

УДК: 621.385.833

МЕТОДИКА АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПОСТРОЕНИЯ ФУНКЦИЙ ПРИНАДЛЕЖНОСТИ ДЛЯ ОПЕРАТИВНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ СТМ-ПРОФИЛОГРАММ

Ю.К. Шелковников, А.В. Тюриков, М.В. Тарасов, П.В. Гуляев, С.Р. Кизнерцев

В статье предложена методика автоматизированного построения функций принадлежности для оперативного распознавания СТМ-профилограмм. Показано, что на этапе фаззификации более целесообразно использовать модель, в которой выбор углов наклона функций принадлежности носит объективный характер и является автоматизированным. Установлено, что по сравнению с экспертным методом построения функций принадлежности для предложенной методики получен более коррелирующий вектор соответствия образца модельным изображениям, что позволяет использовать разработанную методику на этапе фаззификации реальных СТМ-изображений ультрадисперсных частиц кластерных материалов.

Ключевые слова: сканирующий туннельный микроскоп, распознавание СТМ-профилограмм, нечеткая логика, функции принадлежности

Кластерные материалы (КМ) на основе ультрадисперсных частиц (УДЧ) обладают принципиально новыми механическими, магнитными, каталитическими и другими физико-химическими свойствами. Все более широкое применение УДЧ в наноиндустрии ставит задачу распознавания их СТМ-изображений в ряд наиболее актуальных и, в то же время, наиболее сложных, решаемых в условиях неполной информации [1]. Математический аппарат нечеткой логики и теории нечетких множеств в настоящее время успешно применяется для решения подобных задач, используя ненадежные или слабо формализованные исходные данные. Наличие математических средств отражения нечеткости исходной информации позволяет построить модель, адекватную исследуемому объекту.

Функции принадлежности (ФП) являются единственным средством описания нечетких подмножеств. Изучение ФП на протяжении истории развития нечетких систем носит весьма пассивный характер: совершенствование процесса функционирования нечетких систем в большинстве случаев вообще не затрагивало этап фаззификации или совершенствовало его незначительно. В итоге, ФП остаются малоисследованным компонентом, несмотря на важную роль этапа фаззификации при функционировании нечетких систем [2].

Субъективный характер выбора вида и параметров ФП, описывающих входные и выходные сигналы систем, требует построения модели объективного расчета параметров ФП нечетких моделей.

Автоматизированное построение функций принадлежности

В методике идентификации СТМ - профилограмм с применением нечеткой логики [3] на этапе фаззификации использовались симметричные треугольные функции принадлежности вида:

$$\mu(z) = \begin{cases} 1 - \frac{|a-z|}{\alpha}, & \text{если } |a-z| \leq \alpha; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1)$$

Аналогичная треугольная зависимость была использована для построения функции принадлежности выходной переменной. При этом выбор коэффициентов наклона ФП производился на основе экспертных данных, носящих обычно достаточно субъективный характер. Однако возможным является построение модели, в которой выбор углов наклона ФП носит объективный характер и является автоматизированным.

За исходные данные принимается дискретизированная по n точкам эталонная СТМ-профилограмма и ее некоторая искаженная модификация (рисунок 1).

При этом среднеквадратическое отклонение эталона от его искаженного варианта рассчитывается по формуле:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (z_i^{\text{Искж}} - z_i^{\text{Эмл}})^2}{n}}, \quad (2)$$

где $z_i^{Искж}$, $z_i^{Этл}$ значения i -й ординаты искаженного и эталонного сигнала соответственно.

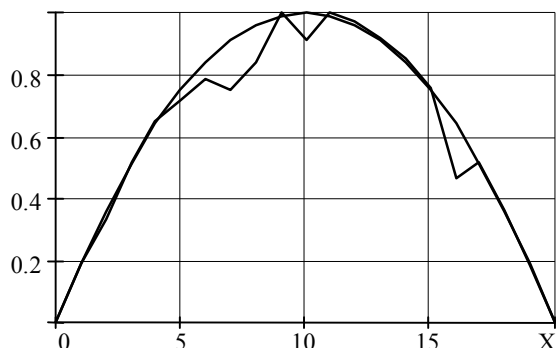


Рисунок 1 - Эталонная СТМ-профилограмма и ее искаженная модификация

На этапе фаззификации СТМ - профилограммы введем n ФП входных переменных и одну ФП выходной переменной с некоторым начальным приближением (рисунки 2,3).

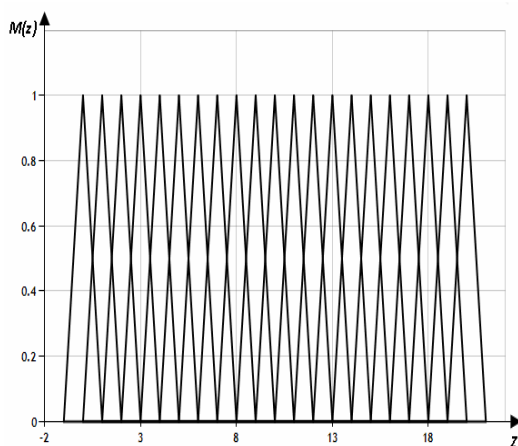


Рисунок 2 - Функции принадлежности входных переменных с начальным приближением угла наклона

За основу метода определения углов наклона ФП взят принцип градиентного спуска [4,5], осуществляющий минимизацию целевой функции (ЦФ) в направлении антиградиента. В данном случае параметрами ЦФ являются углы наклона треугольных ФП входной переменной, а также угол наклона ФП выходной переменной:

$$\omega(x) = \omega(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \beta), \quad (3)$$

где вектор $\bar{x} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \beta)$ - углы наклона ФП входных переменных и выходной переменной соответственно.

Значением ЦФ является мера соответствия искаженного эталона оригиналу, рассчитанная при текущих углах наклона ФП. Таким

образом, минимизация ЦФ состоит в нахождении минимума выражения:

$$F(\bar{x}) = |\omega(\bar{x}) - \omega_0|. \quad (4)$$

Метод градиентного спуска является итерационным методом, и признаком нахождения решения является достижение состояния согласно (4) при некоторой погрешности ε :

$$F(\bar{x}) < \varepsilon. \quad (5)$$

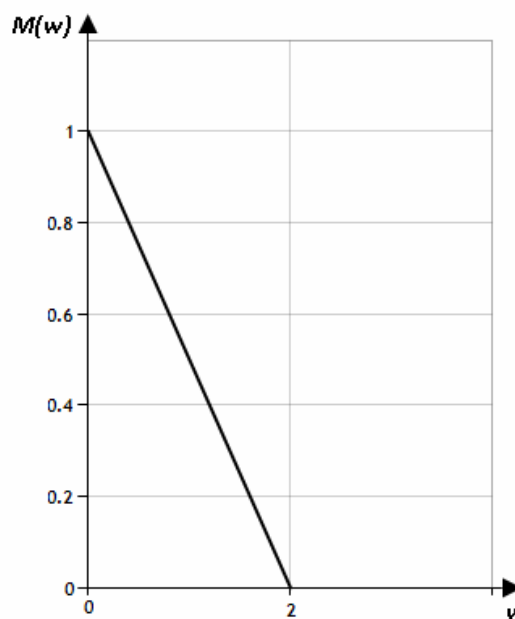


Рисунок 3 - Функция принадлежности выходной переменной с начальным приближением угла наклона

На начальном этапе выбирается некоторое произвольное приближение углов наклона ФП входных и выходной переменной с соответствующим расчетом меры соответствия. Далее происходит итерационный процесс движения к минимуму в направлении наиболее сильного уменьшения ЦФ, которое противоположно направлению, задаваемому вектором градиента $\nabla F(\bar{x})$ минимизируемой функции F :

$$\nabla F(\bar{x}) = [\partial F / \partial \alpha_1, \partial F / \partial \alpha_2, \dots, \partial F / \partial \alpha_n, \partial F / \partial \beta] \quad (6)$$

Общая формула для нахождения аргумента α_i^{k+1} по значению α_i^k , и β^{k+1} по значению β^k на k -м шаге работы алгоритма выглядит следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k + n^k \cdot s^k, \quad (7)$$

РАЗДЕЛ II. ИЗМЕРЕНИЯ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И ТЕХНИКЕ

где s^k - вектор единичной длины в направлении, противоположном направлению градиента $\nabla F(\bar{x}^k)$, определяемый как:

$$s^k = -\frac{\nabla F(\bar{x}^k)}{|\nabla F(\bar{x}^k)|}; \quad (8)$$

$$|\nabla F(\bar{x}^k)| = \left[\left(\frac{\partial F(\alpha_1^k)}{\partial \alpha_1^k}\right)^2 + \left(\frac{\partial F(\alpha_2^k)}{\partial \alpha_2^k}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial F(\alpha_n^k)}{\partial \alpha_n^k}\right)^2 + \left(\frac{\partial F(\beta^k)}{\partial \beta^k}\right)^2 \right]^{1/2}. \quad (9)$$

Если шаг n^k не зависит от k (является постоянным), то в окрестности экстремума будут наблюдаться незатухающие колебания, амплитуда которых зависит от величины n и от формы минимизируемой функции. Например, если функция имеет овраг, вытянутый вдоль одной из координат, то частная производная минимизируемой функции по этой координате мала, значение проекции s^k на эту координату также мало, и колебания $n \cdot s^k$ невелики. По тем координатам, вдоль которых функция $F(\bar{x})$ в окрестности экстремума изменяется сильнее, колебания будут иметь большую амплитуду.

В том случае, если используется шаг n^k , величина которого убывает по ходу итерационного процесса (зависит от номера итерации k), имеет место недостаток, связанный с отрыванностью значений n^k от формы минимизируемой функции. Если вдали от экстремума функция $F(\bar{x})$ имеет малый градиент, то шаг успеет сильно уменьшиться еще вдали от экстремума, в следствие чего сходимость к экстремуму может оказаться недопустимо медленной.

Таким образом, необходимым является использование шага, длина которого зависит от свойств минимизируемой функции.

Значение n^k находится из условия минимума функции, являющейся квадратической аппроксимацией $F(\bar{x})$ в точке x^k :

$$F(x^{k+1}) = F(x^k + \Delta x^k) \cong F(x^k) + [\nabla F(x^k)]^T \cdot \Delta x^k + \frac{1}{2!} [\Delta x^k]^T \cdot \nabla^2 F(x^k) \cdot \Delta x^k, \quad (10)$$

где $\Delta x^k = n^k s^k$, $\nabla^2 F(x^k)$ - матрица вторых производных, вычисленная в точке x^k :

$$\nabla^2 F(x^k) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_1^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_1 \partial \beta} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_2 \partial \alpha_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_2 \partial \beta} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial \beta \partial \alpha_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial \beta \partial \alpha_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial \beta^2} \end{vmatrix}. \quad (11)$$

После подстановки $\Delta x^k = n^k s^k$ в (10) получим:

$$F(x^k + n^k s^k) \cong F(x^k) + n^k \cdot [\nabla F(x^k)]^T \cdot s^k + \frac{1}{2!} \cdot [n^k]^2 \cdot [s^k]^T \cdot \nabla^2 F(x^k) \cdot s^k. \quad (12)$$

Условие минимума квадратической аппроксимации $F(\bar{x}^{k+1})$ по n^k определяется выражением:

$$\frac{dF(x)}{dn^k} = [\nabla F(x^k)]^T \cdot s^k + n^k \cdot [s^k]^T \cdot \nabla^2 F(x^k) \cdot s^k = 0. \quad (13)$$

Из (13) получим формулу для определения шага:

$$n^k = -\frac{[\nabla F(x^k)]^T \cdot s^k}{[s^k]^T \cdot \nabla^2 F(x^k) \cdot s^k}. \quad (14)$$

Согласно разработанной методике проведен численный эксперимент. При этом в качестве параметров для расчета взята эталонная СТМ-профилограмма и ее некоторое известное искажение (рисунок 1).

Результаты и их обсуждение

В процессе нахождения минимума ЦФ, составленной по фазсифицированной профилограмме (рисунок 1), на разных итерациях алгоритма получены следующие значения ФП (рисунки 4 - 6).

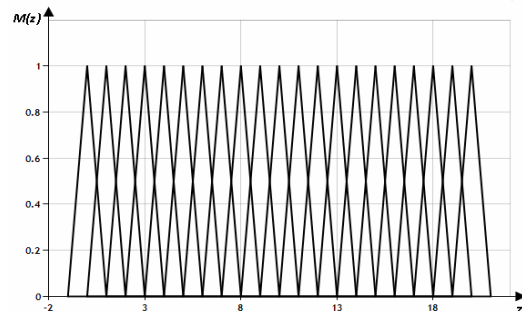


Рисунок 4 - Начальное приближение функций принадлежности входных переменных

Также были получены скорректированные значения для ФП выходной переменной (рисунок 7).

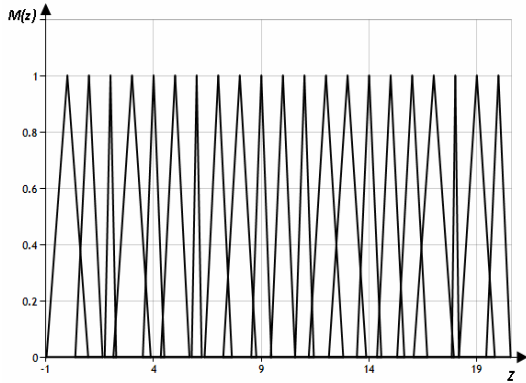


Рисунок 5. Параметры функций принадлежности входных переменных на промежуточной итерации

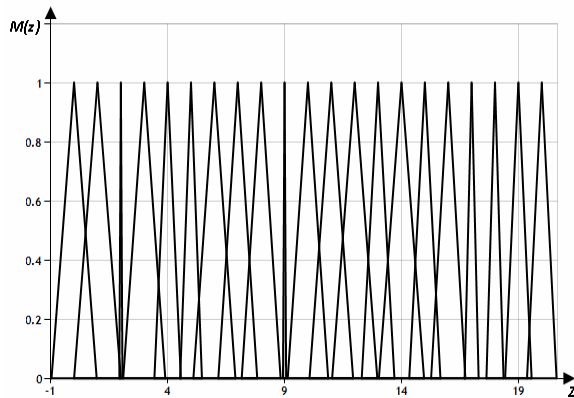


Рисунок 6 - Конечные значения функций принадлежности входных переменных

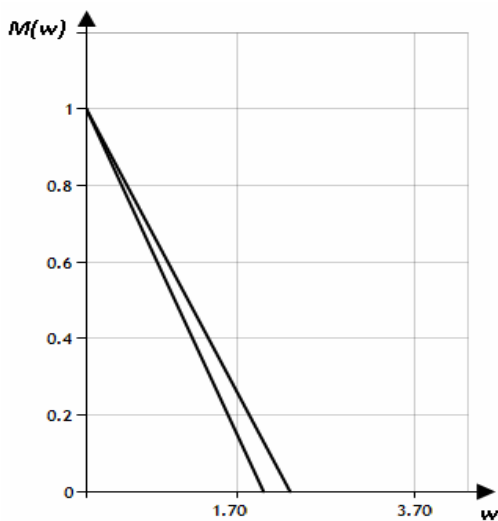


Рисунок 7 - Скорректированное значение функции принадлежности выходной переменной

В качестве сравнения разработанной методики и классического метода построения ФП на основе экспертной оценки был проведен эксперимент по определению меры соответствия эталона-СТМ-профилограммы (рисунок 8г) и модельных сигналов (рисунок 8а-в).

Параметрами углов наклона ФП входной и выходной переменных для классического метода были известные начальные значения, которые, в свою очередь, являлись входными параметрами для разработанной методики (рисунки 9 - 10).

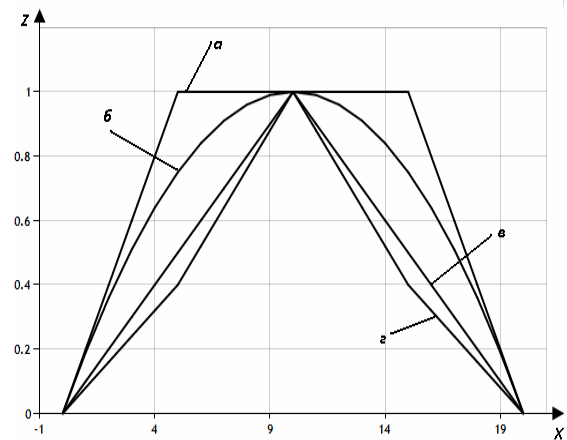


Рисунок 8 - Модельные сигналы: а – эталонный трапецевидный, б – эталонный синусоидальный, в – эталонный треугольный, г – сигнал, предназначенный для идентификации

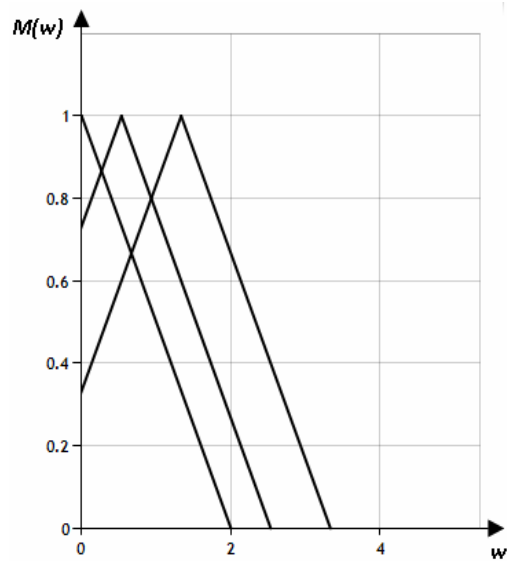


Рисунок 9 - Функции принадлежности выходной переменной, построенные классическим методом

РАЗДЕЛ II. ИЗМЕРЕНИЯ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И ТЕХНИКЕ

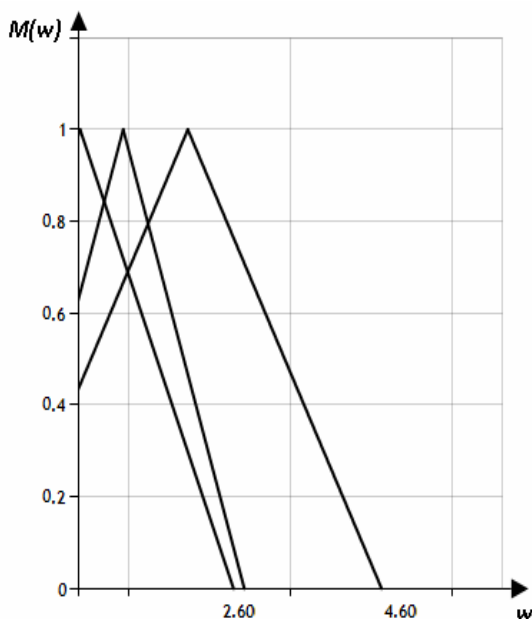


Рисунок 10 - Функции принадлежности выходной переменной, рассчитанные автоматически

Результирующий выходной вектор, вычисленный классическим методом и определяющий степень принадлежности одному из трех классов сигналов, оказался равным (0,17; 0,63; 0,31) (рисунок 11).

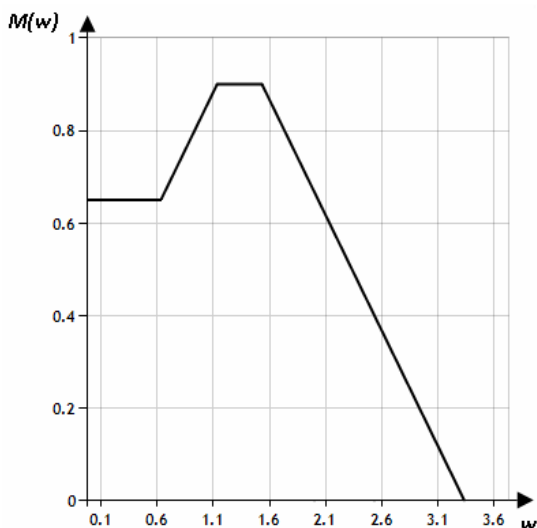


Рисунок 11 - Композитная фигура, собранная из усеченных функций принадлежности, рассчитанных по классическому методу

При использовании автоматизированного способа расчета параметров ФП результирующий вектор равен (0,12; 0,87; 0,24) (рисунок 12).

По сравнению с экспертным методом построения ФП для предложенной методики получен более коррелирующий вектор соответствия образца модельным изображениям, что позволяет использовать разработанную методику на этапе фаззификации реальных СТМ-изображений ультрадисперсных частиц кластерных материалов.

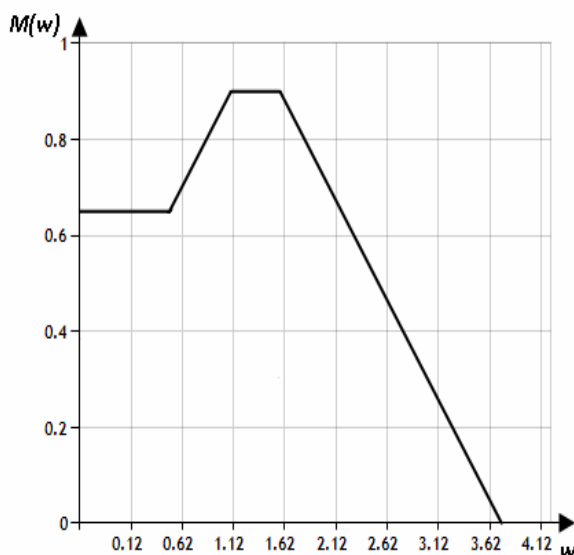


Рисунок 12 - Композитная фигура, собранная из усеченных функций принадлежности, рассчитанных автоматически

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lipanov, A.M. Application of ab initio calculations for modeling STM images / A.M. Lipanov, A.V. Tyurikov, E.Yu. Shelkovnikov, P.V. Gulyaev // Scanning Probe Microscopy-2003, International Workshop.- Nizhny Novgorod: IPM RAS.-2003.- P. 243-245.
2. Заде, Л. Понятие лингвистической переменной и ее применение к принятию приближенных решений. / Л. Заде. - М. Мир, 1976.
3. Круглов, В. В. Нечеткая логики и искусственные нейронные сети / В.В. Круглов, М.И. Длин, Р.Ю. Голубов.- М.: Издательство Физико-математической литературы, 2001.-224 с.
4. Ненахов, А.Н. Ситуационные системы с нечеткой логикой / А.Н. Ненахов, Л.С. Бернштейн, С.Я. Коровин.- М.:Наука, 1990.- 272с.
5. Лапчик, М. П., Численные методы / М. П. Лапчик, М. И. Рагулина, Е. К. Хеннер. – М.: Академия, 2009. – 384с.

Д.т.н., зав. отд. **Шелковников Ю.К.**, к.ф.-м.н., с.н.с. **Тюриков А.В.**, аспирант **Тарасов М.В.**, к.т.н., с.н.с. **Гуляев П.В.**, к.т.н., с.н.с. **Кизнерцев С.Р.** – (3412) 21-89-55, iit@udman.ru - Институт прикладной механики УрО РАН.