

ВИЗНАЧЕННЯ ПОРЯДКУ ОБЕРТАЛЬНОЇ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІЧНИХ ТА КВАЗИКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ФРАКТАЛЬНОГО АНАЛІЗУ

В статті розглянуті кристалічні та квазікристалічні структури, досліджені їх фрактальні характеристики. Побудовані кристалічні структури другого, третього та четвертого порядків обертальної симетрії, а також квазікристалічні структури на основі мозаїк Пенроуза. Розраховані фрактальні характеристики отриманих поверхонь з різним ступенем деталізації.

Ключові слова: КРИСТАЛІЧНІ ТА КВАЗИКРИСТАЛІЧНІ СТРУКТУРИ, ФРАКТАЛЬНА РОЗМІРНІСТЬ, ФРАКТАЛЬНЕ РОЗПОДІЛЕННЯ, ФРАКТАЛЬНІ СИГНАТУРИ, ПОРЯДОК ОБЕРТАЛЬНОЇ СИМЕТРІЇ, МОЗАЇКИ ПЕНРОУЗА, ДЕТАЛІЗАЦІЯ ПОВЕРХНІ.

В статье рассмотрены кристаллические и квазикристаллические структуры, исследованы их фрактальные характеристики. Построены кристаллические структуры второго, третьего и четвертого порядков поворотной симметрии, а также квазикристаллические структуры на основе мозаик Пенроуза. Рассчитаны фрактальные характеристики полученных поверхностей с разной степенью детализации.

The article describes the crystalline and quasicrystalline structure, studied their fractal characteristics. Crystal structures built of the second, third and fourth orders of rotational symmetry, and the quasicrystalline structure based Penrose mosaics. Calculated the fractal characteristics of the surfaces with varying degrees of detail.

Вступ

Кристалічні та квазікристалічні матеріали, як і більшість природних матеріалів, мають складну фрактальну структуру. У зв'язку з цим актуальною задачею є дослідження таких структур методами фрактального аналізу.

Метою даної роботи є побудова кристалічних та квазікристалічних структур та дослідження їх фрактальних характеристик.

Матеріали та методики дослідження

В процесі досліджень побудовані фрактальні поверхні кристалічних та квазікристалічних структур за допомогою *метода випадкового зсуву середньої точки*. Даний метод розпочинається з трикутника, що лежить у довільній площині. Середні точки сторін трикутника з'єднанні між собою таким чином, що трикутник виявляється поділений на чотири менші трикутники. Після чого кожна середня точка зсувається вгору або вниз на певну, випадково обрану величину. Такий самий процес застосовується до кожного з менших трикутників, потім до ще менших й так далі нескінченно. Етапи побудови фрактальної поверхні наведені на рис. 1.

У цьому методі зсуву середніх точок випадкові величини для переміщення середніх точок угору або вниз керуються певним законом розподілу, який підбирається, щоб отримати близьку апроксимацію бажаної поверхні. Таким чином, за допомогою методу зсуву середньої точки з фракталів можна створювати фрактальні складні поверхні. Було досліджено, що у всіх поверхонь, побудованих даним методом існує загальна властивість: міра порізаності або складності їх структури вимірюється фрактальною розмірністю [1].

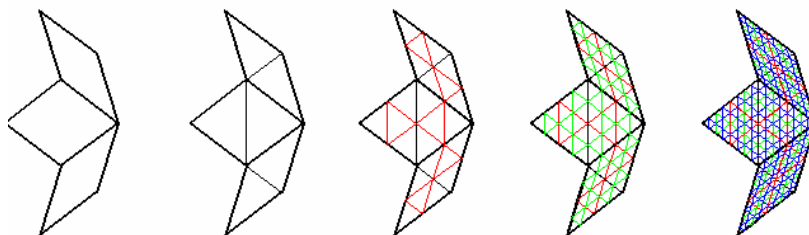


Рисунок 1. – Етапи побудови фрактальних поверхонь на прикладі елементів мозаїки Пенроуза

В ході дослідження було побудовано чисельну кількість фрактальних поверхонь кристалічних структур з використанням наведеного методу: побудовані кристалічні структури другого, третього, четвертого порядків симетрії з різною кількістю ітерацій (від 4 до 9), яка відповідає за ступінь деталізації поверхні та проведений аналіз їх фрактальних характеристик (таблиця 1). При цьому побудова поверхні розпочиналася з розбиття початкової кристалічної решітки, що представлена квадратами (для кристалічної структури другого порядку) чи прямокутниками (для кристалічної структури четвертого порядку) на два трикутники, до яких було застосовано метод випадкового зсуву середньої точки.

Поверхні квазікристалічних структур – поверхні Пенроуза - були побудовані на основі мозаїк Пенроуза з використанням методу випадкового зсуву середньої точки. При цьому побудова поверхні розпочиналася з розбиття кожного з ромбів, якими представлена мозаїка Пенроуза, на два трикутники, до яких було застосовано метод випадкового зсуву середньої точки. Доцільність побудови поверхонь Пенроуза зумовлена властивістю самоподібності мозаїки Пенроуза, яка являє собою модель квазікристалу. Поверхні Пенроуза були побудовані на основі двох видів мозаїки Пенроуза – мозаїки Пенроуза, побудованої за допомогою «золотих» ромбів і мозаїки Пенроуза, побудованої за допомогою «змій» та «дротиків» (рис. 2) використовуючи певний вид розфарбування. Кожну з поверхонь можна побудувати з різною кількістю ітерацій (від 4 до 9), яка відповідає за ступінь деталізації поверхні.

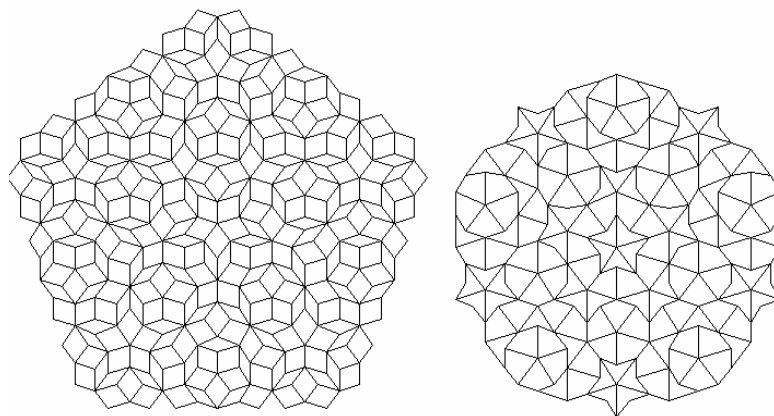


Рисунок 2. – Мозаїки Пенроуза, побудовані за допомогою «золотих» ромбів (ліворуч) та за допомогою «змій» та «дротиків» (праворуч)

Для зображень побудованих поверхонь кристалічних та квазікристалічних структур було проведено фрактальний аналіз, що складається із визначення фрактальної розмірності та побудови фрактальних розподілень. Фрактальна розмірність визначалася з використанням методу BOX COUNTING [2], який є найбільш універсальним та дозволяє працювати із зображеннями будь-якої структури. Для отримання фрактальних розподілень використовується метод ковзаючого вікна, який полягає у визначенні фрактальної розмірності в межах вікна, розмір якого можна задавати довільно. Вікно попіксельно переміщується по зображенню. При цьому на кожному кроці обчислюється фрактальна розмірність зображення, що потрапило у ковзаюче вікно [2]. Після чого проводиться побудова їх *емпіричного розподілу ймовірностей* $W(D)/W_{\max}(D)$. Складні зображення після обчислення фрактальних розподілень дають багатомодальні розподіли.

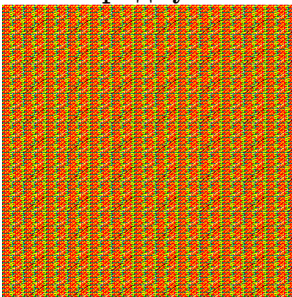
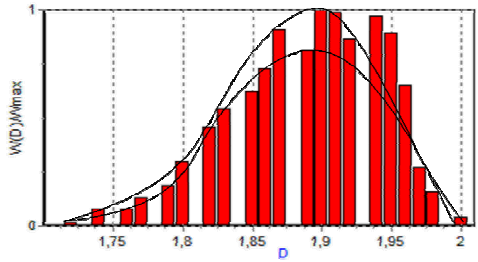
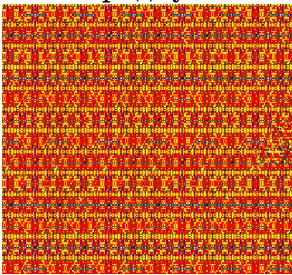
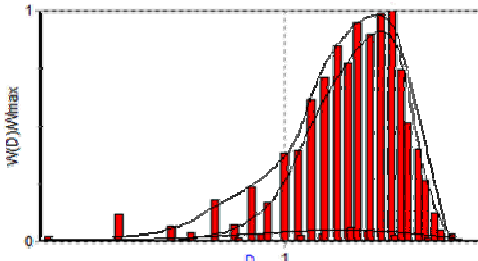
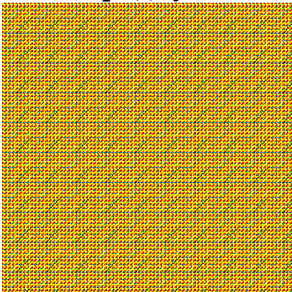
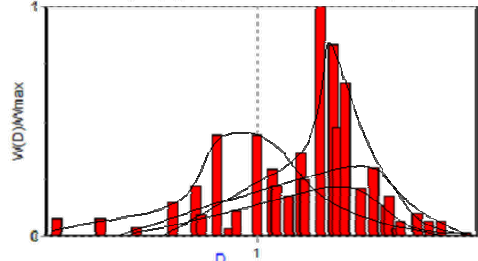
Результати досліджень та їх обговорення

Аналіз кристалічних поверхонь з симетрією різних порядків та квазікристалічних поверхонь Пенроуза дозволив визначити їх фрактальні розмірності, побудувати розподілення локальних фрактальних розмірностей та фрактальні сигнатури, тобто їх фрактальні моделі. В ході дослідження було визначено зростання фрактальної розмірності із збільшенням кількості ітерацій. При цьому відзначено майже на всіх видах поверхонь незначне зниження значень фрактальної розмірності при кількості ітерацій, що дорівнюють 5 та 6 [3].

Результати досліджень кристалічних структур наведено в таблиці 1, з якої видно, що фрактальні розподілення майже для всіх видів поверхонь мають багатомодальний розподіл і широкий розкид значень фрактальної розмірності, який вказує на складні зображення. Фрактальне розподілення кожної із побудованих поверхонь має кількість мод, яка співпадає з порядком симетрії. Таким чином, фрактальні методи дозволяють визначити порядок оберальної симетрії кристалічних матеріалів.

Таблиця 1

Фрактальна розмірність та фрактальні розподілення поверхонь з орієнтаційною симетрією другого, третього та четвертого порядків

Зображення поверхні	Фрактальна розмірність, D_n (n – ступінь деталізації поверхні)	Фрактальні розподілення
<p>Симетрія 2-го порядку</p> 	<p>$D_4 = 1,65$ $D_5 = 1,81$ $D_6 = 1,86$ $D_7 = 1,79$ $D_8 = 1,85$ $D_9 = 1,87$</p>	
<p>Симетрія 3-го порядку</p> 	<p>$D_4 = 1,58$ $D_5 = 1,73$ $D_6 = 1,75$ $D_7 = 1,67$ $D_8 = 1,72$ $D_9 = 1,74$</p>	
<p>Симетрія 4-го порядку</p> 	<p>$D_4 = 1,72$ $D_5 = 1,85$ $D_6 = 1,85$ $D_7 = 1,87$ $D_8 = 1,85$ $D_9 = 1,85$</p>	

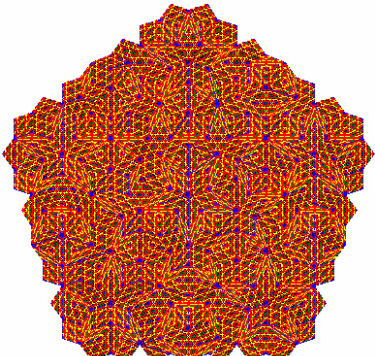
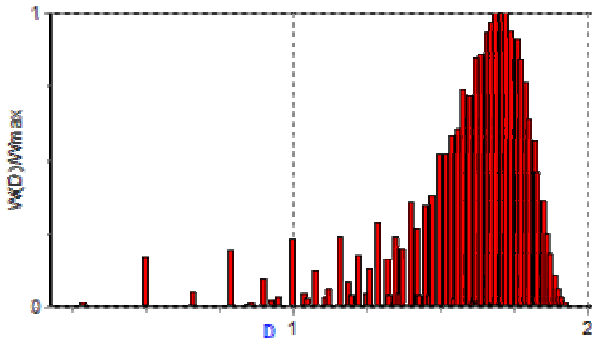
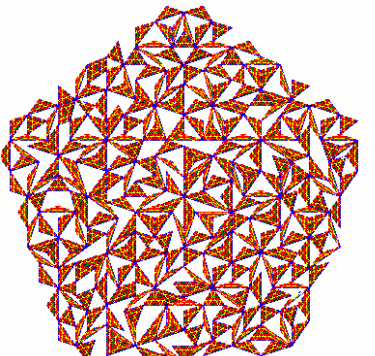
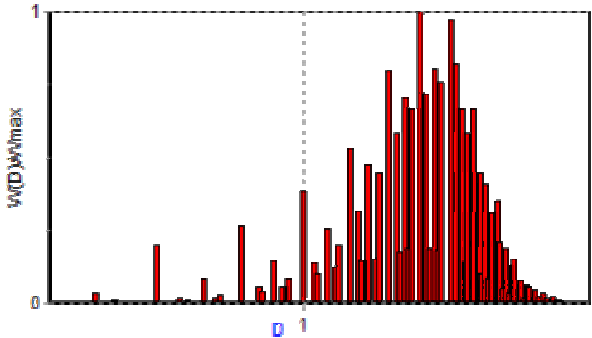
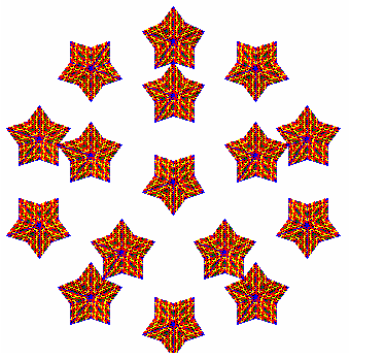
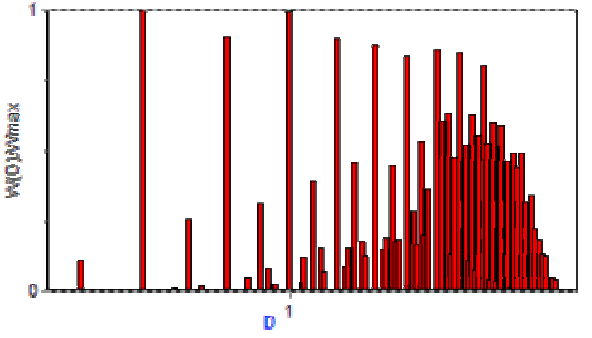
В таблиці 2 представлені зображення поверхонь Пенроуза та розподіл їх локальних фрактальних розмірностей. Фрактальне розподілення наведено для всіх видів поверхонь лише при кількості ітерацій, що дорівнює 9, оскільки розподіл локальних фрактальних розмірностей від кількості ітерацій істотно не змінюється. Цей факт говорить про те, що від більшої деталізації поверхні її основні властивості залишаються незмінними.

З таблиці 2 видно, що фрактальні розподілення майже для всіх видів поверхонь мають багатомодальний розподіл і широкий розкид значень фрактальної розмірності. Кожна мода такого розподілу відповідає кластеру зображення, що має близькі значення локальних розмірностей. При цьому

слід відзначити, що фрактальне розподілення будь-якої із поверхонь Пенроуза має п'ять таких мод. Це вказує на обертальну симетрію п'ятого порядку, яку має мозаїка Пенроуза, а отже - і поверхні Пенроуза. Винятком є перша поверхня, фрактальне розподілення якої має нормальний характер, а моди майже не виділяються, що вказує на її відносну однорідність. Гістограма локальних фрактальних розмірностей при цьому вужче, що свідчить про переважання структур з невеликим розкидом значень фрактальної розмірності. Такий метод визначення порядку обертальної симетрії запропоновано у роботі називати *методом фрактальних розподілень*.

Таблиця 2

Розподілення локальних фрактальних розмірностей зображень Пенроуза

Зображення поверхні Пенроуза	Фрактальні розподілення
<p>№1</p> 	
<p>№2</p> 	
<p>№3</p> 	

Таким чином, виявлена можливість використання фрактального аналізу для визначення порядку обертальної симетрії квазікристалічних

матеріалів. Також, у даному випадку, можна говорити і про ідентифікацію кристалічних та квазікристалічних структур за допомогою побудови фрактальних розподілень: при отриманні фрактальних розподілень з певною кількістю мод можна зробити висновок про кристалічні або квазікристалічні властивості даної структури.

Висновки

Мозаїки Пенроуза мають властивість самоподібності та використовуються при побудові фрактальних поверхонь - поверхонь Пенроуза, які у свою чергу являють собою модель квазікристалів. В ході досліджень були побудовані поверхні другого, третього, четвертого порядків симетрії, поверхні Пенроуза на основі двох видів мозаїки з різними розфарбуваннями та проведений аналіз їх фрактальних характеристик. Аналіз поверхонь Пенроуза дозволив визначити їх фрактальні розмірності, побудувати розподілення локальних фрактальних розмірностей та фрактальні сигнатури.

Було визначено зростання фрактальної розмірності із збільшенням кількості ітерацій. При цьому відзначено майже на всіх видах поверхонь незначне зниження значень фрактальної розмірності при кількості ітерацій, що дорівнюють 5 та 6.

Розподіл локальних фрактальних розмірностей від кількості ітерацій істотно не змінюється, що говорить про постійність основних властивостей поверхонь при збільшенні деталізації поверхні.

В ході аналізу виявлено, що фрактальні розподілення майже для всіх видів поверхонь мають багатомодальний розподіл і широкий розкид значень фрактальної розмірності. При цьому слід відзначити, що фрактальне розподілення будь-якої із поверхонь має таку кількість мод, яка співпадає з порядком обертальної симетрії, який має кожна з аналізованих поверхонь.

ЛІТЕРАТУРА

1. Журба А.О. Побудова фрактальних розподілень поверхонь Пенроуза / А.О. Журба, О.І. Михальов // Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Випуск 2(73). – Дніпропетровськ. – 2011. – С.105-110.
2. Журба А.О. Особливості визначення фрактальної розмірності методом BOX COUNTING у задачах металознавства / А.О. Журба, О.І. Михальов // Інформатика та системні науки (ІСН-2012): матеріали ІІІ Всеукраїнської науково-практичної конференції. – Полтава, 1-3 березня 2012р. – С.109-111.
3. Журба А.А. Анализ изменений фрактальной размерности и ее распределения в процессе формирования композитной структуры быстрорежущей стали / А.А. Журба, А.И. Михалёв, С.И. Губенко, Е.А. Черноиваненко // Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Випуск 4 (81). Дніпропетровськ. – 2012. – С. 155–164.