

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СЛОЖНЫХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ СПЕКТРОВ

В.Е. Бахрушин, Р.Я. Шумада

Гуманитарный университет "Запорожский институт государственного и муниципального управления", ул. Жуковского, 70-б, Запорожье, Украина, 69002
Vladimir.Bakhrushin@zhu.edu.ua

Изложена общая методология идентификации математических моделей сложных релаксационных спектров. Определены наиболее информативные критерии адекватности получаемых моделей.

Введение

Исследование механической релаксации в сплавах внедрения на основе ОЦК металлов позволяет получить ценную информацию о поведении примесей внедрения, их локальном окружении и тонкой структуре твердых растворов [1]. Благодаря этому изучение внутреннего трения, релаксации модулей, упругого последствия и других релаксационных свойств находит широкое применение в физике твердого тела и физическом материаловедении. Одной из проблем, ограничивающих их использование, является сложность определения параметров релаксации при наложении нескольких релаксационных процессов. Как правило, эту задачу решают методами наименьших квадратов или наискорейшего спуска, субъективно оценивая количество налагающихся процессов и выполняемых итераций [1 – 3]. В [4, 5] предложены формальные критерии адекватности модели релаксационного спектра, которые позволяют уменьшить произвол при задании количества процессов, и показана перспективность применения квазиньютоновской минимизации вместо традиционных вариантов метода наименьших квадратов.

Целью данной статьи является уточнение общей методологии идентификации параметров моделей релаксационных спектров и критериев адекватности получаемых моделей.

1. Математическая модель релаксационного спектра

Согласно [1], математическую модель сложного релаксационного спектра в области релаксации Снука во многих практически важных случаях можно записать в виде:

$$\begin{cases} Q^{-1}(T) = \sum_{i=1}^n Q_{0i}^{-1} \cosh^{-1} \left[\frac{H_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{0i}} \right) \right]; \\ H_i = RT_{0i} \ln \left(\frac{kT_{0i}}{hf} \right), \end{cases} \quad (1.1)$$

где $Q^{-1}(T)$ – величина внутреннего трения при температуре T , Q_{0i}^{-1} , H_i и T_{0i} – соответственно, высота, энергия активации и температура i -го релаксационного пика, n – количество элементарных пиков, R – универсальная газовая постоянная, k – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, f – частота колебаний образца при измерениях. В частности модель такого вида хорошо описывает форму спектра, обусловленного релаксацией примесей внедрения в неферромагнитных ОЦК металлах. Задачей идентификации является определение количества элементарных пиков и их параметров Q_{0i}^{-1} , T_{0i} . Для этого необходимо решить задачу минимизации функционала:

$$S = \sum_{j=1}^m [Q_j^{-1} - Q^{-1}(T_j)]^2, \quad (1.2)$$

где Q_j^{-1} – экспериментальное значение внутреннего трения при температуре T_j , $Q^{-1}(T_j)$ – значение, которое рассчитано на основе модели (1.1) для той же температуры, m – количество экспериментальных точек. В [4, 5] предложена методика идентификации параметров модели (1.1), основанная на применении квазиньютоновской процедуры минимизации функционала (1.2). В качестве адекватной принимается модель, для которой он является квазиунимодалым, т.е. имеет для экспериментально исследованного диапазона температур n минимумов, различающихся только номерами пиков, т.е. соответствующих одной и той же физической модели релаксации. Вместе с тем, при проверке адекватности математических моделей принято использовать и общие критерии, такие как близость суммы квадратов остатков к сумме квадратов погрешностей экспериментальных точек, нормальное распределение остатков с нулевым математическим ожиданием, отсутствие автокорреляции остатков [6, 7].

2. Общая процедура идентификации параметров модели

Как уже было сказано выше, задачей идентификации модели (1.1) является определение числа релаксационных пиков, их температур и высот. Общее количество неизвестных параметров при наличии n пиков составляет $2n$.

Решение задачи идентификации удобно разбить на два этапа: определение количества пиков и вычисление их параметров. Поскольку в большинстве случаев невозможно определить количество пиков из каких-либо теоретических соображений, нами предлагается следующая процедура идентификации модели.

1. На первом этапе по виду релаксационного спектра задается начальное (минимальное) значение количества пиков n_1 . Если процедуру идентификации желательно пол-

ностью автоматизировать, можно принять $n_1 = 1$.

2. Решается задача минимизации функционала (1.2) и определяются значения параметров модели для заданного количества пиков. Для этого, согласно проведенным нами исследованиям, целесообразно использовать квазиньютоновские алгоритмы оптимизации. Использование квазиньютоновских методов позволяет улучшить сходимость алгоритма по сравнению с методом наискорейшего спуска. Последний не гарантирует попадания в точку минимума в силу высокой овражности целевого функционала. В качестве критерия остановки итерационной процедуры ставилось выполнение условия, по которому норма вектора смещения на очередном шаге должна была быть меньше заданной малой величины. Общее количество выполнявшихся итераций составляло при этом от нескольких десятков до нескольких тысяч в зависимости от количества точек тестового спектра, стандартного отклонения погрешности и количества пиков в рассматриваемой модели. Это свидетельствует о том, что традиционные методы [1 – 3], в которых количество итераций выбирается субъективно и обычно не превышает 10 – 15, не позволяют достичь точки экстремума.

3. Выполняется проверка адекватности модели. Если по всем рассматриваемым критериям модель признается адекватной, то процедура идентификации на этом заканчивается. В противном случае увеличиваем количество пиков на единицу, принимая $n_{i+1} = n_i + 1$, и возвращаемся к п. 2.

Для проверки алгоритма была выполнена идентификация математических моделей релаксационных спектров на тестовых задачах. В разработанных задачах необходимо было идентифицировать параметры специально сконструированных на основе модели (1) спектров, включавших от трех до пяти налагающихся максимумов. Для имитации погрешности эксперимента к рассчитанным для тестового спектра значениям внутреннего трения добавляли нормально распределенную случайную величину с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением, которое для разных

тестовых задач находилось в пределах от 0,1 до 0,4. Количество пиков, на которые раскладывали тестовый спектр, состоявший из N максимумов, варьировали от $N - 1$ до $N + 1$. Начальные приближения для температур пиков выбирали случайным образом на отрезке, границами которого были минимальная и максимальная температуры тестового спектра, а начальные приближения высот – на отрезке от $1 \cdot 10^{-3}$ до $12 \cdot 10^{-3}$. На рис. 1 показаны пример начального приближения при решении задачи идентификации, а на рис. 2 – результаты при правильном выборе количества пиков в математической модели анализируемого спектра.

3. Критерии адекватности модели

Для проверки адекватности модели использовали такие критерии:

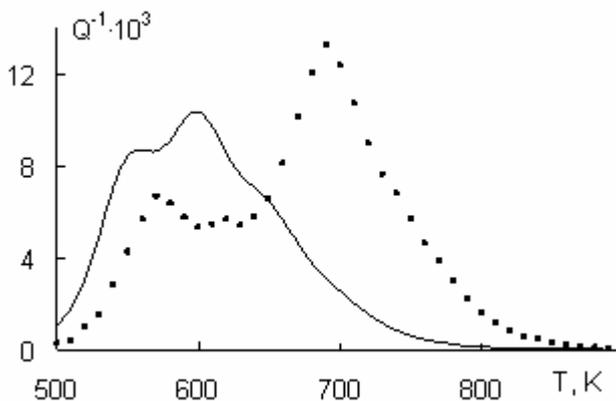


Рис. 1. Пример начального приближения при решении задачи идентификации спектра

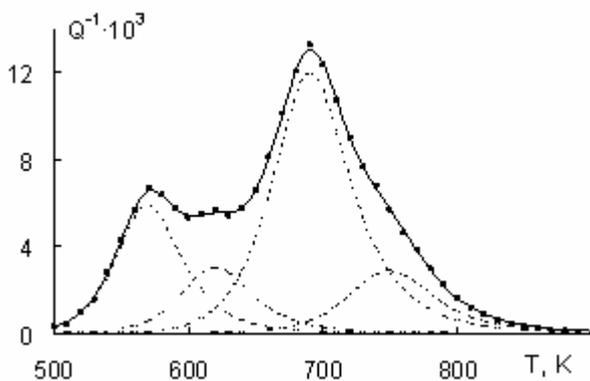


Рис. 2. Результаты идентификации модели релаксационного спектра

- квазиуниmodalность целевого функционала (1.2);

- критерий Фишера близости суммы квадратов остатков модели к сумме квадратов погрешностей значений внутреннего трения;

- Z-критерий равенства нулю среднего значения остатков модели;

- критерий Дарбина-Уотсона отсутствия автокорреляции остатков модели;

- построение P-P диаграммы для проверки нормальности распределения остатков модели.

Исследование указанных критериев дало такие результаты.

Критерий квазиуниmodalности целевого функционала всегда выполнялся при правильном выборе количества пиков, на которые раскладывали анализируемый спектр. Если выбор количества пиков был неправильным, то этот критерий в некоторых случаях выполнялся, в некоторых – нет. При выборе слишком большого числа пиков выполнение этого критерия наблюдалось лишь в случаях, когда один из выделяемых пиков имел нулевую высоту, а остальные соответствовали заданным максимумам тестового спектра. Нарушение критерия в этом случае происходило при выделении дополнительного пика, высота которого была сопоставима с погрешностью ее измерения или при расщеплении одного из заданных пиков. При выборе недостаточного количества пиков результатом идентификации было выделение максимумов, параметры которых были близки к параметрам основных пиков тестового спектра, однако не совпадали с ними.

При использовании критерия Фишера проверяли выполнение условий:

$$\frac{S}{\Delta^2} \leq F, \quad \frac{\Delta^2}{S} \leq F, \quad (2.1)$$

где S – значение целевого функционала (1.2), Δ^2 – сумма квадратов погрешностей определения внутреннего трения по всем экспериментальным точкам или сумма квадратов использованных элементов сгенерированной случайной последовательности, F – критическое значение критерия Фишера для выбран-

ного уровня значимости (при $\alpha = 0,05$ оно находилось в пределах 2,0 – 2,5 в зависимости от количества точек в тестовом спектре).

Невыполнение первого из указанных условий свидетельствовало о недостаточном количестве пиков в рассматриваемой модели спектра, а невыполнение второго – о наличии избыточных максимумов.

Критерий Фишера не выполнялся в случаях, когда число пиков, на которые раскладывали тестовый спектр, было меньше числа пиков, из которых он состоял. При этом значение отношения $\frac{S}{\Delta^2}$ находилось в пределах от 4 до 50. При правильном выборе количества пиков в модели значение этого отношения находилось в пределах 0,7 – 0,8, а при наличии в модели избыточных пиков с ненулевыми высотами оно уменьшалось до 0,2 – 0,5.

На рис. 3, 4 показаны характерные графики остатков для адекватной и неадекватной модели спектра.

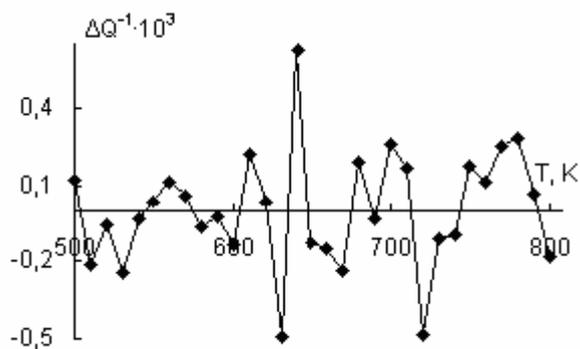


Рис. 3. Характерный график остатков адекватной модели релаксационного спектра

Среднее значение остатков модели во всех проанализированных случаях значимо не отличалось от нуля.

Для анализа автокорреляции остатков применяли критерий Дарбина-Уотсона, значение которого рассчитывали по формуле:

$$d = \frac{\sum_{j=2}^m (e_j - e_{j-1})^2}{\sum_{j=1}^m e_j^2}, \quad (2.2)$$

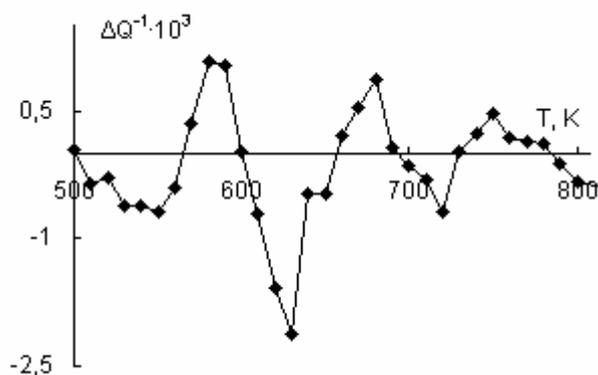


Рис. 4. Характерный график остатков неадекватной модели релаксационного спектра

где $e_j = Q_j^{-1} - Q^{-1}(T_j)$ - остатки модели, m – количество точек тестового спектра. Для адекватной модели должно выполняться условие $d \approx 2$. Близкие к нулю значения d свидетельствуют о наличии положительной автокорреляции, а значения, близкие к 4, - о наличии отрицательной автокорреляции.

Анализ остатков по критерию Дарбина-Уотсона показал, что при недостаточном числе пиков модели всегда имеется положительная автокорреляция остатков, при правильном выборе числа пиков автокорреляция отсутствует, а при наличии избыточных пиков возможно наличие как положительной, так и отрицательной автокорреляции.

Для проверки нормальности распределения остатков использовали Р-Р диаграммы пакета статистического анализа SPSS. На рис. 5, 6 приведены характерные виды диаграмм для адекватных и неадекватных по этому критерию моделей релаксационного спектра.

4. Идентификация параметров математических моделей реальных релаксационных спектров

Разработанная процедура идентификации параметров математических моделей сложных релаксационных спектров была протестирована на примере анализа спектров сплавов Nb – W – N и Nb – Hf – N.

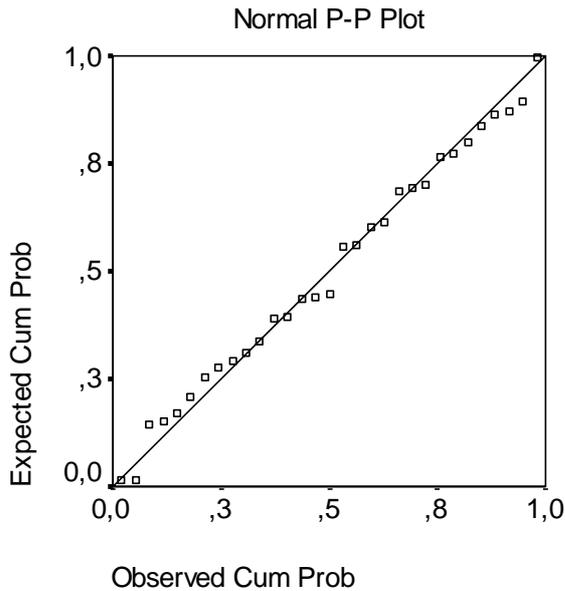


Рис. 5. SPSS P-P диаграмма остатков адекватной модели

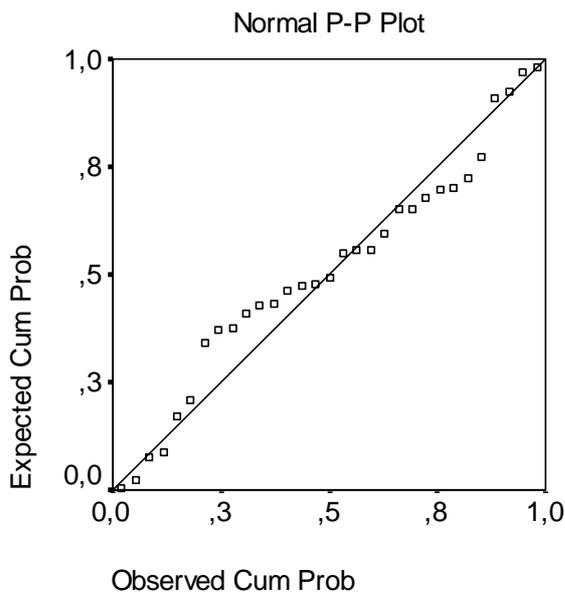


Рис. 6. SPSS P-P диаграмма остатков неадекватной модели

Основные отличия по сравнению с идентификацией моделей тестовых спектров заключались в следующем. Во-первых, существует некоторая неопределенность в определении погрешности измерения величины внутреннего трения. Согласно [2], она существенно и немонотонно зависит от измеряемого значения. Поэтому при использовании критерия Фишера его критическое значение

должно быть несколько увеличено (примерно в 1,5 – 2 раза).

Вторым отличием является то, что из-за ограниченного количества экспериментальных точек в реальных спектрах целесообразно использовать их групповую обработку при идентификации моделей. В этом случае математические модели для группы спектров, соответствующих близким по своим свойствам и условиям измерения образцам, идентифицируются одновременно. В этом случае можно считать, что протекающие релаксационные процессы и, следовательно, температуры пиков являются одинаковыми, а высоты пиков, характеризующие интенсивности этих процессов, различны. Такой подход дает возможность существенно увеличить количество экспериментальных точек, приходящихся на один определяемый параметр модели. Соответственно повышаются надежность получаемых результатов и адекватность моделей.

На рис. 7, 8 показаны примеры идентификации.

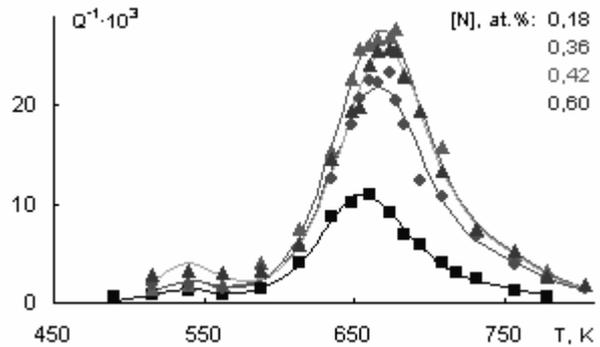


Рис. 7. Результаты идентификации моделей релаксационных спектров сплавов Nb – 2 ат.% W – N

Дополнительным критерием адекватности получаемых в результате идентификации математических моделей сложных релаксационных спектров в этом случае является воспроизводимость получаемых результатов. Так в рассматриваемых примерах для адекватных моделей релаксационных спектров сплавов с 2, 6 и 12 ат. % вольфрама был получен один и тот же набор энергий активации релаксационных процессов, а результаты, полученные при идентификации моде-

лей спектров сплавов Nb – 2 ат.% Hf – N близки к приводимым в литературе [1] значениям параметров основных пиков.

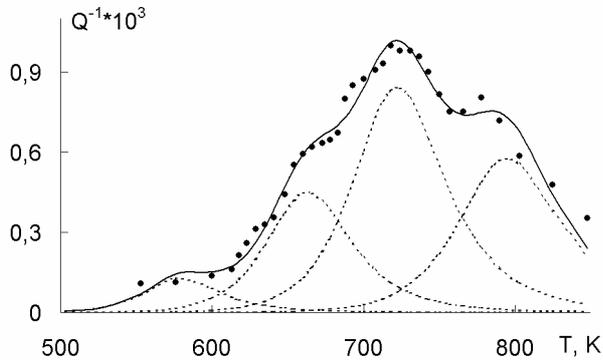


Рис. 8. Результаты идентификации моделей релаксационных спектров сплавов Nb – 2 ат.% Hf – N

Выводы

1. Предложен уточненный алгоритм идентификации математических моделей сложных релаксационных спектров.

2. Показано, что наиболее информативными с точки зрения определения нижней границы числа протекающих релаксационных процессов являются критерии Фишера и Дарбина-Уотсона. При оценке верхней границы этого параметра наиболее информативным является критерий квазиуни-modalности целевого функционала.

Литература

1. Бахрушин В.С., Чиріков О.Ю. Моделі та механізми механічної релаксації, пов'я-

заної з перебудовою домішково-дефектної підсистеми кристалів. – Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2004. – 140 с.

2. Метод внутреннего трения в металловедческих исследованиях / Блантер М.С., Пигузов Ю.В., Агмарин Г.М. и др. – М.: Металлургия, 1991. – 248 с.

3. Анализ сложных релаксационных спектров внутреннего трения на ЭВМ / А.И. Ефимов, О.Н. Разумов, А.Л. Созинов, П.Г. Яковенко // Внутреннее трение в металлах и неорганических материалах. – М.: Наука, 1982. – С. 31 – 35.

4. Бахрушин В.Е., Гончаренко Ю.В., Чиріков А.Ю. Использование методов нелинейной оптимизации для анализа сложных релаксационных спектров // Системні технології, 2004. – № 2(31). – С. 99 – 108.

5. Бахрушин В.Е., Чиріков А.Ю. Анализ сложных релаксационных спектров внутреннего трения твердых растворов на основе ниобия // Высокочистые металлические и полупроводниковые материалы: Сборник докладов 9 Международного симпозиума / Под ред. В.М. Ажажи, В.И. Лапшина, И.М. Неклюдова, В.М. Шулаева. – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2003. – С. 77 – 82.

6. Бахрушин В.С. Математичне моделювання. – Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2004. – 140 с.

7. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн. Кн. 1. – М.: Финансы и статистика, 1986 – 366 с.