Моделирование частотных сканов

Богачев А.М.

12 августа 2022 г.

Аннотация

В отчёте приведены результаты моделирования частотных сканов, образованных сигналом релаксации, состоящим из трёх экспоненциальных сигналов с единичной амплитудой. При моделировании не учитывается влияние шумов. Показано, что показатель нелинейности-неэкспоненциальности p убывает с увеличением разницы между постоянными времени крайних состоавляющих на спектре, при этом растёт среднеквадратическая ошибка между результатами измерений и результатами моделирования. В отчёте также приведена математическая модель частотного скана и краткое описание её программной реализации, в графическом виде преведены примеры результатов идентификации модели, приведён график зависимости p от разности между постоянными времени крайних составляющих на спектре, в приложении приведена таблица с результатами моделирования частотных сканов.

Содержание

1 Цели и задачи

Цель работы: изучить влияние расположения линий на спектрах на коэффициент нелинейности-неэкспоненциальности p.

Для достижения поставленной цели нужно решить следующие задачи:

1. Разработать программу идентификации частотного скана. Модель частотного скана должна учитывать коэффициент нелинейности-неэкспоненциальности p.

2. Расчитать частотные сканы для разных спектров.

3. Выполнить идентификацию полученных сканов.

4. Построить зависимость коэффициента p от расстояния между крайними линиями на спектре.

2 Математическе модели

В данном разделе представленно описание модели частотного скана в математических выражениях.

2.1 Модель сигнала релаксации ёмкости

Согласно обзору [2], зависимость значения ёмкости от времени $f(t)$ для моноэкспоненциального сигнала релаксации имеет вид выражения 1.

$$f(t) = A \exp\left(-\lambda t\right), \tag{1}$$

где

A – амплитуда сигнала релаксации ёмкости;

λ – скорость экспоненциального спада, обратнопрпорциональная постоянной веремени сигнала релаксации τ (выражение 2).

$$\lambda = \tau^{-1} \tag{2}$$

Спектр моноэкспоненциального сигнала релаксации имеет вид, представленный на рисунке 1.

Согласно источнику [2], зависимость сигнала релаксации ёмкости от времени $f(t)$ для сгинала, образованного несколькими дискретными экспоненциальными сигналами, определяется выражением 3.

$$f(t) = \sum_{i=1}^{n} A_i \exp\left(-\lambda_i t\right), \tag{3}$$

где n – количество экспоненциальных составляющих в спектре. Пример спектра такого сигнала показан на рисунке 2.

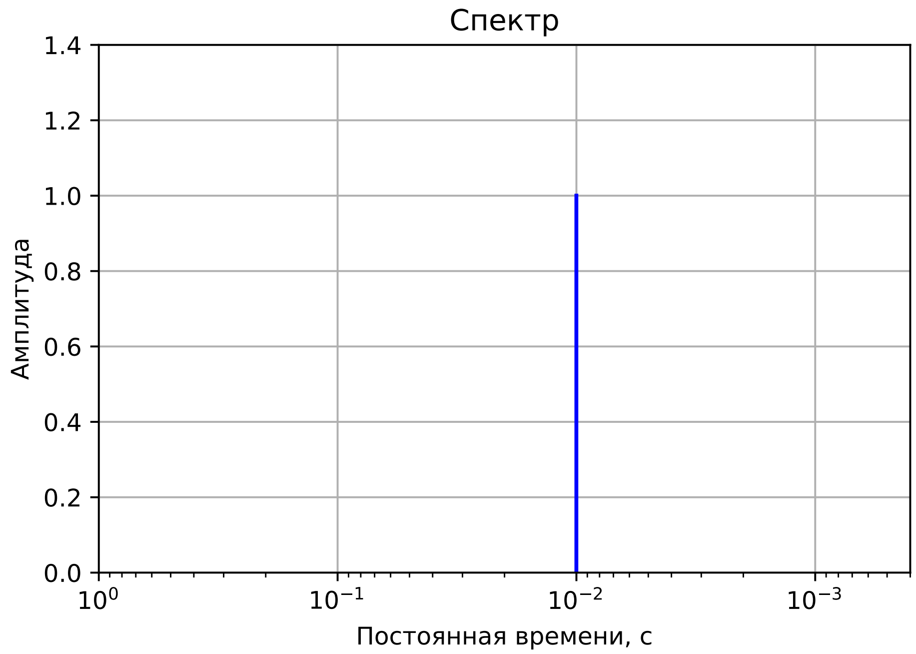


Рис. 1: Пример спектра моноэкспоненциального сигнала релаксации ёмкости.

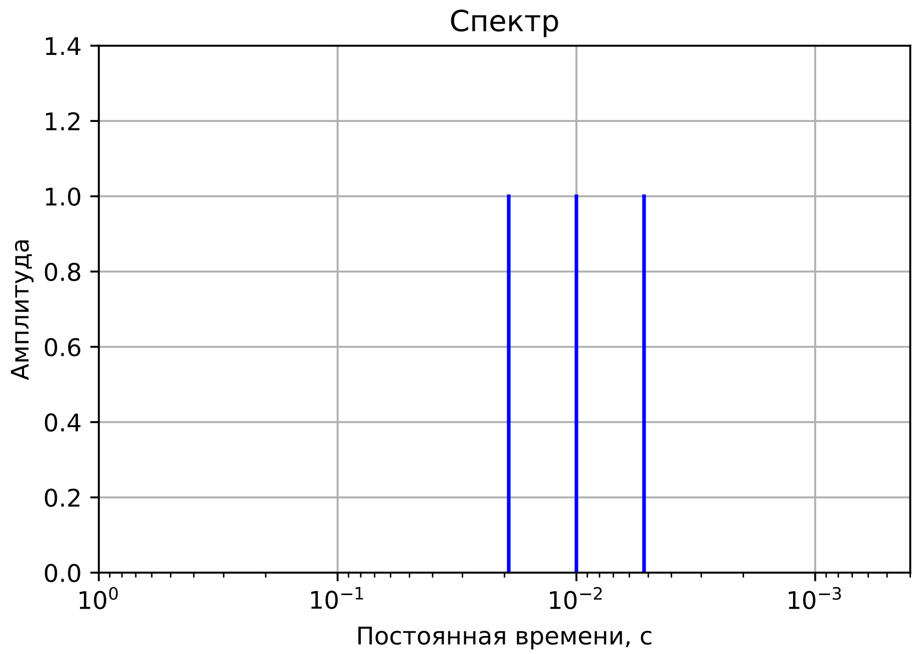


Рис. 2: Пример спектра сигнала релаксации ёмкости, содержащего несколько экспоненциальных составляющих.

2.2 Модель аппаратных преобразований спектрометра DLS-82E

В спектрометре DLS-82E реализована корреляционная обработка сигнала релаксации ёмкости, таким образом сигнал на выходе аналогового тракта спектрометра определяется выражением 4, согласно публикации [2].

$$S\left[g(\lambda), t_c, t_d\right] = \frac{1}{t_c} \int_{t_d}^{t_d+t_c} f(t) W\left(t - t_d\right) dt, \tag{4}$$

где

$W(t)$ – весовая функция, определённая на интервале времени $[0, t_c]$,

t_c – период (длительность) весовой функции $W(t)$,

t_d – время задержки между началом сигнала релаксации и началом корреляционной обработки. Согласно обзору [2], время задержки t_d, обычно, вводится для улучшения избирателности или для снижения искажения сигнала из-за перегрузки измерительной системы.

$g(\lambda)$ – распределение скоростей экспоненциальных спадов, составляющих релаксационный сигнал.

Модель аппаратных преобразований (корреляционной обработки), учитывающая форму весовой функции, реализованной в спектрометре DLS-82E, для моноэкспоненциального сигнала определяется выражением 5 [3].

$$S\left(\tau, C_A, F_0, t_1\right) = C_A K_{BS} K_{LS} \phi\left(\tau, F_0, t_1\right), \tag{5}$$

где

C_A – амплитуда емкостного релаксационного сигнала,

K_{BS} – масштабный коэффициент, зависящий от чувствительности емкостного моста,

K_{LS} – масштабный коэффициент селектора,

τ – постоянная времени релаксации гулбокого уровня,

F_0 – частота сканирования импульсов заполнения,

t_1 – длительность импульса заполнения,

$\phi\left(\tau, F_0, t_1\right)$ – функция определяемая выражением 6.

$$\phi\left(\tau, F_0, t_1\right) = M \tau F_0 e^{-\frac{0.05}{\tau F_0}} \left(1 - e^{\frac{t_1 F_0 - 0.45}{\tau F_0}} - e^{-\frac{0.5}{\tau F_0}} + e^{\frac{t_1 F_0 - 0.95}{\tau F_0}}\right), \tag{6}$$

где M – масштабный множитель.

Масштабный множитель M определяется выражением 7.

$$M(\tau, F_0, t_1) = \frac{1}{\max\left[\tau F_0 e^{-\frac{0.05}{\tau F_0}} \left(1 - e^{\frac{t_1 F_0 - 0.45}{\tau F_0}} - e^{-\frac{0.5}{\tau F_0}} + e^{\frac{t_1 F_0 - 0.95}{\tau F_0}}\right)\right]} \tag{7}$$

Введём коэффициент A (выражение 8), характеризующий амплитуду сигнала релаксации ёмкости и перепишем выражение 5 с учётом того, что длительность импульса заполнения t_1 является неизменной величиной, и получим выражение 9.

$$A = C_A K_{BS} K_{LS}. \tag{8}$$

$$S(\tau, A, F_0) = A\phi(\tau, F_0) \tag{9}$$

Для одновременного учёта нелинейности аппаратного тракта и неэкспоненциальности сигнала релаксации, связанной с присутствием нескольких экспоненциальных составляющих в модель вводят коэффициент нелинейности-неэкспоненциальности p [3], после чего выражение 9 приобретает вид выражения 10.

$$S(\tau, A, F_0, p) = A\left[\phi(\tau, F_0)\right]^p. \tag{10}$$

Для моноэкспоненциальных сигналов релаксации коэффициент $p = 1$, но, как будет показано далее, в случае наличия нескольких экспоенециальных составляющих в сигнале релаксации коэффициент p становится меньше 1.

2.3 Модель для расчёта исходных данных

Если предположить, что сигнал релаксации ёмкости состоит из нескольких экспоненциальных составляющих и определяется выражением 3, то опираясь на выражения 3, 4, 9 и 6, можно сделать выод, что частотный скан, созданный таким сигналом релаксации ёмкости определяется выражением 11.

$$Y = \sum_{i=1}^{n} A_i \phi(\tau_i, F_0), \tag{11}$$

где n – количество экспоненциальных составляющих в сигнале релаксации.

3 Моделирование и его результаты

3.1 Реализация модели

Модель (выражение 10) реализована на языке программирования Python (версия 3.9.12) с применением библиотеки TensorFlow (версия 2.8.0) и других библиотек для научных вычислений.

Модель частотного скана реализованна в виде отдельного класса *FrequencyScan()* в модуле *fsmodels.py*. Код прокомментирован. Все параметры снабжены адекватными значениями по умолчанию. В дальнейшем планируется дополнение документации и перенос всех программных инструментов для обработки экспериментальных данных в один пакет.

Модель реализует две функции:

1. Вычисление частотного скана по заданным параметрам и заданному вектору десятичных логарифмов частот опорной функции.

2. Идентификация параметров модели частотного скана по экспериментальным данным.

Имеется возможность вывода значений параметров модели на каждой итерации при идентификации. Примеры использования модели можно найти в файле *tensorflow_model.ipynb* (ПО Jupyter Notebook в составе дистрибутива Anaconda).

Программа при каждом вычислении значения $\phi\left(\tau, F_0, t_1\right)$ (выражение 6) находит $\max\left[\tau F_0 e^{-\frac{0.05}{\tau F_0}}\left(1 - e^{\frac{t_1 F_0 - 0.45}{\tau F_0}} - e^{-\frac{0.5}{\tau F_0}} + e^{\frac{t_1 F_0 - 0.95}{\tau F_0}}\right)\right]$ методом градиентного спуска и вычисляет масштабный множитель M (выражение 7).

Идентификация параметров модели производится методом градиетного спуска, при этом минимизируется среднеквадратическая ошибка между значениями, полученными в результате измерений, и результатами моделирования (выражение 12).

$$E = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - y_i^*\right)^2, \tag{12}$$

где

y_i – значения, полученные в результате измерений,

y_i^* – значения, полученные в результате моделирования,

n – количество измерений.

Градиентный спуск везде реализован с помощью библиотеки TensorFlow, которая использует алгоритм дифференцирования на графе вычислений, таким образом, производная берётся символьно (точно), затем вычисляется её значение, поэтому точность вычисления градиента ограничена только разрядностью чисел [1].

Для ускорения процесса идентификации и улучшения сходимости в модели вместо постоянной времени сигнала релаксации τ выполняется идентификация величины $\rho = log10(\tau)$. По этим же и некоторым другим техническим причинам при вычислении частотного скана на вход модели нужно подавать не вектор частот опорной функции, а вектор их десятичных логарифмов.

На рисунке 3 показан пример результата идентификации модели на тестовых (специально сгенерированных) данных.

На рисунке 4 показан «путь» изменеия параметров (постоянной времени и амплитуды) при идентификации. Красными точками отмечены значения параметров на каждой итерации, изолинии показывают значения среднеквадратической ошибки.

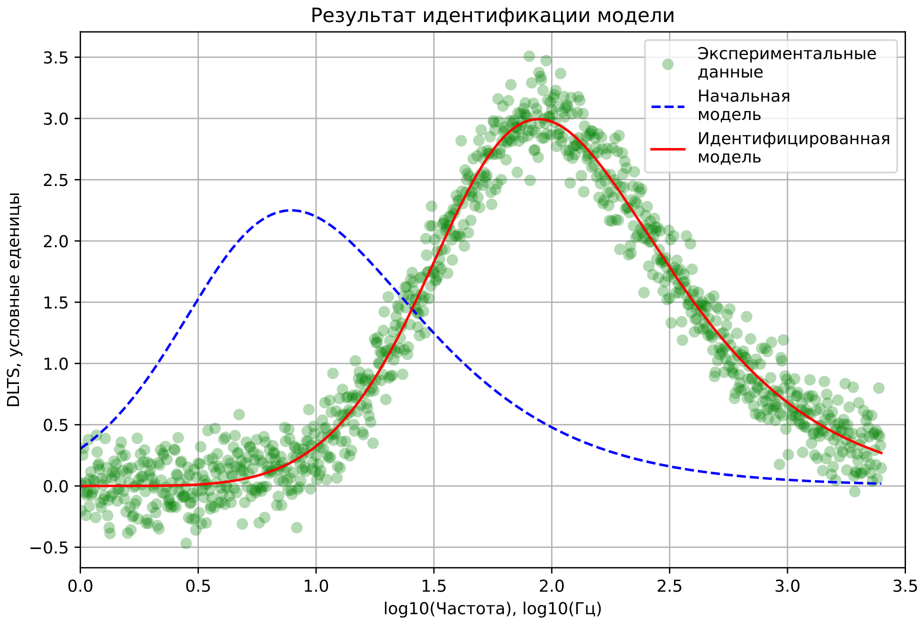


Рис. 3: Пример результата идентификации модели.

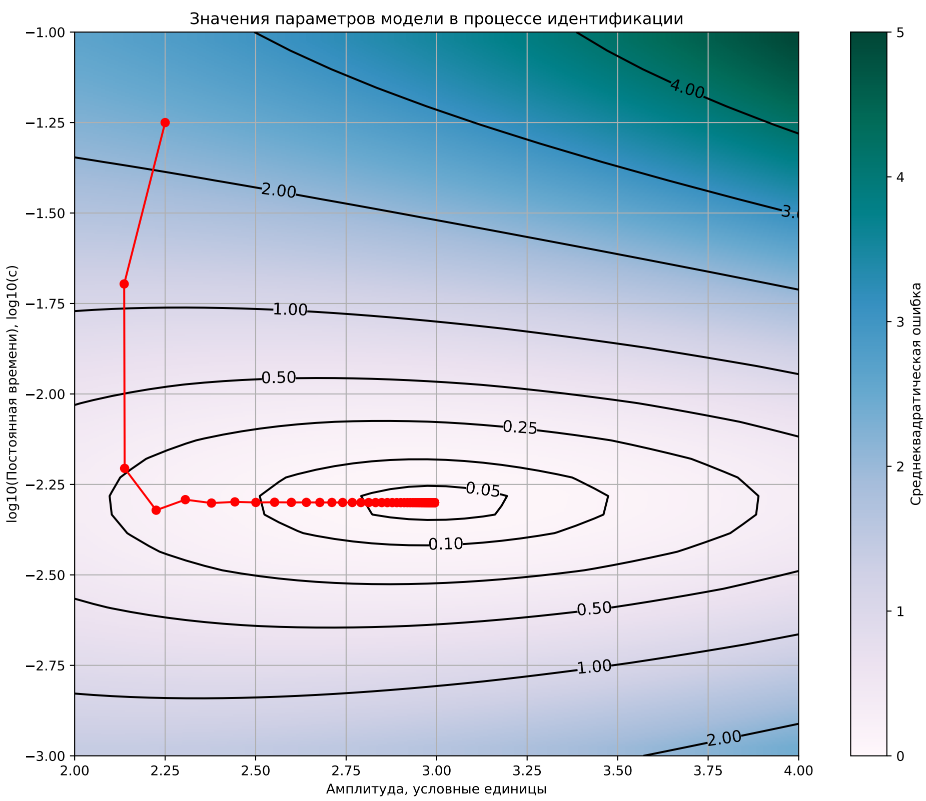
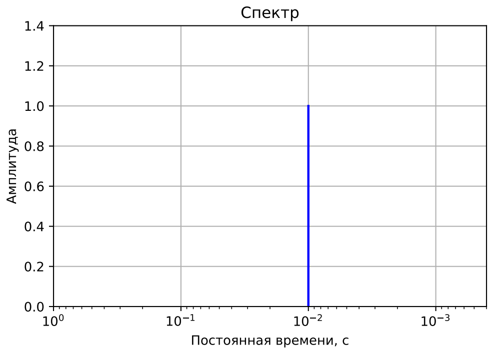


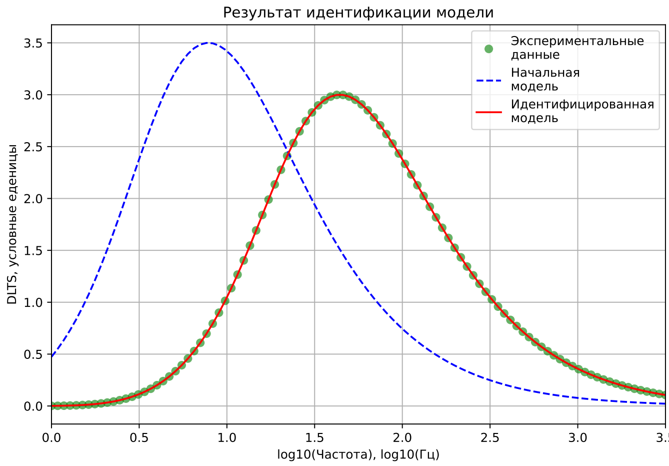
Рис. 4: «Путь» изменеия параметров при идентификации.

3.2 Результаты моделирования в отсутствии шума

Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования. Много текста, посвящённого результатам моделирования.

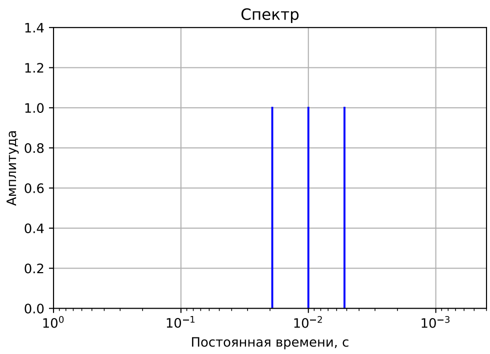


(a) Спектр

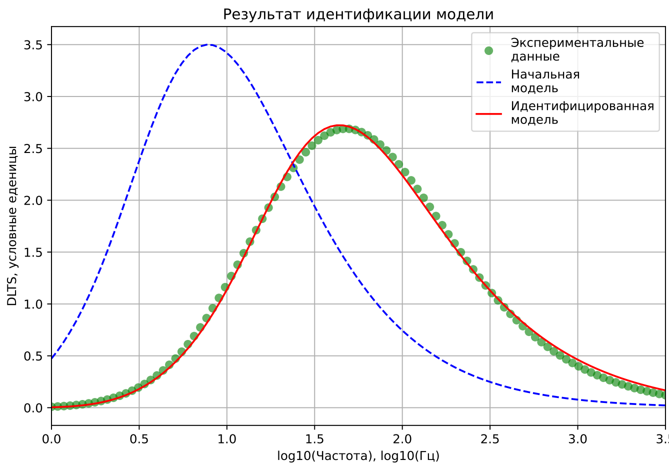


(b) Рассчитанный частотный скан и результаты идентификации

Рис. 5: Пример №0

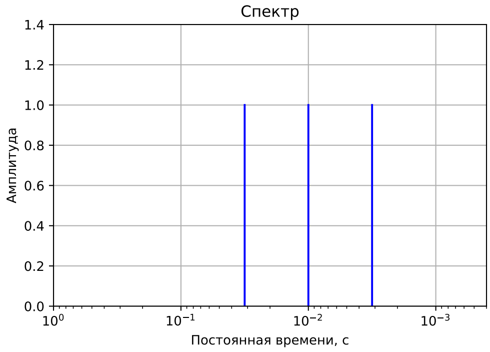


(a) Спектр

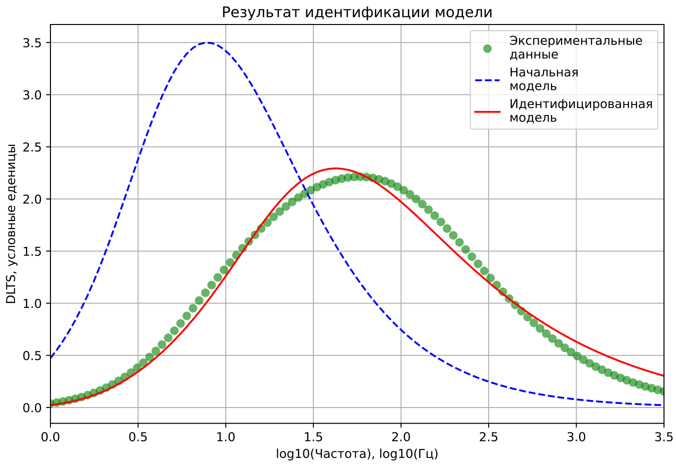


(b) Рассчитанный частотный скан и результаты идентификации

Рис. 6: Пример №1



(a) Спектр



(b) Рассчитанный частотный скан и результаты идентификации

Рис. 7: Пример №2

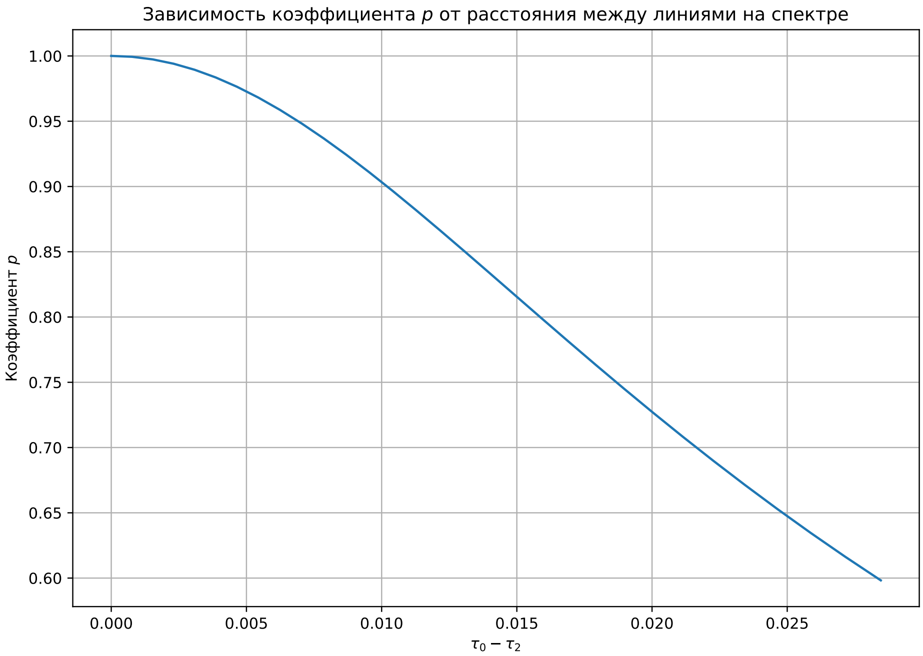


Рис. 8: Зависимость показателя p от расстаяния между крайними линиями на спектре.

4 Выводы

1. Вывод 1.
2. Вывод 2.
3. Вывод 3.

Список литературы

[1] Aurelien Geron. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems*. 2nd. O'Reilly Media, Inc., 2019. ISBN: 1492032646.

[2] Andrei A. Istratov и Oleg F. Vyvenko. «Exponential analysis in physical phenomena». В: *Review of Scientific Instruments* 70.2 (1999), с. 1233—1257. DOI: `10.1063/1.1149581`. eprint: `https://doi.org/10.1063/1.1149581`. URL: `https://doi.org/10.1063/1.1149581`.

[3] Vladimir Krylov, Aleksey Bogachev и T. Pronin. «Deep level relaxation spectroscopy and nondestructive testing of potential defects in the semiconductor electronic component base». В: *Radio industry (Russia)* 29 (май 2019), с. 35—44. DOI: `10.21778/2413-9599-2019-29-2-35-44`.

Приложение 1

Таблица 1: Таблица с результатами моделирования.

№	τ_0	τ_1	τ_2	A_0, A_1, A_2	p	τ	A	E
0	0.01	0.01	0.01	1	1	0.01	3	7.649e-10
1	0.01039	0.01	0.009624	1	0.9994	0.01	2.999	3.037e-08
2	0.0108	0.01	0.009261	1	0.9974	0.01	2.996	4.73e-07
3	0.01122	0.01	0.008913	1	0.994	0.01	2.99	2.38e-06
4	0.01166	0.01	0.008577	1	0.9894	0.01	2.983	7.468e-06
5	0.01212	0.01	0.008254	1	0.9836	0.01	2.974	1.807e-05
6	0.01259	0.01	0.007943	1	0.9764	0.01	2.962	3.708e-05
7	0.01308	0.01	0.007644	1	0.9681	0.01	2.949	6.783e-05
8	0.01359	0.01	0.007356	1	0.9587	0.01	2.933	0.0001141
9	0.01413	0.01	0.007079	1	0.9482	0.01	2.916	0.0001797
10	0.01468	0.01	0.006813	1	0.9367	0.01	2.897	0.000269
11	0.01525	0.01	0.006556	1	0.9243	0.01001	2.877	0.000386
12	0.01585	0.01	0.00631	1	0.9109	0.01001	2.855	0.0005349
13	0.01647	0.01	0.006072	1	0.8968	0.01001	2.831	0.0007194
14	0.01711	0.01	0.005843	1	0.8819	0.01002	2.806	0.0009433
15	0.01778	0.01	0.005623	1	0.8664	0.01002	2.78	0.00121
16	0.01848	0.01	0.005412	1	0.8503	0.01003	2.752	0.001521
17	0.0192	0.01	0.005208	1	0.8336	0.01004	2.724	0.00188
18	0.01995	0.01	0.005012	1	0.8166	0.01005	2.694	0.002287
19	0.02073	0.01	0.004823	1	0.7991	0.01006	2.664	0.002744
20	0.02154	0.01	0.004642	1	0.7813	0.01008	2.632	0.003251
21	0.02239	0.01	0.004467	1	0.7633	0.0101	2.6	0.003806
22	0.02326	0.01	0.004299	1	0.7451	0.01012	2.568	0.004408
23	0.02417	0.01	0.004137	1	0.7267	0.01014	2.534	0.005055
24	0.02512	0.01	0.003981	1	0.7083	0.01016	2.501	0.005745
25	0.0261	0.01	0.003831	1	0.6898	0.01019	2.467	0.006473
26	0.02712	0.01	0.003687	1	0.6713	0.01022	2.432	0.007235
27	0.02818	0.01	0.003548	1	0.6529	0.01025	2.398	0.008026
28	0.02929	0.01	0.003415	1	0.6345	0.01029	2.363	0.008842
29	0.03043	0.01	0.003286	1	0.6163	0.01033	2.328	0.009676
30	0.03162	0.01	0.003162	1	0.5982	0.01038	2.294	0.01052

В таблице 1 использованы следующие обозначения:

τ_0, τ_1, τ_2 – Заданные постоянные времени экспоненциальных составляющих на спектре.

A_0, A_1, A_2 – Заданные амплитуды экспоненциальных составляющих на спектре. В данном случае амплитуды всех составляющих равны 1.

p – коэффициент нелинейности-неэкспоненциальности, полученный в результате идентификации параметров модели.

τ – постоянная времени, полученная в результате идентификации параметров модели.

A – амплитуда, полученная в результате идентификации параметров модели.

E – среднеквадратическая ошибка.