

01;05;07;17

Полигауссовские модели негауссовской случайно-шероховатой поверхности

© М.Я. Литвак, В.И. Малюгин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург
e-mail: vim@imop.spbstu.ru

(Поступило в Редакцию 14 декабря 2011 г. В окончательной редакции 4 июля 2011 г.)

Разработаны полигауссовские модели негауссовских случайных процессов, позволяющие описать и имитировать шероховатые поверхности с разнообразными плотностями распределения высот шероховатости и корреляционными свойствами, а также алгоритмы для численного и аналитического расчетов статистических характеристик негауссовских рельефов. Приведены примеры применения интегральной полигауссовской модели.

Введение

Топографическая структура поверхностей твердых тел играет важную роль во многих областях науки и техники: в машиностроении она влияет на контактные явления, на трение и износ изделий; в микроэлектронике шероховатость возникает при выращивании тонких пленок и при пучковой обработке, проявляется при исследовании и диагностике поверхности по методам электронной спектроскопии, ионной масс-спектрометрии, эллипсометрии. В оптическом приборостроении необходимо учитывать рассеяние света на неоднородностях оптических элементов.

Наиболее распространенной моделью шероховатой поверхности является гауссовская (нормальная) модель, для описания статистики которой достаточно среднеквадратической высоты шероховатости $\sigma_h^2 = \langle h^2(\bar{r}) \rangle - \langle h(\bar{r}) \rangle^2$ (h — высота шероховатости, $\langle \rangle$ — символ статистического усреднения) и нормированной автокорреляционной функции (ACF) $\rho_h(x) = \frac{\langle h(\bar{r})h(\bar{r} + \bar{x}) \rangle - \langle h(\bar{r}) \rangle^2}{\sigma_h^2}$, которая описывает характерные форму, размер и взаимное расположение неровностей поверхности. Теоретическим обоснованием использования нормальной модели для шероховатых поверхностей считают центральную предельную теорему теории вероятностей, согласно которой следует ожидать гауссовской топографической структуры, когда при формировании рельефа каждая точка поверхности подвергается многократным случайным рельефообразующим воздействиям. Ряд методов механической обработки поверхностей (пескоструйная обработка, в некоторых случаях шлифовка, полировка и др.) приводит к нормальной плотности распределения высот шероховатостей [1], хотя многомерные распределения высот поверхности в большинстве работ не рассматривались ввиду сложности их экспериментального исследования. Статистические свойства шероховатости зависят от способа и режимов обработки поверхности, от характеристик материала изделия, от условий эксплуатации и т.д., при этом далеко не всегда микрорельеф реальной поверхности можно адекватно описать моделью нормального

случайного процесса. Плотности распределения вероятностей (PDF) высот микрорельефа $p_h(h)$ в реальных ситуациях достаточно разнообразны по форме и часто значительно отличаются от нормального распределения. Негауссовской статистикой обладают шероховатости со смешанной структурой, образующиеся в результате нескольких последовательных стадий обработки поверхности (при прессовании, притирке, хонинговании) для поверхностей деталей, подвергшихся износу и приработке в процессе эксплуатации и т.д. Другой причиной негауссовости рельефов является наличие в структуре поверхности детерминированной, часто периодической составляющей [1,2], что характерно, в частности, для обработки точением, фрезерованием, обкатыванием, электрополированием. Распределения высот таких поверхностей обычно полимодальны, автокорреляционные функции содержат или незатухающий периодический член, или же затухающие осцилляции при взаимной модуляции случайной и детерминированной составляющих рельефа. В литературе можно найти и другие свидетельства негауссовости рельефов [3]. Следует отметить, что описание характеристик реальных рельефов и их компьютерная имитация затруднены недостаточной разработанностью статистических моделей негауссовских случайных процессов и полей.

В работе предлагается полигауссовская модель случайных процессов, позволяющая единообразно описать и имитировать шероховатые поверхности с разнообразными типами микрорельефов, а также алгоритмы для расчета характеристик негауссовских рельефов. Полигауссовские модели рельефов показали свою эффективность в приложении к задачам рассеяния оптического излучения [4–6].

Модели негауссовских случайных процессов и полей

Понятие „модели“ случайного процесса используется в данной публикации для обозначения некоторого класса случайных функций двух переменных (поверхность)

$h(\bar{r})$ или одной переменной (профиль) $h(X)$, заданного алгоритмом формирования реализаций процесса. В этом случае вид статистических характеристик (функций и плотностей распределения, моментных и кумулянтных функций и т.д.) однозначно определяется типом модели и числовыми или функциональными параметрами. Основные требования к подобной прикладной модели негауссовских случайных процессов можно сформулировать так.

1. Пригодность для описания и имитации эргодических однородных и изотропных случайных процессов и полей с широким классом PDF и ACF. Это свойство позволит проводить сопоставление результатов расчетов, полученных для поверхностей разного вида, в рамках единой модели, что более корректно, чем привлекать для этой цели несколько различных моделей.

2. Простой и эффективный алгоритм численной имитации реализаций процессов и полей, позволяющий использовать модель для расчета средних значений функционалов случайной поверхности при помощи усреднения по большому количеству имитированных реализаций (метод Монте-Карло).

3. Существование эффективных методов численного подбора параметров модели с целью аппроксимации характеристик шероховатости (PDF и ACF), полученных из профилографических измерений. Выполнение этого требования необходимо при сопоставлении результатов численных расчетов с экспериментальными данными.

4. Существование несложных аналитических выражений для статистических характеристик негауссовских процессов хотя бы I и II порядков (PDF, ACF, характеристических функций и т.д.). Данное требование существенно при необходимости проводить расчеты средних значений функционалов непосредственно, не прибегая к имитации реализаций.

Задачу моделирования негауссовских случайных процессов обычно формулируют следующим упрощенным образом: найти модель стационарной случайной функции $h(\bar{r})$ или $h(X)$, обладающую заданными $p_h(h)$ и $\rho_h(x)$. В такой постановке задача может иметь много решений, отличающихся видом многомерных распределений, или не иметь их вовсе, в зависимости от конкретного вида PDF и ACF. В отличие от гауссовского случая, когда ACF может быть произвольной при условии вещественности и неотрицательности спектральной плотности мощности, задание негауссовской PDF ограничивает в общем случае вид возможных корреляций процесса. В известной авторам литературе отсутствуют эффективные методы проверки совместности функциональных форм $p_h(h)$ и $\rho_h(x)$, отмечается лишь, что происхождение ограничений связано со специфическими свойствами двумерной характеристической функции (CF) процесса [7] $\chi_h(v_1, v_2; x) = \langle \exp(i v_1 h(\bar{r} + \bar{x}) + i v_2 h(\bar{r})) \rangle$.

Наибольшее распространение в приложениях получили модели негауссовских случайных процессов на основе нелинейного безынерционного преобразования нормального процесса [8–10] $h(\bar{r}) = F_h^{-1}(F_\varepsilon(\varepsilon(\bar{r})))$,

где $F_h(h)$ и $F_\varepsilon(\varepsilon)$ — функции распределения (DF) процесса ($h(\bar{r})$) и централизованного и нормированного нормального процесса $\varepsilon(\bar{r})$ соответственно. ACF нормального процесса $\rho_\varepsilon(x)$, требуемая для получения заданной ACF негауссовского процесса $\rho_h(x)$, может быть найдена в аналитическом виде только в нескольких частных случаях [8–11], численное же определение $\rho_\varepsilon(x)$ существенно усложняется с ростом отклонения $p_h(h)$ от нормальной плотности.

С точки зрения описания случайной шероховатости, наиболее перспективными можно признать модели, учитывающие особенности процесса формирования микро рельефа при определенном способе обработки поверхности. Например, в [12,13] рассмотрена математическая модель роста пленки, которая дает асимметричные распределения высот шероховатостей и ACF, близкую к гауссовской, что подтверждается экспериментальными исследованиями. В [14] рассмотрена бимодальная композитная модель поверхности магнитной пленки, состоящей из магнитных и немагнитных частиц в полимерной основе. В [15] рассмотрены шероховатости, порождаемые физическими моделями напыления и травления тонких пленок.

Смеси вероятностных распределений

Для аппроксимации разнообразных плотностей распределения высот поверхности можно применить два различных подхода. Традиционно принято использовать для аппроксимации гистограммы распределения из многопараметрического семейства PDF [16] или из более узких классов распределений и их преобразований [8,17–19]. Такой подход не даёт возможности описать детали гистограммы распределения по высотам, и даже для частных случаев этих классов PDF разработка моделей процессов сопряжена с серьезными трудностями принципиального характера. Более удобным способом аппроксимации PDF случайных процессов представляется использование смесей вероятностных распределений [20,21]. Функция распределения смеси $F_h(h)$ имеет, в общем случае, вид

$$F_h(h) = \int Q(h; \bar{\mu}) dG(\bar{\mu}), \quad (1)$$

где $\bar{\mu}$ — вектор параметров; $Q(h; \bar{\mu})$, $G(\bar{\mu})$ — функции распределения. Плотность распределения смеси $p_h(h)$ можно выразить через плотность распределения $q(h; \bar{\mu}) = dQ(h; \bar{\mu})/dh$. Для дискретных распределений $G(\bar{\mu})$ с обобщенной плотностью $g(\bar{\mu}) = \sum_n w_n \delta(\bar{\mu} - \bar{\mu}_n)$ имеем

$$p_h(h) = \sum_n w_n q(h; \bar{\mu}_n), \quad (2)$$

где $\{w_n\}$ — вероятностные веса ($w_n > 0$; $\sum_n w_n = 1$).

Для непрерывных функций $G(\bar{\mu})$ с плотностью $g(\bar{\mu})$:

$$p_h(h) = \int q(h; \bar{\mu}) g(\bar{\mu}) d\bar{\mu}. \quad (3)$$

Возможны смеси в виде комбинации (2) и (3), а также варианты, когда смешиваемые распределения различаются функциональным видом. В отличие от разложения PDF в ряд по полиномам [22] или модельных приближений CF, получаемых усечением бесконечного ряда кумулянтов [16], смеси (2), (3) обладают всеми свойствами вероятностных распределений и могут быть использованы в аналитических расчетах. Понятие смеси предполагает, что реализации случайного явления могут принадлежать разным совокупностям, вероятностные свойства которых отличаются. Такая интерпретация смесей привела к широкому их использованию в статистических задачах кластер-анализа, распознавания и классификации случайных явлений [23,24] и т.д. Различные вопросы, связанные со смесями, рассмотрены в [21], где также приведена обширная библиография.

Наиболее распространенным в приложениях видом смесей является суперпозиция гауссовских распределений, так называемое полигауссовское представление. В работах [25–27] проведен теоретический анализ представления случайных процессов комбинацией гауссовских распределений, доказана полнота гауссовских функций в $L_2(-\infty; \infty)$ и продемонстрирована возможность сколь угодно точного описания произвольной комплекснозначной функции конечным числом гауссовских компонент. Полигауссовские суперпозиции нашли широкое применение для описания случайных негауссовских сигналов и помех для решения задач лазерной локации, аппроксимации распределений случайных величин, встречающихся в технических приложениях [28,29].

Используемые полигауссовские модели случайных процессов предполагают, что почти всякая реализация рассматривается, как реализация одного из конечного (или счетного) множества различных гауссовских процессов [27,30]. При такой интерпретации веса $\{w_n\}$ имеют смысл вероятностей того, что реализация принадлежит той или иной нормальной совокупности. Очевидно, что подобный подход соответствует неэргодическим полигауссовским случайным процессам [28] и не может быть использован для построения моделей, описывающих однородные профили шероховатостей.

В настоящей работе предлагается иной метод получения полигауссовских моделей, при котором сразу задается общий алгоритм построения процессов или полей с полигауссовской структурой, а затем конкретизируются параметры алгоритма для моделирования процессов с различными свойствами.

Алгоритм построения полигауссовских моделей

Рассмотрим алгоритм формирования случайного процесса (поля двумерного микрорельефа) $h(\bar{r})$, заданного на плоскости $\bar{r} = \{X, Y\}$,

$$h(\bar{r}) = \sigma(\bar{r})\varepsilon(\bar{r}) + \mu(\bar{r}), \quad (4)$$

где $\varepsilon(\bar{r})$ — стационарный эргодический гауссовский процесс с нулевым средним и единичной дисперсией ($\varepsilon(\bar{r}) \in N(0, 1)$), а $\sigma(\bar{r})$ и $\mu(\bar{r})$ — случайные процессы, независимые от $\varepsilon(\bar{r})$. Предположим, что эти процессы получены в результате безынерционных в общем случае нелинейных преобразований некоторого стационарного эргодического процесса $\gamma(\bar{r})$ (управляющего процесса)

$$\sigma(\bar{r}) = S(\gamma(\bar{r})), \quad \mu(\bar{r}) = M(\gamma(\bar{r})). \quad (5)$$

В качестве $\gamma(\bar{r})$ следует выбрать случайный процесс, статистические свойства которого хорошо изучены, и обладающий эффективным алгоритмом имитации реализаций. Процесс $\gamma(\bar{r})$ может быть, например, нормальным, или производным от нормальных процессов. Можно также использовать „ступенчатые“ процессы $\gamma(\bar{r})$ с дискретным пространством состояний. Совместная плотность распределения вероятностей процессов $\sigma(\bar{r})$ и $\mu(\bar{r})$ имеет вид

$$p_{\sigma\mu}(\sigma, \mu) = \int \delta(\sigma - S(\gamma))\delta(\mu - M(\gamma))dF_\gamma(\gamma), \quad (6)$$

где δ — дельта-функция; $F_\gamma(\gamma)$ — DF процесса $\gamma(\bar{r})$. Используя (4)–(6), получим одномерную характеристическую функцию:

$$\begin{aligned} \chi_h(v) &= \int d\varepsilon d\sigma d\mu p_\varepsilon(\varepsilon)p_{\sigma\mu}(\sigma\mu)(iv(\sigma\varepsilon + \mu)) \\ &= \int \exp(ivM(\gamma) - v^2S^2(\gamma)/2)dF_\gamma(\gamma), \end{aligned} \quad (7)$$

где $p_\varepsilon(\varepsilon)$ — PDF нормального процесса $\varepsilon(\bar{r})$. Выполнив обратное преобразование Фурье от выражения (7), получим PDF процесса $h(\bar{r})$

$$p_h(h) = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}|S(\gamma)|} \exp\left(-\frac{(h - M(\gamma))^2}{2S^2(\gamma)}\right) dF_\gamma(\gamma). \quad (8)$$

Таким образом, распределение процесса $h(\bar{r})$, полученное по алгоритму (4), будет смесью нормальных распределений типа (1), причем полигауссовский вид PDF не зависит от распределения управляющего процесса $\gamma(\bar{r})$. Так как при формировании $h(\bar{r})$ использовались только стационарные эргодические процессы, то и $h(\bar{r})$ будет стационарным и эргодическим. Алгоритм (4) определяет класс полигауссовских моделей (PG) случайных процессов и полей. PG-модели могут отличаться как видом функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$, так и типом $\gamma(\bar{r})$. Можно выделить две основные группы полигауссовских моделей.

1. Пространство состояний процесса $\gamma(\bar{r})$ непрерывно, существует PDF $p_\gamma(\gamma) = dF_\gamma(\gamma)/d\gamma$, а функция PDF процесса $h(\bar{r})$ примет вид:

$$p_h(h) = \int p_\gamma(\gamma) \frac{1}{\sqrt{2\pi}|S(\gamma)|} \exp\left(-\frac{(h - M(\gamma))^2}{2S^2(\gamma)}\right) d\gamma, \quad (9)$$

т. е. представляет собой интегральную полигауссовскую смесь типа (3), весовой функцией которой является плотность распределения управляющего процесса. Назовем эту группу PG-моделей интегральными полигауссовскими моделями (IPG).

2. Для случайных процессов $\gamma(\bar{r})$ с дискретным пространством состояний $\{\gamma_n\}$, $n = 1, \dots, N$ можно записать $dF_\gamma(\gamma) = d\gamma \sum_{n=1}^N w_n \delta(\gamma - \gamma_n)$, где w_n — вероятности состояний ($w_n > 0$; $\sum_{n=1}^N w_n = 1$) и интеграл (8) преобразуется в сумму

$$p_h(h) = \sum_{n=1}^N w_n \frac{1}{\sqrt{2\pi}|\sigma_n|} \exp\left(-\frac{(h - \mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right), \quad (10)$$

где $\sigma_n = S(\gamma_n)$, $\mu_n = M(\gamma_n)$. Эту группу моделей назовем дискретными полигауссовскими моделями (DPG). Дискретная модель получится и в том случае, когда пространство состояний $\gamma(\bar{r})$ непрерывно, но функции $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$ являются кусочно-постоянными. Тогда вероятностные веса $\{w_n\}$ представляют собой вероятности нахождения процесса $\gamma(\bar{r})$ в интервалах постоянства функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$.

В тех ситуациях, когда пространство состояний $\gamma(\bar{r})$ имеет как непрерывную, так и дискретную составляющие, получим смешанную интегрально-дискретную PG-модель с PDF в виде комбинации (9) и (10).

Основные характеристики полигауссовских процессов

Все вероятностные характеристики полигауссовского процесса можно выразить через характеристики управляющего процесса γ , нормального процесса ε и свойства функций $S(\gamma)$, $M(\gamma)$. Для оценки степени негауссовского PDF удобно использовать кумулянты распределения, которые выражаются через начальные моменты распределения [6]. Для первых четырех кумулянтов центрированного полигауссовского процесса $h(\bar{r})$ имеем:

$$\begin{aligned} \kappa_1^{(h)} &= \alpha_1^{(h)} = \langle h \rangle = \langle \mu \rangle = 0, \\ \kappa_2^{(h)} &= \alpha_2^{(h)} = \sigma_h^2 = \langle \mu^2 \rangle + \langle \sigma^2 \rangle, \\ \kappa_3^{(h)} &= \alpha_3^{(h)} = \sigma_h^3 Sk^{(h)} = \langle \mu^3 \rangle + 3\langle \mu \sigma^2 \rangle, \\ \kappa_4^{(h)} &= \alpha_4^{(h)} - 3\left(\alpha_2^{(h)}\right)^2 = \sigma_h^4 Ku^{(h)} = (\langle \mu^4 \rangle - 3\langle \mu^2 \rangle^2) \\ &+ 3(\langle \sigma^4 \rangle - 3\langle \sigma^2 \rangle^2) + 6(\langle \mu^2 \sigma^2 \rangle - \langle \mu^2 \rangle \langle \sigma^2 \rangle), \end{aligned}$$

где $\langle \rangle$ — усреднение по распределению процесса γ , $\alpha_k^{(h)}$ — начальные моменты распределения процесса $h(\bar{r})$, σ_h^2 , $Sk^{(h)}$, $Ku^{(h)}$ — дисперсия, коэффициенты асимметрии и эксцесса PDF соответственно. Средние значения $\langle \mu^k \sigma^m \rangle$ для моделей IPG и DPG имеют вид:

$$\langle \mu^k \sigma^m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_\gamma(\gamma) M^k(\gamma) S^m(\gamma) d\gamma \quad (\text{IPG})$$

и

$$\langle \mu^k \sigma^m \rangle = \sum_{n=1}^N w_n \mu_n^k \sigma_n^m \quad (\text{DPG}).$$

В приведенных формулах полагается, без ограничения общности, среднее значение процесса $M(\gamma)$ равным нулю, что достигается вычитанием из $M(\gamma)$ постоянного значения. Представив совместную плотность распределения процессов σ и μ в точках \bar{r} и $\bar{r} + \bar{x}$ в виде

$$\begin{aligned} p_{\sigma\mu}(\sigma_{(1)}, \mu_{(1)}, \sigma_{(2)}, \mu_{(2)}; x) \\ = \int dF_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) \prod_{k=1,2} \delta(\sigma_{(k)} - S(\gamma_{(k)})) \delta(\mu_{(k)} - M(\gamma_{(k)})), \end{aligned}$$

где $\gamma_{(1)} = \gamma(\bar{r})$, $\gamma_{(2)} = \gamma(\bar{r} + \bar{x})$ и т.д., $F_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x)$ — двумерная DF процесса γ и, обобщая вывод формулы для одномерной CF (7), получим общее выражение для двумерной CF полигауссовского процесса

$$\begin{aligned} \chi_h(v_1, v_2; x) &= \langle \exp(iv_1 h(\bar{r}) + iv_2 h(\bar{r} + \bar{x})) \rangle \\ &= \int dF_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) \exp\left\{iv_1 M(\gamma_{(1)}) + iv_2 M(\gamma_{(2)})\right. \\ &- \frac{1}{2}(S^2(\gamma_{(1)})v_1^2 + S^2(\gamma_{(2)})v_2^2 \\ &\left.+ 2S(\gamma_{(1)})S(\gamma_{(2)})v_1 v_2 \rho_\varepsilon(x)\right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

где $\rho_\varepsilon(x)$ — ACF нормального процесса ε . Для модели IPG и DPG дифференциал двумерной DF примет вид

$$dF_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) = d\gamma_{(1)} d\gamma_{(2)} p_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) \quad (\text{IPG}), \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} dF_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) &= d\gamma_{(1)} d\gamma_{(2)} \sum_{n,m=1}^N w_n P_{nm}(x) \\ &\times \delta(\gamma_{(1)} - \gamma_n) \delta(\gamma_{(2)} - \gamma_m) \quad (\text{DPG}), \quad (12b) \end{aligned}$$

где $P_{nm}(x) = P(\gamma(\bar{r} + \bar{x}) = \gamma_m | \gamma(\bar{r}) = \gamma_n)$ — вероятность перехода процесса $\gamma(\bar{r})$ из состояния γ_n в точке \bar{r} в состояние γ_m в точке $\bar{r} + \bar{x}$. Подставляя (12) в (11), получим двумерные характеристические функции для интегральной и дискретной моделей

$$\begin{aligned} \chi_h(v_1, v_2; x) &= \int p_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x) \exp\left\{iv_1 M(\gamma_{(1)})\right. \\ &+ iv_2 M(\gamma_{(2)}) - \frac{1}{2}(S^2(\gamma_{(1)})v_1^2 + S^2(\gamma_{(2)})v_2^2 \\ &\left.+ 2S(\gamma_{(1)})S(\gamma_{(2)})v_1 v_2 \rho_\varepsilon(x)\right\} d\gamma_{(1)} d\gamma_{(2)}, \quad (\text{IPG}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_h(v_1, v_2; x) &= \sum_{n,m=1}^N w_n P_{nm}(x) \exp\left\{iv_1 \mu_n + iv_2 \mu_m\right. \\ &- \frac{1}{2}(\sigma_n^2 v_1^2 + \sigma_m^2 v_2^2 + 2\sigma_n \sigma_m v_1 v_2 \rho_\varepsilon(x))\left\}. \quad (\text{DPG}) \end{aligned}$$

Таким образом, для полигауссовских моделей рассматриваемого типа двумерное распределение процесса также представляется в виде смеси нормальных распределений, но, в отличие от неэргодических полигауссовских моделей [26,27,30], вероятностные коэффициенты смеси $p_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x)$ для модели IPG или $w_n P_{nm}(x)$ для модели DPG зависят от расстояния между точками процесса x . Для ACF централизованного процесса $h(\bar{r})$ из (5) следует

$$R_h(x) = \sigma_h^2 \rho_h(x) = \langle h(\bar{r})h(\bar{r} + \bar{x}) \rangle = R_\sigma(x)\rho_\varepsilon(x) + R_\mu(x). \quad (13)$$

Выражения для ACF процессов $\sigma(\bar{r})$ и $\mu(\bar{r})$ можно записать в виде

$$R_g(x) = \int G(\gamma_{(1)})G(\gamma_{(2)})p_\gamma(\gamma_{(1)}, \gamma_{(2)}; x)d\gamma_{(1)}d\gamma_{(2)}, \quad (\text{IPG}) \quad (14a)$$

$$R_g(x) = \sum_{n,m=1}^N w_n P_{nm}(x)g_n g_m, \quad (\text{DPG}) \quad (14b)$$

где $g = \begin{cases} \mu \\ \sigma \end{cases}$, $G = \begin{cases} M \\ S \end{cases}$, $g_k = \begin{cases} \mu_k \\ \sigma_k \end{cases} = \begin{cases} M(\gamma_k) \\ S(\gamma_k) \end{cases}$.

Рассуждая так же, как и при выводе формул для двумерной CF, можно показать, что CF произвольного порядка q для процесса $h(\bar{r})$ в точках $\{\bar{r}_k\}$, $k = 1, \dots, q$ является смесью нормальных CF:

$$\chi_h(\bar{v}; \bar{R}) = \int p_\gamma(\bar{v}; \bar{R})\chi^{(N)}(\bar{v}; \bar{R} | M(\bar{v}), S(\bar{v}), C(\bar{v}, \bar{R}))d\bar{v}, \quad (\text{IPG})$$

$$\chi_h(\bar{v}; \bar{R}) = \sum_{n_1, \dots, n_q=1}^N P_{\bar{N}_q}(\bar{R})\chi^{(N)}(\bar{v}; \bar{R} | \bar{\mu}_{\bar{N}_q}, \bar{\sigma}_{\bar{N}_q}, C_{\bar{N}_q}(\bar{R})), \quad (\text{DPG})$$

где $\bar{v} = (v_1, \dots, v_q)$, $\bar{v} = (\gamma_1, \dots, \gamma_q)$, $\bar{R} = \{r_{kl}\} = \{|\bar{r}_k - \bar{r}_l|\}$, $k, l = 1, \dots, q$ — матрица продольных расстояний между точками процесса $h(\bar{r}_k)$; $\chi^{(N)}(\bar{v}; \bar{R} | M(\bar{v}), S(\bar{v}), C(\bar{v}, \bar{R}))$ — CF порядка q нормальной случайной величины с вектором средних $M(\bar{v})$ и корреляционной матрицей $C(\bar{v}, \bar{R}) = \{C_{kl}\} = \{S(\gamma_k)S(\gamma_l)\rho_\varepsilon(r_{kl})\}$; $p_\gamma(\bar{v}; \bar{R})$ — q -мерная PDF управляющего процесса $\gamma(\bar{r})$, $\bar{N}_g = \{n_1, \dots, n_q\}$; $P_{\bar{N}_q}(\bar{R}) = \mathbf{P}(\gamma(\bar{r}_1) = \gamma_{n_1}, \dots, \gamma(\bar{r}_q) = \gamma_{n_q})$ — вероятность того, что процесс $\gamma(\bar{r})$ в точках $\{\bar{r}_k\}$, находится в состояниях $\gamma_{n_1}, \dots, \gamma_{n_q}$ соответственно;

$$C_{\bar{N}_q}(\bar{R}) = \{S(\gamma_{n_k})S(\gamma_{n_l})\rho_\varepsilon(r_{kl})\}.$$

Рассмотрим универсальный способ численного определения характеристик полигауссовских процессов. Как видно из проведенного выше рассмотрения, выражения для характеристик процесса $h(\bar{r})$ порядка q имеют структуру

$$T_h(\bar{v}, \bar{R}) = \int dF_\gamma(\bar{v}; \bar{R})t(\bar{v}; \bar{R}; \bar{v}), \quad (15)$$

где $T_h(\bar{v}, \bar{R})$ — некоторая характеристика с вектором аргументов \bar{v} и вектором параметров \bar{R} , $F_\gamma(\bar{v}; \bar{R})$ —

DF управляющего процесса порядка q . Специфический вид (15) удобен для вычислений по методу Монте-Карло [31], в этом случае при заданных \bar{v} и \bar{R} имитируются случайные векторы $\{\bar{v}_j\}$, $j = 1, \dots, N_{MC}$ с функцией распределения $F_\gamma(\bar{v}; \bar{R})$, и оценка значения $T_h(\bar{v}, \bar{R})$ вычисляется по формуле:

$$T_h^*(\bar{v}, \bar{R}) \approx \frac{1}{N_{MC}} \sum_{j=1}^{N_{MC}} t(\bar{v}; \bar{R}; \bar{v}_j).$$

Точность оценки зависит от вида подынтегральной функции и количества используемых при расчете случайных векторов. Дисперсия оценки

$$D_{MC} \approx \frac{1}{N_{MC}} \left(\frac{1}{N_{MC}} \sum_{j=1}^{N_{MC}} t^2(\bar{v}; \bar{R}; \bar{v}_j) - (T_h^*(\bar{v}, \bar{R}))^2 \right).$$

Основные преимущества данного метода проявляются при расчете характеристических функций третьего и более высоких порядков, которые с трудом могут быть получены стандартными методами численного интегрирования вследствие высокой размерности интегралов и осциллирующего характера подынтегральных функций.

IPG-модель с нормальным управляющим процессом

В качестве примера применения полигауссовского алгоритма рассмотрим IPG-модель, в которой управляющий процесс $\gamma(\bar{r})$ является нормальным. Без ограничения общности $\gamma(\bar{r})$ можно считать централизованным и нормированным ($\gamma(\bar{r}) \in \mathbf{N}(0, 1)$) с PDF $p_\gamma(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\gamma^2/2)$. Алгоритм имитации реализаций процесса $h(\chi)$ вытекает из (5): требуется промоделировать независимые реализации процессов $\varepsilon(X)$, $\gamma(X)$ нужной длины, провести два безынерционных преобразования $\sigma(X) = S(\gamma(X))$, $\mu(X) = M(\gamma(X))$ и осуществить при каждом значении аргумента X операции умножения и сложения. Структура алгоритма поясняется рис. 1, где приведены фрагменты реализаций процессов $\varepsilon(X)$, $\gamma(X)$, $\mu(X)$, $\sigma(X)$ и $h(X)$, а также графики соответствующих функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$. Вычисления PDF и ACF производились по формулам (9), (13) с использованием численных методов. Используя разложение двумерной нормальной плотности [32]

$$p_\gamma(\gamma_1, \gamma_2; x) = p_\gamma(\gamma_1)p_\gamma(\gamma_2) \sum_{k=0}^{\infty} \rho_\gamma^k(x) H_k(\gamma_1) H_k(\gamma_2)$$

и формул (13), (14), получим выражение для ACF процесса

$$R_h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (S_k^2 \rho_\varepsilon(x) + M_k^2) \rho_\gamma^k(x), \quad (16)$$

где $\rho_\gamma(x)$ — ACF процесса $\gamma(\bar{r})$, $G_k = \begin{cases} M_k \\ S_k \end{cases}$ — коэффициенты разложений функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$ в ряды

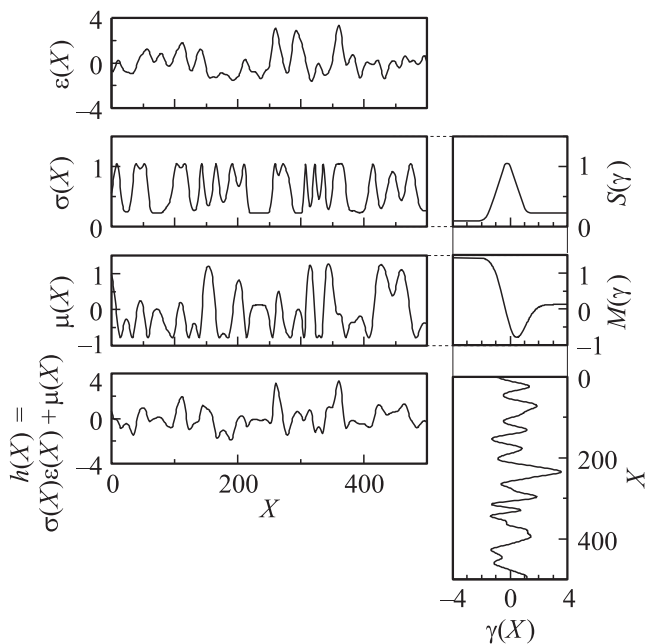


Рис. 1. Структура алгоритма формирования реализации интегрального полигауссовского случайного процесса.

по полиномам Эрмита $G_k = \int_{-\infty}^{\infty} p_\gamma(\gamma)G(\gamma)H_n(\gamma)d\gamma$. Для расчета $R_h(x)$ по (16) с точностью порядка 0.1% достаточно ограничиться 10–40 коэффициентами.

При выборе математического представления функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$ можно исходить как из физического механизма формирования рельефа по алгоритму (4), так и из чисто математических соображений, принимая во внимание возможность аналитического вычисления характеристик процесса, и подбирая такой вид многопараметрических функций, который позволяет описать как можно более широкий класс PDF и ACF рельефов. В настоящей работе применялся второй подход, в рамках которого использовались функции $G = \{S, M\}$ следующего вида:

$$G(\gamma) = B + A \operatorname{erf}(C\gamma/\sqrt{2}) + \exp(-C^2\gamma^2/2) \sum_{k=0}^K g_k H_k(\gamma). \tag{17}$$

Коэффициенты Эрмита G_n для расчета (16) можно вычислить по формулам

$$G_n = G_n^{(1)} + G_n^{(2)}, \quad G_n^{(2)} = \sum_{k=0}^K g_k I_{kn},$$

$$G_n^{(1)} = \begin{cases} B & n = 0, \\ AC\sqrt{2/(\pi p)} & n = 1, \\ 0 & n = 2s, s = 1, 2, \dots, \\ -G_{n-2}^{(1)} \frac{C^2(n-2)}{p\sqrt{n(n-1)}} & n = 2s + 1, s = 1, 2, \dots, \end{cases}$$

$$I_{kn} = I_{nk}$$

$$= \begin{cases} 0 & k + n = 2s + 1, s = 1, 2, \dots, \\ 1/\sqrt{p} & k = n = 0, \\ \frac{1-p}{p} \sqrt{(k-1)/k} I_{k-2,0} & n = 0, k = 2, 4, \dots, \\ \frac{1}{p} \sqrt{k} I_{k-1,0} & n = 1, k = 1, 3, \dots, \\ \frac{1}{p\sqrt{k}} (\sqrt{n} I_{k-1, n-1} + p\sqrt{k-1} I_{k-2, n}) & k, n > 1; \\ & k + n = 2s, s + 1, 2, \dots, \end{cases}$$

$$p = C^2 + 1.$$

При расчете кумулянтов PDF и CF I порядка IPG-процессов с нормальным $\gamma(\bar{r})$ применялись стандартные методы численного интегрирования [33], а для вычисления плотностей и CF II и более высоких порядков использовался метод Монте-Карло, реализация которого сводится к имитации нормальных случайных векторов с заданной корреляционной матрицей, что осуществляется известными методами [17]. Кроме того, для расчета PDF и CF I и II порядков использовался приближенный метод, основанный на замене функций $S(\gamma)$ и $M(\gamma)$ в существенной области значений процесса $\gamma(\bar{r})$ их кусочно-постоянными аппроксимациями. Подбор параметров функций $S(\gamma), M(\gamma)$ вида (17) и гауссовских ACF $\rho_\epsilon(x), \rho_\gamma(x)$ нормальных процессов $\epsilon(x), \gamma(x)$ осуществлялся совместной аппроксимацией заданных $p_h(h)$ и гауссовской $R_h(x)$ симплексным методом многопараметрической оптимизации [34].

В качестве примера использования IPG-модели с нормальным управляющим процессом $\gamma(\bar{r})$ на рис. 2 приведены участки профилей $h(X)$, графики плотности распределения вероятностей высот $p_h(h)$ и корреляционные функции ACF четырех характерных групп рельефа: гауссовский тип рельефа GS; рельеф типа S с отрицательной асимметрией PDF ($S_k < 0$), типичной для поверхностей хрупких материалов после абразивной обработки; рельеф типа K с симметричной PDF высот, но обладающей острой вершиной ($K_u > 0$), что характерно, в частности, для поверхностей после химического травления; рельеф типа B с бимодальной PDF ($K_u < 0$), что может являться, например, следствием зернистости обрабатываемых материалов. Параметры плотности распределения высот профиля для различных поверхностей типов GS, S, K, B приведены в таблице. Наборы поверхностей отличаются различным типом отклонения PDF высот шероховатости от гауссианы, степень отклонения увеличивается с ростом номера поверхности в каждой группе. В данном примере автокорреляционные функции для разных типов рельефов шероховатостей подбирались близкими к гауссовской ACF, что позволяло отдельно исследовать влияние только формы PDF высот на характеристики рассеяния электромагнитного излучения [4–6]. Под „близостью“ ACF (с точностью 1–2%) понимается не математическая тождественность, а близость в аппроксимационном смысле (в метрике пространства L_2).

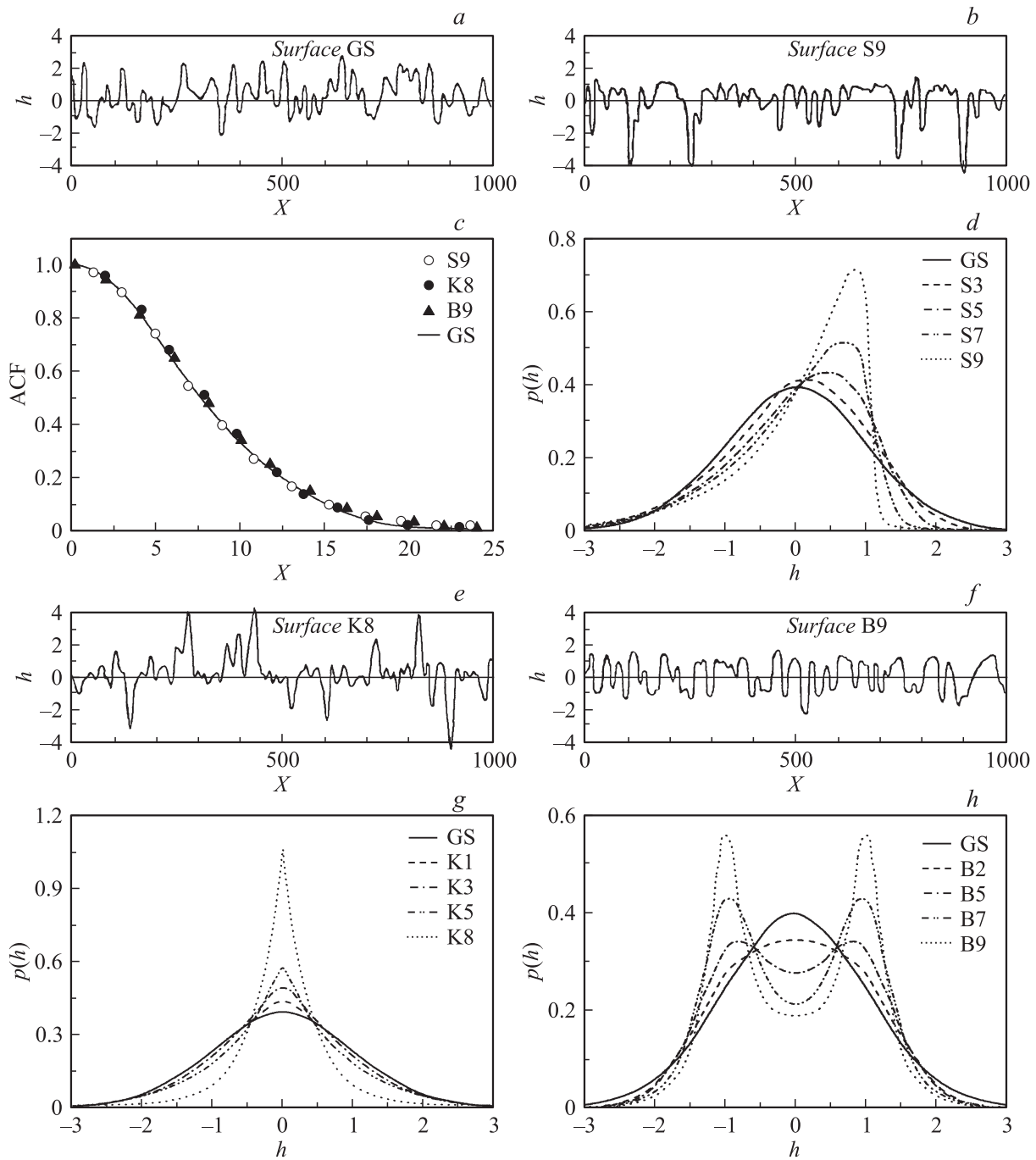


Рис. 2. Примеры поверхностных рельефов различных типов, полученных с использованием интегральной полигауссовской модели. Профили поверхностей типов GS (a), S (b), K (e), B (f), их плотности распределения высот: d, g, h и автокорреляционные функции (c).

Рассмотрим примеры использования IPG-модели с нормальным управляющим процессом для описания реальных микрорельефов, полученных в ряде технологических процессов. На рис. 3 приведены гистограммы распределения высот шероховатости, образующиеся при ионной бомбардировке образца стали [35] марки СТ20 атомами азота (IZ) рис. 3, a и аргона (IR) рис. 3, b с энергией 3 keV в течение 90 min; при химическом

травлении (TR) стали (рис. 3, c) спиртовым раствором азотной кислоты по методике, применяемой при стандартном металлографическом исследовании структуры сталей, а также экспериментальных образцов F₁, F₂, F₃ (рис. 3, d, e, f соответственно). Образцы серии F получены при различных уровнях освещения фотоматериала гауссовским спекл-полем, возникающим при рассеянии лазерного пучка на сильношероховатом диф-

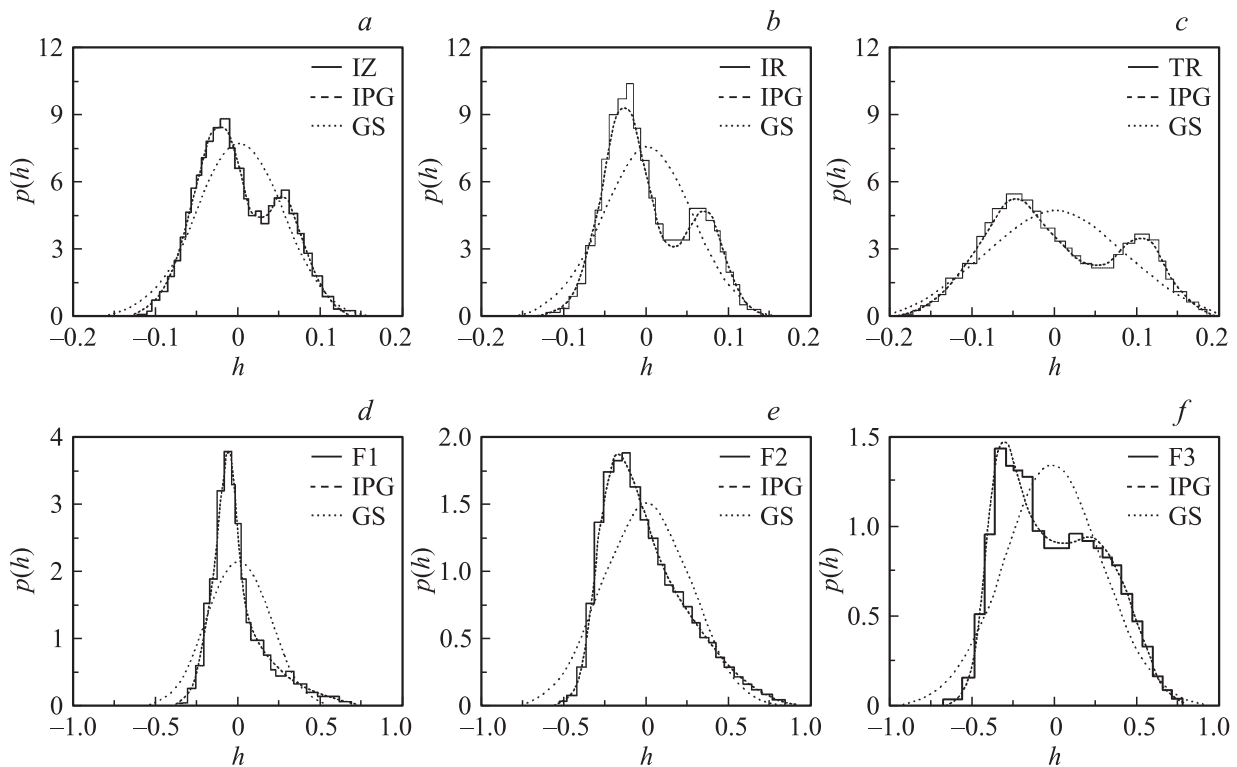


Рис. 3. Гистограммы рельефов поверхностей (сплошная линия), полученных в результате технологических процессов IZ, IR, TR, F, и их аппроксимация (штриховая линия) с использованием интегральной полигауссовской модели. Для сравнения приведены гауссовские распределения высот профиля (пунктирная линия).

(рис. 3, *a–c*) обусловлены наличием двух групп зерен в составе стали, а разделение мод распределения $p_h(h)$ объясняется тем, что различие коэффициентов распыления (травления) разных зерен больше, чем дисперсия в пределах одной группы. Различие высотных параметров рельефов F (рис. 3, *d–f*) связано с нелинейностью характеристик фотоматериала от экспозиции. Наблюдается хорошее соответствие высотных параметров для реальных и моделированных методом IPG рельефов.

Заключение

Рассмотренная реализация IPG-модели обобщает распространенный в приложениях способ имитации негауссовских случайных процессов на основе нелинейного безынерционного преобразования нормального процесса, к которому IPG-модель сводится в „вырожденном“ случае $S(\gamma) \equiv 0$. Следует отметить, что в приведенном выше примере рельефа шероховатой поверхности, в качестве исходных использовались только нормальные процессы с гауссовской ACF, привлекая управляющие процессы другой структуры, например, производные от нормальных или периодические, и используя различные виды корреляций, можно еще более расширить диапазон выходных процессов модели IPG без существенного усложнения математического аппарата.

К преимуществам IPG-модели следует отнести простой алгоритм имитации реализаций, простоту вычис-

фузоре, с последующим проявлением и отбеливанием [36].

Гистограммы рассчитаны при статистической обработке профилограмм, с учетом огибающей поверхностных неровностей, не связанных с процессом модификации поверхности. Аппроксимация гистограмм $p_h(h)$ получена с использованием IPG-модели.

Как видно из сравнения формы гистограмм с кривой гауссовского распределения GS (рис. 3), PDF представленных рельефов существенно отличается от гауссовских. Бимодальные распределения высот при ионном и химическом травлении поликристаллических образцов

Типы рельефа	S_k	K_u
GS	0.003	0.000
S3	-0.476	0.329
S5	-0.809	1.060
S7	-1.374	2.279
S9	-1.850	5.508
K1	-0.001	0.426
K3	0.005	0.837
K5	-0.016	1.198
K8	-0.013	8.355
B2	-0.006	-0.474
B5	0.013	-0.776
B7	0.014	-1.097
B9	-0.018	-1.159

ления статистических характеристик процессов и единообразный вид распределений всех порядков в виде полигауссовских смесей, независимо от формы плотности распределения вероятности и автокорреляционной функции процессов. Возникающая вследствие двух независимых процессов $\varepsilon(x)$, $\gamma(x)$ большая гибкость модели, позволяет добиться независимого варьирования высотных и корреляционных свойств и дает возможность описывать процессы с сильной степенью отклонения от нормальности, что не всегда возможно при нелинейном преобразовании одного нормального процесса.

Список литературы

- [1] Rough Surfaces / Ed. by N.R. Thomas. London: Longman Groups, 1982. 261 p.
- [2] Хусу А.П., Витенберг Ю.Р., Пальмов В.А. Шероховатость поверхностей (теоретико-вероятностный подход). М.: Наука, 1975. 344 с.
- [3] Валетов В.А. Оптимизация микронеровностей поверхностей деталей в приборостроении. Л.: ЛИТМО, 1989. 100 с.
- [4] Малюгин В.И., Литвак М.Я. // Опт. и спектр. 2009. Т. 107. № 1. С. 152–160
- [5] Литвак М.Я., Малюгин В.И. // Опт. и спектр. 2010. Т. 109. № 1. С. 1224–1236.
- [6] Литвак М.Я., Малюгин В.И. // Опт. и спектр. 2010. Т. 109. № 5. С. 831–840.
- [7] Малахов А.Н. Кумулянтный анализ случайных негауссовских процессов и их преобразований. М.: Сов. радио, 1978. 376 с.
- [8] Шалыгин А.С., Палагин Ю.И. Прикладные методы статистического моделирования. Л.: Машиностроение, 1986. 320 с.
- [9] Быков В.В. Цифровое моделирование в статистической радиотехнике. М.: Сов. радио, 1971. 328 с.
- [10] Urzica A., Cretu S.Sp. // Acta Tribologica. 2010. Vol. 18. P. 1–6.
- [11] Sondhi M.M. // Bell Sys. Tech. J. 1983. Vol. 62. N 3. P. 679–701.
- [12] Трофимов В.И., Осадченко В.А. // ОМП. 1987. Вып. 6. С. 9–12.
- [13] Трофимов В.И., Осадченко В.А. // Оптич. журн. 1993. Вып. 8. С. 39–45.
- [14] Peng W., Bhushan B. // P.I. Mech. Eng. J.-J. Eng. 2000. Vol. 214. N 5. P. 459–470.
- [15] Zhao Y.-P., Wang G.-C., Lu T.-M. // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55. P. 13 938–13 952.
- [16] Шелухин О.И., Беляков И.В. Негауссовские процессы. СПб.: Политехника, 1992. 312 с.
- [17] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982. 296 с.
- [18] Guerin C.A. // Waves Random Media. 2002. Vol. 12. P. 293–306.
- [19] Cocheril Y., Vauzelle R., Aveneau L. // Proc. of the 64th IEEE Vehicular Technology Conf. VTC Fall, 2006. 1006. P. 1–5.
- [20] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 1, 2. М.: Мир, 1984. Т. 1. 528 с., Т. 2. 738 с.
- [21] Круглов В.М. // Вестн. МГУ. Сер. 15. Вычислительная математика и кибернетика. 1991. № 2. С. 3–15.
- [22] Кизеветтер Д.В., Литвак М.Я., Малюгин В.И. // ОМП. 1989. Вып. 6. С. 33–36.
- [23] Колтунов И.А., Монастырѳев А.П. // Статистические проблемы управления. 1987. Вып. 78. С. 83–120.
- [24] Воложин Г.Я., Бурлаков И.А., Косенкова С.Т. // Вестн. ДВО АН СССР. 1990. № 4. С. 100–107.
- [25] Дороднов А.А. // Прием и обработка информации в сложных информационных системах. Вып. 3. Казань: Изд-во Казан. ун-та, 1972. С. 139–143.
- [26] Дороднов А.А., Чабдаров Ш.М. // Радиотехника. 1975. Т. 30. № 7. С. 1–7.
- [27] Чабдаров Ш.М., Трофимов А.Т. // РиЭ. 1975. Т. 20. № 4. С. 734–745.
- [28] Tatarskii V.I., Tatarskii V.V. // Progress In Electromagnetic Research. 1999. PIER22. P. 259–291.
- [28] Tatarskii V.I., Tatarskii V.V. // Progress In Electromagnetic Research. 1999. PIER22. P. 293–313.
- [30] Чабдаров Ш.М., Сафиуллин Н.З., Феоктистов А.Ю. Основы статистической теории радиосвязи. Полигауссовские модели и методы. Казань: КАИ, 1983. 86 с.
- [31] Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 312 с.
- [32] Beckmann P. // IEEE Trans. Ant. Propag. 1973. Vol. AP 21. № 2. P. 169–175.
- [33] Крылов В.И., Шульгина Л.Т. Справочная книга по численному интегрированию. М.: Наука, 1966. 372 с.
- [34] Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс. М.: Радио и связь, 1988. 127 с.
- [35] Аброян И.А., Величко В.Я., Литвак М.Я., Малюгин В.И., Меркулова О.А., Фадеев А.Б. // Изв. РАН. Сер. физ. 1994. Т. 58. № 3. С. 116–123.
- [36] Литвак М.Я., Малюгин В.И., Меркулова О.А. // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. Вып. 13. С.12–16.