УДК 531.7:62-2:629.7 (043.3) DOI 10.36910/6775-2313-5352-2022-20-07
Катаєва М.О., Квашук Д. М.
Національний авіаційний університет

РОЗРОБКА МЕТОДУ ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ ТА ШВИДКОДІЇ ВИМІРЮВАЛЬНИХ КОМПЛЕКСІВ

У статті визначено перспективні напрямки в метрологічному забезпечені проведення вимірювань у нанометровому діапазоні. Визначено, що для вимірювання механічних властивостей наноструктурованих матеріалів з прив'язкою до рельєфу поверхні найбільш поширеними у застосуванні є вимірювальні комплекси, що поєднують у собі можливості скануючих зондових мікроскопів та нанотвердомірів. Тому актуальною постає задача підвищення точності та швидкодії розпізнавальної системи зондового вимірювального комплексу за рахунок оптимального вибору кількості і розміщення вимірювальних точок на поверхні нанооб'єкта та точок відліку для математичного опису топологічних та фізичних характеристик поверхні. Доведено, що однією з основних проблем, які виникають у процесі вимірювання нанооб'єктів за допомогою зондового вимірювального комплексу є негативний вплив зовнішніх дестабілізуючий факторів, які можуть бути причиною спотворення вимірювальної інформації та отримання недостовірного зображення рельєфу нанооб'єкта. Оскільки всі дестабілізуючі фактори та викликані ними похибки завчасно невідомі і випадковим чином змінюються у часі, можна стверджувати, що ми маємо справу з цілим рядом випадкових функцій часу. На основі проведеного дослідження, розроблено метод оптимального вибору кількості вимірювальних точок для математичного опису випадкового процесу та доведено, що запропонований метод сприяє значному підвищенню точності та швидкодії розпізнавальної системи зондових вимірювальних комплексів при проведені метрологічних робіт в нанометровому діапазоні.

Ключові слова: *techwords*

Вступ. В наш час метрологічні вимірювання, пов'язані з визначенням кількісних та якісних характеристик твердих поверхонь в нанометровому діапазоні виходять на прогресивно новий рівень у багатьох високотехнологічних галузях. Для вирішення подібних завдань найчастіше використовуються зондові мікроскопи, а також нанотвердоміри. В даний час активно розвиваються вимірювальні комплекси, що поєднують у собі можливості цих двох засобів вимірювання, що дозволяє визначати фізичні властивості нанооб'єктівз прив'язкою до рельєфу поверхні. Особливої актуальності ці вимірювання набувають при роботі з багатофазними наноструктурованими матеріалами. Тому задача розробки нових та удосконалення існуючих засобів вимірювання топологічних та фізичних особливостей нанооб'єктів за допомогою зондових пристроїв є важливою та актуальною.

Постановка проблеми. Точність та прецизійність вимірювань за рахунок зондових пристроїв зазвичай залежить від кількості вимірювальних точок, за якими математичними або програмними засобами будується поверхня нанооб'єкта. Але проведення таких вимірювань вимагають значних витрат часу на отримання та обробку вимірювальної інформації. Окрім того, на вимірювальний засіб та об'єкт постійно чинять вплив зовнішні дестабілізуючі фактори, такі як вібрації, перепади живлення, зміна теплових режимів тощо. Для виключення випадкових похибок, спричинених впливом цих факторів, необхідне збільшення кількості вимірювальних операцій, що негативним чином відображається на швидкодії вимірювального процесу. Для знаходження оптимального балансу між точністю та швидкодією розпізнавання характеристик поверхні нанооб'єкта комп'ютерними засобами та їх математичного опису, необхідно розрахувати оптимальну кількість вимірювальних точок у межах сегмента із заданою фрактальною розмірністю. Особового гостро ця задача постає для вимірювального процесу із одночасним дослідженням кількох характеристик поверхні нанооб'єкта.

Аналіз останніх досліджень. Оскільки дестабілізуючі фактори та викликані ними похибки завчасно невідомі і випадковим чином змінюються у часі, багато вітчизняних та закордонних вчених [1-5] схиляються до твердження, що ми маємо справу з цілим рядом випадкових функцій часу. Найчастіше [3, 5-7] задачу необхідного розрахунку обсягу точок вимірювання вирішують методом статистичного синтезу вимірювань, який полягає в максимізації або мінімізації статистичних критеріїв точності вимірювльних параметрів при заданих обмеженнях вимірювальної системи та зовнішніх дестабілізуючих факторів. На основі аналітичного огляду [4, 6-7], можна виділити два основних варіанти постановки задачі оптимізації кількості точок вимірювання:

– мінімізація ймовірностей помилок розпізнавання характеристик поверхні нанооб'єкта при заданій кількості точок та встановленій фрактальній розмірності;

– мінімізація сумарної кількості вимірювальних точок, необхідних для забезпечення достатнього рівня достовірності розпізнавання при заданій мінімальній фрактальній розмірності.

У виробничих умовах більш ефективним є другий варіант постановки задачі синтезу, оскільки від системи розпізнавання в першу чергу потрібно забезпечення гарантованого стабільного рівня достовірності розпізнавання характеристик поверхні нанооб'єкту. У той же час реалізація можливості значного зменшення сумарної кількості спостережень при забезпеченні заданого рівня достовірності розпізнавання може привести до значного підвищення швидкодії, внаслідок зменшення необхідного обсягу точок вимірювання і кількості вимірювальних засобів, що є дуже важливими факторами при проектуванні і експлуатації реальних систем. Але в цих дослідження не враховано вплив цілого ряду дестабілізуючих факторів на вимірювальний процес.

Виклад основного матеріалу. Було обрано певний відрізок часу проведення нановимірювань $T = [0,1]$, під час якого спостерігався випадковий вплив зовнішніх дестабілізуючих факторів

$$y(t) = \theta f(t) + \varepsilon(t), \qquad t \in T, \tag{1}$$

де $f(t)$ – випадкова функція часу, θ – вимірювальний параметр $\varepsilon(t)$ – безперервний випадковий дестабілізуючий процес з коваріаційною функцією

$K(s,t) = E\varepsilon(s)\varepsilon(t)\ \ (s,t \in T),$

де $K(s,t)$ – ядро щільності розподілу результатів вимірювання, яке формує несингулярну матрицю при звуженні на будь-яку кінцеву множину точок з T-діапазону, $\varepsilon(t)$ – безперервний випадковий дестабілізуючий процес.

Припустимо, що

$$T_n = \{t_1, \dots, t_n | 0 \le t_1 < t_2 < \dots < t_n \le 1\}.$$

Тоді вектор обходу нанооб'єкта зондом вимірювального комплексу Y_n утворюється відліками позиціювання нанооб'єкта $y(t)$ в точках вимірювального сегмента T_n

$$Y_n = (y(t_1), \dots, y(t_n))^T.$$

Аналогічно $f_n = (f(t_1), \dots, f(t_n))^T$ та $K_n = (K(t_i, t_k))_{i,k=1}^n$.при умові

$$Y_n \in \hat{\theta} = c^T Y_n,$$

де $c = K_n^{-1} f_n / (f_n^T K_n^{-1} f_n)$.

Необхідною вимогою для оцінки точності визначення вимірювального параметру θ є відсутність збільшення дисперсії T_n. Тому важливою стає задача оптимального вибору множини точок вимірювання за певний період часу T_n. Оскільки доведено (1), що функція $f(t)$ є безперервною у діапазоні T, то

$$||f||^2 = \sup f_n^T K_n^{-1} f_n, \tag{2}$$

де верхня границя береться за всіма кінцевими наборами точок вимірювання за певний період часу T_n. Визначено, що клас функції $\mathcal{F} = \{f | ||f|| < \infty\}$ є гільбертовим простором з ядром щільності розподілу результатів вимірювання K. Було припущено, що $(\cdot, \cdot)_k$ – скалярний добуток з оптимальної кількості точок вимірювання (2), тоді при будь-якому $t \in T$ функція $K(\cdot, t) \in F$, а для будь-якої функції $f \in F$ і будь-якого $t \in T$ отримаємо відтворюючу властивість

$$(f, K(\cdot, t))_K = f(t).$$

Доведено, що простір F являє собою клас функцій регресії з мінімальною дисперсією лінійної оцінки дестабілізуючого параметра θ для всіх кінцевих наборів вимірювальних точок у певному фрактальному сегменті.

Встановлено, що якщо $z_n = c_n^T Y_n$ – це оцінка точності дестабілізуючого параметра θ в моделі (1) для T_n, тоді існує випадкова величина z, а

$$E_0 z = \theta, E_0(z-\theta)^2 = \|f\|^{-2}, E_0(z_n - z)^2 \to 0, n \to \infty.$$

Оскільки функція регресії $f \notin F$, то дисперсія найбільш точної оцінки дестабілізуючого параметра буде дорівнювати 0. Таким чином, простір F – простір регулярних зрушень безперервного випадкового дестабілізуючого процесу $\varepsilon(t)$. Встановлено, що

$$K(s,s) + K(t,t) - 2K(s,t) = \|K(\cdot,s) - K(\cdot,t)\|^2 \to 0, \qquad t \to s,$$

звідки, враховуючи відтворюючої властивості $(f, K(\cdot,t))_K = f(t)$ було визначено, що простір F складається з безперервних функцій і є сепарабельним гільбертовим простором. Тобто, простір F було представлено як ізоморфний підпростору $L_2(T)$, для якого кінцеві набори спостережень випадкового процесу $\varepsilon(t)$ є лінійними комбінацій

$$\sum a_i K(s_i, t) \ (t \in T).$$

Вирішено задачу оптимального вибору кінцевого набору точок для математичного опису випадкового дестабілізуючого процесу T_n. Нехай $S_n = \{T_n\}$ – безліч всіх кінцевих наборів, включаючих n різних точок. Оптимальний n-точковий набір вимірювальних точок для моделі(1) визначено як

$$T_n^* = \operatorname{Arg} \sup_{T_n \in S_n} \|f\|_{T_n},$$

де норма $\|\cdot\|_{T_n}$, відповідна набору T_n випадкового дестабілізуючого процесу, яка отримана квадратичною формою з матрицею K_n^{-1}: $\|f\|_{T_n}^2 = f_{T_n}^2 K_n^{-1} f_n$.

Встановлено, що для гільбертового простору F_n з нормою $\|\cdot\|_n = \sup_{T_n \in S_n} \|\cdot\|_{T_n}$, $\|f\|_{T_n} = \|P_{T_n} f\|_n$,

де P_{T_n} – лінійний оператор підпростору $\{K(\cdot,t), t \in T_n\}$ в просторі F_n.

Зважаючи на те, що $P_{T_n'} f \to P_{T_n''} f$при $T_n' \to T_n''(t_i' \to t_i'', i = 1, \dots, n)$ є безперервним процесом, то $\|P_{T_n} f\|_n$ виступає як безперервна функція на безлічі n-точкових наборів S_n.

Доведено, що оптимальною кількістю вимірювальних точок для математичного опису топографії нанооб'єкта з урахуванням випадкового дестабілізуючого процесу є множина вимірювальних точок T_n для якого $\|f\|_n = \|f\|$, показник n є найменшим, а необхідною та достатньою умовою його розрахунку є дотримання рівняння

$$f(t) = \sum_{i=1}^{n} a_i K(t, t_i),$$

де набір $(t_1, \dots, t_n)$ – оптимальна кількістю вимірювальних точок.

Було також встановлено, що за відсутністю заданої оптимальної кількості вимірювальних точок для математичного опису n-точкового рельєфу нанооб'єкта T_n^* можна при порівняно невеликій кількості точок застосовувати прямі числові методи пошуку максимуму величини $\|f\|_{T_n}$ як функції точок відліку.

Якщо метрологічне дослідження передбачає одночасне вимірювання додаткових параметрів рельєфу, таких як шорсткість, хвилястість або твердість поверхні, тоді розрахунок оптимальної кількості вимірювальних точок буде проводитись на основі узагальнення моделі (1). Вимірювання кількох параметрів $\theta_1, \dots, \theta_k$ має вигляд

$$y(t) = \sum_{i=1}^{h} \theta_i f_i(t) + \varepsilon(t), \quad t \in T = [0,1], \tag{3}$$

де $f_1(t), \dots, f_k(t)$ – випадкові функції часу, а безперервний випадковий дестабілізуючий процес $\varepsilon(t)$ визначений, як в $\varepsilon(t) = y(t) - \theta f(t),\ t \in T,$.

Встановлено, що кожному набору точок відліку T_n відповідає система найкращих лінійних незміщених оцінок параметрів $\widehat{\theta_1}, \dots, \widehat{\theta_k}$ з коваріаційною матрицею $A_{T_n}^{-1}$, де матриця A_{T_n} порядку k має елементи

$$[A_{T_n}]_{rs} = \sum_{i,j=1}^{n} f_r(t_i)[K_n^{-1}]_{ij} f_s(t_j), \ \ r, s = 1, \dots, k.$$

Оскільки безліч позитивно визначених матриць лише частково впорядковано, не можна гарантувати існування найменшої матриці $A_{T_n}^{-1}$ для деякого $T_n \in S_n$. Тому для цілей оптимізації необхідно використовувати одномірні критерії точності типу дисперсії лінійної форми від параметрів, максимальної дисперсії лінійної форми з деякої компактної безлічі таких форм або узагальненої дисперсії оцінок параметрів $\det A_{T_n}^{-1}$. Для того щоб відповідні критерії точності мали сенс, необхідно, як і в одномірному випадку, щоб функція $f(t) = Ey(t)$ належала простору регулярних зрушень процесу $\varepsilon(t)$, тому важливо, щоб $f_i \in F$ $(i = 1, \dots, n)$, оскільки оптимальна кількість вимірювальних точок в наборі n нам заздалегідь не відома. Виключення становить ситуація, коли існує глобально-оптимальний набір, коли всі f_i представні у вигляді кінцевих лінійних комбінацій $\{K(t_j, t), \in T_n\}$.

Для підвищення швидкодії обчислень оптимальної кількості вимірювальних точок запропоновано ввести критерій асимптотичної оптимальності. Оскільки $\|f\| = \lim_{n\to\infty} \|f\|_n$, то є природним послабити вимогу точної оптимальності кількості вимірювальних точок при кожному n до асимптотичної оптимальності кількості вимірювальних точок $\{T_n, n \to \infty\}$.

Зважаючи на те, що в моделі (1) $f(t)$ – випадкова функція часу

$$f(t) = \int_0^1 K(s,t)\phi(s)ds, \tag{4}$$

де функція $\phi(s)$ - безперервна на $T = [0,1]$, $f \in F$.

Кількість вимірювальних точок $\{T_n, n > 1\}$ можемо вважати асимптотично оптимальною, якщо

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\|f\|^2 - \left\|P_{T_n} f\right\|^2}{\|f\|^2 - \sup\limits_{T_n \in S_n} \left\|P_{T_n} f\right\|^2} = 1.$$

Типовий результат відносно структури асимптотично оптимальної кількість вимірювальних точок наведено на рис. 1.

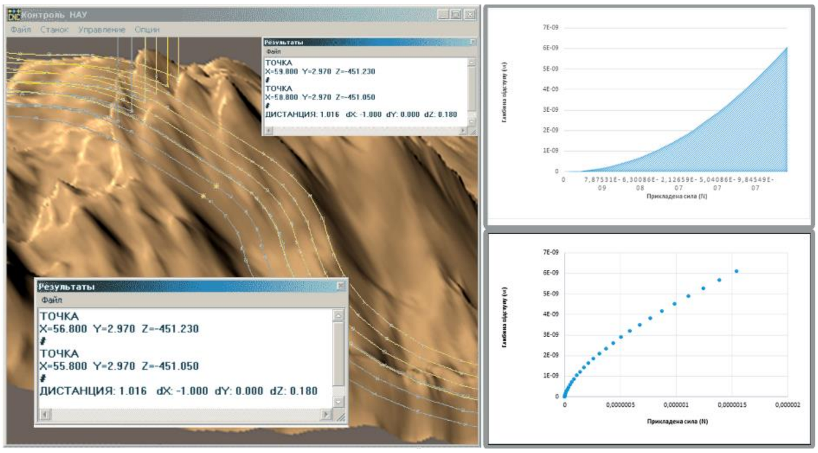

Рисунок 1. Програмне вікно з результатами сканування рельєфу нанооб’єкта

Він формується наступним чином: нехай ядро щільності розподілу результатів вимірювання $K(s,t)$ безперервне у визначеному фрактальному сегменті $T \times T$ і має безперервні похідні до другого порядку у всіх точках сегмента поза головною діагоналлю $(s \neq t)$. На діагоналі s=t функція має всі праві і ліві похідні до другого порядку включаючи і ненульовий стрибок першої похідної:

$$a(t) = \lim_{s\downarrow t} \frac{\partial}{\partial s} K(s,t) - \lim_{s\uparrow t} \frac{\partial}{\partial s} K(s,t) > 0, \quad t \in T;$$

при цьому функція $a(t)$ –суворо додатна і безперервна на T.

Припустимо, що $\partial^2 K(\cdot, t)/\partial t^2 \in F$ при будь-якому $t \in T$, тоді

$$\lim_{n\to\infty} n^2 \inf_{T_n \in S_n} \left\|f - P_{T_n} f\right\|^2 = \frac{1}{12} \int_0^1 [a(t)\phi^2(t)]^{1/3} dt.$$

Асимптотично оптимальна послідовність $[T_n^*]$ визначається через щільність $h(t) = [a(t)\phi^2(t)]^{1/3}$ наступним чином:

$$\int_0^{t_i^*} h(t)dt = \frac{i-1}{n-1}\int_0^1 h(t)dt, \qquad i = 1, \dots, n,$$

де t_i^* - найменше число, що влаштовує написану умову. Тоді

$$K(s,t) = \int_0^{|t-s|^{-1}} \{1 - \lambda|t-s|\}p(\lambda)d\lambda,$$

де $p(\lambda)$ – ймовірнісна щільність на $(0,\infty)$ з умовами

$$\lim_{\lambda\to\infty} \lambda^3 p(\lambda) = c < 0, \quad \int_0^\infty [\lambda p'(\lambda) + 3p(\lambda)]^2 \lambda^6 d\lambda < \infty,$$

Звідки отримуємо

$$K(s,t) = \int_0^\infty e^{-\lambda|t-s|} dP(\lambda),$$

де $p(\lambda)$ – функція розподілу з кінцевим третім моментом.

Результат розрахунку асимптотично оптимальної послідовності може бути розповсюджений на функції $f(t)$ у вигляді

$$f(t) = \int_0^1 K(s,t)\phi(s)ds + \sum_{k=1}^N a_k K(s_k, t),$$

З чого можна зробити висновок, що вимогою безперервності вирішення інтегрального рівняння (4) можемо знехтувати на користь збільшення швидкодії обчислень.

Висновок. Отже, застосування наведеного методу оптимального вибору точок для математичного опису топологічних та фізичних характеристик поверхні нанооб’єкта може сприяти значному підвищенню точності та швидкодії розпізнавальної системи зондового вимірювального комплексу при проведені метрологічних робіт в нанометровому діапазоні. За рахунок запропонованого методу асимптотичної оптимальності можна досягти врівноважених показників опису топологічних та фізичних характеристик поверхні нанооб’єктів. Перевагою методу є його гнучкість та придатність для застосування при вирішенні різноманітних метрологічних задач вимірювання фізичних властивостей нанооб’єкта з прив'язкою до рельєфу поверхні, а також адаптивність до застосуванні у програмному забезпечені.

Література:

1. Крянев, А.В. Математические методы обработки неопределенных данных / А.В. Крянев, Г.В. Лукин. – М.: Физматлит, 2006. – 216 с.
2. The Chemical Structure of a Molecule Resolved by Atomic Force Microscopy / [L. Gross, F. Mohn, N. Moll та ін.]. // Science. – 2019. – №325. – С. 1110–1114.
3. Meyer G. Novel Optical Approach to Atomic Force Microscopy / G. Meyer, N. M. Amer. // Applied Physics Letters. – 2008. – №53. – С. 1045–1047.
4. Israelachvili J. N. Intermolecular and Surface Forces / J. N. Israelachvili. – Academic Press, 2015
5. Johnson K. L. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids / K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts. // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. – 1971. – №324. – С. 301–313.
6. Bhushan B. Contact Mechanics of Multilayered Rough Surfaces / B. Bhushan, W. Peng. // Applied Mechanics Reviews. – 2002. – №55. – С. 435–480.
7. Chi L. Nanotechnology, volume Nanostructured surfaces. / L. Chi. – Wiley-VCH, 2010.

Kataeva M., D. Kvashuk
National Aviation University

DEVELOPMENT OF THE METHOD OF IMPROVING THE ACCURACY AND SPEED OF MEASUREMENT OF NANOBJECTS

The article identifies promising areas in metrological support for measurements in the nanometer range. It is determined that for measuring the mechanical properties of nanostructured materials with reference to the relief of the surface, the most common in use are measuring complexes that combine the capabilities of scanning probe microscopes and nanohardness testers. Therefore, the task of improving the accuracy and speed of the recognition system of the probe measuring complex due to the optimal choice of the number and location of measuring points on the surface of the nanoobject and reference points for mathematical description of topological and physical characteristics of the surface. It is proved that one of the main problems that arise in the process of measuring nanoobjects with a probe measuring complex is the negative impact of external destabilizing factors that can cause distortion of measurement information and inaccurate image of the terrain of the nanoobject. Since all destabilizing factors and the errors caused by them are unknown in advance and change randomly over time, it can be argued that we are dealing with a number of random functions of time. Based on the study, developed a method of optimal selection of the number of measuring points for mathematical description of a random process and proved that the proposed method significantly increases the accuracy and speed of the recognition system of probe measuring complexes in metrological work in the nanometer range.

Key words: *nanomeasurement, destabilizing factors, random processes, probe measuring complexes, speed of measuring process.*