Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
Departamento de Física e Informática

Estimação da Dimensão Fractal de Imagens de SPM

Sílvia Cristina Dias Pinto

Dissertação apresentada ao Instituto de
Física de São Carlos, da Universidade de
São Carlos, para obtenção do Título de
Mestre em Ciências: Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

São Carlos

2001

Dedico essa dissertação

*Ao meu grande irmão, Mauro, que desde a minha
infância me tem incentivado a estudar e o qual
sempre acreditou no meu potencial.*

*À minha amada mãe, Maria Cleyd, que sempre fez de
tudo por mim.*

À Sueli, minha irmã.

Às minhas queridas sobrinhas, Marcela e Luisa.

À minha vó Helena.

Aos meus padrinhos, Celso e Vânia.

Agradecimentos

A Deus, por tudo o que ele já me deu nesta vida.

Ao prof. Dr. Luciano da F. Costa pela oportunidade de realizar este trabalho.

A minha amiga Andréa e ao meu amigo Carlos que sempre estiveram presentes e dispostos a me tirar dúvidas.

Aos meus amigos do Grupo de Pesquisa em Visão Cibernética: Daniela, Leandro, Luiz, Edson, Li, Renata, Bruno, Ricardo, Tadeu, Leandro C., Marquinhos e Felipe; e aos que já passaram por aqui: Cristian, Consul, Regina e Júlia. Todos esses incentivaram para que este trabalho fosse realizado em grande harmonia além de proporcionar um agradável espaço de trabalho.

A todos os funcionários da biblioteca do IFSC, pela atenção e auxílio.

A toda equipe da Secretaria da Pós-Graduação do IFSC, principalmente à Wladerez pela grande atenção e paciência dadas à mim.

Aos meus amigos que estudaram comigo durante a graduação de Física na Unesp - Rio Claro, os quais tenho eterno carinho e amizade.

As minhas amigas da Republica Café com Leite: Alessandra, Gercina, Simone e Thais; e da atual moradia, Josiane.

A família Bachega: José Alberto, Sônia, Fernando e Luciana, e a Tia Landa, pela amizade, carinho e atenção especial.

Ao prof. Dr. Roberto Baldino, pelo crescimento moral e intelectual oferecido no meu curso de cálculo avançado, durante a graduação.

Ao prof. Dr. Ervino C. Ziemath, pela orientação e apoio na minha iniciação científica.

Ao Marcelo A. Pereira da Silva, pelas orientações e sugestões dadas a esse trabalho.

À Nara C. de Souza e à Carla Eiras, pelas imagens e informações fornecidas para realização deste trabalho.

Aos meus colegas e amigos conquistados aqui no IFSC, os quais contribuem com atenção, incentivos e bons momentos de descontração.

Aos funcionários do IFSC que contribuíram indiretamente com seus trabalhos para realização deste trabalho.

Sumário

<i>Lista de Figuras</i>	viii
<i>Lista de Tabelas</i>	xiii
<i>Lista de Abreviaturas, Siglas e Símbolos</i>	xv
<i>Resumo</i>	xvi
<i>Abstract</i>	xvii
<i>Capítulo 1 - Introdução</i>	1
1.1 Formas Fractais.....	1
1.2 Estudos Aplicados em superfícies de SPM.....	2
1.3 Desenvolvimento de um software.....	3
<i>Capítulo 2 - Imagens e Microscopia</i>	5
2.1 Representação da Imagem Digital.....	5
2.2 Amostragem e Quantização na Imagem.....	8
2.3 Geometria Discreta.....	11
2.3.1 <i>Vizinhança de pixel</i>	11
2.3.2 <i>Distância Euclidiana Discreta</i>	14
2.4 Aquisição de Imagem no SPM.....	16
<i>Capítulo 3 - Conceitos em Fractais</i>	23
3.1 O que é um fractal.....	23
3.2 Dimensão Fractal.....	25
3.3 Estimação da Dimensão Fractal.....	29
3.3.1 <i>Box-Counting</i>	29

3.3.2 <i>Rugosidade Média Quadrática</i>	32
3.3.3 <i>Espectro de Potência</i>	32
3.3.4 <i>Salsicha de Minkowski</i>	37
3.3.4.1 <i>Salsicha de Minkowski e a Dilatação Exata</i>	39
Capítulo 4 - Análise Multiescala	42
4.1 <i>Análise de Sinais</i>	42
4.2 <i>Espaço-Escala</i>	43
4.3 <i>Estudo da curva log-log</i>	46
4.3.1 <i>Diferenciação Multiescala baseada na Transformada de Fourier</i>	49
4.3.2 <i>Diferenciação Multiescala baseada no Método de Diferenças Finitas</i>	53
Capítulo 5 - Software e Validação	59
5.1 <i>Software Dimensão Fractal</i>	59
5.2 <i>Implementação do método da Salsicha de Minkowski por dilatação exata</i>	62
5.3 <i>Validação do Software</i>	65
5.3.1 <i>Quádrlica de Koch</i>	66
5.3.2 <i>Curva de Koch</i>	68
5.3.3 <i>Box</i>	70
5.3.4 <i>Ponto</i>	72
5.4 <i>Resultado de Validação</i>	74

Capítulo 6 - Resultados e Aplicações.....	76
6.1 Análise de filmes automontados de polímeros através de diferentes condições de secagem.....	76
6.2 Estudo da rugosidade em processos de deposição de filmes.....	85
Capítulo 7 - Conclusão.....	97
7.1 Discussões Finais.....	97
7.2 Contribuições.....	100
7.3 Trabalhos Futuros.....	101
Capítulo 8 - Bibliografia.....	102
Apêndice A: Teorema da Derivada no domínio da frequência.....	108
Apêndice B: Filtragem Gaussiana.....	110
Apêndice C: Aproximação da derivada por diferenças finitas.....	114

Lista de Figuras

Figura 2.1: (a) Imagem original no espaço contínuo; (b) a imagem discretizada, ou seja, média da intensidade de luz para cada pixel; e (c) representação da imagem digitalizada como uma matriz de inteiros.

Figura 2.2: Imagem 2D em níveis de cinza em (a) e em (b) a imagem considerada como uma superfície.

Figura 2.3: Efeitos da redução da resolução espacial em (a) com 256x256, (b) com 128x128, (c) com 64x64 e (d) com 32x32 pixels.

Figura 2.4: Pirâmide de imagem. Cada imagem tem o mesmo número de pixels respectivos a ordem da figura 2.3.

Figura 2.5: Vizinhança-de-4 em (a) e vizinhança-de-8 em (b) para o pixel p no espaço bidimensional.

Figura 2.6: Vizinhança-de-6 em (a) e vizinhança-de-26 em (b) para o pixel p no espaço tridimensional.

Figura 2.7: Representações da distância Euclidiana numa grade bidimensional em (a) e do disco de raio r centrado no pixel p de coordenadas (x,y) em (b).

Figura 2.8: Esquema do funcionamento do microscópio de varredura por ponta de prova, o SPM (imagem retirada de [DIGITAL INSTRUMENTS]).

Figura 2.9: Esquema do funcionamento do AFM (imagem retirada de [PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS]).

Figura 2.10: Esquema da interação da ponta e a amostra para o STM (imagem retirada de [PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS]).

Figura 2.11: Imagens: bidimensional em (a) e tridimensional em (b) obtida pelo microscópio.

Figura 2.12: Representação da imagem em formato ASCII obtida pela técnica de SPM.

Figura 3.1: Auto-similaridade da reta, do quadrado e do cubo.

Figura 3.2: Processos da construção da curva de Koch.

Figura 3.3: Esponja de Menger ou esponja de Sierpinski.

Figura 3.4: Número N de caixas necessárias para cobrir a estrutura em diferentes tamanhos de caixas r .

Figura 3.5: Gráfico *log-log* de $N(r)$ por r . O coeficiente angular da reta mostrada no gráfico dá o valor da dimensão fractal 1,7722 para a folha. Este valor está entre a dimensão Euclidiana de uma reta e de uma superfície lisa.

Figura 3.6: Diagrama esperado para a dimensão Box-Counting para uma forma (imagem) qualquer.

Figura 3.7: Gráfico *log-log* da Rugosidade R_{rms} pelo comprimento da janela analisada L .

Figura 3.8: Gráfico *log-log* do Espectro de Potência $P(k)$ em função do inverso do comprimento de onda k .

Figura 3.9: (a) Curva original a ser dilatada; (b) círculo digital de raio $R=2$; (c) Círculo centralizado num pixel da curva, preenchendo os pixels limitados por ele; Dilatação de raio $R=2$ da forma original em (e), ou seja, a Salsicha de Minkowski de raio $R=2$, a partir dos círculos centralizados (d).

Figura 3.10: As possíveis dilatações para $0 \leq R \leq 2$ numa grade ortogonal 2D.

Figura 3.11: Forma original "menina" em (a) e as dilatações de raio 1, $\sqrt{2}$, 2, $\sqrt{5}$, $\sqrt{8}$ e 5 em (b)-(g) respectivamente, de seu contorno usando o conceito da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata.

Figura 4.1: (a) curva quádrlica de Koch e (b) gráfico *log-log* do Volume em função do Raio para a figura (a) e o valor de Dimensão Fractal para os respectivos intervalos considerados.

Figura 4.2: (a) Região considerada do gráfico *log-log* e (b) zoom de uma parte do gráfico de interpolação.

Figura 4.3: A representação periódica da função volume em (a) e a sua respectiva derivada pelo método baseado na Transformada de Fourier com $\sigma = 20$ exibindo descontinuidade da derivada na junção dos pontos.

Figura 4.4: Esquema para replicação da função.

Figura 4.5: Função Volume replicada em (a) e (b) a sua derivada da curva replicada usando o método baseado na Transformada de Fourier com $\sigma = 20$ da curva.

Figure 4.6: (a) Derivada da parte considerada da curva da figura 10(a) e, em (b) a curva de dimensão Fractal usando $\sigma = 10$.

Figura 4.7: Região considerada para fazer a diferenciação multiescala a partir do método de Diferenças Finitas.

Figura 4.8: Pontos (em vermelhos) escolhidos a partir do valor do intervalo L.

Figura 4.9: Sinal com intervalo de amostragem igualmente espaçado.

Figura 4.10: Função volume replicada e suavizada, conhecida como Função Volume Total.

Figura 4.11: Parte da curva considerada da Função Volume Total e sua respectiva derivada.

Figura 4.12: Curva da dimensão fractal ao longo da escala espacial considerada. A seta aponta a região onde ocorre o valor máximo da fractalidade para a curva quádrlica de Koch, ou seja 1.4999. O valor teórico para este fractal é de 1.50.

Figura 5.1: Display do software *Dimensão Fractal*

Figura 5.2: Display do programa executado no MATLAB em (a) mostra a curva log-log do volume em termos do raio e em (b) fornece a curva de fractalidade da superfície e o seu valor de Dimensão Fractal.

Figura 5.3: Matriz padrão do SEDR.

Figura 5.4: Quádrlica de Koch (350x350 pixels).

Figura 5.5: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por diferenças finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 5.3$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 11.5$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 11$, no domínio da frequência.

Figura 5.6: Curva de Koch (250x250 pixels).

Figura 5.7: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por diferenças finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 5$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 9$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 9$, no domínio da frequência.

Figura 5.8: Box (250x250 pixels).

Figura 5.9: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por diferenças finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 4.1$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 15$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 11.2$, no domínio da frequência.

Figura 5.10: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por diferenças finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 4.5$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 11$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 7$, no domínio da frequência.

Figura 6.1: Imagens de filmes automontados de POMA/PVS para diferentes condições de secagem por fluxo de (a) ar, (b) nitrogênio e (c) vácuo. (Imagens fornecidas por Nara Cristina de Souza, IFSC, USP).

Figura 6.2: Log-log da Rugosidade W , pela largura da janela L , para as diferentes condições de secagem (ar, nitrogênio e vácuo), de um filme automontado de POMA/PVS.

Figura 6.3: Curva da dimensão fractal, obtida pelo método de Rugosidade Média Quadrática, ao longo de toda região observada, para as diferentes condições de secagem em azul para ar, vermelho para nitrogênio e preto para vácuo, através dos métodos de diferenciação por diferenças finitas ($\sigma = 8$) em (a), (c) e (e) e, por Fourier ($\sigma = 10$) em (b), (d) e (f). Ambas curvas foram suavizadas no domínio da frequência.

Figura 6.4: Curva da dimensão fractal, obtida da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, ao longo da escala espacial analisada, para as diferentes condições de secagem em azul

para ar, vermelho para nitrogênio e preto para vácuo, através dos métodos de diferenciação por diferenças finitas ($\sigma = 12$) em (a), (c) e (e) e, por Fourier ($\sigma = 12$) em (b), (d) e (f). Ambas curvas foram suavizadas no domínio da frequência.

Figura 6.5 : Imagens bi e tridimensional do perfil da superfície em relação ao tempo de observação em (a) e (b) para t_1 , (c) e (d) para t_2 , (e) e (f) para t_3 e (g) e (h) para t_4 .

Figura 6.6: Curva do Espectro de Potência para as superfícies apresentadas na figura 6.5 em (a) para t_1 , (b) para t_2 , (c) para t_3 e (d) para t_4 .

Figura 6.7: Integral do sinal em (a)-(d) para as suas respectivas curvas do espectro de potência apresentado na figura 6.6 (a)-(d).

Figura 6.8: Curva da dimensão fractal ao longo do espaço de frequência, obtida através da curva do espectro de potência, e diferenciando-o pelo método de Diferenças Finitas ($\sigma = 9$) em (a), (c), (e) e (g) e, por Fourier ($\sigma = 9$) em (b), (d), (f) e (h). Ambas curvas foram suavizadas no espaço da frequência.

Figura 6.9: Curva *log-log* do Volume dilatado em função do raio, em pixels, em (a) para t_1 , (b) para t_2 , (c) para t_3 e (d) para t_4 .

Figura 6.10: Curva da dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as superfícies observadas em diferentes tempos em (a) através do método de Diferenças Finitas ($\sigma = 9$) e em (b) através do Fourier ($\sigma = 10$), ambas suavizadas no domínio da frequência.

Figura B.1: Curva da Função Gaussiana de desvio padrão σ e média μ .

Figura B.2: Curva original com presença de ruídos em (a), o filtro Gaussiana ($\sigma=3$) em (b) e o resultado da convolução em (c), ou seja, a curva original suavizada.

Figura C.1: Demonstração do método de Diferenças Finitas.

Lista de Tabelas

Tabela V.1: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para a quádriga de Koch, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de diferenças finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Tabela V.2: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para a Curva de Koch, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de diferenças finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Tabela V.3: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para o fractal Box, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de diferenças finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Tabela V.4: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para o ponto, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de diferenças finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Tabela VI.1: Valores dos expoentes de rugosidade α obtidos nas regiões consideradas para diferentes condições de secagem.

Tabela VI.2: Dimensão fractal das regiões limitadas para diferentes condições de secagem do filme, obtida através do expoente de rugosidade α .

Tabela VI.3: Resultado da dimensão fractal obtido através do valor máximo da curva de dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as diferentes condições de secagem do filme.

Tabela VI.4: Valores da dimensão fractal D_{PSD} para as superfícies da observadas em diferentes tempos, para a região linear dos gráficos da figura 6.8.

Tabela VI.5: Resultado da dimensão fractal obtido através do valor máximo da curva de dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as superfícies observadas em diferentes tempos.

Tabela VI.6 : Valor da complexidade de cada superfície observada, obtido pela área limitada pela curva da dimensão fractal.

Lista de Abreviaturas, Siglas e Símbolos

<i>STM</i>	Microscópio de Tunelamento por Varredura
<i>SPM</i>	Microscópio de Varredura por Ponta de Prova
<i>AFM</i>	Microscópio de Força Atômica
<i>2D</i>	bidimensional
<i>3D</i>	tridimensional
(x,y)	coordenadas do pixel da imagem
$f(x,y)$	coordenada z ou altura referente ao par de coordenada (x,y)
$\log$	função logarítmica na base e
D_E	distância Euclidiana
E	dimensão Euclidiana
D_T	dimensão topológica
D	dimensão fractal
D_{BC}	dimensão fractal Box-Counting ou Kolmogorov
D_{PSD}	dimensão fractal por Espectro de Potência
D_{SM}	dimensão fractal por Salsicha de Minkowski
f	frequência
$U(b,a)$	transformada multiescala do sinal $u(t)$
σ	desvio padrão da Gaussiana
<i>GUI</i>	Graphics User Interface
<i>WWW</i>	World Wide Web
<i>SEDR</i>	Sorted Euclidean Distance Representation

Resumo

Este trabalho utiliza o método da Salsicha de Minkowski usando dilatação exata para estimação da dimensão fractal em imagens de superfícies de SPM (Microscópio de Varredura por Ponta de prova). Descrevemos uma rotina que permite o cálculo de uma série de dilatações da superfície original em relação a vários raios. O método de dilatação exata considera todas as possíveis salsichas envolvendo um pré-cálculo das distâncias (raios) numa grade ortogonal, que são armazenadas em uma lista junto com suas coordenadas relativas. A partir daí, realizamos um estudo multiescala sobre a curva log-log do volume dilatado em termos dos raios a fim de obter o valor da dimensão fractal para a superfície analisada. Para isso aplicamos dois métodos numéricos exatos, os quais são baseados em: diferenciação da curva por diferenças finitas e, por diferenciação usando uma propriedade da Transformada de Fourier. Os valores da derivada do sinal obtido permitem caracterizar a evolução da dimensão fractal da superfície ao longo de várias escalas espaciais, isto é, a dimensão fractal apresenta um comportamento dinâmico em termos de escalas espaciais definida pelos raios.

Abstract

This work uses the Minkowski Sausage method using exact dilation for estimating fractal dimension to SPM (Scanning Probe Microscopy) surface images. We describe a routine that permits the calculation of a series of dilations of the original surface, with respect to several radii. The exact dilation method considers all the possible sausages, involving pre-calculation of the distances (radiuses) in the orthogonal lattice, which are stored into a list together with the relative coordinates. Afterwards, we did a multiscale analysis of the log-log plot of the dilated volume in terms of radiuses, in order to obtain the dimension fractal of the studied surface. For this we applied two accurate numerical methods, which are based: on the differentiation by Finite Difference and, by differentiation using a Fourier transform property. The derivative values obtained allow to characterize the evolution of the fractal dimension of the surface along several spatial scales, i.e., the fractal dimension presents a dynamic behavior in terms of different spatial scales defined by radiuses.

1 Introdução

1.1 *Formas Fractais*

A geometria fractal proporcionou um novo paradigma para a compreensão de muitos fenômenos físicos, o que tem sido oportuno já que os estudos destes fenômenos descritos por essa geometria estão se tornando cada vez mais importantes em vários aspectos da tecnologia. A idéia de que a dimensão topográfica não precisa ser um número inteiro pode parecer inquietante à primeira vista, mas os valores de dimensões 0 (ponto), 1 (reta), 2 (plano) e 3 (sólido), muitas vezes não são suficientes para descrever curvas e superfícies do mundo-real, especialmente aquelas que apresentam rugosidades e detalhes em certas escalas. A fim de estudar tais formas, alguns modelos fracionários de curvas e superfícies foram desenvolvidos juntamente com os métodos de estimativa do valor da fractalidade das formas através da medida de dimensão fractal.

O conceito de dimensão fractal normalmente é utilizado em medidas, análise e classificações de formas e texturas, fornecendo informações sobre a complexidade das mesmas.

1.2 Estudos aplicados em superfícies de SPM

Em 1981, o físico alemão Gerd Binnig e o físico suíço Heinrich Rohrer, pesquisadores do Laboratório de Pesquisas da IBM, em Zurique (Suíça), inventaram o STM (sigla, em inglês, para Microscópio de Tunelamento por Varredura) [ZANETTE, 2000]. A resolução de um STM, no plano da superfície estudada, é da ordem de $1\text{\AA}$, e na direção perpendicular à amostra pode chegar a $10\text{\AA}$. O novo equipamento superou todas as técnicas de observação e de medida até então usadas, bem como estreitou ainda mais os laços de parceria entre a ciência e a tecnologia no final do século XX. Possibilitou uma nova visão sobre as propriedades da matéria, já que o STM foi o primeiro instrumento a gerar imagens no espaço-real de superfícies com resolução atômica. Após cinco anos, em 1986, Binnig e Rohrer ganhariam o prêmio Nobel de Física por essa invenção.

Vinte anos se passaram desde a construção do primeiro STM e a partir de aperfeiçoamentos de suas partes, nasceu uma grande família de instrumentos, conhecida como SPM (sigla, em inglês, para Microscópio de Varredura por Ponta de Prova). O elemento básico de um SPM é sua sonda (ou ponta de prova), que se desloca muito rente à superfície da amostra, processo no qual surge algum tipo de interação entre ela e os constituintes da superfície. Essa interação pode ser medida, e sua variação é transformada em dados por meio de programas específicos de computador (softwares). Finalmente, esses dados tornam-se imagens da superfície do material.

A família SPM reúne vários integrantes, entre quais os dois mais utilizados são STM e o AFM (sigla, em inglês, para Microscópio de Força Atômica). O microscópio dotado de uma ponta de prova (ou sonda) é a única ferramenta capaz de obter imagens

tridimensionais de altíssima resolução, permitindo estudos de superfícies que apresentam rugosidades extremamente pequenas.

1.3 Desenvolvimento de um Software

Apesar de equipamentos relacionados à microscopia haverem sido desenvolvidos com excelentes sistemas de captura de informações/imagens, nem sempre encontramos meios para obter certas informações de características apresentadas nessas imagens.

Existem muitos softwares que permitem obter certas medidas em imagens de SPM, como por exemplo, o software que acompanha o microscópio, além de outros mais que são vendidos separadamente ou até mesmo disponíveis via *Web*. Uma das medidas que um software deste fornece é a medida de dimensão fractal de uma superfície, ou seja, esta medida irá informar se a superfície apresenta uma textura mais suave ou mais rugosa. A maioria dos softwares encontrados, senão todos, utilizam métodos para esta estimação fractal analisando sinais bidimensionais da imagem, por exemplo, o método de estimação fractal baseado na altura média da superfície. Dependendo do método adotado, nem sempre a resolução máxima por eles atingidos fornece uma medida que caracteriza bem determinados materiais ou fenômenos presentes na superfície estudada.

No capítulo 2 a seguir, discutimos a representação da imagem microscópica e as ferramentas consideradas para implementação deste trabalho. E o capítulo 3 apresenta alguns conceitos básicos sobre fractais, além de expor alguns métodos para estimação da dimensão fractal.

A partir de um método de caracterização de formas baseado em Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata [COSTA, 1999a; MONTAGNOLI, 2000] proposto neste trabalho e explicado no capítulo 3, seção 3.3.4, utilizado na análise de relevo de superfícies, assim como a consideração da dimensão fractal como uma função da escala espacial [COSTA, 1999c; COSTA, 2001c], podemos estudar melhor a uniformidade, rugosidade e dimensão geométrica de superfícies, obtidas através de imagens de SPM.

O capítulo 4 apresenta o conceito de análise multiescala, o qual utilizamos para estudar e enriquecer as informações obtidas pelo microscópio.

O objetivo deste trabalho foi implementar um software voltado ao usuário final (end-user), para estimação da dimensão fractal de superfícies obtidas pela microscopia SPM, tratando a superfície como um sinal tridimensional. O capítulo 5 discute a construção e validação do software desenvolvido neste trabalho de mestrado. O capítulo 6 apresenta resultados de dois outros métodos de estimação de dimensão fractal e que são comparados com os resultados obtidos pelo nosso software.

Por fim, o capítulo 7 apresenta as discussões sobre os resultados obtidos, as contribuições desse trabalho e as propostas para trabalhos futuros.

2 Imagens e Microscopia

2.1 Representação da Imagem Digital

O fato de o computador trabalhar com informações discretas necessita da discretização da imagem antes de qualquer processamento computacional. A figura 2.1 ilustra os passos necessários para a discretização de uma imagem. A câmera projeta a imagem em uma grade de células fotodetectora e para cada célula calcula-se a média da intensidade da luz nela projetada, discretizando espacialmente a imagem contínua.

Para reproduzir a imagem discretizada no computador é necessário também decidir como representar as intensidades de luz calculadas no contínuo para os elementos da imagem discreta, as quais estimam as diferenças entre os níveis de cinza em cada célula. Isto pode ser feito determinando um número que indica a intensidade de luz para cada ponto da imagem, isto é, determinar 255 para branco e 0 para preto, de tal modo que valores intermediários representem uma seqüência discreta de níveis de cinza. Depois de tal discretização, a versão da imagem digital (figura 2.1 (b)) em uma matriz de valores discretos (figura 2.1(c)) é obtida. Cada elemento da imagem digital é chamado *pixel*. Se para cada pixel assumirmos valores inteiros entre 0 e 255, então estaremos tratando uma imagem monocromática ou imagem em níveis de cinza, onde cada pixel assume um valor de um nível de cinza (figura 2.2 (a)).

Deve-se enfatizar que imagens digitais são então obtidas de imagens contínuas através de 2 processos de discretização, um pelo ponto espacial e outro pelo nível de

cinza, determinado para cada pixel. Estes dois processos são chamados *amostragem* e *quantização*, respectivamente. Portanto uma imagem digital em níveis de cinza pode ser definida como:

Definição: Uma *imagem digital em níveis de cinza* g é representada como uma matriz 2D, de dimensão $P \times Q$, onde cada pixel assume um valor inteiro de nível de cinza n , sendo $0 \leq n < N$ [COSTA, 2001a].

Figura 2.1: (a) Imagem original no espaço contínuo; (b) a imagem discretizada, ou seja, média da intensidade de luz para cada pixel; e (c) representação da imagem digitalizada como uma matriz de inteiros [COSTA, 2001a].

Portanto, considerando a imagem da figura 2.1(a) podemos concluir que $P = 10$, $Q = 10$, $N = 255$, e g é representada pela matriz a seguir.

$$g = \begin{bmatrix} 221 & 222 & 224 & 226 & 227 & 229 & 230 & 230 & 230 & 230 \\ 225 & 226 & 227 & 230 & 232 & 233 & 234 & 227 & 231 & 235 \\ 221 & 222 & 224 & 226 & 227 & 229 & 230 & 226 & 227 & 231 \\ 212 & 214 & 216 & 218 & 219 & 221 & 221 & 226 & 223 & 219 \\ 213 & 209 & 212 & 210 & 203 & 213 & 223 & 221 & 215 & 212 \\ 213 & 210 & 204 & 222 & 234 & 222 & 216 & 201 & 218 & 215 \\ 226 & 227 & 208 & 190 & 168 & 172 & 239 & 234 & 213 & 206 \\ 64 & 31 & 0 & 9 & 21 & 18 & 76 & 217 & 224 & 229 \\ 4 & 0 & 0 & 77 & 150 & 85 & 8 & 16 & 151 & 236 \\ 19 & 13 & 28 & 107 & 171 & 136 & 62 & 0 & 15 & 151 \end{bmatrix}$$

Ao se tratar de uma imagem 3D, ou seja, uma superfície (figura 2.2 (b)), levamos em consideração alguns outros parâmetros. Por exemplo, normalizaremos a altura da superfície trabalhada no mesmo intervalo que determinamos para representar as intensidades de luz. Assim cada pixel terá um valor de nível de cinza referente à sua altura. Portanto, através dos índices da matriz g obtemos as coordenadas (x,y) e para cada elemento da matriz teremos o valor da altura $z=f(x,y)$. Em imagens de microscopia o nível de cinza não reflete luminosidade mas sim outras propriedades físicas, como por exemplo, altura ou fase.

(a)

Figura 2.2: Imagem 2D em níveis de cinza em (a) e em (b) a imagem considerada como uma superfície.

2.2 Amostragem e Quantização da imagem

A resolução (grau de detalhes discerníveis) de uma imagem depende fortemente dos parâmetros de amostragem e quantização da imagem. Quanto maiores forem esses parâmetros, melhor será a imagem original aproximada pela matriz digitalizada. É difícil definir o que é uma "boa" imagem, porque a qualidade de imagens não é apenas subjetiva, mas também fortemente dependente dos requisitos de uma determinada aplicação.

Podemos observar no exemplo a seguir como uma imagem digital degrada quando sua resolução espacial e quantização de níveis de cinza são diminuídas. A figura 2.3(a) mostra a imagem de uma paisagem de 256x256 pixels e 256 níveis de cinza.

Figura 2.3: Efeitos da redução da resolução espacial em (a) com 256x256, (b) com 128x128, (c) com 64x64 e (d) com 32x32 pixels .

A figura 2.3(b)-(d) mostra os resultados da redução espacial de 256x256 para 128x128, 64x64, 32x32 pixels respectivamente. Observe que em todos os casos o número máximo de níveis de cinza permitido foi 256. Sendo a mesma a área de exibição usada para cada imagem, os pixels nas imagens de menor resolução tiveram de ser duplicados no tamanho, de maneira a preencher toda a área de exibição. Essa replicação de pixels produz um efeito de xadrez, o qual é visível nas imagens de resolução mais baixa. Note

também que os pequenos detalhes na imagem são progressivamente removidos, enquanto estruturas maiores são enfatizadas.

Figura 2.4: Pirâmide de imagem. Cada imagem tem o mesmo número de pixels respectivos a ordem da figura 2.3.

No caso de uma pirâmide de imagem, onde a imagem é sucessivamente reduzida pelo decréscimo de pixels, também mostra a importância da amostragem. Uma sequência de imagens obtidas desta maneira é apresentada na figura 2.4(a)-(d), que tem o mesmo número de pixels conforme suas respectivas partes mostrada na figura 2.3(a)-(d), exceto que agora o tamanho do pixel é mantido constante para todas imagens. Podemos então observar que a imagem da figura 2.4(a) apresenta estruturas de escalas menores (ou seja, pequenos detalhes) enquanto nas figuras 2.4(b)-(d) os detalhes são filtrados conforme reduzimos o número de pixels, destacando então os elementos de escalas maiores.

Portanto, dependendo da análise proposta para classificação da imagem, que no nosso caso será estimar a dimensão fractal da imagem, temos que tomar um certo cuidado

na amostragem da imagem, pois dependendo da técnica aplicada, os pequenos detalhes podem se perder, e outros podem se destacar, causando um erro no resultado final.

2.3 Geometria Discreta

O conceito de geometria discreta está voltado principalmente na relação entre os pixels de uma imagem.

2.3.1 Vizinhos de um pixel

Um pixel p , em uma imagem 2D, de coordenadas (x,y) possui quatro vizinhos (2 horizontais e 2 verticais), cujas coordenadas são dadas por

$$(x + 1, y), (x, y + 1), (x - 1, y), (x, y - 1).$$

Esse conjunto de pixels, chamado *vizinhança-de-4* de p , é representado por $N_4(p)$. Cada pixel está a uma unidade de distância de p .

Os quatros vizinhos diagonais de p possuem como coordenadas

$$(x + 1, y + 1), (x - 1, y - 1), (x - 1, y + 1), (x + 1, y - 1).$$

e são representados por $N_D(p)$. Esses pontos, juntos com a *vizinhança-de-4*, são chamados de *vizinhança-de-8* de p , representada por $N_8(p)$.

Figura 2.5: Vizinhança-de-4 em (a) e vizinhança-de-8 em (b) para o pixel p no espaço bidimensional.

As vizinhança-de-4 e vizinhança-de-8 são características da análise de imagens em 2D, quando trabalhamos com imagens de superfície outras vizinhanças são determinadas, ou seja, vizinhança-de-6 e vizinhança-de-26.

Figura 2.6: Vizinhança-de-6 em (a) e vizinhança-de-26 em (b) para o pixel p no espaço tridimensional.

Onde a vizinhança-de-6 para p possuem como coordenadas

$$(x+1, y, z), (x, y+1, z), (x-1, y, z), (x, y-1, z), (x, y, z+1), (x, y, z-1),$$

que estão a uma unidade de distância de p , e são representa por $N_6(p)$. E a vizinhança-de-26 para p , $N_{26}(p)$, possuem alem de $N_6(p)$, as seguintes coordenadas:

$$\begin{aligned} &(x+1, y+1, z), (x-1, y+1, z), (x-1, y-1, z), (x+1, y-1, z), (x+1, y+1, z+1), (x-1, y+1, z+1), \\ &(x-1, y-1, z+1), (x+1, y-1, z+1), (x+1, y+1, z-1), (x-1, y+1, z-1), (x-1, y-1, z-1), (x+1, y-1, \\ &z-1), (x+1, y, z+1), (x, y+1, z+1), (x-1, y, z+1), (x, y-1, z+1), (x+1, y, z-1), (x, y+1, z-1), \\ &(x-1, y, z-1), (x, y-1, z-1). \end{aligned}$$

2.3.2 Distância Euclidiana discreta

Considerando os pixels p e q de coordenadas (x_p, y_p) e (x_q, y_q) respectivamente (figura 2.7), a distância Euclidiana entre p e q é definida como:

$$D_E(p, q) = \left[(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2 \right]^{1/2} \quad (2.1)$$

Para essa medida de distância, os pixels que têm uma distância de (x, y) menor ou igual a valor de distância r são considerados pontos contidos em um disco de raio r centrado no pixel de coordenadas (x, y) (figura 2.7(b)) [COSTA, 1999a; COSTA, 2001a].

Figura 2.7: Representações da distância Euclidiana numa grade bidimensional em (a) e do disco de raio r centrado no pixel p de coordenadas (x, y) em (b).

A idéia de distância Euclidiana para grade tridimensional é similar a discutida acima, sofrendo apenas uma mudança de coordenadas, ou seja, trabalharemos com coordenadas (x, y, z) do pixel e consideraremos esferas de raio r centralizadas num pixel p de coordenadas (x, y, z) . A distância Euclidiana entre pixels p e q será representada por:

$$D_E(p, q) = [(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2 + (z_p - z_q)^2]^{1/2} \quad (2.2)$$

A distância Euclidiana será adotada como meio de medir o raio para as dilatações sofridas pela superfície estudada, conforme explicaremos no capítulo 3, seção 3.3.4.1.

2.4 Aquisição de imagem no SPM

Figura 2.8: Esquema do funcionamento do microscópio de varredura por ponta de prova, o SPM (imagem retirada de [DIGITAL INSTRUMENTS]).

O SPM é usado em uma ampla variedade de áreas, incluindo ciência de superfície fundamental, análise de rugosidade de superfície, e especialmente imagens tridimensionais de amostras microscópicas. O SPM proporciona medidas de propriedades físicas tais como condutividade da superfície, campos magnéticos, distribuição de cargas estáticas, etc [PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS].

Os componentes básicos do SPM estão ilustrados na figura 2.8. O microscópio tem um *scanner* que proporciona uma varredura nas direções *x-y* sobre a superfície da

amostra, capturando através de um detector as deflexões de uma ponta de prova, a qual se movimenta através do tipo de contato que sofre com a superfície. Um aparelho controla a manutenção exigida pelo microscópio durante a aquisição da imagem, como calibração e ajuste de sinais, além de permitir que as informações fornecidas pelo microscópio sejam transformadas em sinais digitais por um computador. Este através de uma interface eletrônica fornece informações gráficas para um monitor de controle, o qual o usuário tem interação em tempo-real com o sistema de obtenção de dados, e para um monitor de *display*, o qual fornece a imagem final da superfície da amostra analisada.

Conforme discutido no capítulo 1, na família de microscopia SPM destacam-se dois importantes microscópios, que são o AFM e o STM, que se diferenciam devido à diferença de captura do sinal z durante a varredura.

No microscópio de força atômica, AFM, a sonda (ou ponta de prova) é uma ponta fina ligada a uma pequena viga (cantilever) de baixa constante de elasticidade, feita de material isolante ou condutor (figura 2.9). Quando a ponta se aproxima da superfície, ela sente a força entre os átomos (força de repulsão) e provoca a deflexão no cantilever. Essa deflexão é medida por um sensor óptico que detecta as variações de posição e de intensidade de luz produzidas. Essas diferenças, captadas no detector, são armazenadas e processadas por um computador.

Figura 2.9: Esquema do funcionamento do AFM (imagem retirada de [PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS]).

No microscópio de tunelamento, STM, a ponta metálica e a amostra condutora são aproximadas até provocarem uma corrente elétrica de aproximadamente $10 \text{ \AA}$. Este fluxo de elétrons denomina-se corrente de tunelamento, e varia com a distância entre a ponta e a amostra. Com base na posição da sonda, bem como na variação da corrente elétrica, é possível transformar esses dados em um mapa topográfico da superfície.

Figura 2.10: Esquema da interação da ponta e a amostra para o STM (imagem retirada de [PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS]).

Para ocorrer tunelamento de elétrons, tanto a amostra quanto a ponta devem ser condutoras ou semicondutoras. Para o AFM não há essa necessidade, enquanto que no caso do STM não se consegue imagens de materiais isolantes.

Tanto para os dados obtidos através da técnica AFM ou STM, existe um programa (software) cuja finalidade é transformar dados em imagens topográficas bi e tridimensionais, numa escala atômica, conforme as imagens mostradas na figura 2.11(a) e (b).

(a)

(b)

Figura 2.11: Imagens: bidimensional em (a) e tridimensional em (b) obtidas pelo microscópio.

Uma imagem gerada através da técnica SPM é inicialmente um arquivo binário, o qual é transformado em formato ASCII que fornece informações sobre a superfície. A figura 2.12 mostra uma representação da imagem fornecida pelo microscópio, em

formato ASCII . A imagem é composta por um cabeçalho, ou texto, que fornece as informações de como a imagem foi produzida e quais são suas características, como tamanho, escala, etc. Após o cabeçalho são fornecidos os valores do sinal z da imagem no formato de uma matriz, cujos índices são considerados os valores das coordenadas (x,y) e que representa uma imagem de tamanho 512×512 pixels. Como o valor de z varia numa escala muito grande, temos que normalizá-la numa escala de 0 a 255 a fim de transformá-la numa imagem em níveis de cinzas, conforme a equação (2.3) abaixo:

$$h_{normalizada} = \frac{(z_{xy} - z_{\min}).255}{z_{\max} - z_{\min}}, \quad (2.3)$$

onde $h_{normalizada}$ é a altura normalizada em (x,y) , z_{xy} é a altura original, $z_{\min}$ e $z_{\max}$ são respectivamente o menor e o maior valor de z para a imagem analisada. Portanto, no final dos ajustes necessários iremos trabalhar com uma superfície representada numa matriz tridimensional, isto é, uma matriz de tamanho $512 \times 512 \times 256$ pixels.

```

?*File list
\Version: 0x04240000
\Date: 09:57:40 AM Wed Dec 03 1997
\Start context: OL2
\Data length: 8192
\*NC Afm list
\Parameter select: Main
\Operating mode: Image
\Scan size: 2000 nm
\X offset: -1480.39 nm
\Y offset: -29.412 nm
.
.
.
\Valid data len X: 512
\Valid data len Y: 512
\Image data: Phase
\Z magnify image: 0.552687
\Z scale: 90.4669 deg (32938)
\*File list end

14861    14797    14745    14671    14618    14575    14544    14459    14396
14322    14290    14248    14216    14174    14121    14068    14005    13952
13920    13899    13878    13836    13793    13740    13709    13666    13624
13582    13508    13466    13423    13360    13307    13254    13233    13149
13096    13064    12990    12884    12853    12800    12736    12652    12599
12557    12504    12451    12409    12377    12324    12282    12218    12166
12123    12134    12081    12028    11965    11901    11838    11785    11732
11669    11595    11542    11510    11436    11362    11309    11267    11204
11109    11035    11003    10961    10908    10865    10791    10717    10622
10559    10474    ...

```

Figura 2.12: Representação da imagem em formato ASCII obtida pela técnica de SPM.

3 Conceitos em Fractais

O conceito Fractal é aplicado em diferentes problemas de análises de imagens. Essas medidas são úteis para caracterizar problemas que requerem análise de complexidade de estruturas auto-similares através de diferentes escalas, sendo particularmente adequadas para caracterização de cobertura espacial e superfície de contato.

Este capítulo apresentará uma introdução conceitual das idéias básicas de formas fractais e alguns dos diferentes métodos usados para a estimação da dimensão fractal.

3.1 O que é um Fractal

Incapazes de descreverem as formas de nuvens, montanhas, árvores ou outros modelos da natureza que são irregulares e fragmentados, Benoit Mandelbrot em 1977 [MANDELBROT, 1977] tomou a iniciativa perante outros matemáticos propondo um novo estudo morfológico das "amorfas", identificando uma família de formas chamada *FRACTAIS*.

Definição: Fractal seria então uma forma (curva ou superfície) para a qual a dimensão Hausdorff-Besicovitch excede estritamente a dimensão topológica, onde as formas como curvas, superfícies e sólidos apresentam dimensão topológica D_T 1, 2 e 3 respectivamente [MANDELBROT, 1983].

A dimensão Hausdorff-Besicovitch D , formulada por Hausdorff em 1919 e apresentada de forma final por Besicovich é definida como segue:

No espaço Euclidiano R^E , ambas D_T e D são no mínimo 0 e no máximo E . Mas a semelhança termina aí. A dimensão D_T é sempre um valor inteiro, e D não necessariamente precisa ser um valor inteiro. E as duas dimensões não precisam coincidir, elas só devem satisfazer à desigualdade de Szpilrajn [MANDELBROT, 1983], ou seja

$$D \geq D_T.$$

No caso de formas Euclidianas, $D = D_T$.

Consideraremos um conjunto de pontos no espaço Euclidiano de dimensão $E = 3$. Por exemplo, o conjunto de pontos que compõem uma reta tem dimensão topológica $D_T = 1$ e dimensão Hausdorff-Besicovitch $D = 1$, como $D_T = D$ para a reta, então ela não é um fractal de acordo com a definição. Similarmente o conjunto de pontos que formam uma superfície tem $D_T = 2$ e $D = 2$ ou um conjunto de pontos que formam uma esfera $D_T = 3$ e $D = 3$ não são fractais [FEDER, 1989].

O fato de que D não precisa ser um inteiro merece uma terminologia à parte. Se usarmos fração de um modo geral, como sinônimo de um número real não inteiro, a dimensão Hausdorff-Besicovitch pode ser chamada dimensão *fracionária*. Mas D pode ser um inteiro (não maior que E mas estritamente maior que D_T , e então podemos chamá-la de *dimensão fractal*.

3.2 Dimensão Fractal

A dimensão fractal pode ser determinada teoricamente se houver conhecimento do processo de formação do objeto. Um objeto geralmente considerado como 1D, um segmento de reta por exemplo, que possui uma propriedade chamada *auto-similaridade* (figura 3.1), pode ser dividido em N partes idênticas tais que sejam escalonadas pelo fator $s = 1/N$ de um todo. Similarmente, para um objeto 2D, tal como a área de um quadrado, pode ser dividida em N áreas auto-similares tais que sejam escalonadas pelo fator $s = 1/N^{1/2}$. E um objeto 3D, como um cubo, pode ser dividido em N cubos menores tais que sejam escalonados pelo fator $s = 1/N^{1/3}$. Portanto um objeto auto-similar pode ser dividido em N cópias menores dele mesmo tal que seja escalonada pelo fator s [SCHROEDER, 1996], onde

$$s = \frac{1}{\sqrt[D]{N}} \therefore N(s) = \frac{1}{s^D} \therefore N(s) = s^{-D} \quad (3.1)$$

Assim, sua dimensão fractal é dada por

$$D = \frac{\log(N)}{\log(1/s)} \quad (3.2)$$

Figura 3.1: Auto-similaridade da reta, do quadrado e do cubo.

Por exemplo, qualquer segmento da curva de Koch (figura 3.2) é composta de 4 subsegmentos tais que cada um é dividido pelo fator de $1/3$ da sua parte original, portanto sua dimensão fractal é:

$$D = \frac{\log(4)}{\log(3)} \cong 1,26$$

A dimensão fractal D , diferente da noção familiar da dimensão Euclidiana, não precisa assumir um valor inteiro. O valor $D = 1,26$ significa que a curva de Koch preenche mais espaço que uma linha reta ($E = 1$), mas menos que uma área Euclidiana plana ($E = 2$).

Figura 3.2: Processos da construção da curva de Koch.

A esponja de Menger ou esponja de Sierpinski, como também é conhecida (figura 3.3), é um fractal sólido descrito da seguinte maneira: dado um cubo (nível 0), divide-o em $27 = 3 \times 3 \times 3$ cubos menores de mesmo tamanho e remova o cubo central e os 6 cubos que estão no centro de cada face, restando então 8 cubos para cada face num total de 20 cubos (nível 1). Agora para cada um destes 20 cubos deve-se dividi-los em 27 cubos menores e subtrair 7 cubos de cada grupo (nível 2) e assim por diante [PEITGEN, 1992].

A dimensão fractal para este sólido é então:

$$D = \frac{\log(20)}{\log(3)} \cong 2,73$$

O que significa que a esponja de Menger preenche mais espaço que uma superfície plana ($E = 2$), mas menos espaço que um cubo sólido ($E = 3$).

Figura 3.3: Esponja de Menger ou esponja de Sierpinski.

As imagens e formas encontradas na natureza não são auto-similares, no entanto, existe uma outra classe de objetos fractais chamado *auto-afins*, que são formas fractais que apresentam diferentes valores de dimensão fractal para escalas de observação diferentes. Para esses tipos de fractais, não se conhecem leis que produzam tais modelos. Então, para obter a medida D é necessário construir métodos para a estimação de dimensão fractal.

3.3 Estimação da dimensão fractal

A seguir apresentaremos alguns métodos utilizados para estimar a dimensão fractal.

3.3.1 Box-Counting

A dimensão Box-Counting propõe uma medida sistemática, que se aplica a qualquer estrutura no plano e pode ser adaptada para estruturas no espaço. Baseia-se em particionar a imagem em quadrados de lados r e contar o número $N(r)$ de caixas contendo no mínimo uma porção (o quão pequena for) da forma (imagem). Variando o valor de r , é possível montar um gráfico de $\log(N(r))$ x $\log(r)$. A figura 3.4 apresenta um exemplo de variação do valor r para a imagem de uma folha. O valor da dimensão fractal pode ser calculado em relação ao valor absoluto (módulo) do coeficiente angular da reta interpolada nos pontos do gráfico *log-log*, conforme ilustrado na figura 3.5. O que é equivalente a resolver a equação da dimensão Box-Counting [PEITGEN, 1992; STOYAN, 1995] abaixo:

$$N(r) = r^{-D_{BC}} \quad (3.3)$$

A dimensão Box-Counting D_{BC} , conhecida também como dimensão Kolmogorov, é outra forma especial da dimensão fractal de Mandelbrot.

A seqüência de tamanhos de caixas, iniciando pela imagem inteira, é geralmente reduzida pela metade de um nível para o outro próximo. No entanto, é importante notar que estruturas fractais verdadeiras são idealizações que podem nunca chegar a existir nem ser completamente representada por computadores. As principais razões para isto são: (a) auto-similaridade infinita (*ad infinitum*) que nunca foi verificada para forma na natureza. Isso vale para a escala microscópica, onde a dimensão atômica é sempre alcançada em última instância, e na escala macroscópica, visto que a forma tem um tamanho finito; e (b) a resolução limitada adotada em imagens digitais tende a filtrar os detalhes muito pequenos da forma (imagem). Assim, é necessário assumir que formas "fractais" apresentam fractalidade limitada, isto é, elas são fractais com respeito a um intervalo de escala limitada [COELHO, 1996]. Isto está refletido no gráfico $\log(N(r)) \times \log(r)$ da figura 3.6 pela presença das três regiões diferentes, isto é, uma região não-fractal ($D_{BC} \cong 1$), uma região fractal ($D_{BC} > 1$) e uma região com dimensão zero. Esta organização geral da curva pode ser facilmente entendida levando em conta os tamanhos relativos das caixas e a forma (imagem). Quando as caixas são muito pequenas, elas tendem a "ver" as porções da forma como linhas retas, fornecendo dimensão 1. Conforme os tamanhos das caixas crescem, os detalhes complexos da forma começam a ser percebidos, fornecendo dimensão fractal possivelmente maiores que 1 e menores que 2. Finalmente, quando as caixas se tornam muito grandes, a forma inteira pode ser compreendida por uma única caixa, implicando dimensão zero. Consequentemente, a linha deveria ser ajustada para uma porção fractal do gráfico $\log(N(r)) \times \log(r)$ a fim de obter uma estimativa mais exata do comportamento fractal limitado da forma sujeita a análise.

Segundo Russ [RUSS, 1994], o método de estimação Box-Counting é impróprio para os casos de formas auto-afins.

Figura 3.4: Número N de caixas necessárias para cobrir a estrutura em diferentes tamanhos de caixas r

Figura 3.5: Gráfico $\log\text{-}\log$ de $N(r)$ por r . O coeficiente angular da reta plotada no gráfico dá o valor da dimensão fractal $D_{BC}=1,7722$ para a folha. Este valor está entre a dimensão Euclidiana de uma reta e a de uma superfície lisa.

Figura 3.6: Diagrama esperado para a dimensão Box-Counting D_{BC} para uma forma (imagem) qualquer.

3.3.2 Rugosidade Média Quadrática

Este método permite calcular a dimensão fractal apenas para imagens 3D, ou seja, imagens de superfícies. O principal propósito é analisar a superfície em função do tamanho da janela de observação [PEREIRA-DA-SILVA, 2001]. Um dos parâmetros que devemos levar em consideração é o expoente da rugosidade α , o qual através da teoria da escala dinâmica [DE SOUZA, 2001] permite-nos estudar a rugosidade da superfície, ou seja, dizer o quanto a superfície é suave ou áspera. O expoente α está relacionado com a dimensão fractal de uma superfície pela relação

$$DF = E - \alpha \quad (3.4)$$

onde E é a dimensão Euclidiana onde a superfície é analisada, ou seja $E = 3$.

A partir uma imagem de tamanho $N \times M$ pixels, e sendo $x = 0, 1, \dots, N$ e $y = 0, 1, \dots, M$, a rugosidade R_{rms} é obtida pela seguinte equação

$$R_{(rms)}(N, M) = \sqrt{\frac{1}{NM} \sum_{x=1}^N \sum_{y=1}^M [h(x, y)] - \bar{h}(N, M)]^2} \quad (3.5)$$

onde $h(x, y)$ é a altura de cada ponto (pixel) de coordenadas (x, y) da imagem e, $\bar{h}(N, M)$

é a altura média da superfície e é dada por

$$\bar{h}(N, M) = \frac{1}{NM} \sum_{x=1}^N \sum_{y=1}^M h(x, y) \quad (3.6)$$

Através de um gráfico *log-log* da rugosidade, R_{rms} , pelo tamanho da largura da janela de varredura, L , figura 3.7, pode-se medir o expoente de rugosidade α calculando o coeficiente angular da reta interpolada nos pontos do gráfico.

Figura 3.7: Gráfico *log-log* da Rugosidade R_{rms} pelo comprimento da janela analisada L .

Devido ao comportamento da curva apresentada no gráfico, apenas algumas regiões específicas acabam sendo levadas em conta na hora de interpolar a reta. No capítulo 4 iremos explicar com detalhes como e porque é feita esta escolha.

Outro ponto a ser considerado é que a rugosidade superficial medida pelo SPM frequentemente é expressa através de parâmetros estatísticos representados por um único número como a rugosidade média quadrática. No entanto, duas superfícies com morfologias completamente distintas podem apresentar o mesmo valor da Rugosidade Média Quadrática, R_{rms} . Isto se deve ao fato de que a medida da rugosidade R_{rms} leva apenas em consideração os valores das estruturas verticais e não o valor das estruturas horizontais. Portanto, os valores de rugosidade R_{rms} não podem caracterizar de maneira completa uma superfície.

3.3.3 Espectro de Potência

A análise dos dados obtidos pelo software que acompanha o microscópio é geralmente apresentada no domínio da frequência do espectro, usando a *Transformada de Fourier*. Este método baseia-se em partir das coordenadas do pixel (x,y) de uma imagem discreta $N \times M$, onde $x = 0,1,..N$ e $y = 0,1,..M$, sendo $h(x,y)$ a coordenada z de cada pixel (x,y) , a qual consideraremos como uma função altura definida no domínio espacial, estudar a rugosidade da superfície de imagens de SPM. A *Transformada de Fourier* bidimensional [BRIGHAM, 1988] é dada pela seguinte equação:

$$F(u,v) = \frac{1}{NM} \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} h(x,y) \exp[-j2\pi(\frac{ux}{M} + \frac{vy}{N})] \quad (3.7)$$

O valor da amplitude no domínio da frequência, $F(u,v)$, quando elevado ao quadrado é conhecido como Espectro de Potência do perfil ou sinal original. A função P (ou seja, a função da densidade espectral de potência) é obtida por

$$P(u,v) = |F(u,v)|^2 \quad (3.8)$$

e sendo k o comprimento de onda no espaço recíproco, temos então

$$k^2 = u^2 + v^2, \quad (3.9)$$

que conseqüentemente fornece a seguinte relação:

$$P(k) = |F(k)|^2. \quad (3.10)$$

Visto que o perfil de uma superfície fractal pela definição inclui informações em quase todas as frequências, parece ser difícil aplicar este método, mas de fato, a relação é muito simples de se realizar. O método de estimação fractal por espectro de potência apresenta uma variação “aparentemente” linear (considerando apenas um determinado intervalo) entre o $\log$ da amplitude ao quadrado e o $\log$ da frequência conforme mostra o gráfico da figura 3.8. O coeficiente angular α da reta interpolada no determinado intervalo linear do gráfico é relacionado com a equação de dimensão fractal D_{PSD} , conforme a relação (3.11) [PEITGEN, 1988; DUMAS, 1993; VATEL, 1993].

$$D_{PSD} = 4 + \left(\frac{\log P(k)}{2 \log(1/k)} \right) \Leftrightarrow D_{PSD} = 4 + \frac{\alpha}{2} \quad (3.11)$$

Figura 3.8: Gráfico $\log\text{-}\log$ do Espectro de Potência $P(k)$ em função do inverso do comprimento de onda k .

Este método fornece uma das mais diretas técnicas para análise de perfis de superfícies fractais e que pode ser aplicado em imagens auto-afins ou auto-similares.

3.3.4 Salsicha de Minkowski

Minkowski foi outro matemático que considerou maneiras para descrever curvas "monstras" que eram contínuas mas tinham comprimentos e derivadas indefinidas. A dimensão Minkowski, ou seja a dimensão fractal calculada pelo método de Minkowski, é diferente das dimensões de Hausdorff-Besicovitch e a de Kolmogorov. Do ponto de vista matemático, o valor da dimensão Hausdorff-Besicovitch é uma dimensão "verdadeira", porque se obtém através de fractais formados por meio de certa ordem (lei), enquanto os outros não. Falconer mostra em [FALCONER, 1990] que a dimensão Minkowski é maior ou igual à dimensão Hausdorff, e há muitos casos em que a desigualdade se mantém. A discretização dos pontos dados para o limite geralmente assegura que os dois não serão iguais e podem criar valores maiores. A dimensão Kolmogorov (Box-Counting) também não é uma dimensão "verdadeira" e, em geral, fornece um resultado acima do valor da dimensão Minkowski, que como notado já pode ser maior que a dimensão de similaridade [RUSS, 1994].

O método da Salsicha de Minkowski consiste em dilatar a forma analisada (contorno de uma imagem segmentada) através de um disco de raio R e, a partir disto, estudar a área de influência, ou cobertura espacial, em relação ao parâmetro R .

O procedimento para obtenção da Salsicha de Minkowski para um limite (curva) é mostrado na figura 3.9. Um círculo é varrido continuamente ao longo dos pixels da borda da forma (contorno), sendo cada pixel da borda, o pixel do centro de cada círculo. Os pixels que estão limitados pelo círculo de raio R , são somados fornecendo então a área coberta, ou seja, a Salsicha de Minkowski para o raio R .

Figura 3.9: (a) Curva original a ser dilatada; (b) círculo digital de raio igual á 2; (c)

Círculo centralizado num pixel da curva, preenchendo os pixels limitados por ele;

Dilatação de raio $R=2$ da forma original em (e), ou seja, a Salsicha de Minkowski de raio igual á 2, a partir dos círculos centralizados (d).

Este método pode ser aplicado para medidas de superfícies auto-similares ou auto-afins. Para uma superfície, uma esfera de raio R é movida por todos os pontos (pixels) da superfície, varrendo completamente um volume (algumas vezes chamado de

Manta de Minkowski), da mesma forma que a Salsicha de Minkowski é obtida varrendo uma curva (contorno).

A dimensão fractal é obtida analisando o gráfico *log-log* das áreas $A(r)$ (ou volumes $V(r)$) de influência em relação aos respectivos raios r . (Para um exemplo deste gráfico veja o capítulo 4.3). Os pontos do gráfico são interpolados por uma reta e a inclinação α , ou seja o coeficiente angular da reta, fornece o valor da dimensão fractal D_{SM} através da seguinte relação

$$D_{SM} = E - \alpha \quad (3.11)$$

onde E é a dimensão Euclidiana do espaço onde a forma está embutida.

3.3.4.1 Salsicha de Minkowski e a Dilatação Exata

O conceito de *Dilatação Exata* [COSTA, 1999a; COSTA, 1999c] foi introduzido com o propósito de obter todas as possíveis versões dilatadas para um contorno digital (curva ou superfície) sem omissão ou repetição de nenhuma delas. Isso supera o problema do qual a composição de elementos estruturantes normalmente usados em morfologia matemática tende a produzir distâncias distorcidas. Como tal, este conceito melhora o significado natural para definir um conjunto adequado de raios a serem usados pelo método baseado em Salsicha de Minkowski.

Por exemplo, dada uma curva contínua 2D C , sua dilatação por um disco de raio R , $C(r)$ pode ser obtida considerando o conjunto de todos os pontos limitados pelo disco

cujo centro é o ponto da curva. Enquanto isso parece trivial no espaço contínuo, no espaço discreto há dificuldades para representar este mesmo conjunto de pontos. O problema é que nem todas as distâncias numa grade ortogonal sobreposta à imagem digital são possíveis de se obterem. Por exemplo, para $0 \leq R \leq 2$, temos como possíveis distâncias 0, 1, $\sqrt{2}$ e 2 (figura 3.10).

Figura 3.10: As possíveis dilatações para $0 \leq R \leq 2$ numa grade ortogonal 2D.

Este fato tem motivado a aproximação da Dilatação Exata a ser representada por uma estrutura de dados especial, chamada SEDR - *Sorted Euclidean Distance Representation* [COSTA, 2000; MONTAGNOLI, 2000; COSTA, 2001a], a qual é usada para representar todas as possíveis distâncias numa grade até um valor de raio máximo determinado R_{max} .

Em cada distância processada, a respectiva versão dilatada do contorno é computada. A figura 3.11 ilustra 5 diferentes dilatações exatas (b)-(g) da forma original "menina" em (a). É interessante observar que a família das dilatações obtidas deste modo permite uma representação multiescalar natural da forma original, sendo R o parâmetro de escala espacial.

Figura 3.11: Forma original imagem "menina" em (a) e as dilatações de raio 1, $\sqrt{2}$, 2, $\sqrt{5}$, $\sqrt{8}$ e 5 em (b)-(g) respectivamente, de seu contorno usando o conceito da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata.

Para o caso da grade tridimensional, ou seja, para quando estamos trabalhando com dilatações na superfície, o método leva em consideração todos os pixels que estejam limitados por uma esfera de raio r .

Os gráficos *log-log* obtidos por este método são analisados no capítulo 4.3 adiante.

4 Análise Multiescala

4.1 Análise de Sinais

Um sinal $u(t)$ apresenta detalhes em diferentes escalas espaciais. Ao analisá-lo por uma *Transformação Multiescala* $U(b,a)$ levamos em consideração dois parâmetros: b , associado à variável tempo t de $u(t)$, e a , associado à escala analisada. O parâmetro escala a é geralmente relacionado com o inverso da frequência f , isto é, $\frac{1}{a} \equiv f$, a qual sugere a seguinte relação de termos: *tempo-escala* e *tempo-frequência*. Assim um sinal unidimensional $u(t)$ é dito ser explorado pela transformação bidimensional $U(b,a)$, com o propósito de construir a informação base para suas estruturas em diferentes escalas.

Os diferentes sistemas de análise de sinais baseado em Multiescala podem ser resumidos pelo seguinte algoritmo [COSTA, 2001a]:

Algoritmo: Análise Multiescala de sinais

1. Obter o sinal a ser analisado $u(t)$;
2. Calcular a Transformação Multiescala $U(b,a)$ de $u(t)$;
3. Extrair as principais e importantes características da escala de $u(t)$ de $U(b,a)$.

A seguir iremos expor uma das mais importantes Transformações Multiescala e sua estratégia para extrair características multiescala.

4.2 Espaço-Escala

A aproximação *espaço-escala* para análise de sinais multiescala é um dos mais populares métodos deste tipo. Segundo Witkin [WITKIN, 1983], as principais características de um sinal são geralmente associadas aos seus pontos extremos, tais como pontos de máximos ou mínimos locais. Assim, é importante desenvolver ferramentas capazes de detectar e localizar esses pontos, levando-se em consideração o sinal da derivada. Os pontos de máximo e de mínimo locais de $u(t)$ correspondem aos *zero-crossings* de $u^{(1)}(t)$, ou seja, da primeira derivada de $u(t)$.

Na prática, em situações de análise de imagens, deparamos com sinais analíticos que apresentam derivadas desconhecidas, requerendo métodos de diferenciação numérica para resolver este problema, como esses métodos dependem de uma vizinhança ao redor de cada ponto, a definição de comprimento de vizinhança de fato corresponde à definição da escala analisada. Um importante fato a ser destacado sobre muitos métodos de diferenciação numérica é que estes processos tendem a aumentar o ruído em altas frequências, requerendo assim um processo de filtragem para compensar tais efeitos. O filtro Gaussiano é uma das aproximações mais usadas para este problema. Neste caso, o sinal diferenciado desejado pode ser obtido pela convolução do sinal $u^{(1)}(t)$ com a função Gaussiana $g(t)$ conforme a aplicação da propriedade da convolução abaixo [BRIGHAM, 1988; COSTA 2001a]:

$$u^{(1)}(t) * g(t) = (u(t) * g(t))^{(1)} = u(t) * g^{(1)}(t), \quad (4.1)$$

ou seja, o sinal $u(t)$ pode ser diferenciado pela sua convolução com a primeira derivada da função Gaussiana. Os pontos extremos de $u(t)$ podem ser localizados examinando os *zero-crossings* do sinal convoluído.

É importante notar que o filtro Gaussiano (ver Apêndice B) tem um parâmetro σ , chamado de desvio padrão, que controla sua largura, e que conseqüentemente controla o grau de suavização do filtro. Portanto, o parâmetro σ está diretamente relacionado à escala espacial da função Gaussiana, já que quanto maior o desvio padrão, maior a escala analisada e, portanto, os detalhes das escalas menores tornar-se-ão impercebíveis. Witkin [WITKIN, 1983] generalizou este conceito para definição do parâmetro de escala (o desvio padrão da Gaussiana) como uma variável contínua. Deste modo, para cada escala, um conjunto de pontos extremos de uma versão suavizada de $u(t)$ pode ser obtido. E assim, o *espaço-escala* de $u(t)$ pode ser definido como a evolução do conjunto destes pontos extremos ao longo do parâmetro escala.

Seja $u(t)$ o sinal a ser analisado e $g_a(t)$ a função Gaussiana com desvio padrão $a > 0$:

$$g_a(t) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2a^2}\right) \quad (4.2)$$

A convolução entre $u(t)$ e $g_a(t)$ é definida como

$$U(t, a) = u(t) * g_a(t) \quad (4.3)$$

em uma escala específica observada a e, para uma dada a_0 . $U(t, a_0)$ é a versão suavizada de $u(t)$. Os pontos extremos de $U(t, a)$ podem ser definidos como os *zero-crossings* de $U^{(1)}(t, a)$, com

$$U^{(1)}(t, a) = u(t) * g_a^{(1)}(t) \quad (4.4)$$

onde $g_a^{(1)}(t)$ define a primeira derivada de $g_a(t)$.

A transformada $U(b, a)$ pode ser vista como uma função de R^2 que assume valores reais ou complexos, dependendo da transformada e do sinal, isto é,

$$U(b, a) : R^2 \rightarrow R \quad \text{ou} \quad U(b, a) : R^2 \rightarrow C$$

Por exemplo, a transformada espaço-escala é obtida por uma série de convoluções entre o sinal e uma derivada da função Gaussiana. Então, se o sinal é de valores reais, a transformada será de valores reais. Por outro lado, ambos os sinais de entrada e transformada resultante serão complexos.

A partir de um estudo realizado na curva *log-log* obtida por um método de estimação da dimensão fractal, pode-se aplicar o conceito da transformada espaço-escala.

4.3 Estudo da curva log-log

Conforme podemos observar nos gráficos *log-log* obtidos pelo método de Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata para formas fractais (figura 4.1(b)), a maioria deles, senão todos, envolvem uma interpolação linear ao longo de um intervalo na escala espacial. Os valores de inclinação obtidos podem variar amplamente dependendo do intervalo de escala espacial considerado, conforme ilustrado na figura 4.1 (b).

Figura 4.1: (a) curva quádrlica de Koch e (b) gráfico *log-log* do Volume em função do Raio para a figura (a) e o valor de Dimensão Fractal para os respectivos intervalos considerados.

Tal fenômeno motiva o desenvolvimento de métodos numéricos exatos capazes de estimar a fractalidade ao longo de várias escalas espaciais, que podem fornecer informações não só sobre a máxima fractalidade da forma, mas também sobre a escala espacial onde ela é alcançada. Em outras palavras, uma caracterização precisa do

comportamento fractal de formas reais ao longo de várias escalas espaciais pode ser usada para fornecer informação adicional e representativa sobre as propriedades geométricas da forma.

O principal propósito desta seção é mostrar uma aproximação numérica altamente precisa para caracterizar a evolução da dimensão fractal de formas digitais ao longo de uma extensão da escala espacial [COSTA, 2001b; COSTA, 2001c].

Após obtermos todas possíveis Salsichas de Minkowski por Dilatação Exata e organizarmos os dados obtidos num gráfico *log-log* como uma função, a qual expressa a evolução da área coberta em termos dos raios exatos, trabalharemos com uma diferenciação da função usando dois métodos para a aproximação multiescala. O primeiro é baseado na Transformada de Fourier [COSTA, 2001a; COSTA, 1997] e o segundo baseado no método de Diferenças Finitas, cujos métodos permitem uma caracterização abrangente da evolução do comportamento fractal da forma ao longo das escalas espaciais. Os métodos aqui apresentados podem ser aplicados em qualquer curva *log-log* obtida, independente do método para estimar a dimensão fractal de uma forma 2D ou 3D.

Devemos fazer algumas observações sobre o gráfico *log-log* antes de trabalharmos com as aproximações numéricas propostas. A figura 4.1(b) apresenta o gráfico *log-log* do volume em termos dos raios obtidos para a curva quádrlica de Koch (figura 4.1(a)), chamaremos esta curva de *função volume*. Devido a não uniformidade da amostragem de pontos ao longo do eixo das abcissa, pois se trata da escala logarítmica, lacunas na parte esquerda da função são formadas. Como estas lacunas nas escalas espaciais iniciais são bastante largas, representando poucos pontos, iremos considerar apenas os raios maiores que um certo valor, por exemplo raios maiores que $\log 4,953 \approx$

1.6, pois assim só trataremos intervalos onde a amostragem do sinal é maior, conforme destacado na figura 4.2(a). As lacunas restantes são removidas levando em consideração o método de diferenciação adotado. Por exemplo, para o método de diferenciação por Fourier, as lacunas restantes são preenchidas através de uma interpolação sobre estes intervalos (figura 4.2(b)), o qual é feito pela média entre cada 2 raios exatos sucessivos e suavizando com a aplicação da Gaussiana [ver Apêndice B]. Aplicando a Gaussiana no domínio de Fourier juntamente com a diferenciação, este esquema é capaz de introduzir uma capacidade multiescala para o método, com a escala espacial determinada em termos do desvio padrão da Gaussiana.

Figura 4.2: (a) Região considerada do gráfico *log-log* e (b) zoom de uma parte do gráfico de interpolação.

4.3.1 Diferenciação Multiescala baseada na Transformada de Fourier

Enquanto esquemas tradicionais de diferenciação numérica, tal como aqueles baseados em Diferenças Finitas poderiam ser usados, a aproximação numérica adotada neste trabalho envolve a diferenciação do sinal no domínio de Fourier, o qual leva em conta o sinal completo (integral) e não só uma pequena vizinhança conforme os métodos de Diferenças Finitas. Este método compreende a Transformada de Fourier da função volume, diferenciando-a no domínio da frequência (baseado na propriedade da derivada da transformada de Fourier [ver Apêndice A]), que é feita juntamente com a suavização da gaussiana e a Transformada de Fourier Inversa. Isto está resumido na equação (4.5) [BRIGHAM, 1988; COSTA, 2001a], onde s é o logaritmo dos raios da salsicha, $h(s)$ é a função volume, f é a frequência, $G_\sigma(f)$ é a Transformada de Fourier da função Gaussiana com desvio padrão σ , e j é o número imaginário.

$$\frac{dh(s)}{ds} = \mathfrak{Z}^{-1} \{ \mathfrak{Z} \{ h(s) \} G_\sigma(f) (j2\pi f) \} \quad (4.5)$$

Tendo definido o sistema numérico para a estimação da primeira derivada, alguns aspectos práticos importantes têm de ser levados em consideração agora. O mais importante deles é o fato de que a extensão periódica da função volume, implicada pela transformada de Fourier discreta, apresentará derivadas descontínuas nas junções dos períodos, com podemos ver na figura 4.3. Este fenômeno é conhecido como Fenômeno de Gibbs [BRIGHAM, 1988]. Ele ocorre porque a transformada de Fourier não converge

uniformemente nas descontinuidades, nas quais as expansões de Fourier assumem os valores médios.

Figura 4.3: A representação periódica da função volume em (a) e a sua respectiva derivada pelo método baseado na Transformada de Fourier com $\sigma = 20$ exibindo descontinuidade da derivada na junção dos pontos.

Figura 4.4: Esquema para replicação da função.

Para resolver esse problema, a função volume é organizada de acordo com o esquema de replicação e reflexão explicado na figura 4.4 para o processo da transformada de Fourier discreta. Os resultados conseguidos por tal esquema, o qual garante a continuidade das derivadas primeiras ao longo do intervalo $[N+1, 2N]$, são mostrados na figura 4.5 com respeito à função volume da figura 4.1 (a).

Outra maneira de resolver este problema utiliza o método variacional baseado em energia, o qual torna a função periódica garantindo uma suavidade para a derivada do sinal [COSTA, 2001c].

Figura 4.5: Função Volume replicada em (a) e (b) a sua derivada da curva replicada usando o método baseado na Transformada de Fourier com $\sigma = 20$ da curva.

Retornando à versão diferenciada justamente na função volume original no intervalo considerado, a função caracteriza o comportamento fractal da forma em termos da escala espacial, representada como $dh(s)$, pode ser agora obtida como $W(s) = n - dh(s)$, onde n é o valor da dimensão Euclidiana, a qual para o volume de uma superfície é igual

ao valor 3. A figura 4.6 apresenta a derivada da função volume e a curva de dimensão fractal com respeito ao sinal original da figura 4.1(a), onde a seta aponta para o valor máximo da dimensão fractal, ou seja 1.4684, enquanto o valor teórico é $\log(8)/\log(4) \approx 1.50$.

Figure 4.6: (a) Derivada da parte considerada da curva da figura 4.2(a) e, em (b) a curva de dimensão Fractal usando $\sigma = 10$.

Para identificar um valor fixo adequado σ , foram processadas experimentalmente várias curvas fractais com valores de dimensão fractal conhecidos analiticamente, enquanto variamos sistematicamente os valores de σ e comparamos os valores estimados e teóricos. Isso é feito na seção 5.3.

4.3.2 Diferenciação Multiescala baseada no Método de Diferenças Finitas

Conforme explicado na seção 4.3.1, a partir do gráfico *log-log* do volume em relação aos seus respectivos raios, devemos considerar apenas a região onde a amostragem do sinal é maior em relação à escala considerada, portanto trabalharemos com o sinal mostrado na figura 4.7.

O método de diferenciação por Diferenças Finitas aplica-se a sinais cujo intervalo de amostragem é igualmente espaçado. Assim ao invés de interpolar o sinal considerado, como fizemos para o método baseado em Fourier, temos que obter um sinal igualmente espaçado no eixo x .

Figura 4.7: Região considerada para fazer a diferenciação multiescala a partir do método de Diferenças Finitas.

Assim escolhemos um valor L para o intervalo da amostragem e a partir deste consideraremos pontos pertencentes ao sinal a ser diferenciado apenas aqueles que em

relação ao primeiro ponto tem um valor de $\log(\text{raio})$ múltiplo (ou muito próximo) do valor do intervalo (figura 4.8). Geralmente L é escolhido como a diferença entre os dois primeiros volumes do sinal considerado. Um sinal igualmente espaçado no espaço de amostragem é então obtido conforme mostra a figura 4.9.

Seja $U(x)$ o sinal do gráfico da figura 4.9, o qual trataremos a partir daqui como a função volume. O método de Diferenças Finitas faz a diferenciação da função levando em consideração apenas os pontos da vizinhança mais próxima (ver Apêndice C), conforme a equação (4.6) abaixo [SMITH, 1992]:

$$U'(x) = \frac{1}{h} \{U(x) - U(x-h)\}, \quad (4.6)$$

onde $U'(x)$ é o valor da derivada da função $U(x)$ em relação aos pares de pontos $(U(x_k), U(x_{k-1}))$ da função, onde $1 \leq k \leq N$ e N é o número de pontos da amostragem.

Figura 4.8: Pontos (em vermelhos) escolhidos a partir do valor do intervalo L.

Figura 4.9: Sinal com intervalo de amostragem igualmente espaçado.

O próximo passo então seria, conforme fizemos para o método de diferenciação por Fourier, replicar a função Volume $U(t)$ a fim de obtermos um sinal periódico, para que não haja distorções no resultado da derivada. O esquema usado para replicação é o mesmo usado para o outro método, que está explicado na figura 4.4. Já que a

diferenciação da função ocorrerá no domínio do espaço a suavização, ou seja, a filtragem da função será feita através de uma convolução com a função Gaussiana (usando $\sigma = 5.3$) (ver Apêndice B). O resultado da replicação da função Volume suavizada pelo filtro Gaussiana está mostrado na figura 4.9 abaixo, a qual chamaremos de função Volume Total.

Figura 4.10: Função Volume replicada e suavizada, conhecida como Função Volume Total.

Aplicando o método de diferenciação por Diferenças Finitas na função do gráfico acima, e considerando apenas a versão diferenciada no intervalo da função Volume original, nós obtemos a derivada da Função Volume original conforme mostrado na figura 4.11.

Figura 4.11: Parte da curva considerada da Função Volume Total e sua respectiva derivada.

A partir do sinal da derivada, isto é $U'(x)$, podemos obter o valor de dimensão fractal multiescala $W(x)$ para a curva quádrlica de Koch, através da relação

$$W(x) = n - U'(x), \quad (4.7)$$

onde n é o valor da dimensão Euclidiana para um volume de superfície, ou seja, $n = 3$. Este resultado pode ser verificado pela figura 4.12, que mostra a curva de fractalidade ao longo da escala espacial considerada, permitindo também saber onde ocorre o valor máximo de dimensão fractal e qual o seu valor, o qual caracteriza a forma fractal estudada.

O gráfico da figura 4.12 mostra que o valor para a máxima dimensão fractal, ou um número muito próximo a ele, se repete para diferentes escalas espaciais, o que garante a auto-similaridade do fractal analisado.

Figura 4.12: Curva da dimensão fractal ao longo da escala espacial considerada. A seta aponta a região onde ocorre o valor máximo da fractalidade para a curva quádrlica de Koch, ou seja 1.4999 ($\sigma = 5.3$). O valor teórico para este fractal é de 1.50.

5 Software e Validação

5.1 Software *Dimensão Fractal*

O software *Dimensão Fractal* foi desenvolvido com o principal propósito de ser utilizado por um usuário final (end-user) para obter medidas de dimensão fractal de superfícies geradas pela técnica SPM.

O ambiente computacional usado para construção do software é baseado em programação orientada a objetos, isto é, o software *Borland Delphi* versão 4, que usa o conceito *GUI (Graphics User Interface)*, o mesmo que o *Windows*. O ambiente *MATLAB* versão 5.3, também foi utilizado em estudos da curva de fractalidade das formas analisadas.

O display do software *Dimensão Fractal* apresentado na figura 5.1 é composto pelas seguintes ferramentas:

✓ Menu File

Este menu contém as seguintes operações:

- ❑ **Open** : Abre a imagem ASCII gerada pela microscopia SPM e, mostra na tela em 2D.
- ❑ **Close** : Fecha todas as rotinas abertas e encerra o programa.
- ❑ **Save** : Salva o arquivo gerado na extensão *.txt*.

✓ Botões:

- **Image Choice:** Permite abrir mais de uma imagem por arquivo, ou seja quando um arquivo contém mais de uma imagem, podemos escolher qual abri-la. Geralmente o máximo de imagens em um arquivo é três.
- **Fractal Dimension:** Calcula todas as possíveis dilatações para a superfície analisada e gera um arquivo em forma de lista, com os valores dos volumes e seus respectivos raios.

✓ Display da imagem: Campo bidimensional para mostrar a imagem. Acompanha um dispositivo que fornece o endereço e o nome da imagem.

✓ Caixa de informação: Fornece o tempo de processamento, em segundos, da execução dos dados iniciada pelo botão **Fractal Dimension**.

O software lê as informações em *ASCII* a partir do comando **Open**, e fornece ao usuário, através da execução do botão **Dimension Fractal**, um arquivo que contém os dados necessários para obter a curva de dimensão fractal. Este arquivo é salvo pelo comando **Save** e, então um programa desenvolvido com *MATLAB* fornece a curva de fractalidade, ao longo da escala estudada, e o valor da dimensão fractal da superfície, conforme mostra a figura 5.2(a) e (b).

Figura 5.1: Display do software *Fractal Dimension*.

Figura 5.2: Display do programa executado no MATLAB em (a) mostra a curva *log-log* do volume em termos do raio e em (b) fornece a curva de fractalidade da superfície e o seu valor de Dimensão Fractal.

5.2 Implementação do método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata

Conforme exposto no capítulo 3, seção 3.3.4.1, devido à natureza discreta da grade de pixels, somente um número pequeno de raios podem ser representados em uma forma dilatada. Segundo o conceito introduzido em [COSTA, 1999a; COSTA, 1999c], os valores das distâncias definidas por cada raio crítico é o que chamamos de distância exata, e a ordem de que uma distância exata ocorra é conhecida como índice da distância, simbolizada por k . Por exemplo, começando com $k = 0$ para a distância nula, e portanto $k = 1$ para $d = 1$, $k = 2$ para $d = \sqrt{2}$, e $k = N_M$ para $d = d_M$, que correspondem as dilatações exatas da forma original. Como consequência, não haverá nenhuma dilatação intermediária entre duas sucessivas dilatações exatas, nem dilatações replicadas.

Dilatação Exata, considerando a métrica Euclidiana, pode ser implementada computacionalmente, usando o algoritmo simples descrito a seguir. O primeiro passo para calcular a dilatação exata de qualquer forma binária consiste em obter uma estrutura de dados auxiliar, conhecida como SEDR - *Sorted Euclidean Distance Representation* [COSTA, 2001a]. Veja a ilustração desta técnica no endereço WWW em [COSTA, 2000]. Essa estrutura de dados inclui cada uma das possíveis distâncias Euclidiana na grade e a posição relativa de tais pontos.

Uma forma simples de implementar a rotina SEDR é através da matriz padrão (figura 5.3), reservando uma linha para cada das sucessivas distâncias exatas. Dada a distância exata k -ésima, o elemento SEDR $(k,1)$ contará o valor de d (para fins de otimização computacional, trabalhamos com o valor ao quadrado da distância), o

elemento $SEDR(k,2)$ indicará o número $M(k)$ de pontos apresentando distância d , e $SEDR(k,3)$ até $SEDR(k,3*M(k)+2)$ conterà as coordenadas x, y e z destes pontos, as quais estão armazenadas seqüencialmente conforme os trios:

$$SEDR = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 2 & 12 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & -1 & . & . & . \\ 3 & 8 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 4 & 6 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & -2 & -2 & 0 & 0 \\ 5 & 24 & 2 & 0 & 1 & -2 & 0 & 1 & -2 & 0 & -1 & 0 & 1 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & . & . & . \\ 6 & 24 & -2 & -1 & 1 & -1 & -2 & -1 & 1 & -1 & 2 & 1 & -2 & -1 & -1 & -1 & 2 & 1 & -1 & -2 & 1 & -2 & 1 & . & . & . \\ \vdots & \end{bmatrix}$$

Figura 5.3: Matriz padrão do SEDR.

O processo para obter a estrutura SEDR é o seguinte:

1. Calcula as distâncias entre todos os pontos dentro de uma esfera digital de raio

$$d_M \text{ centralizado em } (0,0,0), \text{ isto é, } \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq d_M ;$$

2. Lista as distâncias acima em ordem crescente, eliminando as distâncias repetidas e, guarde as posições relativas dos pontos que apresentam cada distância específica.

Consideraremos então, uma caixa tridimensional vazia, e para cada pixel atribuiremos o valor -1. S é uma superfície representada em termos de uma lista contendo as coordenada x, y e z de cada ponto. As dilatações exatas de S podem ser obtidas

varrendo todos os elementos de S para cada distância possível registrada pelo SEDR e, marcando todas as posições com cada valor da distância considerada para tais elementos da borda. Este processo é resumido pelo seguinte pseudocódigo:

Algoritmo: *Dilatação Exata*

```

for x = 1 to N {Inicializa uma matriz tridimensional para a dilatação}
  for y = 1 to M
    for z = 1 to P
      matr_dilat(x,y,z) = -1
    end
  end
end

for i = 1 to NM {considera todas as subseqüentes distâncias Euclidianas do SEDR}
  d = SEDR(i,1);
  for j = 1 to SEDR(i,2) {Considera todas as respectivas posições para d}
    dx = SEDR(i,3j);
    dy = SEDR(i,3j+1);
    dz = SEDR(i,3j+2);
    for k = 1 to L {Verifica cada ponto da superfície}
      x = x(k)+dx;
      y = y(k)+dy;
      z = z(k)+dz;
      if matr_dilat(x,y,z) = -1 then
        matr_dilat(x,y,z) = d;
      end
    end
  end
end
end

```

Para cada dilatação d , é então somado e registrado em $\text{total_pix}(k)$, o número total de pixels que foi atribuído o valor de d . O volume da Salsicha de Minkowski de cada raio d é calculado a partir do seguinte algoritmo:

Algoritmo: Volume da Salsicha de Minkowski

```
acumula = 0;  
for c=1 to NM  
    volume(c) = total_pix(c) + acumula;  
    acumula = volume(c);  
end
```

O gráfico *log-log* do vetor volume em função da raiz quadrada das respectivas distâncias gera o gráfico para estimação da dimensão fractal.

5.3 Validação do software

A validação do software *Dimensão Fractal* foi realizada a partir de medidas da dimensão fractal em curvas fractais conhecidas. A seguir apresentaremos estes resultados.

5.3.1 Quádrica de Koch

Figura 5.4: Quádrica de Koch (350x350 pixels).

(a)

(b)

(c)

Figura 5.5: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por Diferenças Finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 5.3$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 11.5$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 11$, no domínio da frequência.

Tabela V.1: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para a quádrlica de Koch, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de Diferenças Finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Quádrlica de Koch					
Diferenças finitas				Fourier	
filtragem no tempo		filtragem na frequência		filtragem na frequência	
<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>
4	1.5082	10	1.4966	9	1.4966
5	1.5014	11	1.4984	10	1.4984
5.3	1.4999	11.50	1.4999	11	1.5002
6	1.4965	12	1.5010	12	1.5018
Valor teórico da DF: 1.50					

5.3.2 Curva de Koch

Figura 5.6: Curva de Koch (250x250 pixels).

(a)

(b)

(c)

Figura 5.7: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por Diferenças Finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 5$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 9$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 9$, no domínio da frequência.

Tabela V.2: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para a Curva de Koch, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de Diferenças Finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Curva de Koch					
Diferenças finitas				Fourier	
filtragem no tempo		filtragem na frequência		filtragem na frequência	
<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>
4	1.2652	9	1.2679	8	1.2757
4.5	1.2646	10	1.2680	9	1.2756
5	1.2644	11	1.2680	10	1.2757
6	1.2664	12	1.2682	11	1.2758
Valor teórico da DF: 1.26					

5.3.3 Box

Figura 5.8: Box (250x250 pixels).

(a)

(b)

(c)

Figura 5.9: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por Diferenças Finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 4.1$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 15$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 11.2$, no domínio da frequência.

Tabela V.3: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para o fractal Box, obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de Diferenças Finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Box					
<i>Diferenças finitas</i>				<i>Fourier</i>	
<i>filtragem no tempo</i>		<i>filtragem na frequência</i>		<i>filtragem na frequência</i>	
<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>
4	1.4655	11.5	1.4615	10	1.4630
4.1	1.4650	13	1.4630	11	1.4646
4.2	1.4645	14	1.4640	11.2	1.4648
5	1.4617	15	1.4650	11.5	1.4652
Valor teórico da DF: 1.4649					

5.3.4 Ponto

Figura 5.10: Curva de fractalidade usando método de diferenciação por Diferenças Finitas e suavizando a curva em (a) com $\sigma = 4.5$, no domínio do tempo e (b) com $\sigma = 11$, no domínio da frequência; e (c) usando o método de diferenciação por Fourier e suavizando com $\sigma = 7$, no domínio da frequência.

Tabela V.4: Resultados do valor de dimensão fractal, DF , para vários valores de σ para um ponto, foram obtidos através da diferenciação da curva *log-log*, pelos métodos de Diferenças Finitas e Fourier. Os valores destacados foram os que mais se aproximaram do valor teórico da curva.

Ponto					
<i>Diferenças finitas</i>				<i>Fourier</i>	
<i>filtragem no tempo</i>		<i>filtragem na frequência</i>		<i>filtragem na frequência</i>	
<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>	<i>sigma</i>	<i>DF</i>
3	0.0051	9	0.0082	7	0.0187
4	0.0035	9.5	0.0078	8	0.0189
4.5	0.0034	10	0.0077	9	0.0195
5	0.0035	11	0.0076	10	0.0205
Valor teórico da DF: 0 (zero)					

5.4 Resultado de Validação

As curvas utilizadas para validar o software implementado são de fractais teóricos conhecidos, os quais podem ser encontrados em [MANDELBROT, 1977; MANDELBROT, 1983] ou na bibliografia de fractais. Esses fractais são caracterizados por apresentarem auto-similaridade, devido a uma lei de formação, conforme vimos no capítulo 3, ou seja, são fractais que apresentam o mesmo comportamento de fractalidade independente da escala de observação. Portanto seria natural que encontrássemos um valor constante de dimensão fractal DF , para a curva auto-similar ao longo de todo o intervalo observado.

Infelizmente, os dois métodos adotados para obtenção da curva de dimensão fractal, ou sejam Diferenças Finitas e Fourier, não permitiram a verificação de tal comportamento, o qual é devido a vários fatores de representação da imagem, sendo um deles a discretização. Mas podemos verificar que, dada a curva de fractalidade da forma considerada, o seu valor máximo na escala observada resultou-se ou aproximou-se na maioria das vezes, do valor teórico da dimensão fractal da forma. Para chegar a esses resultados foram usados diferentes valores para o parâmetro σ , o qual apresentou uma certa variação para cada forma analisada.

Tanto para curva fractal Quádrica de Koch como para a Box, nós pudemos observar que a curva de fractalidade apresenta mais de um pico de máximo para o intervalo de escala observado e que seus valores são aproximadamente iguais. Já para as outras curvas como a Curva de Koch ou para um único ponto, a curva de fractalidade apresenta apenas um pico de máximo, que permanece quase constante em relação a um

intervalo de escala considerado. Podemos verificar então que tais formas apresentam um comportamento de fractalidade constante, isto é, uma auto-similaridade ao longo da escala observada.

No próximo capítulo apresentaremos a aplicação do software em formas (imagens) que não são teóricas, ou seja, são imagens auto-afins obtidas não por uma certa lei de formação, mas sim através da técnica de SPM para imagens da natureza.

6 Resultados e Aplicações

Utilizando imagens de microscopia de força atômica, as quais obtidas pelo Grupo de Polímeros do Instituto de Física de São Carlos - USP, apresentaremos os resultados de dimensão fractal, os quais obtidos por diferentes métodos de estimação em diferentes aplicações.

6.1 Análise de filmes automontados de polímeros através de diferentes condições de secagem

Conforme vimos no método de estimação de dimensão fractal para superfícies, explicado no capítulo 3, seção 3.3.2, dada a curva *log-log* da rugosidade pela largura da janela analisada, podemos obter o valor da dimensão fractal através do expoente de rugosidade α , o qual é obtido através da reta interpolada nos pontos do gráfico.

Segunda a teoria descrita em [DE SOUZA, 2001], há uma variável α que é o expoente crítico que caracteriza a rugosidade de uma interface saturada, ou seja, quando o sistema atinge o equilíbrio. Assim, a curva obtida é analisada em relação ao comprimento de saturação L_s , o qual é dependente do tipo da amostra e geralmente é aproximado do valor do diâmetro médio d_m dos grãos presentes na superfície. Portanto, definido o valor de d_m podemos considerar os intervalos de largura $L < d_m$ e $L > d_m$, a fim

de estudar o comportamento da rugosidade em ambas regiões. Os valores de $\alpha < 1$ são obtidos em escalas anisotrópicas, isto é, em superfícies auto-afins.

Um estudo feito em filmes automontados de POMA/PVS para diferentes condições de secagem [DE SOUZA, 2001], obteve através de imagens de tamanho $2\text{ }\mu\text{m} \times 2\text{ }\mu\text{m}$ geradas por um microscópio de força atômica (figura 6.1), os resultados dos gráficos da figura 6.2.

(a)

(b)

(c)

Figura 6.1: Imagens de filmes automontados de POMA/PVS para diferentes condições de secagem por fluxo de (a) ar, (b) nitrogênio e (c) vácuo. (Imagens fornecidas por Nara Cristina de Souza, IFSC, USP).

Figura 6.2: *Log-log* da Rugosidade W , pela largura da janela L , para as diferentes condições de secagem (ar, nitrogênio e vácuo), de um filme automontado de POMa/PVS.

O comprimento de crossover L_s adotado neste estudo foi de $L_s \approx 150 \text{ nm}$ ($\ln 150 = 5.0106$). Assim consideraremos duas regiões no gráfico acima, isto é, $L < d_m$ e $L > d_m$, as quais fornecem os valores do expoente de rugosidade α apresentado na tabela 6.1 seguinte.

Tabela VI.1: Valores dos expoentes de rugosidade α obtidos nas regiões consideradas para diferentes condições de secagem.

	Ar	Nitrogênio	Vácuo
$L < d_m$	0.82	0.79	0.74
$L > d_m$	0.41	0.30	0.31

Usando a relação 3.4, proposta no capítulo 3, seção 3.3.2, obtemos a partir dos valores da tabela VI.1, os resultados para a dimensão fractal nas regiões consideradas, conforme apresentados na tabela VI.2 abaixo.

Tabela VI.2: Dimensão fractal das regiões limitadas para diferentes condições de secagem do filme, obtida através do expoente de rugosidade α

	Ar	Nitrogênio	Vácuo
$L < d_m$	2.18	2.21	2.26
$L > d_m$	2.59	2.70	2.69

O estudo proposto no capítulo 4 para a análise multiescala da curva *log-log*, permite verificarmos o comportamento da dimensão fractal da superfície ao longo da região observada, oferecendo informações mais ricas do comportamento da rugosidade da superfície. Assim, aplicando os métodos de diferenciação por Diferenças Finitas e por Fourier, para as curvas *log-log* do gráfico da figura 6.2, obtemos as seguintes curvas de dimensão fractal.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

Figura 6.3: Curva da dimensão fractal, obtida pelo método de Rugosidade Média Quadrática, ao longo de toda região observada, para as diferentes condições de secagem em azul para ar, vermelho para nitrogênio e preto para vácuo, através dos métodos de diferenciação por Diferenças Finitas ($\sigma = 8$) em (a), (c) e (e) e, por Fourier ($\sigma = 10$) em (b), (d) e (f). Ambas curvas foram suavizadas no domínio da frequência.

Observe que, com esse resultado podemos obter o valor de dimensão fractal ao longo de toda a escala observada, não só apenas para certas regiões conforme o resultado anterior (tabela 6.2).

De acordo com o parágrafo comentado no capítulo 3, seção 3.3.2, o método de estimação por Rugosidade Média Quadrática não caracteriza de maneira completa uma superfície. Por isso, propomos o método de estimação da dimensão fractal da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, o qual considera igualmente todas as direções para a dilatação na superfície, já que no primeiro método citado acima, as informações verticais (eixo z) pesam mais no resultado final. Além disso, conforme apresentado em [DE SOUZA], existem alguns sistemas experimentais que são difíceis de perceber se o sistema entrou em equilíbrio e outros, que nem sempre nos permitem realizar medidas até a saturação.

A seguir apresentaremos os resultados obtidos pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata.

(a)

(b)

(b)

(d)

(e)

(f)

Figura 6.4: Curva da dimensão fractal, obtida da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, ao longo da escala espacial analisada, para as diferentes condições de secagem em azul para ar, vermelho para nitrogênio e preto para vácuo, através dos métodos de diferenciação por Diferenças Finitas ($\sigma = 12$) em (a), (c) e (e) e, por Fourier ($\sigma = 12$) em (b), (d) e (f). Ambas curvas foram suavizadas no domínio da frequência.

Tabela VI.3: Resultado da dimensão fractal obtido através do valor máximo da curva de dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as diferentes condições de secagem do filme.

	Ar	Nitrogênio	Vácuo
<i>Diferenças Finitas ($\sigma=12$)</i>	2.1397	2.1710	2.1723
<i>Fourier ($\sigma=12$)</i>	2.1418	2.1711	2.1741

Assim poderemos afirmar que este método fornece o valor da dimensão fractal para a superfície e o seu comportamento da rugosidade ao longo da escala espacial analisada. Comparando os resultados pelos diferentes métodos de estimação fractal, podemos verificar que os valores obtidos pelo método de Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata estão mais próximos dos valores encontrados para comprimentos $L < d_m$. Isto acontece porque a máxima dilatação exata para a superfície foi de raio 30 pixels, o qual equivale a 117,1875 nm em uma imagem de 2 μm (2000 nm), que é um valor menor que o valor do comprimento de saturação considerado, isto é, 150 nm.

6.2 Estudo da rugosidade em processos de deposição de filmes

Em alguns processos de deposição de filmes existe a necessidade de se acompanhar a variação da rugosidade em função do tempo, ou seja, à medida que as partículas vão se agregando num certo substrato, as alturas vão se modificando e a rugosidade da superfície se altera. A figura 6.5 apresenta as imagens de diferentes perfis da superfície estudada em tempos diferentes de observação.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

(g)

(h)

Figura 6.5 : Imagens bi e tridimensional do perfil da superfície em relação ao tempo de observação em (a) e (b) para t_1 , (c) e (d) para t_2 , (e) e (f) para t_3 e (g) e (h) para t_4 .

Estas imagens foram obtidas pela aluna de doutorado Carla Eiras pertencente ao Grupo de Polímeros, em filme de Poliparafenileno depositado por processo eletroquímico em cima de substrato de ITO.

A partir desses dados, tais medidas foram realizadas por diferentes métodos de estimação fractal a fim de se obter um estudo do comportamento da rugosidade em

função do tempo. A figura 6.6 a seguir apresenta as curvas de Espectro de Potência para as respectivas imagens acima.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 6.6: Curva do Espectro de Potência para as superfícies apresentadas na figura 6.5

em (a) para t_1 , (b) para t_2 , (c) para t_3 e (d) para t_4 .

Segundo o trabalho realizado por Pereira-da-Silva em [PEREIRA-DA-SILVA, 2001] em imagens de microscopia de força atômica, dada a curva de espectro de potência, devemos considerar apenas a região onde a integral de todo o sinal apresentar uma linearidade. Ou seja, devemos obter a integral da curva de espectro de potência e a partir deste resultado, determinar a região onde a superfície apresenta fractalidade, a qual é representada por uma região reta da integral. A seguir apresentamos a integral do sinal para cada curva da figura 6.6.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 6.7: Integral do sinal em (a)-(d) para as suas respectivas curvas do espectro de potência apresentado na figura 6.6 (a)-(d).

Considerando somente os pontos da região linear do gráfico da figura 6.7, podemos aproximar, pelo método dos mínimos quadrados, uma reta, cujo coeficiente angular β nos permite, através da relação (3.11), obter o valor da dimensão fractal da superfície. A tabela VI.4 apresenta os valores da dimensão fractal, D_{PSD} , obtida pelo método do espectro de potência, das superfícies para os diferentes tempos de observação, levando em consideração somente os pontos da região linear dos gráficos da figura 6.8.

Tabela VI.4: Valores da dimensão fractal D_{PSD} para as superfícies da observadas em diferentes tempos, para a região linear dos gráficos da figura 6.8.

	t_1	t_2	t_3	t_4
Intervalo	-1 a 0	-0.8 a 0	0 a 0.7	-1 a 1
D_{PSD}	2.5046	2.5413	2.1201	2.5612

Conforme apresentado na tabela VI.4, os valores de dimensão fractal dependem praticamente da escolha do intervalo de pontos, assim dependendo do método escolhido para determinar estes intervalos, podemos estar medindo valores incertos, ou seja, esse método torna-se subjetivo e não exato.

Uma maneira de obter resultados mais seguros através do método de estimação fractal por espectro de potência é através da análise multiescala das curvas originais apresentadas na figura 6.6. Portanto, aplicando os métodos de diferenciação da curva por Diferenças Finitas e por Fourier, para as curvas *log-log* da potência em relação à frequência, obtemos as curvas de dimensão fractal as quais são apresentadas na figura 6.8.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

(g)

(h)

Figura 6.8: Curva da dimensão fractal ao longo do espaço de frequência, obtida através da curva do espectro de potência, e diferenciando-o pelo método de Diferenças Finitas ($\sigma = 9$) em (a), (c), (e) e (g) e, por Fourier ($\sigma = 9$) em (b), (d), (f) e (h). Ambas curvas foram suavizadas no espaço da frequência.

Através das curvas de dimensão fractal as quais são apresentadas nas figuras 6.8(a) e (b), podemos analisar a superfície ao longo de todo um intervalo, e considerar como região de fractalidade apenas os valores para os quais a superfície tem dimensão fractal entre 2 e 3.

O outro método proposto para estimação fractal é a Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata. Os gráficos *log-log* do Volume dilatado em função do raio, para as superfícies observadas em tempos diferentes, são apresentados na figura 6.9.

Figura 6.9: Curva *log-log* do Volume dilatado em função do raio, em pixels, em (a) para t_1 , (b) para t_2 , (c) para t_3 e (d) para t_4 .

Conforme discutido no capítulo 4, a partir da análise multiescala nas curvas *log-log* acima, podemos obter uma curva de fractalidade ao longo de toda a escala espacial analisada, além de obter um valor característico para a dimensão fractal da superfície. A seguir apresentaremos tais curvas (figura 6.9) e seus respectivos resultados de dimensão fractal, mostrados na tabela V.5.

(a)

(b)

Figura 6.10: Curva da dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as superfícies observadas em diferentes tempos em (a) através do

método de Diferenças Finitas ($\sigma = 9$) e em (b) através do Fourier ($\sigma = 10$), ambas suavizadas no domínio da frequência.

Tabela VI.5: Resultado da dimensão fractal obtido através do valor máximo da curva de dimensão fractal pelo método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, para as superfícies observadas em diferentes tempos t .

	t_1	t_2	t_3	t_4
Diferenças Finitas ($\sigma = 9$)	2.0840	2.2486	2.1600	2.0693
Fourier ($\sigma = 10$)	2.0794	2.2480	2.1609	2.0703

Através dos gráficos da figura 6.10 acima, podemos observar que a máxima fractalidade ocorre em escalas diferentes para cada superfície analisada, permite-nos verificar também se o comportamento da rugosidade ao longo da escala varia muito ou pouco.

Para a primeira superfície observada, t_1 , verificamos que, somente as primeiras dilatações a identificam como uma superfície, isto é, só podemos observá-la como superfície, nas escalas pequenas, o que não acontece para as outras superfícies observadas.

Devido a estas observações, provamos que devemos estudar as superfícies fractais sempre ao longo de uma escala considerada e não só pelo valor da dimensão fractal obtido por um certo método, já que conforme o gráfico da figura 6.10, podemos ter diferentes valores de dimensão fractal para a escala de observação escolhida.

Outro resultado que este gráfico fornece é a complexidade da superfície, ou seja, através da largura da curva de dimensão fractal, nós podemos dizer se uma superfície é

mais ou menos complexa do que outra. Podemos obter um valor da complexidade através da área limitada pela curva. A tabela VI.6 apresenta tais valores.

Tabela VI.6 : Valor da complexidade de cada superfície observada, obtida pela área limitada pela curva de dimensão fractal.

	t_1	t_2	t_3	t_4
Diferenças Finitas ($\sigma = 9$)	106.7909	117.0093	111.9826	108.5701
Fourier ($\sigma = 10$)	5131.8	4935.9	4799.5	4720.4

Os valores apresentados na tabela VI.7, são diferenciados devido ao número de pontos que representa a curva. Então é mais confiável determinar a complexidade da superfície com o método que tem maior amostragem numa região considerada.

7 Conclusão

Atualmente o número de softwares que tratam de imagens de SPM é suficientemente grande, mas na maioria das vezes são limitados tanto em relação aos dados de entrada, como também nos resultados obtidos através das técnicas e métodos usados. O software desenvolvido neste trabalho de mestrado permite analisar a superfície microscópica através de uma ferramenta tridimensional, ou seja, o método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata. Este método dá a mesma importância para os dados encontrados nas três direções, ou seja, nos eixos x , y e z da superfície ao mesmo tempo.

A seguir apresentaremos algumas discussões finais sobre a aplicação e implementação do método de Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata para cálculo da dimensão fractal em imagens de SPM, além de discutir as vantagens e desvantagens dos métodos de diferenciação desenvolvidos para análise multiescala da curva *log-log*.

7.1 Discussões Finais

Conforme apresentado neste trabalho, é de grande importância a escolha do método para estimação fractal. O método da Salsicha de Minkowski foi escolhido devido à simplicidade de sua implementação e também por causa do baixo erro em relação à medida teórica.

Os resultados obtidos na estimação fractal das superfícies de SPM foram satisfatoriamente aceitos, já que serviram para acrescentar informações as quais estavam

encobertas, pois através da dilatação exata de raios podemos estudar o comportamento da fractalidade passo a passo num intervalo de raio R considerado.

O método Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata junto com a análise multiescala propõe uma nova maneira de se estudar o relevo de superfícies, dando importância à dimensão fractal como função da escala espacial. Os processos usados na análise multiescala permitiram uma melhor interpretação das curvas *log-log* fornecidas pelos métodos de estimação fractal, principalmente o da Salsicha de Minkowski. A partir de dois métodos de diferenciação para um sinal, ou seja, por Diferenças Finitas e pela propriedade da derivada da Transformada de Fourier, foram demonstrados algumas aplicações e motivos para a análise multiescala, a qual é de grande importância em várias áreas.

Um dos pontos mais relevantes nos estudos multiescala é o parâmetro de escala espacial. O sinal *log-log* obtido pelas várias técnicas muitas vezes apresenta regiões de pouca amostragem ou regiões ruidosas. Através da função Gaussiana e da propriedade da convolução, podemos tornar o sinal original mais representativo para um intervalo de amostragem escolhido. A função Gaussiana é dependente de um parâmetro de escala σ , conhecido como desvio padrão, permite determinar a melhor escala espacial a ser trabalhada para o sinal analisado. A importância deste parâmetro pode ser observada nos resultados apresentados no capítulo 5, através da validação do software e dos métodos de diferenciação multiescala. Infelizmente, não houve tempo neste trabalho para o estudo de um melhor valor de σ para as diferentes aplicações consideradas.

Podemos concluir que segundo os resultados obtidos pelos dois métodos de diferenciação, na maioria das vezes, chegaram-se a valores bem parecidos. O método por

Diferenças Finitas, que leva em consideração somente os pontos de vizinhanças mais próximas, tem uma desvantagem em relação ao de Fourier porque dependendo do parâmetro de escala escolhido, e o intervalo da amostragem do sinal original, pode-se limitar o resultado final da curva de dimensão fractal. Isso não acontece no método de Fourier, pois para aplicar a Transformada de Fourier no sinal, precisamos aproximar os pontos do sinal original para o mais próximo de um sinal contínuo, o que enriquece o espaço de amostragem.

O método proposto neste trabalho para caracterização de superfícies fractais, ou seja, Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, permite estudar fractalidades presentes não só em imagens de microscopias SPM, mas também em contornos 2D e 3D, ou seja podemos estudar fractalidades de outras formas que não sejam imagens de SPM.

O software implementado teve como principal objetivo fornecer ao usuário final um método rico em informações na caracterização da superfície. Uma futura otimização do software possibilitará ao usuário uma praticidade maior em obter os resultados de dimensão fractal para a superfície analisada, no momento, além do software que gera os valores da dilatação para a superfície, nós necessitamos utilizar outro programa para obter a curva de dimensão fractal, conforme explicado no capítulo 5. Outro importante ponto a ser levado em consideração é o tempo de execução do programa *Dimensão Fractal* para obter todas as possíveis dilatações limitadas por um raio máximo, para uma superfície de dimensões $512 \times 512 \times 256$ pixels. O tempo para este procedimento é de normalmente 90 minutos, para raio máximo de 30 pixels e 270 minutos para raio máximo de 50 pixels. O que é um tempo longo se comparado com outros métodos citados para calcular a dimensão fractal.

Um método baseado em transformada distância desenvolvido por Cuisenaire [CUISENAIRE, 1999] permite calcular as dilatações exatas da superfície em um tempo muito menor mas com a mesma exatidão que o método de Minkowski oferece.

7.2 Contribuições

O método da Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata para análise tridimensional é inédito até onde soubemos. Portanto, não podemos comparar seus resultados ainda, mas sim acreditar que este trabalho poderá servir de base para outras aplicações futuras. Já o método de análise multiescala, poderá ser aplicado em diferentes curvas de uma ampla área de estudo.

O software desenvolvido neste trabalho está sendo usado como uma nova ferramenta pelo Grupo de Polímeros do Instituto de Física de São Carlos, USP, para análise de superfícies obtidas pelo Microscópio de Força Atômica.

Durante o período de mestrado um artigo, que propõe a análise multiescala para formas fractais bi e tridimensional usando Salsicha de Minkowski por Dilatação Exata, foi submetido para o Journal of Computational Physics [COSTA, 2001 b]. E também a participação no XVIII Congresso da Sociedade Brasileira de Microscopia e Microanálise, a ser realizado em 28 a 31 de outubro de 2001, em Águas de Lindóia, SP; para apresentação deste trabalho.

7.3 Trabalhos futuros

A realização deste trabalho serviu para elaboração de um trabalho continuado no doutorado para desenvolvimento de novas características de formas em espaços 3D com especial ênfase em abordagens multiescala e caracterização de complexidade (como as provindas de análise fractal) e a aplicação em análise de imagens de microscopia de tunelamento e força atômica, além de outras aplicações.

Estamos buscando melhoria na implementação do algoritmo baseado em transformada distância proposto por Cuisenaire [CUISENAIRE, 1999] para otimização do software, para diminuir o tempo de execução.

8 Bibliografia

[BRIGHAM, 1988] BRIGAM, E.O. *The Fast Fourier Transform*. 2^a Ed. New Jersey, Prentice Hall, 1988.

[CASTLEMAN, 1979] CASTLEMAN, K.R. *Digital Image Processing*. New Jersey, Prentice Hall, 1979.

[COELHO, 1996] COELHO, R.C.; COSTA, L.F. On the Application of the Bouligand-Minkowski Fractal Dimension for Shape Characterisation. *Appl. Sig. Process*, 3, p. 163, 1996.

[COSTA, 1997] COSTA, L.F.; CESAR JR, R.M. Application and Assessment of Multiscale Bending Energy for Morphometric Charecterization of Neural Cells. *Rev. Sci. Instrum.*, 68 (5), p. 2177, 1997.

[COSTA, 1999 a] COSTA, L.F. Particle Systems Analysis by Using Skeletonization and Exact Dilations. *Part. Part. Syst. Charact.*, 16, p. 273-277, 1999.

[COSTA, 1999 b] COSTA, L.F.; ESTROZI, L.F. Multiresolution shape representation without border shifting. *Electronics Letters*, 35 (21), p. 1829-1830, 1999.

- [COSTA, 1999 c] COSTA, L.F. Multidimensional Scale-Space Shape Analysis. In: INTERNATIONAL WORKSHOP ON SYNTHETIC-NATURAL HIBRID CODING ON THREE DIMENSIONAL IMAGING. Grécia, 1999, p. 214-217.
- [COSTA, 2000] COSTA, L. F.; ESTROZI, L. F. The Scale Space Skeletonization Page, (<URL:[http:// cyvision.if.sc.usp.br/ms](http://cyvision.if.sc.usp.br/ms)>). 2000.
- [COSTA, 2001 a] COSTA, L.F.; CESAR JR, R.M. *Shape Analysis and Classification: Theory and Practice*. Florida, CRC Press, 2001.
- [COSTA, 2001 b] COSTA, L. F.; CAMPOS, A. G.; PINTO, S. C. D.; RODRIGUES, C. A. Accurate Estimation of the Fractality of Real Shapes. *Journal of Computational Physics*, submetido em 2001.
- [COSTA, 2001 c] COSTA, L.F.; CAMPOS, A.G.; MANOEL, T.M. An integrated approach to shape analysis: Results and Perspectives. QCAV2001. France, 2001. p. 23-34.
- [CUISENAIRE, 1999] CUISENAIRE, O. *Distance Transformation: Fast Algorithms and Applications to Medical Image Processing*. Belgium, 1999. 213 p. Ph. D. Thesis, Laboratoire de Telecommunications at Teledetection, Univerite Catolique de Louvain.

[DE SOUZA, 2001] DE SOUZA N.C., SILVA J.R., PEREIRA-DA-SILVA M.A., DI THOMMAZO R., RAPOSO M., GIACOMETTI J.A., OLIVIERA JR. O.N. Uso da teoria de escala dinâmica para caracterizar a morfologia de filmes automontados de polímeros. 6º CONGRESSO BRASILEIRO DE POLÍMEROS, IX INTERNATIONAL MACROMOLECULAR COLLOQUIUM. Gramado/RS (a ser realizado em Novembro de 2001).

[DIGITAL INSTRUMENTS] *MultiMode Scanning Probe Microscope Instruction Manual* - Digital Instruments.

[DUMAS, 1993] DUMAS, P.; BOUFFAKHREDDINE, B.; AMRA, C.; VATEL, O.; ANDRE, E.; GALINDO, R.; SALVAN, F. Quantitative Microroughness Analysis down to the Nanometer Scale. *Europhysics Letters*. 22 (9), p. 717-722. 1993.

[FALCONER, 1990] FALCONER, K.J. *Fractal geometry: mathematical and applications*. New York, John Wiley, 1990.

[FEDER, 1989] FEDER, J. *Fractals*. New York, Plenum Press, 1989.

[GONZALEZ, 2000] GONZALEZ, R.C.; WOODS, R.E. *Processamento de Imagens Digitais*. São Paulo, Edgard Blucher Ltda, 2000.

[PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS] *Practical Guide to Scanning Probe Microscopy*. Park Scientific Instruments.

[MANDELBROT, 1977] MANDELBROT, B. *Fractals, Form, Chance, and Dimension*. San Francisco, W. H. Freeman, 1977.

[MANDELBROT, 1983] MANDELBROT, B. *The Fractal Geometry of Nature*, New York, W. H. Freeman, 1983.

[MONTAGNOLI, 2000] MONTAGNOLI, C.J.; COSTA, L.F.; KAYE, B.H., Accurate Fractal Dimension Estimation using Exact Dilations, IBERAMIA/SBIA 2000-WORKSHOP ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND COMPUTER VISION. Atibaia/SP, 2000.

[PEITGEN, 1988] PEITGEN, H.O.; SAUPE, D. *The Science of Fractal Images*. New York, Springer-Verlag, 1988.

[PEITGEN, 1992] PEITGEN, H.O.; JURGENS, H.; SAUPE, D. *Fractals for the Classroom - Part One Introduction to Fractals and Chaos*. New York, Springer-Verlag, 1992.

[PEREIRA-DA-SILVA, 2001] PEREIRA-DA-SILVA, M.A. *Análise de Superfície de Filmes Finos de Polianilina Depositados em Diferentes Substratos por Microscopia*

de Força Atômica. São Carlos, 2001, 143 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo.

[RUSS, 1992] RUSS, J.C. *Computer-Assisted Microscopy - The Measurement and Analysis of Images*. New York, Plenum Press, 1992.

[RUSS, 1994] RUSS, J.C. *Fractal Surfaces*. New York, Plenum Press, 1994.

[SCHROEDER, 1996] SCHROEDER, M. *Fractals, Chaos, Power Laws - Minutes from an Infinite Paradise*. New York, W. H. Freeman and Company, 1996.

[SIMMONS, 1987] SIMMONS, G.F. *Cálculo com Geometria Analítica*. 2^aed. São Paulo, McGraw-Hill, 1987. V.1.

[SMITH, 1992] SMITH, G.D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Oxford, Clarendon Press, 1992.

[STOYAN, 1995] STOYAN, D., STOYAN, H. *Fractals, Random Shapes and Point Fields -Methods of Geometrical Statistics*. Chichester, John Wiley & Sons, 1995.

[VATEL, 1993] VATEL, O.; DUMAS, P.; CHOLLET, F.; SALVAN, F.; ANDRE, E. Roughness Assessment of Polysilicon Using Power Spectral Density. *Jpn. J. Appl. Phys.* 32 (12A). p. 5671-5674. 1993.

[ZANETTE, 2000] ZANETTE, S.I.; CARIDE, A.O. As novas imagens da matéria.

Ciência Hoje, 27 (162), p. 33-38, 2000.

[WITKIN, 1983] WITKIN, A.P. Scale-Space Filtering. PROC. 8TH INTERNACIONAL

JOINT CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE. 1983. p 1019-1022.

Apêndice A: Teorema da derivada no domínio da frequência

Se $f(x)$ tem a transformada de Fourier $F(s)$ então $f'(x)$ tem a Transformada de Fourier $i2\pi sF(s)$, ou seja

$$f(x) \leftrightarrow F(s)$$

$$f'(x) \leftrightarrow i2\pi sF(s)$$

Demonstração do teorema [SIMMONS, 1987; BRIGHAM, 1974]:

Seja $F(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi xs} dx$ a Transformada de Fourier de $f(x)$ e $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(s)e^{i2\pi xs} ds$ sua Transformada Inversa de Fourier. Assim, podemos escrever a seguinte relação

$$D(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)e^{-i2\pi xs} dx,$$

ou seja, $f'(x) \leftrightarrow D(s)$.

Substituindo a relação $f'(x) = \lim_{\Delta x} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ na expressão acima obtemos então

$$D(s) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\lim_{\Delta x} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \right) e^{-i2\pi xs} dx$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} e^{-i2\pi s x} dx \\
&= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{e^{i2\pi s \Delta x} F(s) - F(s)}{\Delta x} \\
&= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{e^{i2\pi s \Delta x} - 1}{\Delta x} \right) F(s),
\end{aligned}$$

onde usando a relação

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{g(\Delta x + 0) - g(0)}{\Delta x} = \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x=0}$$

obtemos que

$$D(s) = i2\pi s F(s)$$

Isto é,

$$f'(x) \leftrightarrow i2\pi s F(s).$$

c. q. d.

Apêndice B: Filtragem Gaussiana

Há varias razões para escolher a filtragem Gaussiana para suavizar um sinal. Uma delas é pelo seu parâmetro de espalhamento da função Gaussiana, ou seja, *desvio padrão* σ . Este parâmetro controla a largura da curva Gaussiana, no sentido de que quanto maior o valor de σ , mais ampla é a função (figura B.1). Portanto, o parâmetro desvio padrão esta diretamente ligado à escala espacial da Gaussiana, o qual daqui a diante iremos nos referir como parâmetro de escala.

A função Gaussiana é dada pela seguinte equação:

$$g_{\sigma}(x) = k \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right) \quad (\text{B.1})$$

onde μ é a média, σ é o desvio padrão, x é a posição no eixo e k é um valor real. Quando

$k = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ na equação (B.1), dizemos que a função Gaussiana é normalizada e que

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_{\sigma}(x) dx = 1.$$

Figura B.1: Curva da Função Gaussiana de desvio padrão σ e média μ .

Portanto o conceito de filtragem usando a função Gaussiana pode ser entendido por convoluir o sinal original com a função Gaussiana no domínio do espaço (ou do tempo), ou multiplicar a Transformada de Fourier do sinal pela Transformada de Fourier da Gaussiana, que também é uma função Gaussiana, no domínio da frequência, conforme o Teorema da Convolução [BRIGHAM, 1974] abaixo:

Seja $g(t) \leftrightarrow G(f)$ e $h(t) \leftrightarrow H(f)$ então

$$(g * h)(t) \leftrightarrow G(f)H(f) \quad (\text{B.2})$$

e

$$g(t)h(t) \leftrightarrow (G * H)(f) \quad (\text{B.3})$$

Um fato importante a destacar é que, conforme o parâmetro de escala aumenta, a Gaussiana torna-se mais larga no domínio do espaço (ou do tempo), enquanto no domínio de Fourier torna-se mais estreita. Considerando então o que acontece para um sinal

quando ele é filtrado através da convolução por uma Gaussiana em diferentes escalas, podemos perceber que quando a escala da Gaussiana no domínio do tempo aumenta, o conteúdo de frequências espaciais mais altas do sinal que está sendo filtrado é progressivamente eliminado. Esta análise explica o mecanismo do filtro passa-baixa implementado pelo filtro Gaussiano.

Por exemplo, considerando o sinal da figura B.2 (a). Se fizermos a convolução deste sinal com a função Gaussiana (figura B.2 (b)), obtemos o sinal filtrado da figura x2(c), isto é, o filtro Gaussiano suavizou as altas frequências do sinal original, fornecendo um sinal sem ruídos.

Figura B.2: Curva original com presença de ruídos em (a), o filtro Gaussiano ($\sigma=3$) em (b) e o resultado da convolução em (c), ou seja, a curva original suavizada.

Apêndice C: Aproximação da derivada por Diferenças Finitas

Quando uma função U e sua derivada são valores-únicos, ou seja, uma função finita e contínua de x , então pelo *Teorema de Taylor*,

$$U(x+h) = U(x) + hU'(x) + \frac{1}{2}h^2U''(x) + \frac{1}{6}h^3U'''(x) + \dots \quad (\text{C.1})$$

e

$$U(x-h) = U(x) - hU'(x) + \frac{1}{2}h^2U''(x) - \frac{1}{6}h^3U'''(x) + \dots \quad (\text{C.2})$$

A soma destas expansões dá

$$U(x+h) + U(x-h) = 2U(x) + h^2U''(x) + O(h^4), \quad (\text{C.3})$$

onde $O(h^4)$ define termos contendo potências de quatro ou mais altas de h . Assumindo que estes são negligentes em comparação a potências mais baixas de h , segue que,

$$U''(x) = \left(\frac{d^2U}{dx^2} \right)_{x=x} \cong \frac{1}{h^2} \{U(x+h) - 2U(x) + U(x-h)\}, \quad (\text{C.4})$$

cujo lado direito da equação apresenta um erro da ordem de h^2 .

Subtraindo a equação (C.2) da equação (C.1) e desprezando os termos de ordem h^3 temos que

$$U'(x) = \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x} \cong \frac{1}{2h} \{U(x+h) - U(x-h)\}, \quad (\text{C.5})$$

com erro da ordem de h^2 .

Considerando o gráfico da figura C.1, a equação (C.5) claramente aproxima o valor da tangente em P pela inclinação do eixo AB, e é chamada uma aproximação *diferença-central*. Podemos também aproximar a inclinação da tangente em P por outra inclinação do eixo PB, dando a formula da *diferença-adiante*,

$$U'(x) \cong \frac{1}{h} \{U(x+h) - U(x)\}, \quad (\text{C.6})$$

ou a inclinação do eixo AP dando a formula da *diferença-para-trás*

$$U'(x) \cong \frac{1}{h} \{U(x) - U(x-h)\}. \quad (\text{C.7})$$

Ambos (C.6) e (C.7) podem ser escritas imediatamente das equações (C.1) e (C.2) respectivamente, assumindo que potências de segundo grau e mais altas de h são desprezadas. Isto conduz um erro de $O(h)$ para as formulas de *diferenças adiante e para trás*.

Figura C.1: Demonstração do método de Diferenças Finitas.

Maiores detalhes deste método podem ser encontrados em [SMITH, 1992], livro no qual esta seção se baseia.