

УДК 519.213

EDN: MXHDMW

АНАЛИЗ ФРАКТАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ ТОПОЛОГИЙ МИКРОСТРУКТУР СО СТОХАСТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

В.Б. КуликовORCID: 0000-0003-2825-7476 e-mail: vb.kulikov@yandex.ruНижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
*Нижний Новгород, Россия***А.Б. Куликов**ORCID: 0009-0008-4659-7793 e-mail: akulikov@nntu.ruНижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
*Нижний Новгород, Россия***В.П. Хранилов**ORCID: 0000-0003-1317-5320 e-mail: hranilov@nntu.ruНижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Нижний Новгород, Россия

Предложено решение задачи идентификации одно- и двумерных законов распределения характеристик стохастических структур с фрактальными свойствами. Показано, что если задана матрица данных (измеренные двумерные выборки) топологических параметров структур, то стохастический анализ может опираться на идентифицированную систему одномерных условных плотностей распределения и конструктивно определять систему двух случайных величин. При этом фрактальная геометрия мембранных топологий эффективно исследуется на основе предложенного двумерного R/S-анализа. На основе методов стохастического и фрактального анализа впервые выявлена анизотропия топологических характеристик гибридных газоселективных мембран, что позволило ввести и обосновать математический формализм и представление о двумерной фрактальной размерности Хаусдорфа-Безиковича с двумя «ортогональными» компонентами.

Ключевые слова: идентификация, фрактальная геометрия и фрактальный анализ, двумерная плотность распределения и двумерный R/S-анализ стохастических данных, размерность Хаусдорфа-Безиковича.

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Куликов, В.Б. Анализ фрактальных параметров поверхностных топологий микро-структур со стохастическими свойствами / В.Б. Куликов, А.Б. Куликов, В.П. Хранилов // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2024. № 4. С. 17-26. EDN: MXHDMW

ANALYSIS OF FRACTAL PARAMETERS OF SURFACE TOPOLOGIES OF MICROSTRUCTURES WITH STOCHASTIC PROPERTIES

V.B. KulikovORCID: 0000-0003-2825-7476 e-mail: vb.kulikov@yandex.ruNizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev
*Nizhny Novgorod, Russia***A.B. Kulikov**ORCID: 0009-0008-4659-7793 e-mail: akulikov@nntu.ruNizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev
Nizhny Novgorod, Russia

V.P. Khranilov

ORCID: **0000-0003-1317-5320** e-mail: **hranilov@nntu.ru**

Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev

Nizhny Novgorod, Russia

Abstract. The paper proposed a solution to the problem of identifying one- and two-dimensional distribution laws of characteristics of stochastic structures with fractal properties. If a data matrix (measured two-dimensional samples) of topological parameters of structures is specified, then stochastic analysis can rely on the identified system of one-dimensional conditional density function and constructively determine a system of two random variables. In this case, the fractal geometry of membrane topologies is effectively studied based on the proposed two-dimensional R/S analysis. The anisotropy of topological characteristics of hybrid gas-selective membranes was revealed for the first time based on stochastic and fractal analysis methods. This made it possible to introduce and substantiate the mathematical formalism and the concept of a two-dimensional Hausdorff-Besicovitch fractal dimension with two «orthogonal» components.

Key words: identification, fractal geometry and fractal analysis, two-dimensional density function and two-dimensional R/S analysis of stochastic data, Hausdorff-Besicovitch dimension.

FOR CITATION: V.B. Kulikov, A.B. Kulikov, V.P. Khranilov. Analysis of fractal parameters of surface topologies of microstructures with stochastic properties. Transactions of NNSTU n.a. R.E. Alekseev. 2024. № 4. Pp. 17-26. EDN: MXHDMW

Введение

Стохастический анализ в сочетании с фрактальной геометрией и фрактальным анализом двумерных стохастических данных востребованы в сложных техно- и биосферах современной науки: материаловедении, системах космического наблюдения, микробиологии бактериальных сообществ, атомной и термоядерной энергетике. Структура и динамика этих систем характеризуется полимодальностью законов распределения параметров и закономерностей. Зачастую изучаемая топология двумерных структур фрактальна (мультифрактальна). Методы идентификации шероховатости поверхностей и фрактальных характеристик изложены, в частности, в [1-4]. Для широкого класса задач идентификации одномерных законов распределения случайных величин разработаны эффективные методы [5]. При восстановлении сложных полимодальных законов в [6] рассмотрены новые способы идентификации плотностей распределения на основе регуляризации. Верификация методов выполнена для технических приложений и биомедицины, включая перинатальную диагностику для получения устойчивых решений [7].

В предлагаемой статье излагаются результаты исследования мембранных структур наноразмерного формата: выполнена идентификация, 3D-визуализация и впервые предложенный двумерный R/S-анализ по Херсту. Показано, что для анализа двумерных стохастических пористых структур и интерпретации их свойств необходимо непараметрическое восстановление условных законов распределения системы двух случайных величин, заданных на фрактальной поверхности и двумерный R/S-анализ (обобщение одномерного варианта по Херсту). Двумерный глубинный профиль мембраны измерялся методом атомно-силовой микроскопии (АСМ), после чего для него были идентифицированы одно- и двумерные полимодальные плотности распределения. Две выборки (по 256 элементов) анизотропных параметров Херста впервые в практике исследования и R/S-анализа доопределены идентифицированными плотностями распределения.

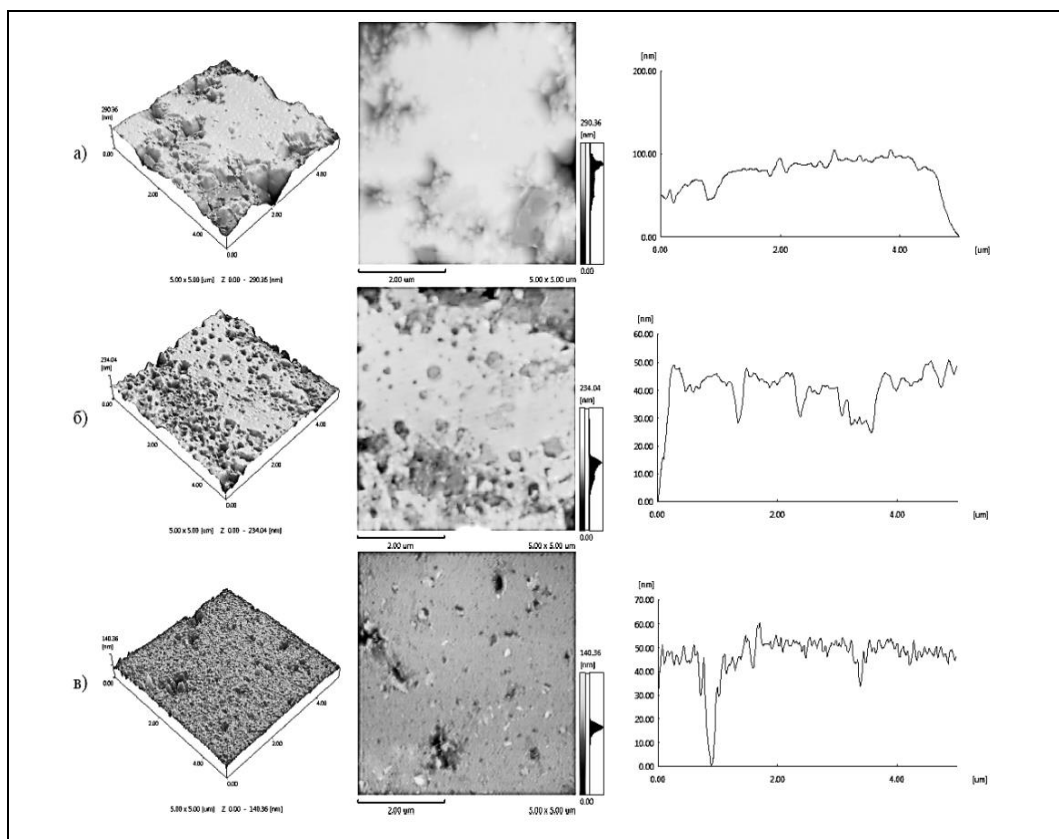
Идентификация и визуализация плотностей распределения двумерных стохастических мембранных структур

Представим краткий обзор технологического аспекта задачи стохастического анализа характеристик мембранных структур. Востребованными наукоемкими технологиями становятся в настоящее время мембранные технологии газоразделения, имеющие важное значение

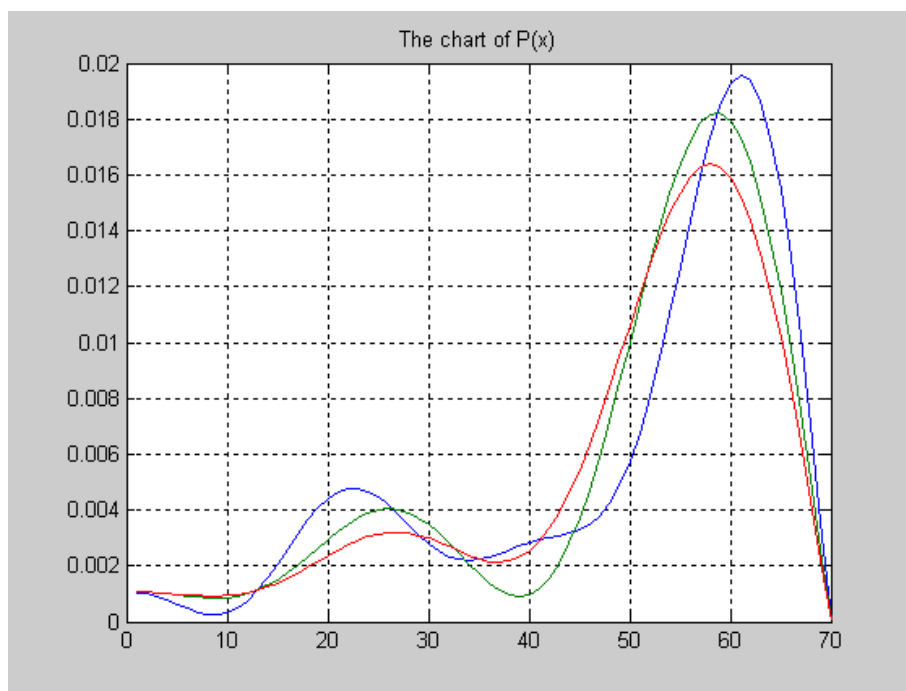
для химической, атомной и многих других отраслей промышленности [8, 9]. При этом новые полимерные мембраны характеризуются высокими значениями механической прочности, избирательности и стойкости к воздействию агрессивных сред. В [10] с этих позиций отмечается перспективность органо-неорганических полимеров блочной структуры. В публикации [11] указывается, что «в этом направлении особую роль играют нано-пористые полимеры, получаемые на основе 2,4-толуиленидиизоцианата и макро-инициаторов – калий-замещенных блок-сополимеров оксидов пропилена и этилена». Для оптимизации концентрации нано-дисперсной фазы в органо-неорганической полимерной мембране и синтеза структур с заранее заданными свойствами по широкому спектру технологических параметров, необходим глубокий анализ исходных материалов мембран, в том числе, контроль стохастических вариаций давления, вязкости, молекулярного веса разделяемых газов. Очень важен также мониторинг процессов загрязнения, деградации топологии и других параметров структур. При исследовании микромембран главенствующую роль играют АСМ-методы, определяющие стохастическую оценку распределения пор (размеры, глубина) на основе измеренных данных [12]. АСМ является «неинвазивной» процедурой, что позволяет изучать мембранные поверхности без предварительной физико-химической обработки. Кроме того, в процессе измерений можно задать бесконтактный режим сканирования топологии микромеханического зонда – кантилевера. В качестве недостатка АСМ можно отметить относительно высокую длительность измерений и требование к исключению вибрационных воздействий на установку.

Настоящая работа является развитием методов исследования, изложенных в [12]. В ходе экспериментов с использованием сканирующего зондового микроскопа были исследованы распределения пор и глубинных профилей полимерных микромембран с различным содержанием полиэдральных октаглицидил-силсесквиоксанов (GI-POSS). Устройство атомно-силовой микроскопии выдает для обработки матрицу данных глубинных профилей структуры размером 256×256 пикселей. Таким образом, изучаемые структуры описываются двумерными выборками, по которым восстанавливается система одномерных плотностей распределения, образующая 3D-поверхность. Ниже будет показано, что дополнение стохастических методов исследования фрактальным анализом представляется перспективным направлением в изучении структур и процессов с самоподобными и хаотическими свойствами.

На рис. 1А приведен снимок топологии и графики распределения глубин пор мембран на центральной линии структур. Мембраны имеют размеры 5 на 5 мкм. Измеренные параметры зависят от температуры разделяемых газов, молекулярного веса и давления, размера пор, фрактальной размерности, характеризующей топологические особенности строения микроструктуры. Глубинные профили мембран по измеренным выборкам идентифицируются разработанными методами как одномерные полимодальные распределения (рис. 1Б). Для идентификации распределений использован созданный авторами комплекс программ в системе MATLAB. Как видно, одномерные плотности распределения глубин пор – полимодальны с максимальным количеством высших мод до 4-5. Полимодальность отражает фрактальность характеристик мембран, что обуславливает сложные связи механических, диффузионных и других химических свойств изучаемых мембран [7]. Рис. 2А дополняет рис. 1 аналогичным изображением для значительных концентраций ПОСС (в 1 масс. %, 2 масс. % и 5 масс. %) и иллюстрирует 3D-график глубинного профиля периодической эталонной мембранной структуры с матрицей данных 512×512 пикселей. Эта мембрана характеризуется бимодальными плотностями распределения глубинного профиля в сечениях вдоль оси X.



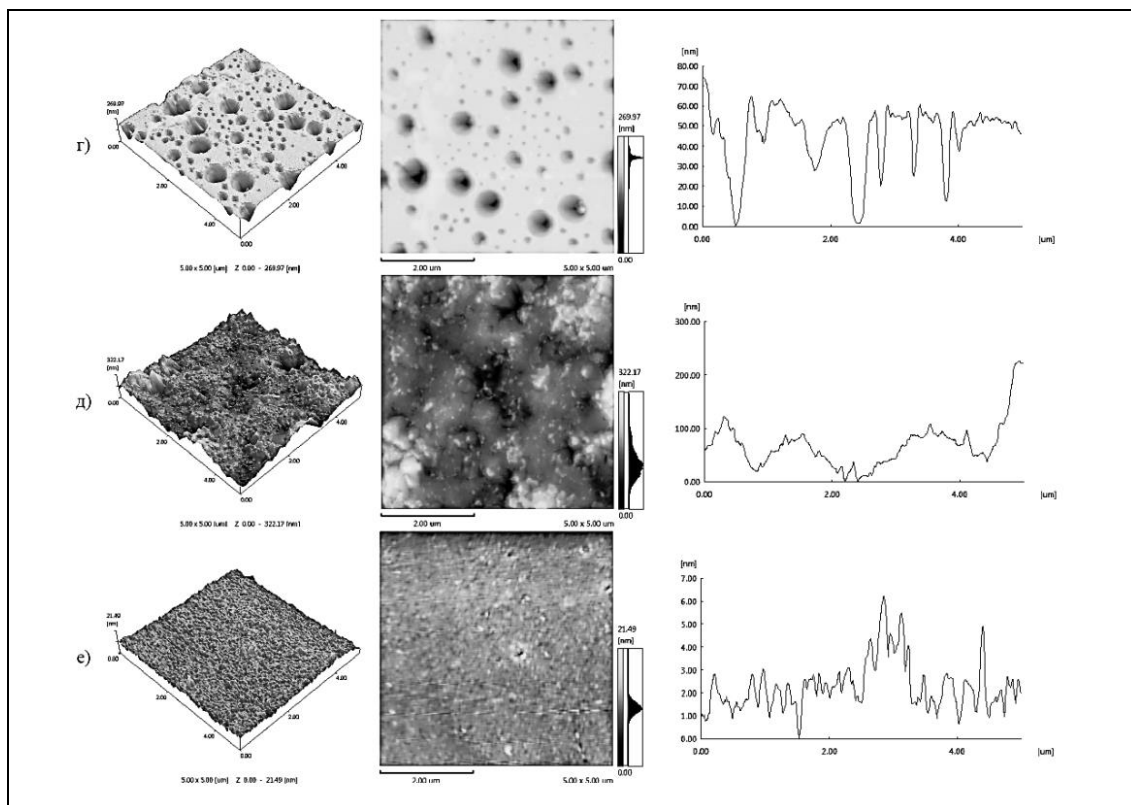
A)



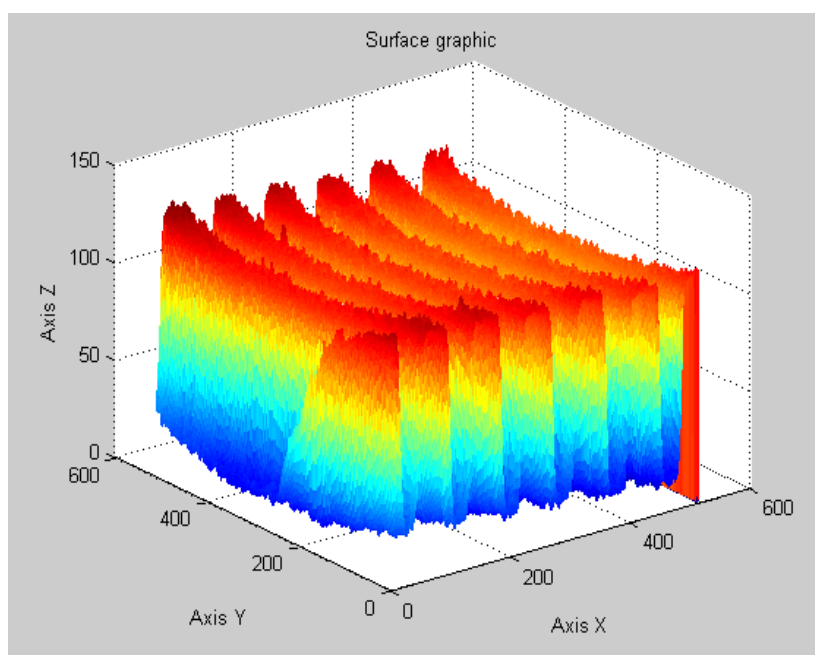
Б)

Рис. 1. А) Снимки атомно-силовой микроскопии топологий [12] и графики глубинного профиля мембран для низких концентраций POSS (масс. %). Б) Законы распределения глубин пор для первых трех выбранных сечений мембраны

Fig. 1. A) Atomic-force microscopy images of membrane topologies [12] and depth profile graphs of membrane for low POSS concentrations (wt.%). Б) Pore depth distribution laws for the first three selected membrane sections



А)



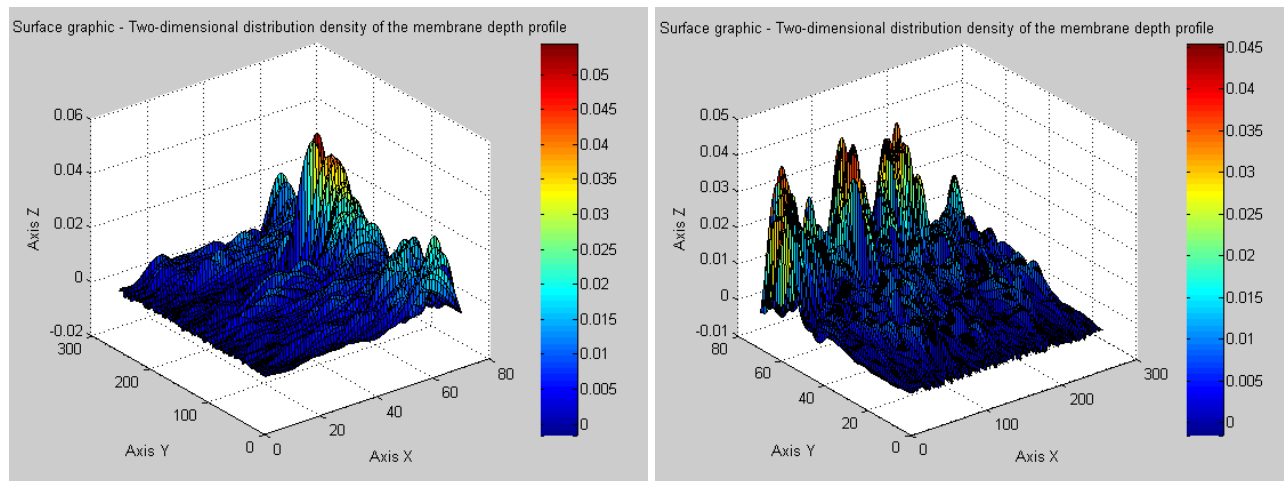
Б)

Рис. 2. А) Снимки атомно-силовой микроскопии топологий [12] и графики глубинного профиля мембран для значительных концентраций POSS (масс. %).

Б) Двумерное изображение периодической эталонной мембраны с матрицей данных 512×512 пикселей

Fig. 2. A) Atomic-force microscopy images of membrane topologies [12] and depth profile graphs of membrane for significant POSS concentrations (wt.%).
 B) Two-dimensional image of a periodic reference membrane with a 512×512 pixel data matrix

На рис. 3А изображен массив одномерных плотностей распределения глубин пор мембраны по оси X при различных значениях по оси Y . Фактически это двумерная система одномерных плотностей распределения, при этом каждая функция плотности рассчитывается за несколько долей секунд в 70 координатах X при выбранном значении Y . На рис. 3Б показана аналогичная система плотностей по оси Y (по X – конкретная координата).



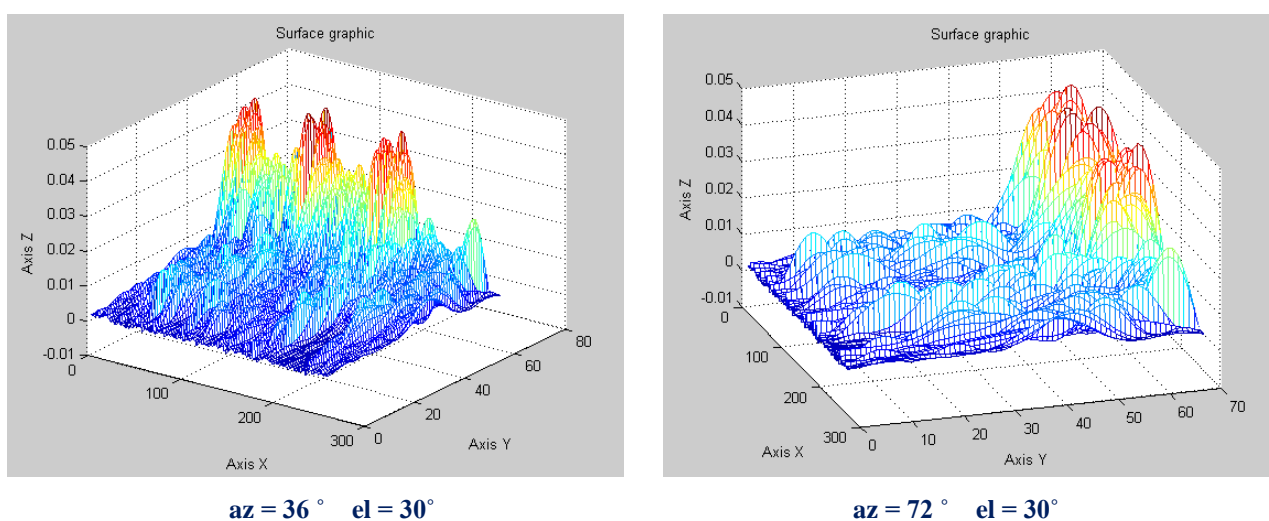
А)

Б)

Рис. 3. Идентифицированные двумерные плотности распределения глубинного профиля мембраны вдоль осей X (Y)

Fig. 3. Identified two-dimensional density functions of the membrane depth profile along the X (Y) axes

Восстановление параметров двумерных стохастических зависимостей в конечном итоге требует высококачественной визуализации графических фигур. Так, 3D-график «двумерной» плотности распределения удобно рассматривать в полярной системе координат. Рис. 4 показывает $p(X, Y)$ в режиме поворота, что повышает наглядность деталей в распределениях структуры, имеющих полимодальный характер, различный по направлениям X и Y .



$az = 36^\circ \quad el = 30^\circ$

$az = 72^\circ \quad el = 30^\circ$

Рис. 4. Вращение двумерной плотности распределения для мембраны по оси Y (az и el - азимутальный и полярный углы в градусах)

Fig. 4. Rotation of the two-dimensional density function for the membrane along the Y axis (az and el are the azimuthal and polar angles in degrees)

Таким образом, результаты восстановления двумерного распределения по ортогональным направлениям демонстрируют анизотропность функции плотности для глубин пор. Эта особенность подтверждается в рамках предложенного двумерного R/S -анализа. Двумерный стохастический анализ мембран является более эффективным инструментом исследования, позволяющим выявлять тонкую структуру топологий и влияние технологических факторов при изготовлении мембран.

Очевидно, что предложенный подход востребован при обработке конструкций авиационной и космической техники, в «тонком» экспериментальном анализе технологических и физических процессов в аппаратах, включая термоядерные установки типа ИТЭР, токамак Т-10, TEXTOR [4].

Двумерный R/S -анализ характеристик микроструктур

Полиmodalность законов распределения топологических характеристик мембран органично связана с фрактальным анализом, фрактальной геометрией и методологией исследования закономерностей явлений динамического хаоса [7]. В прикладном аспекте изучение фрактальных поверхностей или самоподобных процессов традиционно опирается на статистический метод, а именно – R/S -анализ [13-15]. Нормированный размах R/S связан с показателем Херста – H [13]. Семейство показателей Херста в 256 сечениях мембраны вдоль осей X и Y показано на рис. 5А. В статье [16] говорится, что «метод нормированного размаха Херста позволяет различить случайный и фрактальный временные ряды, а также давать оценку наличия или отсутствия долговременной памяти процесса. Исследуемый одномерный ряд обладает «кратковременной памятью» при $H < 0.5$, если $H > 0.5$ – ряд соответствует фрактальному броуновскому движению (блужданию) с персистентными свойствами. Коэффициенты H в основном выше уровня 0.5 и ниже уровня 1 (фрактальность геометрии поверхности изучаемой мембраны). На некоторых одномерных плотностях показатели H превышают уровень 1».

Авторы полагают, что впервые выявленные «всплески» коэффициентов H для 2D-мембранной структуры аналогичны распределениям с «тяжелыми хвостами» (рис. 5Б).

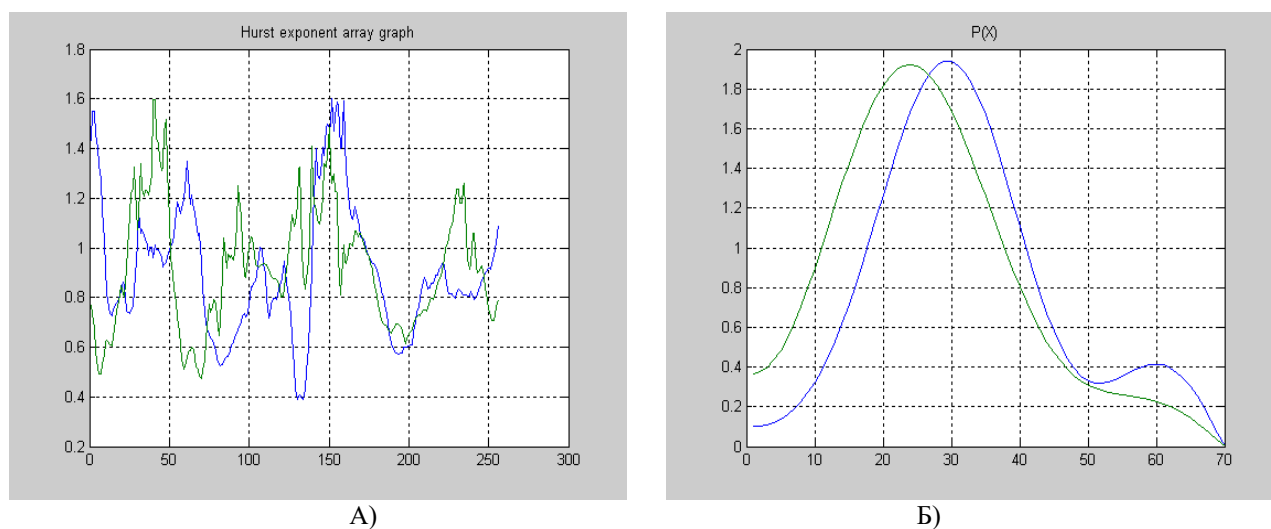


Рис. 5. А) Коэффициенты Херста H глубин пор мембраны вдоль осей X и Y (синий и зеленый цвета соответственно).

Б) Восстановленные одномерные плотности распределения для H

Fig. 5. А) Hurst coefficients H of membrane pore depths along the X and Y axes (blue and green colors, respectively).

Б) Reconstructed one-dimensional density functions for H

Отмеченная особенность отражает сингулярность фрактально-вероятностных свойств конкретной мембранной топологии. Имеет место экстремальная (резко выраженная) глубинная разнородность профилей. R/S -анализ подтверждает фрактальность геометрии и анизотропии свойств пористых поверхностей мембранных структур. Для верификации полученных результатов приведем ниже выдержки из работы [4] ученых НИЦ «Курчатовский институт» по исследованию аморфных пленок на конструкциях из графита в термоядерных установках (ТУ).

«Особенностью условий высокотемпературной плазмы в ТУ является нетривиальная функция распределения турбулентных пульсаций – так называемая негауссовская статистика и перемежаемость» [4, с. 39]. «Пристеночная турбулентность плазмы в токамаке характеризуется такими свойствами, как перемежаемость, негауссова статистика, перенос типа супердиффузии с наличием всплесков амплитуды потоков. Плазма у стенки в токамаке является стохастической системой с динамикой типа Леви с пролетными траекториями» [4, с. 46]. «Фрактальный рост есть следствие сильной неравновесности в системе плазма – стенка и имеет универсальный характер. В токамаке сильная турбулентность пристеночной плазмы может возбуждать флуктуации в осаждаемом потоке, что приводит к фрактальному росту пленок с размерами от нано- до микрометров» [4, с. 34-35]. Для иллюстрации универсальности и значимости разрабатываемого авторами подхода к анализу стохастических и фрактальных структур на рис. 6 показаны поверхности углеводородной пленки токамака Т-10 в процессе экспериментальной эксплуатации [4].

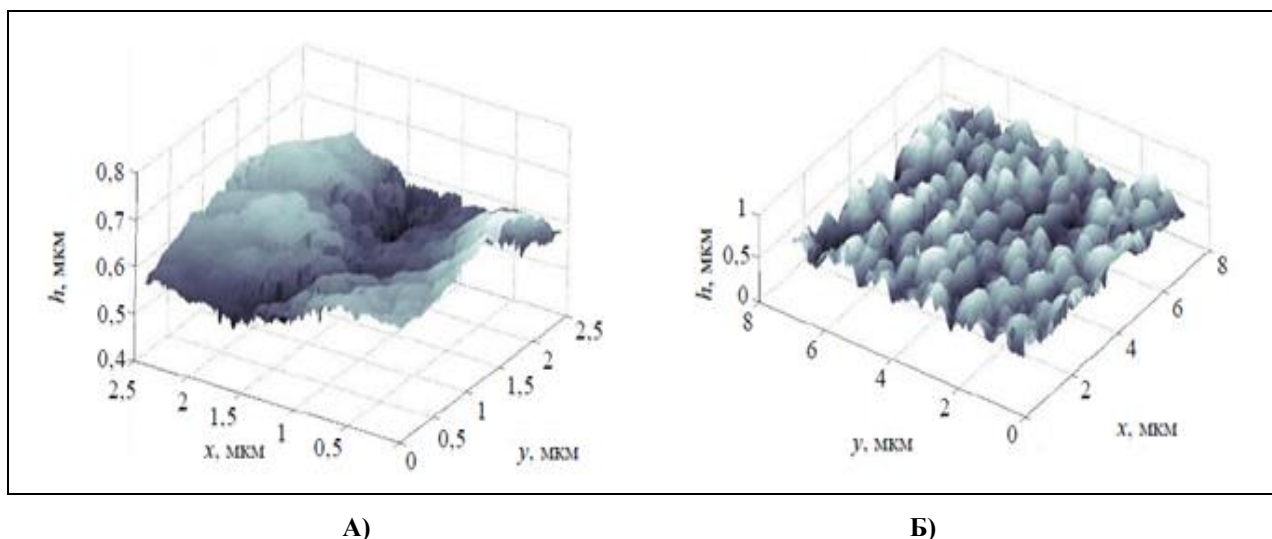


Рис. 6. 3D-структуры углеводородной пленки в установке токамака Т-10 [4]

Fig. 6. 3D structures of hydrocarbon film in the T-10 tokamak installation [4]

Изображение получено с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Отмечается, что «форму и иерархическую структуру таких пленок можно классифицировать в рамках фрактальной геометрии, а стохастическая топография поверхности пленок характеризуется показателем Херста, равным 0,68-85, указывая на нетривиальное самоподобие структуры. Фрактальность (пористость) осажденных пленок следует рассматривать как важный вопрос накопления трития в термоядерном реакторе, в том числе, ИТЭР» [4, с. 37]. Таким образом, фрактальное распределение глубинных профилей мембран (пространственная стохастическая характеристика) имеет аналогию со стохастическим движением типа Леви потока частиц в турбулентных полях, определяющих фрактальные свойства микроструктур на этапе технологического синтеза или эксплуатации.

В предшествующей публикации авторов отмечается впервые полученный научный результат: «фрактальный анализ мембран позволяют ввести в рассмотрение для поверх-

ностей двумерную фрактальную размерность Хаусдорфа-Безиковича $D = 3 - H$, которая различается по направлениям X и Y . Фрактальная размерность по направлению X определяется как $D_x = 3 - M\{H_x\}$, где $M\{H_x\}$ – среднее значение показателя Херста по 256 линиям сканирования глубинных профилей. Значение $M\{H_x\} = 0.904$, $D_x = 2.096$. Аналогично вдоль оси Y мембраны компонента $D_y = 3 - M\{H_y\} = 3 - 0.919 = 2.081$ » [16, с. 101-106]. Очевидно, что шероховатость поверхности углеводородной пленки, осажденной на конструкциях токамака Т-10 в процессе эксплуатации, также можно изучать на основе введенных двумерных фрактальных размерностей.

Отметим, что двумерная размерность D , в отличие от традиционного скалярного коэффициента, является вектором, компоненты которого имеют различные плотности распределения (рис. 5Б). Плотности распределения для H в первом приближении можно аппроксимировать линейными (одномодалными) плотностями и корректно ввести двумерную фрактальную размерность Хаусдорфа-Безиковича $D_{x,y} = 3 - M\{H_{x,y}\}$.

Выводы

Исследование стохастических мембранных микроструктур должно опираться на:

- идентифицированную систему одномерных условных плотностей распределения и конструктивно определять систему двух случайных величин;
- обоснованный математический формализм и представление о двумерной фрактальной размерности Хаусдорфа-Безиковича с двумя «ортогональными» компонентами.

Библиографический список

1. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. Ежегодник. Вып. 12. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – 908 с.
2. **Потапов, А.А.** Фракталы и хаос как основа новых прорывных технологий в современных радиосистемах / Кроновер Р. Фракталы и хаос в динамических системах. Пер. с англ. – М.: Техносфера, 2006. С. 374-479.
3. **Торохов, Н.А.** Фрактальная геометрия поверхностного потенциала электрохимически осажденных пленок платины и палладия / Н.А. Торохов, В.А. Новиков // Физика и техника полупроводника. 2009. Т. 43. Вып. 8. С. 1109-1115.
4. **Будаев, В.П.** Фрактальная нано- и микроструктура осаждённых пленок в термоядерных установках / В.П. Будаев, Л.Н. Химченко // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез, Вып. 3. 2008. С. 34-61.
5. **Тихонов, А.Н.** Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1986. – 288 с.
6. **Куликов, В.Б.** Восстановление полимодалных плотностей вероятности по экспериментальным данным в структурах со стохастическими свойствами // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2014. № 1(1). С. 248-256.
7. **Kulikov, V.** The Stochastic and Singular Analysis of Fractal Signals in Cyber-Physical Systems of Biomedicine / V. Kulikov, A. Kulikov, A. Ignatyev // Society 5.0: Cyberspace for Advanced Human-Centered Society. Studies in Systems, Decision and Control. Cham: Springer, 2021. Vol. 333. p. 239-252.
8. **Vorotyntsev, V.M.** High purification of gases by diffusion through polymer membranes / V.M. Vorotyntsev // Petroleum Chemistry. 2015. Vol. 55. № 4. P. 259-275.
9. **Ямпольский, Ю.П.** Гибридные газоразделительные полимерные мембраны с добавками наночастиц / Ю.П. Ямпольский, Л.Э. Странникова, Н.А. Белов // Мембраны и мембранные технологии. 2014. Т. 4. № 4. С. 231-246.
10. **Kickelbick, G.** Concepts for the incorporation of inorganic building blocks into organic polymers on a nanoscale / G. Kickelbick // Progress in Polymer Science. 2003. Vol. 28. № 1. P. 83-114.
11. **Сазанова, Т.С.** Изучение гибридных полимерных мембран с помощью атомно-силовой микроскопии: топографический анализ поверхности и оценка распределения размеров пор / Т.С. Сазанова, И.В. Воротынцев, В.Б. Куликов, И.М. Давлетбаева, И.И. Зарипов // Мембраны и мембранные технологии. 2016. Т. 6 № 2. С. 166-175.

12. **Sazanova, T.S.** An Atomic Force Microscopy Study of Hybrid Polymeric Membranes: Surface Topographical Analysis and Estimation of Pore Size Distribution / T.S. Sazanova, I.V. Vorotyntsev, V.B. Kulikov, I.M. Davletbaeva, I.I. Zaripov // Petroleum Chemistry. 2016. Vol. 56. N. 5. P. 427-435. Pleiades Publishing, Ltd.
13. **Херст, Г.Э.** Долгосрочная вместимость водохранилищ // Труды Американского общества гражданских инженеров. 1951. Т. 116. С. 770-808.
14. **Петерс, Э.** Хаос и порядок на рынках капитала. Новый аналитический взгляд на циклы, цены и изменчивость рынка / Э. Петерс. – М.: Мир, 2000. – 333 с.
15. **Федер, Е.** Фракталы / Е. Федер. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
16. **Куликов, В.Б.** Плотности распределения и фрактальная геометрия двумерных характеристик стохастических структур и систем / В.Б. Куликов, А.Б. Куликов, В.П. Хранилов, А.А. Игнатъев // Математические методы в технологиях и технике. 2024. № 6. С. 101-106.

Дата поступления

в редакцию: 17.09.2024

Дата принятия

к публикации: 14.10.2024