

УДК 519.213

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ ЗАКОНОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ИДЕНТИФИКАЦИИ ХАРАКТЕРИСТИК СТОХАСТИЧЕСКИХ СТРУКТУР И СИСТЕМ

В.Б. Куликов

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Россия, 603950, Нижний Новгород, ул. Минина, 24
E-mail: vb.kulikov@yandex.ru

А.Б. Куликов

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Россия, 603950, Нижний Новгород, ул. Минина, 24
E-mail: akulikov@nntu.ru

В.П. Хранилов

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Россия, 603950, Нижний Новгород, ул. Минина, 24
E-mail: hranilov@nntu.ru

Ключевые слова: задачи идентификации и управления, двумерные законы распределения, визуализация 3D-графиков условных плотностей, двумерный R/S-анализ стохастических данных, полимодальные случайные величины.

Аннотация: В публикации представлены результаты исследования двумерных стохастических структур – идентификация, визуализация и двумерный R/S-анализ. Показано, что для анализа и интерпретации вероятностных свойств систем и структур, описываемых двумерными выборками временного или пространственного типа в ряде случаев можно использовать систему одномерных условных плотностей распределения. Кроме того, для объектов с фрактальными свойствами (мембранные структуры, томографические медицинские данные, карты распределения характеристик поверхностей Мирового океана и суши) целесообразно применение двумерного R/S - анализа. В качестве примера рассмотрена газоселективная мембранная структура микронных размеров, для которой вычислен массив параметров Херста, идентифицированы одномерные и двумерные полимодальные плотности распределения.

1. Введение

Проблема достоверного анализа и интерпретации стохастических данных актуальна во многих областях науки и техники – в медицине, химии, энергетике, создании новых материалов. В этих областях существует множество сложных по своей природе структур и процессов, при исследовании которых применяются различные методы идентификации законов распределения характеристик стохастической или фрактальной природы.

Для прикладных задач идентификации полимодальных законов распределения случайных величин эффективно применяются методы решения обратных некорректно

поставленных задач [1, 2]. В работах авторов [3, 4] предложены методы идентификации плотностей распределения полимодальных, негауссовых характеристик с использованием регуляризирующих алгоритмов и программ для получения устойчивых решений при восстановлении сложных законов распределения – метод регуляризации на основе ЕС-алгоритма (эпсилон-структуризация). Возможности развиваемого подхода к идентификации проверены при решении сложных задач в биомедицине (клиническая иммунология, гастроэнтерология) и в технических приложениях [3, 5].

Перспективными сферами применения являются также системы управления летающими объектами (космические аппараты, аэронавтика), регулирование и контроль сложных технологических процессов, мониторинг медицинских параметров, анализ функций многих переменных и многомерных массивов данных в численных методах.

В настоящей публикации представлены результаты исследования двумерных стохастических структур – идентификация, визуализация и двумерный R/S-анализ. Показано, что для анализа и интерпретации вероятностных свойств систем и структур, описываемых двумерными выборками временного или пространственного типа в ряде случаев можно использовать систему одномерных плотностей распределения, т.е. идентифицировать условные законы распределения системы двух случайных величин. Кроме того выявлено, что для объектов с фрактальными свойствами (например, мембранные структуры, томографические медицинские данные, карты распределения характеристик поверхностей Мирового океана и суши, полученные методами спутникового зондирования) применим двумерный R/S – анализ. В качестве примера исследования рассмотрена газоселективная мембранная структура микронных размеров. Для 256 линий глубинного профиля мембраны с наноразмерным масштабом параметров, измеренных с помощью атомно-силовой микроскопии, вычислен массив параметров Херста, идентифицированы одномерные и двумерные полимодальные плотности распределения.

2. Идентификация и визуализация плотностей распределения двумерных стохастических структур

2.1. Идентификация

В статье [6] выполнена стохастическая оценка распределений пор и глубинных профилей гибридных полимерных мембран. Измерения проведены с использованием сканирующего зондового микроскопа SPM-9700 (Shimadzu, Япония) с максимальным полем сканирования размером 30×30 мкм² в научном центре кафедры «Нанотехнологии и биотехнологии» НГТУ им. Р.Е. Алексеева.

На рис. 1 приведено изображение, полученное методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) поверхности и график глубинного профиля пленок (наноразмерных мембран), параметры которых зависят от ряда технологических факторов и идентифицируются указанными методами полимодальными распределениями (пример рис.1Б). Размер пленок 5×5 мкм².

Для идентификации одномерных плотностей распределения авторами использован разработанный комплекс алгоритмов и программ в пакете MATLAB.

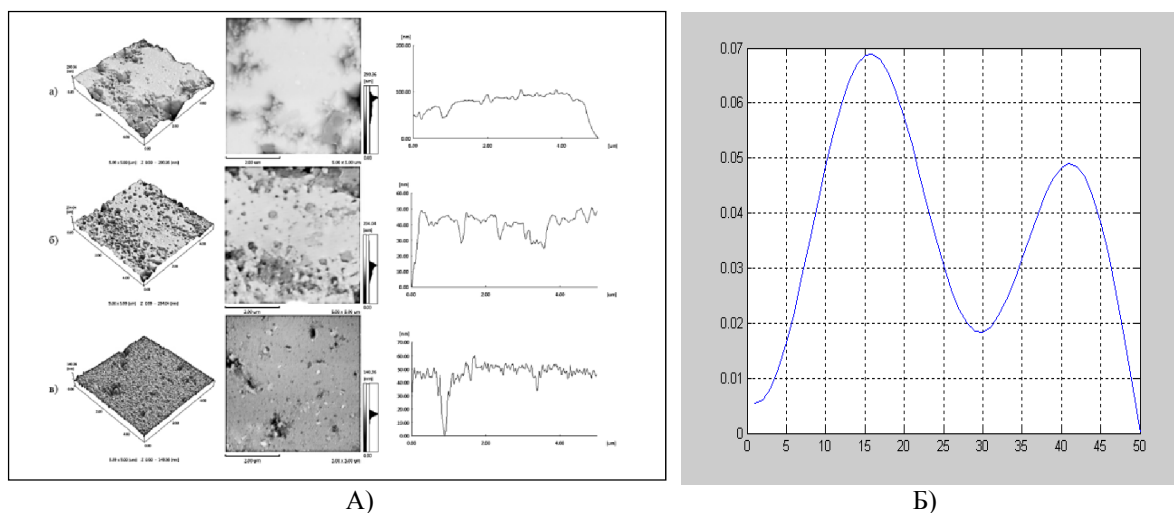


Рис. 1. А) АСМ изображение поверхности и график профиля пленок амфифильного блок-сополимера с добавлением полиэдральных октаглицидил-силесквиоксанов (ПОСС) в концентрации: (а) 0 масс. %; (б) 0,1 масс. %; (в) 0,5 масс. %. Б) Бимодальная плотность распределения глубины пор в центральном сечении пленки для ПОСС в концентрации 0,1 масс. % (по оси абсцисс глубина пор в нанометрах).

Восстановленные одномерные плотности распределения размеров и глубин пор для различных концентраций носят полимодальный характер с числом мод от 1 до 6. Для конкретных технологических задач обнаруженные полимодальные характеристики можно соотнести с селективными, прочностными и другими физико-химическими свойствами синтезированных мембран.

Метод атомно-силовой микроскопии дает матрицу данных 256×256 – двумерную выборку. Для анализа и интерпретации вероятностных свойств приведенных мембранных структур, описываемых двумерными выборками пространственного типа целесообразно использовать систему одномерных плотностей распределения, т.е. идентифицировать условные законы распределения системы двух случайных величин.

На рис. 2 справа показана идентифицированная система из 256 одномерных плотностей распределения глубинного профиля мембраны (ПОСС в концентрации 0 масс. %) по оси X при фиксированных значениях Y. Это система условных плотностей распределения, представленная в данном случае в 70 точках координаты X.

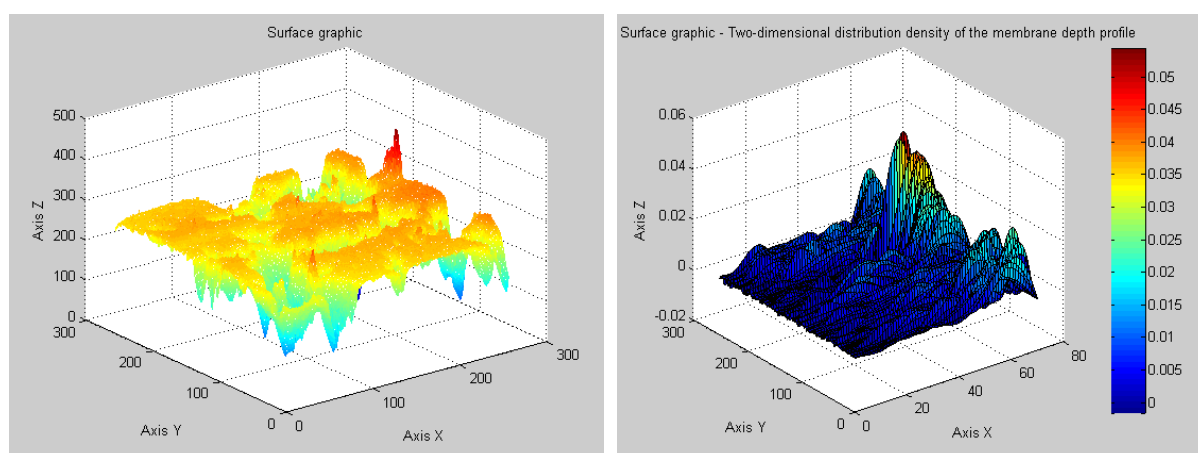


Рис. 2. Цветное АСМ изображение поверхности и график идентифицированной двумерной условной плотности распределения глубинного профиля мембраны (ПОСС в концентрации 0 масс. %).

Объемный график «двумерной» плотности распределения удобно рассматривать при различных углах обзора по азимуту и полярному углу (возвышению наблюдателя). Рис. 3 демонстрирует график идентификации в режиме поворота и дает наглядное представление о распределении глубинной пористости по поверхности структуры. В целом двумерное распределение имеет полимодальный характер и может быть восстановлено аналогичным образом вдоль оси Y.

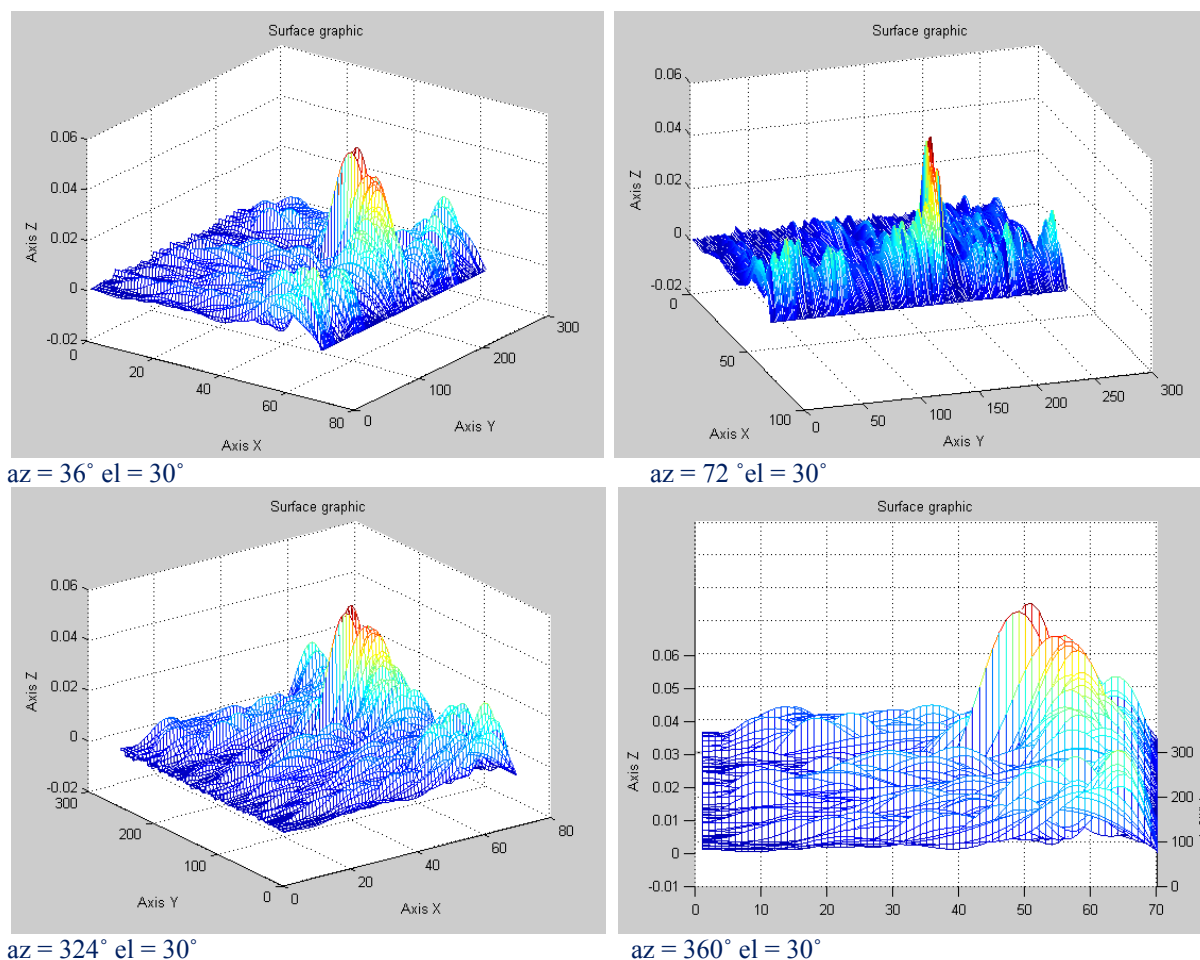


Рис. 3. Графики поворота идентифицированной двумерной условной плотности распределения глубинного профиля мембраны (ПОСС в концентрации: 0 масс.). Азимутальный угол – az, полярный – el, в градусах.

Представляется, что двумерный стохастический анализ данных позволит более наглядно и точно выявлять и оценивать влияние действующих технологических факторов и их вклад в топологические параметры и погрешность изготовления газоселективных мембран, имеющих важное значение для получения высокочистых полупроводниковых материалов. В качестве меры однородности топологии поверхности мембран можно использовать значения дифференциальной энтропии, вычисляемые по множеству идентифицированных плотностей.

2.2. Двумерный R/S-анализ

Выявленная полимодальность законов распределения характеристик мембран взаимосвязана с методологией анализа фрактальных закономерностей физических,

химических или биологических явлений, порождающих случайные и хаотические процессы, а также фрактальную геометрию пространственных структур [5].

В теории фракталов известен эффективный метод исследования объектов с фрактальной природой – R/S-анализ. В его основе лежит метод нормированного размаха Херста [7, 8].

Для метода требуется выборка значений, по которой вычисляются суммарное отклонение от среднего значения, размах отклонений сигнала R и стандартное отклонение S. Нормированный размах R/S связан с показателем Херста – H [7].

Если $H < 0.5$, исследуемый одномерный ряд обладает «кратковременной памятью», если $H > 0.5$ – ряд наделен персистентными свойствами (*persistere* /лат./ – пребывать, оставаться, упорствовать) и имеет фрактальную природу. Если задана совокупность рядов, то естественно рассматривать вопрос о фрактальности топологии структуры. Для анализа объектов поверхностного типа авторами разработан алгоритм и программа MATLAB, с помощью которых идентифицирована двумерная R/S-характеристика, на основе которой вычислен график показателя Херста для 256 сечений мембраны вдоль оси X (рис. 4). Также выдвинута гипотеза о фрактальности топологии мембран [6].

Как видно, показатель H, за исключением узкого участка в середине мембраны, выше значения 0.5 и в основном ниже единицы. В этом случае оправданно говорить о фрактальной геометрии поверхности изучаемой мембраны. В то же время, показатель H имеет существенную часть значений больших 1. В теории фракталов это аномальный случай, когда имеет место экстремальное (относительно амплитуд флуктуаций) свойство глубинных профилей структуры. Подобное поведение во временной области связывают с распределением Леви при движении частиц с резким случайным блужданием.

Таким образом, результаты R/S-анализа свидетельствуют о фрактальной геометрии топологических характеристик изучаемых мембранных структур. Данный вывод является оригинальным и представляет новые знания в прогнозировании свойств гибридных газоселективных мембран.

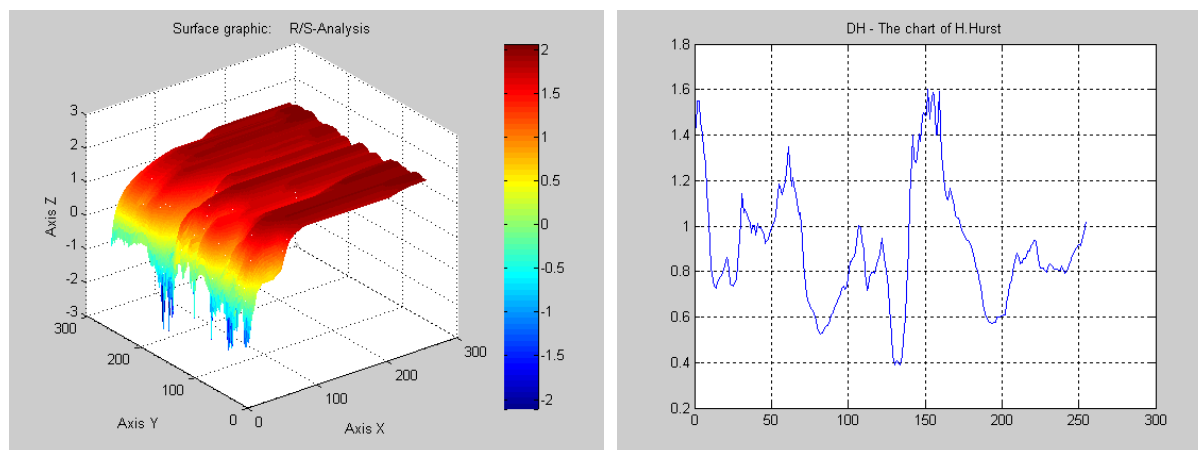


Рис. 4. Изображение поверхности R/S-характеристик вдоль оси X мембраны и график идентифицированных показателей Херста (256 значений для сечений вдоль оси X) глубинного профиля мембраны (ПОСС в концентрации 0 масс. %).

Фрактальную размерность Хаусдорфа-Безиковича $D = 3 - H$ поверхности мембраны логично определить как $D = 3 - M\{H\}$, где $M\{H\}$ – среднее значение показателя Херста по 256 линиям глубинных профилей. Вычисленное значение $M\{H\} = 0.904$, $D = 2.096$. Аналогично выполняется R/S-анализ вдоль оси мембраны Y.

3. Заключение

В результате исследования стохастических структур в рамках идентификации, визуализации и интерпретации двумерных данных показано, что:

- для анализа и первичной оценки вероятностных свойств систем и структур, описываемых двумерными выборками временного или пространственного типа, целесообразно использовать систему одномерных условных плотностей распределения;
- двумерный R/S-анализ свидетельствует о фрактальной геометрии топологических характеристик гибридных газоселективных мембран и определяет ее меру на основе фрактальной размерности Хаусдорфа-Безиковича $D = 3 - M\{H\}$;
- в процессе получения мембранных структур целесообразно контролировать качество топологических и физико-химических параметров на основе фрактальной статистики, включая размерность Хаусдорфа-Безиковича D .

Список литературы

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986. 288 с.
2. Вапник В.Н., Стефанюк А.Р. Непараметрические методы восстановления плотности вероятности // Автоматика и телемеханика. 1978. № 8. С. 38-52.
3. Куликов В.Б. Восстановление полимодальных плотностей вероятности по экспериментальным данным в структурах со стохастическими свойствами // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2014. № 1 (1). С. 248-256.
4. Куликов В.Б., Куликов А.Б., Хранилов В.П. ЕС-алгоритм регуляризации для метода идентификации полимодальных плотностей распределения в стохастических задачах управления // Труды XIII всероссийского совещания по проблемам управления (ВСПУ-2019). Москва, 17-20 июня 2019 г. М.: Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2019. С. 864-869.
5. Kulikov V., Kulikov A., Ignatyev A. The Stochastic and Singular Analysis of Fractal Signals in Cyber-Physical Systems of Biomedicine // Society 5.0: Cyberspace for Advanced Human-Centered Society. Studies in Systems, Decision and Control. Cham: Springer, 2021. Vol. 333. P. 239-252.
6. Sazanova T.S., Vorotyntsev I.V., Kulikov V.B., Davletbaeva I.M., Zaripov I.I. An Atomic Force Microscopy Study of Hybrid Polymeric Membranes: Surface Topographical Analysis and Estimation of Pore Size Distribution // Petroleum Chemistry. 2016. Vol. 56, No. 5. P. 427-435.
7. Петерс Э. Хаос и порядок на рынках капитала. Новый аналитический взгляд на циклы, цены и изменчивость рынка. М.: Мир, 2000. 333 с.
8. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.