

*На правах рукописи*



**Галаев Андрей Борисович**

**ФРАКТАЛЬНО-ВЕЙВЛЕТНЫЕ АЛГОРИТМЫ И КОМПЛЕКС ПРОГРАММ  
КОМПЬЮТЕРНОГО АНАЛИЗА МИКРОФОТОИЗОБРАЖЕНИЙ ТЕКСТУРЫ  
КОМПОЗИЦИОННЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ**

Специальность:

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ  
(технические науки)

|

**Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук**

Москва 2013

Работа выполнена на кафедре прикладной математики Московского государственного машиностроительного университета (МАМИ) и на кафедре логистики и экономической информатики Российского химико-технологического университета им. Д.И.Менделеева

**Научный руководитель:**

доктор физико-математических наук, профессор Бутусов Олег Борисович, заведующий кафедрой прикладной математики Московского государственного машиностроительного университета (МАМИ)

**Научный консультант:**

доктор технических наук, член-корреспондент РАН, профессор Мешалкин Валерий Павлович, заведующий кафедрой Логистики и экономической информатики Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева

**Официальные оппоненты:**

доктор технических наук, профессор Колыбанов Кирилл Юрьевич, профессор кафедры информационных технологий Московского государственного университета тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

доктор технических наук, профессор Софиев Александр Эльхананович, заведующий кафедрой Технической кибернетики и автоматике Московского государственного машиностроительного университета (МАМИ)

**Ведущая организация:**

ФГБУН Институт проблем управления имени В.А. Трапезникова РАН

Защита состоится «19» ноября 2013 года в 11-00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.204.10 при РХТУ им. Д.И. Менделеева по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д. 9, Конференц-зал (ауд.443)

С диссертацией можно ознакомиться в Научно-библиотечном центре РХТУ им. Менделеева

Автореферат разослан «18» октября 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 212.204.10  
д.т.н., профессор



Комиссаров Ю.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Функциональные композиционные наноматериалы (ННМ), или нанокompозиты (ННК), различной текстуры, в настоящее время широко используются в различных сферах современной экономики (промышленность, транспорт, военно-промышленный комплекс, информационные технологии, радиоэлектроника, энергетика, биотехнология, медицина др.). *Текстура* – это внутреннее строение твердого материала, учитывающее не только характер расположения, но и свойства различных его составных частей (зерен, кристаллов и др.), например, горных пород.

При разработке новых ННМ большое значение имеют исследования по определению зависимости физико-химических свойств ННМ от особенностей их текстуры, которую отображают микрофотоизображения (МФИ), полученные с помощью современных приборов микроскопии материалов (оптические, просвечивающие, сканирующие и атомно-силовые микроскопы; рентгеновские томографы). С использованием этих приборов возможно получение разнообразных МФИ исследуемых образцов ННК очень крупного масштаба для очень малоразмерных объектов (вплоть до атомарного) и высокого разрешения (до нескольких мегапикселей), что делает возможным проводить структурно-фазовый анализ этих ННК с большой точностью. Указанные научные исследования весьма актуальны для различных областей науки: материаловедение, химия, химическая технология, физика, электроника, радиотехника и др.

Методология компьютерного анализа МФИ текстуры нанокompозитов основывается прежде всего на фундаментальных трудах отечественных ученых в области наук о материалах и анализа изображений: академиков Н.П. Алёшина, О.А. Банных, А.Л. Бучаченко, Н.А. Ватолина, Е.Н. Каблова, Н.Т. Кузнецова, Л.И. Леонтьева, В.М. Новоторцева, П.Д. Саркисова, Л.А. Смирнова, К.А. Солнцева, Д.Ю. Третьякова, Ю.В. Цветкова, В.Я. Шевченко, а также на научных исследованиях по компьютерному моделированию текстуры материалов и компьютерному анализу различного масштаба фотоизображений, выполненного членами-корреспондентами РАН А.Д. Изотовым, В.П. Мешалкиным, Э.А. Пастуховым и В.А. Соيفером, профессорами О.Б. Бутусовым и А.М. Степановым, кроме того, в исследованиях автора используются результаты научных работ зарубежных ученых С.Н. Chou, L. Hui, R. Kronover, J. Lee, J. Santner, M. Tuscayan, H. Zengyou. Большой вклад в развитие методов компьютерного моделирования текстуры материалов внесли работы А.Ю. Бавриной, А.Ю. Бортникова, И.В. Золотухина, Н.Ю. Ильясовой, А.В. Куприянова, И.Н. Минаевой, А.А. Потапова, В.В. Сергеева и многих других.

Компьютерный анализ МФИ текстуры ННК позволяет определить статистическо-морфометрические, текстурно-кластерные и фрактальные характеристики получаемых МФИ. Морфометрический анализ МФИ позволяет вычислять средние размеры микрообъектов структуры ННК, их количество, величину занимаемой ими площади, т.е. общие геометрические характеристики МФИ. Фрактальный анализ МФИ позволяет определять уникальную характеристику МФИ – фрактальную размерность (ФР), которую можно использовать при изучении свойств лакуарности (меры неоднородности заполнения объектом пространства), самоподобия строения текстуры, а также для прогнозирования областей и направлений роста микрообъектов текстуры вещества (при анализе последовательности МФИ сечений нанокompозитов на различных стадиях процесса их получения). Текстурно-кластерный анализ позволяет выделять и классифицировать на МФИ области с одинаковыми характеристиками мозаики пикселей, в том числе, кластеры микрообъектов.

В настоящее время особый научный интерес представляет разработка специальных методов и алгоритмов компьютерного анализа МФИ текстуры ННК, которые позволяют получать кроме традиционных морфологических характеристик структуры ННК

(распределения микрообъектов по размерам, занимаемой ими площади, их количества, ориентации и др.) такие уникальные специальные характеристики текстуры как фрактальная размерность (ФР), компактность кластеров, перколяционные скелетоны микрообъектов на МФИ и др.

В диссертационной работе поставлена и решена новая научная задача разработки и реализации фрактально-вейвлетных алгоритмов компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры композиционных наноматериалов.

Основные разделы диссертационной работы соответствуют следующим пунктам Перечня критических технологий Российской Федерации: "7. Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий", "11. Технологии диагностики наноматериалов и наноустройств", "17. Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов", а также следующим направлениям развития науки, представленным в Плане фундаментальных исследований Российской Академии Наук на период с 2011 по 2025 год: "5.(б). Разработка обобщенной теории синтеза материалов, объединяющей иерархию структур с их макро-, микро- и наномеханическими свойствами, электрическими, магнитными, сверхпроводящими и другими характеристиками", "4. Создание распределенных вычислительных комплексов нового поколения на основе фундаментальных методов синтеза новых архитектур и алгоритмов их функционирования и управления" и пункту "2.1. Исследование фундаментальных свойств и разработка методов синтеза, в том числе с использованием эффектов самоорганизации, наноструктур, наноматериалов и нанокомпозитов и создание на их основе новых поколений электронных и оптоэлектронных устройств".

**Цель диссертационной работы:** разработка и обоснование компьютерных моделей и фрактально-вейвлетных алгоритмов анализа микрофотоизображений текстуры наноматериалов на основе использования методов морфометрического, фрактального и кластерного анализа, а также разработка комплекса проблемно-ориентированных программ фрактально-вейвлетного анализа микрофотоизображений нанокомпозитов.

Для достижения указанной цели сформулированы и решены следующие основные научные задачи:

1. Аналитический обзор современных методов и алгоритмов компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры наноматериалов.
2. Усовершенствование существующих фрактальных и создание новых кластерно-морфометрических алгоритмов компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры наноматериалов, а также разработка методологии применения этих алгоритмов для установления взаимосвязи между рассчитанными текстурными, морфологическими и фрактальными характеристиками МФИ и физико-химическими свойствами исследуемых НК.
3. Разработка архитектуры и программно-информационного обеспечения комплекса проблемно-ориентированных программ фрактально-вейвлетного анализа микрофотоизображений текстуры нанокомпозитов "FRA\_VA\_T".
4. Практическое применение разработанного комплекса программ "FRA\_VA\_T" для проведения вычислительных экспериментов по анализу МФИ текстуры различных наноматериалов для изучения зависимостей "структура-свойства", а также влияния независимых физических переменных на структуру НК.

**Методы исследования:** методы математической статистики, теории фракталов, компьютерной графики, численные и компьютерные методы анализа изображений и сигналов; принципы модульного и объектно-ориентированного программирования и современные методы визуального компьютерного 2d-моделирования

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Результаты аналитического обзора современных методов и алгоритмов компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры наноматериалов.
2. Логико-статистический алгоритм идентификации сквозных пор в структуре нанокompозитов по последовательности МФИ сечений его образца.
3. Вейвлетно-морфометрический нейросетевой алгоритм анализа МФИ текстуры.
4. Методика применения разработанных фрактально-вейвлетных алгоритмов компьютерного анализа МФИ текстуры для установления взаимосвязи между рассчитанными текстурными, морфологическими и фрактальными характеристиками МФИ и физико-химическими свойствами исследуемых НКК.
5. Архитектура, программно-информационное обеспечение и режимы функционирования комплекса программ фрактально-вейвлетного анализа микрофотоизображений текстуры нанокompозитов "FRA\_VA\_T", реализующего предложенные методы и алгоритмы компьютерного анализа МФИ.
6. Результаты проведённых вычислительных экспериментов с применением комплекса программ "FRA\_VA\_T" для практического анализа МФИ сечений бруска нанокompозита на основе иттрий алюминиевого граната, модифицированного карбидом кремния ( $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ) на различных глубинах среза, а также МФИ алюмосиликатной стеклокерамики при разных температурах в процессе её получения.

**Обоснованность** научных результатов, полученных в диссертационной работе, подтверждается использованием известных научных положений и методов исследования, корректным применением методов теории фракталов, методов дискретного и непрерывного вейвлет-преобразования, методов математической статистики.

**Достоверность** полученных результатов и выводов подтверждается проведенными многочисленными вычислительными экспериментами, результаты которых позволяют сделать вывод об адекватности разработанных математических моделей, а также о работоспособности созданных фрактально-вейвлетных алгоритмов и комплекса программ "FRA\_VA\_T".

**Научная новизна** основных результатов работы состоит в следующем:

1. Разработан логико-статистический алгоритм идентификации открытых пор в структуре нанокompозитов по последовательности послойных МФИ композиционных наноматериалов, отличающийся применением булевских, морфологических и статистических операций над последовательностью бинаризованных микрофотоизображений сечений образца наноматериала, что позволяет рассчитывать коэффициент сквозной пористости наноматериала по последовательности МФИ без применения трудоёмких физических методов порометрии.
2. Предложены модифицированный клеточный алгоритм, а также алгоритм расчёта фрактальной размерности по показателям самоподобия спектров мощности МФИ, отличающиеся возможностью визуализации различных статистических характеристик ФР и визуализацией изображений рассчитанных изолиний ФР, что позволяет не только оценить точность фрактальной размерности исследуемых МФИ с помощью различных алгоритмов, но и визуально наблюдать характер лакунарности в конкретных областях МФИ.
3. Обоснованно применение в качестве новой характеристики анализа последовательностей МФИ функции первой производной для кривой фрактальной размерности при изменении температуры, времени или других физических переменных, в зависимости от поставленной задачи исследования, с помощью которой можно характеризовать мгновенное изменение текстуры МФИ от изменяющейся независимой физической переменной.
4. Разработан вейвлетно-морфологический нейросетевой алгоритм анализа текстуры МФИ наноматериалов, отличающийся применением самоорганизующихся искусственных нейронных сетей Кохонена для кластеризации исходных и промежуточных изображений,

что позволяет автоматизировано решать задачу оптимальной классификации групп пикселей при анализе МФИ наноматериалов для распознавания наличия в текстуре нанокompозита различных физико-химических фаз или других микрокомпонентов исследуемого вещества.

5. Разработаны архитектура, программно-информационное обеспечение и режимы функционирования комплекса программ "FRA\_VA\_T", который можно практически применять для анализа МФИ наноматериалов.

**Научная значимость работы.** Разработанные методы и алгоритмы фрактально-вейвлетного анализа текстуры МФИ вносят определенный вклад в развитие теории компьютерного анализа и компьютерного моделирования МФИ текстуры композиционных материалов, что имеет существенное значение для научно-обоснованного создания наноматериалов и проектирования различных специальных функциональных конструкций и технических изделий из высокоэффективных нанокompозитов с учётом полного жизненного цикла этих объектов.

**Практическая значимость работы.**

1. Разработанный и протестированный комплекс программ «FRA\_VA\_T» может быть использован как современный инструмент компьютерного анализа текстуры ННК при исследовании физико-химических процессов получения ННК и изучении зависимостей "структура-свойства" ННК.
2. С использованием предложенных фрактально-вейвлетных алгоритмов и комплекса программ «FRA\_VA\_T» решены следующие практические задачи исследования текстуры ННК на основе иттрий алюминиевого граната, модифицированного карбидом кремния ( $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ):
  - компьютерный анализ МФИ текстуры  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ;
  - расчёт морфологических параметров строения поверхности  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ;
  - расчёт процентного соотношения открытых пор в структуре  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ;
  - вейвлетно-морфометрический анализ пористой структуры образца по МФИ рентгеновского томографа;
  - расчёт фрактальной размерности, и определение самоподобия на разных пространственных масштабах, позволивший доказать, что структура этого ННК фрактальна;
3. С использованием предложенных фрактально-вейвлетных алгоритмов и комплекса программ «FRA\_VA\_T» проведён компьютерный анализ МФИ текстуры алюмосиликатной стеклокерамики (АЛСК) в процессе её получения; определено влияние независимой переменной (температуры) на характеристики текстуры МФИ образующейся АЛСК (размеры, количество, площадь объектов – флуктуационные образования лквирующей фазы нанокompозита); на основе анализа и построенных перколяционных скелетонov для микрофотоизображений АЛСК установлена температура процесса образования АЛСК, при которой процесс лквиации в образце происходит наиболее быстро.

**Реализация результатов работы.**

Разработанный комплекс программ «FRA\_VA\_T» применён для анализа микрофотоизображений нанокompозитов, полученных в ИОНХ имени Н.С. Курнакова РАН в лаборатории химии лёгких элементов и кластеров (зав. лабораторий академик Н.Т. Кузнецов) и в РХТУ имени Д.И. Менделеева на кафедре химической технологии стекла и ситаллов (зав. кафедрой академик П.Д. Саркисов).

**Апробация работы.** Основные научные и практические результаты диссертации неоднократно докладывались и обсуждались на XXV Международной Чугаевкой конференции по координационной химии и II Молодежной конференции-школе «Физико-химические методы в химии координационных соединений», Суздаль, 2011; на XIX

Менделеевском съезде по общей и прикладной химии, Волгоград, 2011; на II Всероссийской конференции молодых специалистов «Логистика ресурсоэнергосбережения, технологическая инноватика и автоматизированное проектирование предприятий в нефтегазохимическом комплексе» («ЛогТехИнРЭС-2012»); на X Курнаковском совещании по физико-химическому анализу, Самара, 2013, а также на научных семинарах в РХТУ им. Д.И.Менделеева и в ИОНХ им. Н.С. Курнакова.

**Публикации.** Основные результаты диссертационной работы отражены в 11 публикациях, в том числе в 5 статьях в изданиях, рекомендованных ВАК. Получены свидетельства о государственной регистрации двух программ для ЭВМ, являющихся модулями разработанного комплекса программ «FRA\_VA\_T».

### Оглавление диссертации.

#### **Введение**

#### **Глава 1. Современное состояние научных исследований по компьютерному анализу микрофотоизображений текстуры наноматериалов**

- 1.1 Краткая характеристика современных инструментальных методов и приборов получения микрофотоизображений наноматериалов.
- 1.2 Микрофотоизображения наноматериалов как объект математического и компьютерного моделирования
- 1.3 Влияние кластерных микрообразований в текстуре наноматериалов на их физико-химические свойства
- 1.4 Общая характеристика современных алгоритмов анализа функциональных свойств и текстуры наноматериалов
- 1.5 Обоснование актуальности, цели и задачи диссертационной работы

#### **Глава 2. Разработка фрактально-вейвлетных алгоритмов анализа микрофотоизображений текстуры композиционных наноматериалов**

- 2.1 Логико-статистический алгоритм идентификации открытых пор в структуре нанокompозита
- 2.2 Анализ эффективности и модификация существующих алгоритмов расчета фрактальной размерности микрофотоизображений
  - 2.2.1 Модифицированный клеточный алгоритм расчёта фрактальной размерности микрофотоизображений текстуры нанокompозитов
  - 2.2.2 Модифицированный алгоритм расчёта фрактальной размерности по показателям самоподобия спектров мощности микрофотоизображений текстуры нанокompозитов
- 2.3 Вейвлетно-морфометрический нейросетевой алгоритм анализа текстуры микрофотоизображений
- 2.4 Выводы

#### **Глава 3. Разработка комплекса проблемно-ориентированных программ фрактально-вейвлетного анализа микрофотоизображений нанокompозитов "FRA\_VA\_T"**

- 3.1 Архитектура, назначение и режимы функционирования комплекса программ "FRA\_VA\_T"
- 3.2 Программа первичного анализа яркости микрофотоизображений нанокompозитов
- 3.3 Программа расчета фрактальных размерностей микрофотоизображений кластерной структуры нанокompозитов
- 3.4 Программа кластерно-морфометрического анализа микрофотоизображений
- 3.5 Вспомогательная программа расчета зависимостей "текстура-свойство"
- 3.6 Информационное обеспечение комплекса программ
- 3.7 Выводы

#### **Глава 4. Практические результаты компьютерного анализа текстуры и свойств неорганических композиционных наноматериалов**

- 4.1 Методика и результаты компьютерного анализа текстуры композиционного материала на основе иттрий алюминиевого граната, модифицированного карбидом кремния по микрофотоизображениям рентгеновского томографа
- 4.2 Методика и результаты компьютерного анализа физико-химических процессов получения алюмосиликатной стеклокерамики
- 4.3 Методика и результаты вейвлетно-морфометрического анализа микрофотоизображений пористой структуры нанокompозита карбидом кремния по микрофотоизображениям рентгеновского томографа
- 4.4 Выводы

## **5. Заключение**

## **6. Глоссарий основных терминов и понятий**

## **7. Список основных аббревиатур**

## **8. Список литературы**

### **ПРИЛОЖЕНИЯ**

- П1. Распечатка основных программных модулей комплекса проблемно-ориентированных программ "FRA\_VA\_T"
- П1.1. Модули расчёта фрактальных размерностей микрофотоизображений наноматериалов
- П1.2. Модуль кластерно-морфометрического анализа микрофотоизображений наноматериалов
- П2. Справки о практическом использовании результатов диссертационной работы
- П3. Копии свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ

### **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обосновывается актуальность научных исследований и кратко излагается современное состояние науки в области компьютерного анализа МФИ композиционных наноматериалов. Формулируется цель и задачи диссертационной работы; излагается научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

**В первой главе** **«Современное состояние научных исследований по компьютерному анализу микрофотоизображений текстуры композиционных наноматериалов»** сформулирована математическая и практическая постановка задачи анализа МФИ.

Проведено сравнение функций различных современных инструментальных средств и приборов получения микрофотоизображений наноматериалов.

Рассматриваются различные методы математического и компьютерного моделирования текстуры наноматериалов, её влияния на их физико-химические свойства. Описываются свойства веществ с фрактальным внутренним строением.

Приведен аналитический обзор современных исследований по фрактальному, статистическому и кластерному анализу МФИ текстуры композиционных наноматериалов. Проводится сравнительная оценка современных алгоритмов анализа МФИ текстуры наноматериалов.

**Во второй главе** **«Разработка фрактально-вейвлетных алгоритмов анализа микрофотоизображений текстуры композиционных наноматериалов»** дано математическое обоснование разработанных алгоритмов и процедур. Изложены основные этапы предложенного логико-статистического алгоритма идентификации пор по последовательности послойных МФИ текстуры НК, сущность которого состоит в применении булевой операции конъюнкции к бинарным матрицам, составленным для "соседних" в последовательности МФИ и некоторых морфологических операциях над ними, после чего получают результирующие МФИ только с выделенными на них открытыми порами. Кратко изложены традиционные алгоритмы оценки фрактальной размерности текстуры нанокompозитов.

Одним из наиболее эффективных и широко известных алгоритмов является



"Клеточный" (Box-counting) алгоритм определения фрактальной размерности. Автором предложен модифицированный клеточный алгоритм, при использовании которого предварительно бинаризованное МФИ покрывается расчетной сеткой и вычисляется количество ячеек сетки, содержащих бинарные точки. Формула расчета фрактальной размерности имеет следующий вид:

$$D = -\lim_{a \rightarrow 0} \frac{\log_2 N(a)}{\log_2 a}, \quad (1)$$

где  $N(a)$  – количество квадратов, покрывающих бинарные точки,  $a$  – длина стороны квадрата. Начальное значение длины стороны квадрата-ячейки выбирается как степень числа  $1/2$ , например  $a = \left(\frac{1}{2}\right)^8$ . Тогда  $\log_2 \frac{1}{2^8} = -8$  и в соответствии с формулой (1) фрактальная размерность будет положительной.

При уменьшении размера ячеек расчетной сетки их количество необходимое для покрытия объектов на МФИ растет. При этом отношение логарифмов стремится к постоянной величине, так что в большинстве случаев предел для функции (1) существует. Этот предел называется фрактальной размерностью (ФР). Более того, это отношение (1) остается почти постоянным практически для всех конечных значений параметра  $a$ , так что

члены последовательности  $\left\{ \frac{\log_2 N(a_k)}{\log_2 a_k} \right\}$ , где  $k$  – номер членов последовательности,

имеют почти одинаковую величину, которая и является величиной ФР по Минковскому, для вычисления которой члены последовательности необходимо представить в виде точек на графике в координатах  $y=f(x)$ , где  $y = \log_2 N(a)$ ,  $x = \log_2 a$ . Далее следует вычислить величину ФР как наклон графика по формуле линейной регрессии:

$$D = \frac{n \sum_i (x_i y_i) - \sum_i x_i \cdot \sum_i y_i}{n \sum_i x_i^2 - \left( \sum_i x_i \right)^2}, \quad (2)$$

где  $i$  – номер пикселя для светового изображения линейного объекта на МФИ.

Для анализа случайных фракталов, как правило, используют другой алгоритм расчёта, который определяет показатели самоподобия спектров мощности. Для одномерных линейных объектов формула для расчета показателей самоподобия имеет следующий вид:

$$P(k) = \frac{C}{|k|^d}, \quad (3)$$

где  $P(k)$  – спектр мощности,  $d$  – показатель самоподобия,  $C$  – произвольная постоянная.

Формула (3), обобщенная для прямого расчета показателя самоподобия исходного не бинаризованного двухмерного изображения, имеет следующий вид:

$$P(k_1, k_2) = \frac{C}{|k_1^2 + k_2^2|^{d/2}}, \quad (4)$$

где  $P(k_1, k_2)$  – двухмерный спектр мощности,  $d$  – показатель самоподобия,  $C$  – произвольная постоянная.

Для расчета спектра мощности световых пикселей на МФИ может быть использовано

быстрое дискретное преобразование Фурье, с помощью которого спектр мощности рассчитывается по следующей формуле:

$$P_k = \frac{1}{n} F_k \cdot F_k^*, \quad (5)$$

где  $F_k$  – спектр быстрого дискретного преобразования Фурье линейного объекта,  $n$  – количество пикселей, составляющих линейный объект.

Спектр мощности случайного фрактала должен удовлетворять формуле (3), логарифмируя которую получим уравнение для расчета величины ФР:

$$\ln P_i = A - d \cdot \ln k_i, \quad (6)$$

где  $i$  – номер пикселя линейного объекта.

Формула (6) – это уравнение прямой линии в логарифмических координатах. Используя известные формулы линейной регрессии, получим следующее выражение для расчета ФР:

$$D = 2 - 0,5 \frac{\sum \ln k_i \cdot \sum \ln P_i - n \sum (\ln k_i \cdot \ln P_i)}{n \sum (\ln k_i)^2 - (\sum \ln k_i)^2}, \quad (7)$$

где  $n$  – количество пикселей линейного объекта.

Изложена сущность предложенного комплексного вейвлетно-морфометрического нейросетевого (ВМНС) алгоритма, который позволяет решать три следующие задачи: использовать текстурные показатели для определения числа классов объектов, в которые группируются пиксели изображения (т.е. классифицировать их по форме); выделять объекты каждого класса и представить их в виде групп пикселей на бинарных изображениях; использовать специальную систему морфометрических показателей, для расчета количественных статистических характеристик объектов каждого класса. ВМНС-алгоритм состоит из трех этапов: 1. Вейвлетно-текстурный анализ. 2. Кластерный анализ. 3. Морфометрический анализ.

Рассмотрим основные этапы и шаги алгоритма. Первый этап: 1.1. Осуществление процедуры дискретного вейвлет-преобразования исходного микрофотоизображения. Эта процедура получила название бинарной вейвлет-декомпозиции исходного МФИ. При выполнении дискретного вейвлет-преобразования исходное двумерное МФИ представляется в виде одномерных сигналов, для выделения которых могут быть использованы различные направления на плоскости (горизонтальное (строки), вертикальное (столбцы) и диагональное направление). Таким образом, исходное МФИ декомпозируется на четыре компоненты: одна аппроксимационная и три детализационных компоненты. При этом каждая точка изображения может быть представлена в виде четырехмерного вектора яркостей пикселей.

$$\begin{cases} A(i, j) = [H_x[H_y I]](i, j) \\ V(i, j) = [H_x[G_y I]](i, j) \\ H(i, j) = [G_x[H_y I]](i, j) \\ D(i, j) = [G_x[G_y I]](i, j) \end{cases}, \quad (8)$$

где  $I(i, j)$  – исходная матрица пикселей МФИ;  $A(i, j), V(i, j), H(i, j), D(i, j)$  – матрицы вейвлет-декомпозиции (соответственно аппроксимационная и вертикальная, горизонтальная и диагональная детализационные компоненты);  $H_x$  и  $H_y$  – операторы вейвлет-преобразований, выделяющие низкие частоты (аппроксимационные компоненты) по строкам и столбцам исходной матрицы;  $G_x, G_y$  – операторы вейвлет-преобразований, выделяющие высокочастотные

(детализационные) компоненты исходного изображения соответственно по строкам и столбцам исходной матрицы;  $i, j$  – координаты пикселя.

1.2. Вычисление текстурных показателей МФИ. В настоящее время наиболее эффективным показателем текстурной классификации объектов изображения является показатель "энергия". Для преобразования матриц  $A(i, j), V(i, j), H(i, j)$  и  $D(i, j)$  в матрицы текстурного показателя "энергия" использована процедура скользящего окна, которая рассчитывает текстурный показатель как сумму показателей для всех пикселей окна, записываемую далее в центральный пиксель. В результате применения этой процедуры к матрицам  $A(i, j), V(i, j), H(i, j)$  и  $D(i, j)$  создаются четыре текстурные энергетические матрицы:  $E_A(i, j)$  – аппроксимационного компонента;  $E_V(i, j)$  – детализационного вертикального компонента;  $E_H(i, j)$  – детализационного горизонтального компонента;  $E_D(i, j)$  – детализационного диагонального компонента. Расчет каждого из значений показателей как элементов для этих текстурных энергетических матриц выполняется по следующей формуле:

$$E_i(r, s) = \frac{1}{N} \sum_{j, k \in \Omega} M_i^2(j - r, k - s), \quad (9)$$

где  $M_i(j - r, k - s)$  – матричный элемент аппроксимационного или одного из трех детализационных компонентов вейвлет-декомпозиции;  $j, k$  – координаты пикселей скользящего окна;  $\Omega$  – скользящее окно;  $r, s$  – координаты центрального пикселя скользящего окна;  $N$  – суммарное количество пикселей скользящего окна.

На этапе 2 ВМНС-алгоритма выполняется кластеризация объектов микрофотоизображения с помощью самообучающейся искусственной нейронной сети Кохонена (ИНС-К).

В результате классификации на выходе ИНС-К формируется интегрально-обобщенное однокомпонентное изображение, каждый пиксель которого содержит номер класса, к которому он принадлежит. Процедуру преобразования входного многокомпонентного изображения в однокомпонентное интегрально-обобщенное изображение результатов классификации кластеров можно представить в виде формулы:

$$\begin{aligned} C(i, j) = k : \hat{\mathbf{K}} * \mathbf{E}(i, j) = \Omega_k \\ k = 1..N \end{aligned}, \quad (10)$$

где  $k$  – номер класса (интегрально-обобщенного кластерного нейрона);  $N$  – количество классов;  $C(i, j)$  – матрица результатов классификации;  $\mathbf{E}(i, j)$  – матрица входного четырехкомпонентного изображения;  $\hat{\mathbf{K}}$  – оператор классификации;  $\Omega_k$  – интегрально-обобщенный кластер с номером  $k$ .

Далее однокомпонентное изображение результатов классификации  $C(i, j)$  разделяется на однокомпонентные изображения бинарных кластеров по следующей формуле (кластеры названы бинарными, так как пиксели отображаются только двумя значениями):

$$\begin{aligned} B_k(i, j) = \begin{cases} 0, & C(i, j) = k \\ 1, & C(i, j) \neq k \end{cases}, \\ k = 1..N \end{aligned} \quad (11)$$

где  $B_k(i, j)$  – матрица изображения  $k$ -го бинарного кластера;  
 $C(i, j)$  – матрица результатов классификации.

Третий этап ВМНС алгоритма – вычисление морфометрических показателей.

Для оценки морфометрических характеристик бинарных объектов используются следующие морфометрические показатели: площадь объекта (количество пикселей, составляющих объект), длины максимальной и минимальной осей инерции, ориентация объекта и его эксцентриситет. Для каждого из этих морфометрических показателей рассчитываются средние значения и стандартные отклонения, которые можно рассматривать как интегральные морфометрические показатели кластерной текстуры исходного МФИ.

В третьей главе **«Разработка комплекса проблемно-ориентированных программ фрактально-вейвлетного анализа текстуры микрофотоизображений нанокompозитов»** описывается предложенная автором архитектура, режимы функционирования и назначение комплекса программ «FRA\_VA\_T», реализующего предложенные в работе методы, процедуры и алгоритмы. Общая блок-схема архитектуры пакета представлена на рисунке 1. Комплекс программ реализован на языке Matlab с использованием функций библиотеки среды Image Processing Toolbox на основе применения принципов модульного и объектно-ориентированного программирования.

Программное обеспечение комплекса реализует предложенные автором оригинальные морфологические, фрактально-вейвлетные и кластерно-морфометрические алгоритмы анализа МФИ.

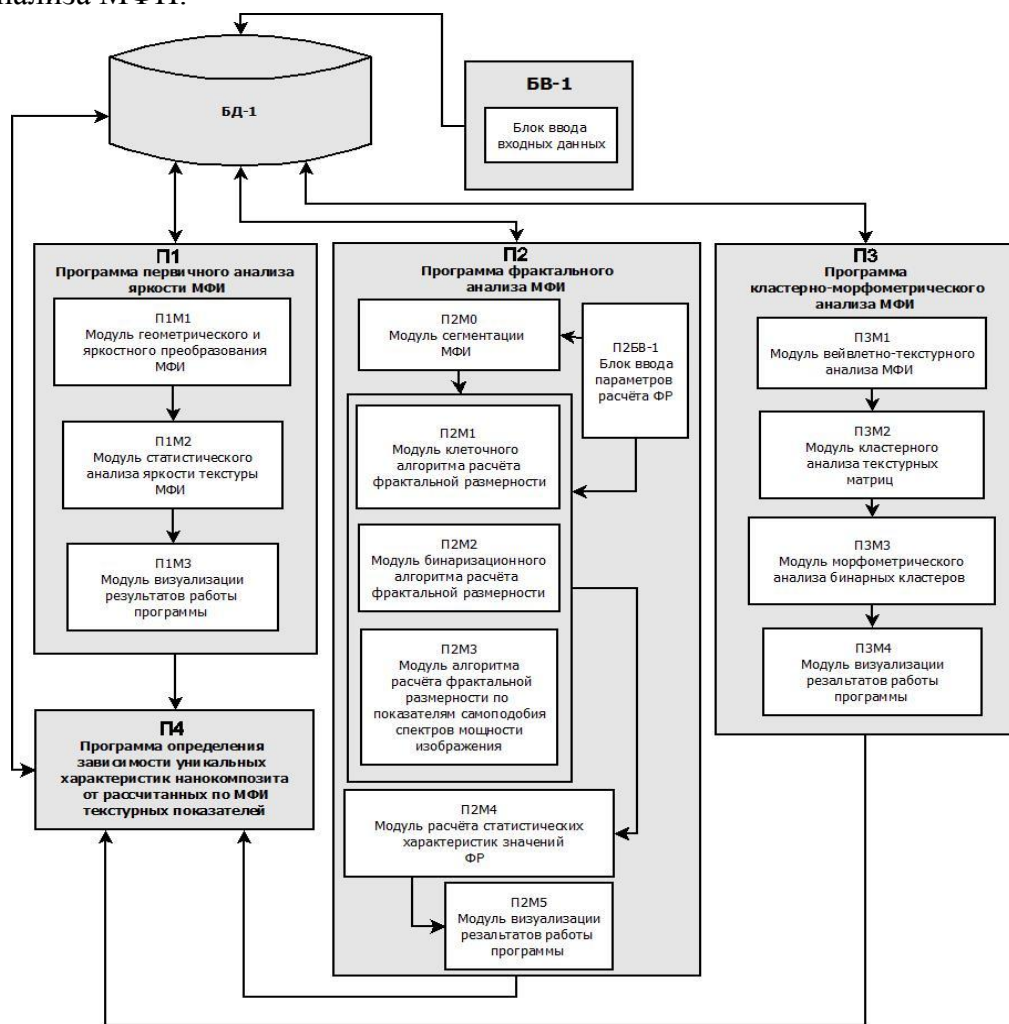


Рис.1. Общая блок-схема архитектуры комплекса программ "FRA\_VA\_T".

Программа **П1** состоит из следующих модулей: **П1М1** – модуль геометрического и яркостного преобразования исходного МФИ; **П1М2** – модуль статистического анализа яркости текстуры МФИ; **П1М3** – модуль визуализации результатов. Программа **П2** состоит из модулей: **П2БВ1** – модуль ввода параметров расчета ФР; **П2М0** – модуль сегментации изображения; **П2М1, П2М2, П2М3** – модули расчёта фрактальных размерностей; **П2М4** – модуль расчёта статистических характеристик значений ФР и **П2М5** – модуль визуализации результатов. Программа состоит из следующих модулей: **П3М1** – модуль вейвлетно-текстурного анализа МФИ; **П3М2** – модуль кластерного анализа текстурных матриц; **П3М3** – модуль морфометрического анализа бинарных кластеров; **П3М4** – модуль визуализации результатов.

База данных **БД-1** содержит исходные МФИ и уникальные численные характеристики, соответствующие определённому МФИ или условиям, при которых МФИ получено (глубина сечений рентгеновской томографии; температура или давление, при которой исследуемый ННК был получен; концентрация того или иного вещества в составе изучаемого образца и др.). Также в **БД-1** результаты анализа в виде построенных графиков; гистограмм; кривых – профилей сечений; изображений изолиний ФР; скелетонов, отображающих текстуру; бинарных кластеров; отдельно выделенных объектов; областей интереса; сквозных пор и пр. Все эти изображения генерируются в результате работы комплекса программ и сохраняются в соответствующем каталоге БД.

**В четвертой главе «Практические результаты компьютерного анализа текстуры и свойств неорганических композиционных наноматериалов»** подробно изложены результаты применения разработанных автором алгоритмов фрактально-морфологического анализа для исследования объёмно-рентгеновых МФИ морфологии образца ННК на основе иттрий алюминиевого граната, модифицированного карбидом кремния  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (рисунок 2а), полученных в лаборатории "Химии лёгких элементов и кластеров" ИОНХ имени Н.С. Курнакова РАН спеканием исходного порошка при высокой температуре и давлении.

Для решения задачи выбора оптимальной нанокластерной текстуры образца необходимо определять количество пор на поверхности материала, которые являются открытыми («сквозными») и в которые могут быть включены дополнительные нанокластеры, образующие дополнительную каркасную матрицу, кроме того, для определения других морфологических особенностей материала, в качестве характеристик которых могут быть использованы фрактальные размерности МФИ пор, их распределение по размерам, средний размер и другие фрактально-статистические показатели.

Анализ данного образца- бруска  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (рисунок 2а), выполненный с применением комплекса «FRA\_VA\_T», проводился по следующим этапам. На первом этапе проведена необходимая предварительная подготовка и подгонка исходного МФИ; установление соотношения пиксель-микрон, бинаризация исходного МФИ. Зачастую очень сложно объективно визуально оценить, где кончается и начинается та или иная пора. Для этого выполняются две операции: предварительная бинаризация, суть которой состоит в сужении диапазона яркости, и конечная бинаризация, после которой уже остаётся только два значения цвета – полностью чёрный и полностью белый, отображаемые нулями и единицами, без промежуточных значений яркости.

Далее выполнен этап фрактально-морфологического анализа полученного МФИ: с использованием комплекса «FRA\_VA\_T» рассчитаны морфологические характеристики поверхности бруска.

Фрактальный анализ проводился при разных приближениях: в исходном масштабе, при увеличении в 4, в 8 и 16 раз. Высокое разрешение исходных МФИ, полученных с помощью современного рентгеновского томографа (4000x4000 пикселей) позволяет это сделать практически без потери качества. Для каждого МФИ фрактальная размерность вычислялась с различными шагами расчётной сетки: 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512.

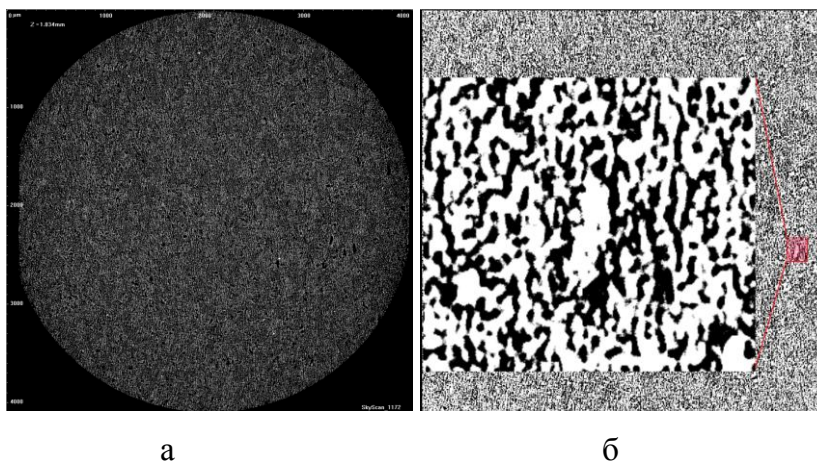


Рис.2. а) Исходное изображение образца – брусок  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ; б) Подготовленное для анализа бинаризованное изображение с увеличенным участком.

Разные масштабы представления исходного МФИ выбирались для того, чтобы показать наличие фрактального строения структуры и его фундаментального свойства – самоподобия.

В результате применения комплекса «FRA\_VA\_T» определено, что фрактальная размерность текстуры НКК при различных масштабах имеет приблизительно одно и то же значение для каждого алгоритма. Для модифицированного "клеточного" алгоритма это  $1,17 \pm 0,05$ , а для модифицированного алгоритма "спектров мощности"  $1,8 \pm 0,03$ , а их корреляция при различных шагах сетки составляет 0,85. Эти значения ФР говорят о том, что полученная структура каркаса самоподобна при различных приближениях, а следовательно, фрактальна.

Определение открытой пористости для НКК  $\text{SiC}/\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  проводилось с применением логико-статистического алгоритма идентификации открытых пор в структуре нанокompозита, которое показало, что площадь сквозных пор для исходного МФИ (см. рис.3) составляют 46,52% от общей площади сечения, или 97,5% от общего количества пор на этом исходном МФИ.

При этом следует отметить, что пористость с применением предложенного логико-статистического алгоритма идентификации открытых пор в структуре нанокompозита составила 47%, что даже превышает значение, полученное экспериментально по "методу ацетона". Видимо, это обусловлено тем, что при компьютерной бинаризации исходных МФИ к порам, возможно, были отнесены некоторые участки каркаса образца.

На рис.3 представлен фрагмент исходного МФИ (слева над диагональю) вместе с МФИ, полученным в результате выполнения бинаризации исходного МФИ (справа под диагональю), т.е. исходное и бинаризованное МФИ при 10-кратном увеличении. Как следует из рис.3, визуально различие в количестве пор на исходном и результирующем МФИ не наблюдается даже при 10-кратном увеличении. Это означает, что процедура бинаризации, насколько можно визуально, проведена корректно.

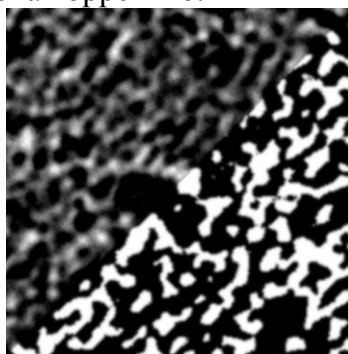


Рис.3. Увеличенный в 10 раз фрагмент исходного МФИ (слева над диагональю) вместе с изображением, полученным в результате его бинаризации (справа под диагональю).



Рассчитанные показатели открытой (сквозной) пористости для исходного МФИ бруска НКК (97,5%) оказались более близкими к экспериментальным значениям (98%). Величина 97,5% пористости получена усреднением по всем МФИ соседних срезов бруска, количество которых равно двадцати. При этом соотношение открытых и закрытых пор расчете показателя сквозной пористости с использованием предложенного логико-статистического алгоритма между первым и последним сечением оказалось равным 73,23%.

Изложены результаты комплексного исследования структурно-физико-химических свойств алюмосиликатной стеклокерамики (АЛСК) в процессе её получения (рис.4).

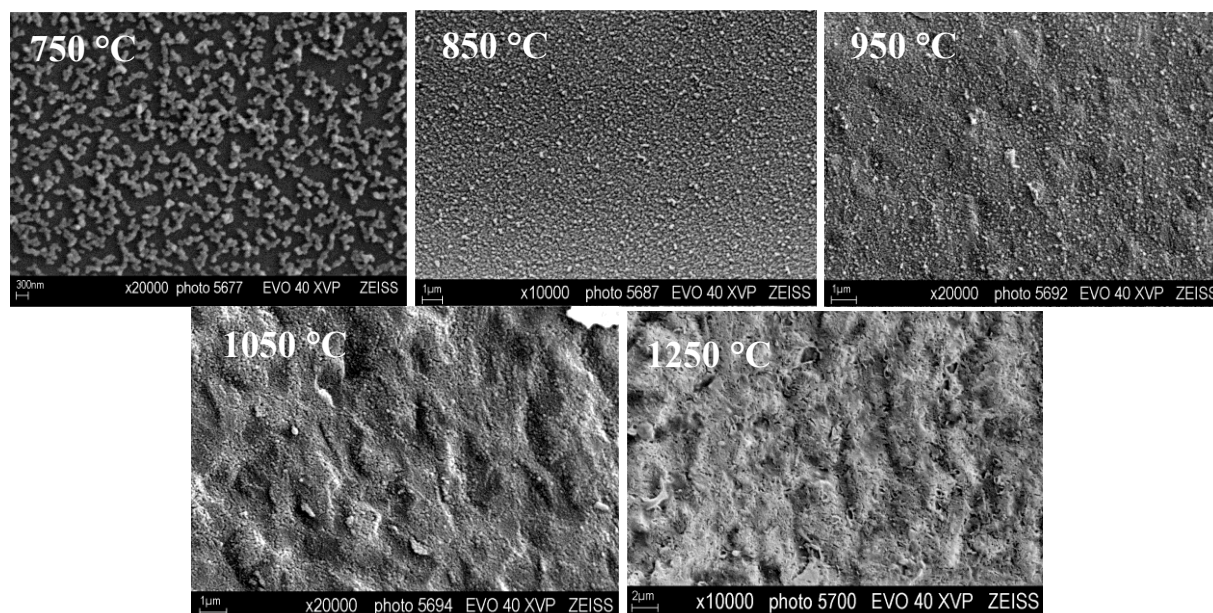


Рис.4. МФИ образцов АЛСК, термообработанной в интервале температур 750-1250 С°.

По результатам морфологического анализа, микроликвация в образце алюмосиликатной стеклокерамики, полученном профессором Л.А. Орловой, сопровождается химической дифференциацией и образованием флуктуационных неоднородностей в его структуре со средним размером  $0,0338 \text{ мкм}^2$ . При увеличении температуры степень ликвации в образце возрастает – появляются новые более мелкие области неоднородностей, а средний размер неоднородностей в текстуре образца составляет  $0,0231 \text{ мкм}^2$ .

После повышения температуры до  $950 \text{ °C}$  в образце протекает процесс кристаллизации тиалита и моноклинной формы стронциевого анортита. По виду текстуры сечения образца стеклокерамики на МФИ и результатам морфологического анализа можно заключить, что из каждой частицы ликвирующей фазы образца появляется несколько кристалликов меньшего размера – средний размер частиц резко сокращается на порядок и составляет  $0,0042 \text{ мкм}^2$ , а общее их количество увеличивается в 4 раза (рис.5).

Большой интерес представляют результаты фрактального анализа электронномикроскопических снимков сечения образца стеклокерамики, который выявил зависимость между изменением текстуры материала и изменением средней ФР. Более корректные значения ФР дал алгоритм расчёта спектров мощности показателей самоподобия, который применяется для анализа стохастических фрактальных образований, которыми и являются ликвирующая и кристаллическая фазы в текстуре стеклокерамики.

Если рассматривать фрактальную размерность как меру заполнения материей пространства с визуально-пространственной точки зрения, то можно предположить, что снижение величины ФР на первых этапах термообработки образца свидетельствует о процессах перестройки текстуры стеклокерамики – процессов ликвации и кристаллизации, когда поверхность образца на МФИ становится более хаотичной и разветвленной. По мере

повышения температуры, когда процесс кристаллизации в значительной мере интенсифицируется и количество кристаллической фазы увеличивается, текстура становится более упорядоченной и геометрически правильной, о чем свидетельствует увеличение значения ФР.

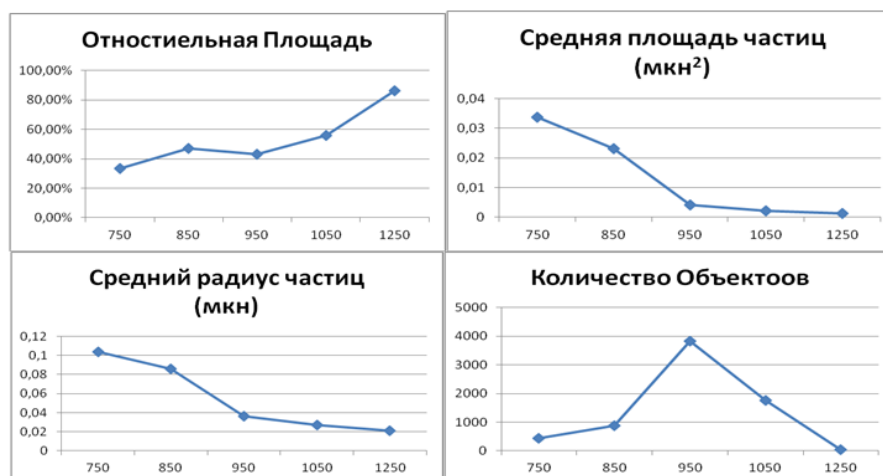


Рис.5.Графики морфологических характеристик для образца, полученных по микрофотографиям текстуры образца стеклокерамики в процессе её получения.

Температурная зависимость мгновенной скорости изменения ФР (рис. 6), которая характеризуется первой производной ФР, имеет минимум при температуре 890-893 °С.

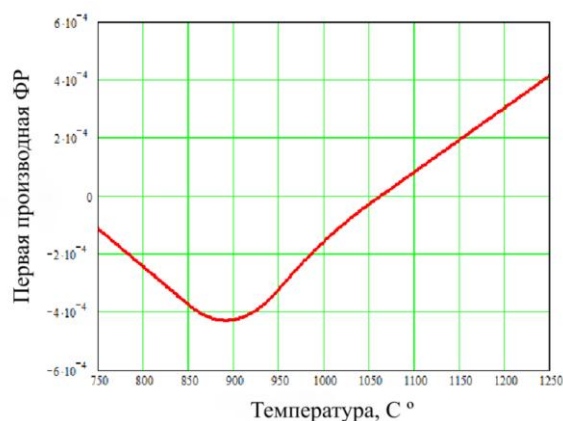


Рис. 6. График первой производной фрактальной размерности по температуре.

Это означает, что изменение текстуры образца наиболее быстро протекает в указанном интервале температур и соответствует процессу ликвации и зарождения будущих кристаллических фаз, когда текстура стеклокерамики наиболее разупорядоченна. Затем происходит резкий рост мгновенной скорости, что свидетельствует о протекании процессов кристаллизации и, как следствие, упорядочивании текстуры материала.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Разработан логико-статистический алгоритм идентификации открытых пор в структуре нанокompозитов.
2. Разработаны модифицированные алгоритмы расчёта фрактальной размерности по микрофотоизображениям текстуры нанокompозитов.
3. Разработан вейвлетно-морфологический нейросетевой алгоритм анализа микрофотоизображений текстуры нанокompозитов.
4. Разработана методика применения показателя изменения фрактальной размерности, рассчитанной по микрофотоизображениям текстуры нанокompозитов, от значений температуры или других физико-химических параметров как новой числовой характеристики для описания динамики процесса получения нанокompозитов.



5. Разработан комплекс проблемно-ориентированных программ «FRA\_VA\_T» компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры нанокompозитов, реализующий предложенные фрактально-вейвлетные алгоритмы анализа микрофотоизображений нанокompозитов.
6. Проведён компьютерный анализ микрофотоизображений текстуры образцов нанокompозитов на основе карбид кремния/иттрий алюминиевого граната и алюмосиликатной стеклокерамики, позволивший определить зависимости между текстурными характеристиками и физико-химическими свойствами исследуемых нанокompозитов.

\*\*\*

По мнению соискателя, настоящая диссертационная работа представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой в результате выполнения исследований получена совокупность научно-технических разработок по созданию фрактально-вейвлетных алгоритмов и комплекса программ компьютерного анализа микрофотоизображений текстуры композиционных наноматериалов, имеющих существенное значение для развития теории компьютерного моделирования функциональных композиционных наноматериалов широкого назначения.

### **Основные работы, опубликованные по теме диссертации**

#### **В изданиях ВАК**

1. Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Севастьянов В.Г., Галаев А.Б., Винокуров Е.Г. Вейвлетно-морфометрический нейросетевой алгоритм анализа пористой структуры наноматериалов // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 4. С. 386.
2. Галаев А.Б., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Математические методы анализа фрактальных структур на микрофотографиях нанокompозитов. // Труды института системного анализа РАН. Динамика неоднородных систем. Москва. 2009. т.42 (2).С 190-194.
3. Галаев А.Б., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Орлова Л.А., Севастьянов В.Г. Логико-статистический алгоритм идентификации сквозных пор и его применение для анализа структуры наноматериала // Прикладная информатика.2013.№2(44). с.42-48.
4. Мешалкин В.П., Орлова О.А., Бутусов О.Б., Галаев А.Б. Исследование физико-химических и структурных процессов при получении алюмосиликатной стеклокерамики // Известия МГТУ «МАМИ» - 2012. – т.4. – №2(14). – с.299-304.
5. Саркисов П.Д., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Севастьянов В.Г., Галаев А.Б. Компьютерный метод анализа текстуры нанокompозитов на основе расчёта изолиний фрактальных размерностей // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 6. С. 620-625.

#### **В других изданиях**

6. Бутусов О.Б., Галаев А.Б., Редикульцева Н.И. Кластерный анализ текстуры пористого наноматериала // Сборник научных трудов 6-й международной научно-практической конференции с элементами научной школы для молодежи «Энергосберегающие технологии в промышленности. Печные агрегаты. Экология» - М.: Изд-во ООО «ИТЕП», НИТУ «МИСиС», 2012. – С.68-69.
7. Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Галаев А.Б., Севастьянов В.Г., Гращенков Д.В. Моделирование влияния морфологии пористой структуры карбида кремния на его физико-химические свойства // Тезисы докладов XXV Международной Чугаевской конференции по координационной химии и II Молодежная конференция-школа «Физико-химические методы в химии координационных соединений», Суздаль: изд-во «Иваново», 2011 г. с.364.

8. Бутусов О.Б., Мешалкин В.П., Галаев А.Б., Севастьянов В.Г., Гращенко Д.В. Фрактально-морфологический анализ влияния пористой структуры карбида кремния на его физико-химические свойства // Тезисы докладов XIX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. В 4 т. Т. 2: тез. докл. - Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2011. – с.206.
9. Галаев А.Б. Компьютерно-математическое моделирование структуры поверхности алюмосиликатной стеклокерамики в процессе её получения // Тезисы докладов для II Всероссийской конференции молодых специалистов «Логистика ресурсоэнергосбережения, технологическая инноватика и автоматизированное проектирование предприятий в нефтегазохимическом комплексе» («ЛогТехИнРЭС-2012»), с.57.
10. Галаев А.Б. Компьютерный анализ морфологии пористой структуры карбида кремния // Успехи в химии и химической технологии. 2012. Т. 26. № 11. С. 113-117.
11. Мешалкин В.П., Бутусов О.Б., Галаев А.Б. Фрактально-морфологический анализ пористой структуры нанокompозитов. // X Курнаковское совещание по физико-химическому анализу, Самара, 01-05.07.2013 г. С. 150-153

#### **Свидетельства на программные продукты:**

12. Галаев А.Б. Программа кластерно-морфометрического анализа изображений "Морфокласт" // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013618696 выдано Федеральной службой по интеллектуальной собственности 16.09.2013 г.
13. Галаев А.Б., Бутусов О.Б., Мешалкин В.П. Программа фрактального анализа изображений "ПАФР" // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013618930 выдано Федеральной службой по интеллектуальной собственности 23.09.2013 г.

В совместно опубликованных работах Галаевым А.Б. лично предложены основные шаги логико-статистического алгоритма идентификации сквозных пор в структуре нанокompозита [3,9,10]; процедуры модификации различных алгоритмов расчёта фрактальной размерности микрофотоизображений для анализа неоднородностей строения текстуры нанокompозитов [2,4-6]; предложена методика применения функции первой производной от фрактальной размерности по какой-либо физической переменной [4,11]; методика применения самообучающихся нейронных сетей Кохонена для кластеризации групп объектов на микрофотоизображении [1,8.]

\*\*\*

*В заключении автор считает своим приятным долгом выразить глубокую благодарность своему научному руководителю д.ф.м.н., профессору О.Б. Бутусову и члену-корреспонденту РАН, д.т.н, профессору В.П. Мешалкину за научно-методическую поддержку и огромное терпение, проявленное ими при написании автором данной диссертационной работы.*

*Автор благодарит зав. лабораторией "Химии лёгких элементов и кластеров" ИОНХ имени Н.С. Курнакова РАН, академика Кузнецова Н.Т., зав. сектором, члена-корреспондента РАН, профессора, д.х.н. Севастьянова В.Г. и весь молодежный коллектив лаборатории «Химии лёгких элементов и кластеров» за представление экспериментальных образцов наноматериалов и подробное обсуждение результатов исследований автора.*

*Автор искренне благодарит профессора Орлову Л.А. (РХТУ имени Д.И. Менделеева) и к.т.н. Гращенкова Д.В. (Всероссийский институт авиационных материалов) за активное сотрудничество при обсуждении исходной постановки и результатов решения задач компьютерного анализа нанокompозитов.*

