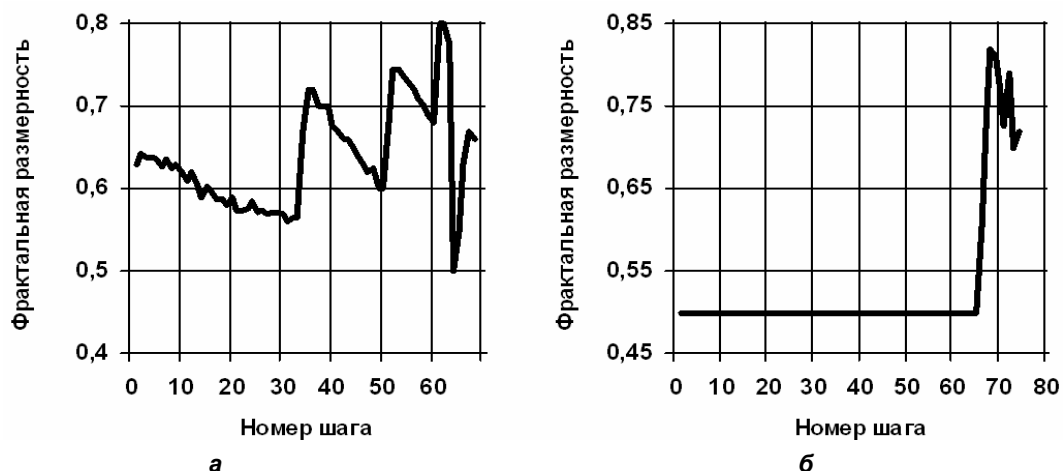


Рис. 3. Изменение фрактальной размерности в системе при морфологических преобразованиях в случае 50 % упорядоченности (а) и в случае 100 % упорядоченности (б) [5]

Для показателя Херста существует такая классификация:

1. $H = 0,5$. Указывает на *случайный* ряд. События случайны и некоррелированы. Настоящее не влияет на будущее. Функция плотности вероятности может быть выражена нормальной кривой, однако, это не обязательное условие. R/S -анализ может классифицировать произвольный ряд безотносительно к тому, какой вид распределения ему соответствует;

2. $0 \leq H < 0,5$. Этот диапазон соответствует *антиперсистентным*, или *эргодическим*, рядам. Такой тип системы часто называют «возвратом к среднему». Если система демонстрирует «рост» в предыдущий период, то, скорее всего, в следующем периоде начнется спад. И наоборот, если наблюдалось снижение, то вероятен близкий подъем. Устойчивость такого антиперсистентного поведения зависит от того, насколько значение H близко к нулю. Такой ряд более изменчив, чем ряд случайный, так как состоит из частых реверсов спад-подъем;

3. $0,5 < H < 1,0$. Характеризует *персистентные*, или *трендоустойчивые*, ряды. Если ряд возрастает (убывает) в предыдущий период, то, вероятно, он будет сохранять эту тенденцию в течение какого-то времени в будущем. Чем ближе значение H к 0,5, тем более зашумлен ряд и тем менее выражен его тренд. Персистентный ряд – это обобщенное броуновское движение, или смещенные случайные блуждания. Сила этого смещения зависит от того, насколько значение H больше 0,5.

Существует еще и четвертая характеристика показателя Херста, когда $H > 1$. В этом случае говорят о статистике Леви и о процессе (или временном ряде) с фрактальным временем, о временных точках разрыва производной. Это означает, что происходят независимые скачки амплитуды, распределенные по Леви в течение времени, определенного величиной скачка, и растущее вместе с ним. Дисперсия приращения за данный интервал времени становится конечной, траектория в фазовом пространстве сохраняет свой вид, но появляется новый фрактальный объект – временные точки разрыва производной.

Если в двойных логарифмических координатах найти наклон R/S как функцию от N , то тем самым получим оценку H . Эта оценка не связана с какими-либо предположениями относительно лежащего в основе распределения, хотя предпринимаются некоторые попытки классификации случайных распределений на основе фрактальной шкалы [15].

Для очень большого количества наблюдений N можно ожидать сходимости ряда к величине $H = 0,5$, так как эффект памяти уменьшается до того уровня, когда становится незаметным. Другими словами, в случае длинного ряда наблюдений можно ожидать, что его свойства станут неотличимыми от свойств обычного броуновского движения, или простого случайного блуждания, поскольку эффект памяти рассеивается.

Показатель Херста может быть преобразован во фрактальную размерность D с помощью следующей формулы [14]:

$$D = 2 - H.$$

Фрактальная размерность временного ряда, или накопленных изменений при случайном блуждании, равна 1,5. Фрактальная размерность кривой линии равна 1, а геометрической плоскости – 2. Таким образом, фрактальная размерность случайного блуждания лежит между кривой линией и плоскостью. Если $H = 0,5$, то $D = 1,5$. Обе величины характеризуют независимую случайную систему. Величина $0,5 < H \leq 1$ будет соответствовать фрактальной размерности, более близкой к кривой линии. Это персистентный временной ряд, дающий более гладкую, менее зазубренную линию, чем случайное блуждание. Антиперсистентная величина H ($0 < H < 0,5$) дает соответственно более высокую фрактальную размерность и более прерывистую линию, чем случайное блуждание, и, следовательно, характеризует систему, более подверженную переменам.

Выводы

Современные физические методы визуализации позволяют выявлять наличие упорядоченных/разупорядоченных структур на поверхности различных систем. Однако для исключения субъективности в этом вопросе необходим четкий математизированный критерий для их описания и фрактальная размерность вполне может служить таким критерием. Возможно также использование показателя Херста для определения того, является ли поверхностная структура объекта упорядоченной и имеется ли определенная закономерность распределения случайной величины, даже если ряд негауссовский (то есть не является нормально распределенным).

Однако следует отметить, что если критерий ФР позволяет работать как с вертикальной (одномерной), так и с плоскостной (двумерной) структурой объекта, то для применения показателя Херста для плоскостной структуры требуется еще определенная математическая доработка этого критерия.

Литература

1. Зенин С.В. Структурное состояние воды как основа управления поведением и безопасностью живых систем: дис. д-ра биол. наук / Зенин Станислав Валентинович. – М., 1999. – 207 с.
2. *Human* basophil degranulation triggered by very dilute antiserum against IgE / Davenas E., Beauvais B., Benveniste J. et al. – *Nature*. – 1988. – Vol. 333, № 6176. – P. 816–818.
3. Лебедев М.В. Механизм адсорбции молекул H_2S на поверхности GaAs(100): квантово-химический анализ из первых принципов // *Физика твердого тела*. – 2006. – Т. 48, вып. 1. – С. 152–158.
4. Chesters S., Wang H.C., Kasper G. A fractal based method for describing surface roughness and texture // *Proc. of Institute of Environmental Science*. – 1990. – P. 316.
5. Герасименко Н.М., Апрелов С.А. Фрактальные методы анализа степени упорядоченности наноструктур // *Российские нанотехнологии* – 2007. – Т. 2, № 1–2. – С. 136–139.
6. *Fractal-based* description for the three-dimensional surface of materials / Jianming Li, Li Lu, Ying Su, Man on Lai // *Journ. of Applied Physics*. – 1999. – Vol. 86, № 5. – P. 2526–2532.
7. *AFM* Imaging, Roughness Analysis and Contact Mechanics of Magnetic Tape and Head Surfaces. Transactions of ASME / P.I. Oden, A. Majumdar, B. Bhushan et al. // *Journ. of Tribology*. – 1992. – Vol. 114. – P. 666–674.
8. Hedman A. Surface Characterization and Applications to Atomic Force Microscopy: Graduate diploma thesis / Luleå University of Technology. – Luleå, 1994. – 102 p.
9. Gomez-Rodriguez J.M., Baro A.M., Salvarezza R.C. Fractal characterization of gold deposits by scanning tunneling microscopy // *Journ. of Vacuum Science and Technology: Part B*. – Melville. – 1991. – Vol. 9, № 2. – P. 495–499.
10. Sinha S.K. DWBA-analysis of the surfaces by AFM and diffuse X-ray reflectometry measurements // *Journ. Phys.* – Vol.III, № 4. – 1994. – P. 1543.
11. *Roughness* fractal approach of oxidized surfaces by AFM and diffuse X-ray reflectometry measurements / J.C. Arnault, A. Knoll, E. Smigiel, A. Cornet // *Applied Surface Science*. – Vol.171. – 2001. – P.189–196.
12. *Fractal-based* description for the planar surface of the self-organized structures / T. Roch, V. Holy, A. Daniel et al. // *Journ. Phys. D: Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 34. – P. A6–A10.
13. Герасименко Н.Н., Павлюченко М.Н., Джаманбалин К.К. Фрактальный анализ поверхности $CoSi_2$, полученного ионным синтезом // *Изв. ВУЗов: Электроника*. – 2002. – № 6. – С. 75–79.
14. Федер Е. Фракталы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
15. Кликушин Ю.Н. Фрактальная шкала для измерения формы распределений вероятности // *Журн. радиоэлектроники*. – 2000. – № 3. – С.15–18.