ISSN 2224-087X. Електроніка та інформаційні технології. 2016. Випуск 6. С. 83–88
Electronics and information technologies. 2016. Issue 6. P. 83–88

УДК 519.6:538.9

ОЦІНКА МЕЖ ТОЧНОСТІ ЧИСЛОВОГО ОБЧИСЛЕННЯ ІНТЕГРАЛЬНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ ФУР'Є СТЕПЕНЕВИХ СПЕКТРІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ІНТЕРПОЛЯЦІЇ КУБІЧНИМИ СПЛАЙНАМИ

О. Флюнт

Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна
flunt@electronics.lnu.edu.ua

Запропоновано метод оцінки меж точності числового обчислення інтегрального перетворення Фур'є з використанням інтерполяції степеневих спектрів з нецілими показниками степеня кубічними сплайнами. З'ясовано, що можлива похибка, зумовлена можливими похибками інтерполяції спектрів кубічними сплайнами, загалом значно менша, ніж похибка, зумовлена частотними обмеженням діапазону інтегрування. Проте після корекції перетворення Фур'є внесками інтегралів на проміжках поза межами частотного діапазону, у якому значення спектра відомі, інформація про межі точності дає змогу визначити точність параметрів отриманих імпульсних (перехідних) характеристик та вірогідність особливостей їхньої поведінки.

Ключові слова: інтегральне перетворення Фур'є, кубічні сплайни, імпульсна характеристика, частотний спектр, високоточні обчислення, бібліотека MPFR.

Багато фізичних параметрів твердих тіл (відносна діелектрична проникність, струм фотопровідності у напівпровідниках, інтенсивність люмінесценції та ін.) залежать від частоти модуляції вимірювального сигналу, що приводить до потреби відображати їх у вигляді частотних спектрів дійсної $\chi_1(\omega)$ (синфазної) та уявної $\chi_2(\omega)$ (зміщеної за фазою на 90°) складових. Причиною цього є затримка відгуку того чи іншого параметра твердого тіла на зовнішнє збудження. У часовому просторі процес визначення того чи іншого параметра твердого тіла описують імпульсна $h(t)$ або перехідна $f(t)$ характеристики, які є реакціями системи на збудження у вигляді дельта-функції з одиничною площею або прямокутної сходинки, відповідно. Комплексний частотний спектр та імпульсна характеристика повністю відображають лінійні динамічні властивості твердого тіла стосовно певної фізичної властивості й пов'язані між собою за допомогою інтегрального перетворення Фур'є:

$$h(t) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \chi_1(\omega)\cos(\omega t)d\omega = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \chi_2(\omega)\sin(\omega t)d\omega\,; \tag{1}$$

$$\chi_1(\omega) = \int_0^\infty h(t)\cos(\omega t)dt, \qquad \chi_2(\omega) = \int_0^\infty h(t)\sin(\omega t)dt\,. \tag{2}$$

Імпульсну або перехідну характеристики частіше використовують у разі досліджень у діапазоні інфранизьких частот, переважно доти, доки це дає змогу виконувати швидкодія вимірювальної техніки. Проведення вимірювань у часовому просторі потребує менше часу, що особливо відчутно в діапазоні інфранизьких частот. Частотні спектри вимірюють у діапазоні звукових та радіочастот, оскільки необхідний час для визначення квазістаціонарного процесу, а це переважно не менше десяти періодів коливань на кожній частоті, уже не такий значний. Підвищення швидкодії аналого-цифрових перетворювачів значно зсуває верхню межу частотного діапазону в бік більших значень, що обмежує використання вимірювань перехідних процесів у часовому просторі.

Числове обчислення інтегрального перетворення Фур’є важливе як у сучасній фізиці конденсованого стану, так і для аналізу степеневих залежностей у комп’ютерних системах. Зокрема, у діелектричній спектроскопії твердих тіл і рідин часто потрібно переходити від імпульсних характеристик, отриманих як залежності від часу, до частотних спектрів, отриманих у частотному просторі, і навпаки. Інтерполяція залежностей, які відомі в окремих точках, за допомогою кубічних сплайнів є одним з найліпших методів отримання значень функцій між відомими точками, оскільки кубічні сплайни дають змогу згладжувати не лише значення функції в точках дотику між сусідніми відрізками, а й її першу та другу похідні. До того ж, їхнє використання дає змогу обчислювати перетворення Фур’є спектрів, відстані між точками яких неоднакові за значенням. Це важлива перевага методу, оскільки відстані між точками реальних спектрів переважно зростають з підвищенням частоти відповідно до експоненціального закону. Метод приводить до виразів, які є точними результатами аналітичного обчислення інтегралів виду

$$a_i \int_{\omega_{m-1}}^{\omega_m} \omega^i \cos(\omega t)\, d\omega \tag{3}$$

з i = 0, 1, 2, 3 [1]. Проте для реалізації аналітичного методу обчислення інтегрального перетворення Фур’є за допомогою інтерполяції експериментальних частотних залежностей кубічними сплайнами необхідне використання чисел з високою розрядністю: більшою ніж 18–19 значущих цифр [1–3]. Високу точність обчислень можна реалізувати за допомогою бібліотеки високоточних обчислень MPFR, написаної на основі GMP [4, 5]. Ці бібліотеки дають змогу виконувати обчислення з застосуванням чисел довільної, наперед заданої точності.

Оскільки частотні спектри часто підлягають степеневим залежностям від частоти з нецілими значеннями показника степеня [6], то сплайнів третього порядку повинно бути цілком достатньо для максимально адекватного відтворення форми спектра. Проте зрозуміло, що завжди буде певна числова похибка точності відтворення значення спектра на певній частоті, яка, відповідно, може приводити до похибки форми інтегрального перетворення Фур’є.

Тому важливою є оцінка точності перетворення Фур’є, зумовлена неточністю інтерполяції експериментальних залежностей, заданих тільки в певних точках. Надалі для оцінки можливої похибки, зумовленої неточністю інтерполяції, уважатимемо, що значення частотних залежностей у заданих точках є точними; оцінюватимемо, як можливі похибки інтерполяції спектра між заданими точками можуть вплинути на форму інтегрального перетворення Фур’є.

Спектри дійсної частини діелектричної проникності твердих тіл у діапазоні низьких та радіочастот є переважно монотонно спадними функціями. Тому похідна в будь-якій відомій точці не перевищує значення, обчисленого як середнє на наступному відрізку від f_i до f_{i+1}. Тому лінійна апроксимація на певному відрізку матиме в кожній точці значення, яке не менше від фактичного значення спектра, а інтеграл від неї буде не меншим, ніж значення інтеграла від справжньої спектральної залежності (рис. 1).

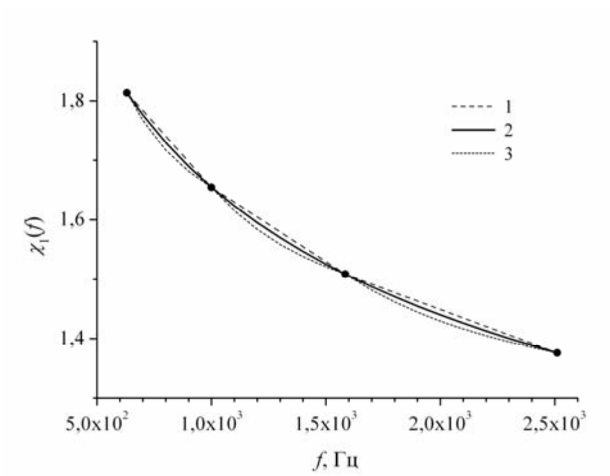

Рис. 1. Інтерполяція степеневого спектра з n = 0,2 кубічними сплайнами (2), кусково-лінійна інтерполяція (1) та інтерполяція на підставі з умови, що похідна в лівій (правій) крайній точці перевищує (менша ніж) справжнє значення (3)

Для знаходження нижньої межі інтеграла використаємо ту властивість спектра, що похідна, записана як $(\chi_i - \chi_{i-1})/(f_i - f_{i-1})$, де χ_i і χ_{i-1} – значення спектра на частотах f_i і f_{i-1}, відповідно, перевищуватиме фактичне значення похідної в точці f_i. Середня похідна на відрізку від f_{i+1} до f_{i+2} буде дещо меншою, ніж фактичне її значення в точці f_{i+1}. Тому інтерполяція за допомогою кубічного сплайна з накладанням умов прирівнювання похідних до їхніх середніх значень на сусідніх відрізках для монотонно спадної функції дасть інтерполяційну залежність, значення якої в кожній з точок не перевищуватиме справжні значення спектра (див. рис. 1).

Такий самий підхід можна застосувати для зростаючих ділянок спектра, які часто можна виявити на залежностях діелектричних втрат від частоти. У цьому разі верхню і нижню межі інтеграла на кожному з відрізків треба поміняти місцями.

Надалі розглянемо два граничні випадки: коли підінтегральний вираз інтегрального перетворення Фур'є є неосцилювальним, коли $\omega t << 1$, і осцилювальним, коли $\omega t >> 1$). Результати обчислення засвідчують, що кусково-лінійна апроксимація приводить до незначного відхилення (близько 1–2 %) значення інтегралів на проміжках для відрізків без осциляцій (рис. 2), великі відносні похибки можуть виникати за умови однієї осциляції на відрізок, які значно зменшуються за умови більшої кількості осциляцій.

З рис. 3 бачимо, що інтеграл Фур'є, обчислений у широкому частотному діапазоні (наприклад, 1 Гц – 1 МГц) матиме значно менші межі можливої сумарної похибки, зумовленої неточністю інтерполяції спектра, що можна пояснити сумарним внеском як сильночутливих до точності інтерполяції фрагментів (з порядком однієї осциляції на відрізок), так і слабкочутливих (без осциляцій або з великою кількістю осциляцій на відрізок). З рис. 4 випливає, що відносна похибка більша для степеневих спектрів з меншими значеннями n, що можна пояснити їхньою сильнішою дисперсією.

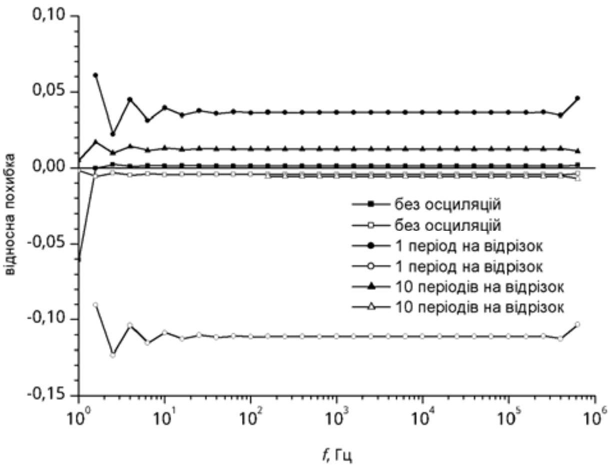

Рис. 2. Верхня та нижня допустимі межі значень для косинус інтеграла Фур'є від неосцилювальних та осцилювальних підінтегральних виразів на кожному з відрізків від f_{i-1} до f_i для степеневого спектра з $1 - n = 0{,}2$

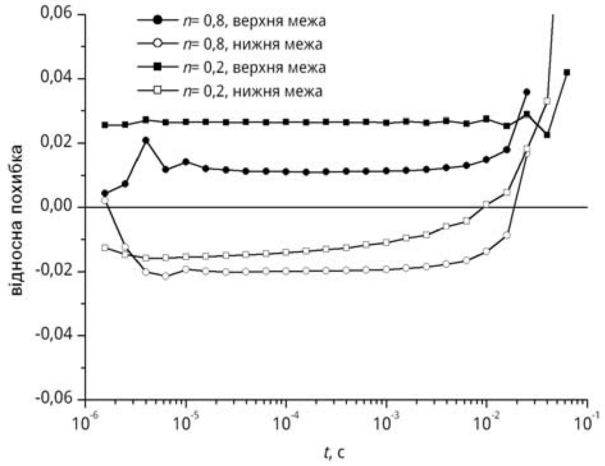

Рис. 3. Межі відносних похибок значень для косинус інтеграла Фур'є від степеневих спектрів з $1 - n = 0{,}2$ та 0,8 заданих на частотному проміжку від 1 Гц до 1 МГц

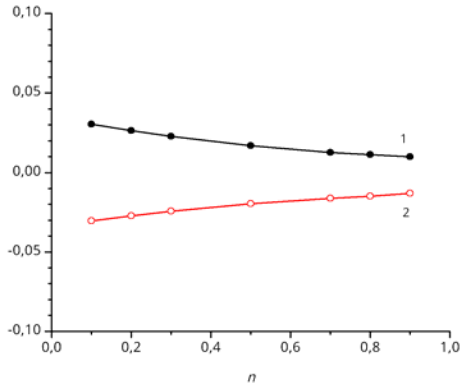

Рис. 4. Залежність меж максимально можливої відносної похибки інтегрального косинус перетворення степеневого спектра для часу 10^{-4} с від показника степеня *n*, зумовлена можливою неточністю інтерполяції

Отже, можна стверджувати, що можлива похибка, зумовлена неточностями інтерполяції частотних залежностей, значно менша від можливих похибок, зумовлених відсутністю внесків інтеграла Фур'є на нижчих та вищих частотах поза межами частотного діапазону, на якому форма спектра відома [7]. Проте запропонований метод можна використовувати для визначення максимальних меж можливих відносних похибок числового перетворення Фур'є методом апроксимації кубічними сплайнами частотних степеневих спектрів, зумовлених неточністю інтерполяції. Можливість визначення меж точності імпульсних або перехідних характеристик у часовому просторі дає змогу визначати точність параметрів, якими їх характеризують, та виявляти вірогідність певних особливостей їхньої поведінки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Флюнт О.* Вплив розрядності чисел на правильність та точність чисельного розрахунку перехідних діелектричних характеристик / О. Флюнт // Вісник Львів. ун-ту. Сер. фіз. – 2013. – Вип. 48. – С. 270–278.
2. *Флюнт О. Є.* Застосування бібліотеки обчислень довільної точності GNU MPFR для реалізації алгоритму перетворення Фур'є методом апроксимації спектрів кубічними сплайнами / О. Є. Флюнт // Вільне та з відкритим кодом програмне забезпечення : матеріали та програма наук.-практ. конф. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2014. – С. 32–34.
3. IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic. IEEE Std 754-2008. – [Approved 2008-06-12]. – The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc. 3 Park Avenue, New York, NY 10016-5997, USA, 2008. – 58 p.
4. The Multiple Precision Floating-Point Reliable Library // The MPFR team. – 2013. – 56 p. [Electronic resource]. – Mode of access : http://www.mpfr.org/mpfr-current/mpfr.pdf .

5. The GNU Multiple Precision Arithmetic Library // Torbjorn Granlund and the GMP development team. – 2015. – 142 p.– [Electronic resource]. – Mode of access : https://gmplib.org/gmp-man-6.1.0.pdf .
6. *Jonscher A. K.* Universal relaxation law / A. K. Jonscher. – London : Chealsea Dielectrics Press, 1996. – 416 p.
7. *Флюнт О.* Розрахунок перехідної характеристики низькоомних шаруватих кристалів GaSe / О. Флюнт // Вісник Львів. ун-ту. Сер. фіз. – 2009. – Вип. 44. – С. 226–233.

Стаття: надійшла до редакції 06.06.2016,
доопрацьована 17.06.2016,
прийнята до друку 22.06.2016.

ESTIMATION OF ACCURACY LIMITS OF NUMERICAL INTEGRAL FOURIER CALCULATION OF POWER SPECTRA USING CUBIC SPLINE INTERPOLATION

O. Fl'unt

Ivan Franko National University of Lviv,
50 Drahomanov Str., UA–79005 Lviv, Ukraine
flunt@electronics.lnu.edu.ua

The method of estimation of accuracy limits of numerically calculated integral Fourier transform of fractional power spectra using cubic splines interpolation has been proposed. It is shown that the possible error caused by possible interpolation cubic spline errors is in general much lower than error due to frequency range limits of integration. However, after correction of Fourier integrals contributions outside the frequency range within which the value of the spectrum is known, information about the accuracy limits allows to establish the precision of parameters of derived time-domain responses and reliability of their features.

Key words: integral Fourier transform, cubic spline, time-domain response, frequency spectra, high-precision calculation, MPFR-library.