

На правах рукописи



Щербань Дмитрий Сергеевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНФРАКРАСНЫХ
СПЕКТРОВ ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Томск 2017

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет» и в ФГБОУ ВО «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники»

Научный руководитель – Михайлов Михаил Михайлович,
доктор физико-математических наук,
профессор

Официальные оппоненты: Кошкин Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет», профессор кафедры теоретической кибернетики

Крутиков Владимир Николаевич,
доктор технических наук, профессор,
ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет», профессор кафедры прикладной математики

Ведущая организация – ФБГОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет»

Защита состоится 16 ноября 2017 г. в 15 час. 15 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.268.02 Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 40, ауд. 201.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники и на сайте https://storage.tusur.ru/files/62601/Dissertaciya_Shcherban'.pdf

Автореферат разослан «29» августа 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Зайченко Татьяна Николаевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Проведенный анализ публикаций научной литературы позволяет сделать вывод, что на сегодняшний день внимание ученых, специализирующихся как в теоретических, так и в прикладных областях наук, обращено на изучение и создание новых инженерных материалов, обладающих необходимыми свойствами. Особенно отчетливо эта тенденция проявляется в направлениях, изучающих соединения, находящиеся в конденсированном состоянии.

Зачастую решения концептуальных задач, позволяющих раскрыть фундаментальные закономерности, лежащие в основе парадигмы «состав – структура – свойства», основываются на применении методик, использующих весьма подробные экспериментальные данные. В свою очередь ограниченность сырьевых, энергетических и временных ресурсов значительно затрудняет подобные чисто эмпирические методы поиска образцов с необходимыми физическими свойствами. Таким образом, данная ситуация обуславливает объективную необходимость использования иных методов поиска, например, подходов, основывающихся на эффективном математическом моделировании эксплуатационных характеристик искомым материалов. Следовательно, создание более эффективной математической модели упругой ионной поляризации и соответствующего ей численного метода расчета динамических параметров, а также реализация на их основе нового программного продукта, способного автоматизировать процесс адекватного имитационного моделирования поляризационных характеристик образца, является *актуальной задачей*.

Основные разделы диссертационной работы выполнялись в рамках тематики госбюджетной НИОКР АмГУ «Компьютерное моделирование характеристик природных и технических систем» (2010-2014 гг., гос. № 0120.1053818), а также НИР №145 «Кибернетическое моделирование внутренней микроструктуры вещества», выполненной по государственному заданию вузам Министерства образования и науки Российской Федерации (2014-2016 гг., гос. № 114030440029).

Основная цель исследования включает в себя: разработку модификации системной модели процесса упругой ионной поляризации диэлектрика, направленной на увеличение точности моделируемых поляризационных характеристик; создание, на основе предлагаемой модификации модели, соответствующего ей численного метода расчета структурно-энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса; разработка программного продукта, способного автоматизировать расчет исследуемых поляризационных спектров.

Задачи исследования:

- 1) анализ существующих детерминированных описаний процесса упругой ионной поляризации;
- 2) структурный синтез математического описания, использующий в качестве основы системную модель, адекватно описывающую характеристики процесса;
- 3) создание численного метода расчета структурно-энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса;

4) разработка протокола, управляющего основным исполняемым модулем;

5) создание программного продукта, позволяющего проводить компьютерное моделирование спектральных характеристик выбранной группы кристаллических диэлектриков. Анализ и сравнение полученных результатов со значениями в справочной литературе.

Методы исследования. Решение поставленных задач проводилось с использованием следующих подходов: инженерная методика реализации компьютерных моделей сложных систем; методы многомерной оптимизации; математический аппарат передаточных функций и их частотных аналогов; метод построения структурных схем и эквивалентных им преобразований; общие методы математического моделирования; концепция объектно-ориентированного программирования; общие принципы алгоритмизации.

На защиту выносятся:

1. Структурная модификация системной модели процесса упругой ионной поляризации двухатомного кристалла, направленная на использование в качестве входных данных собственных параметров кристалла и динамических параметров процесса, позволяет проводить более точный расчет поляризационных характеристик, по сравнению с существующими моделями. Результаты данного расчета вполне соответствуют данным физических экспериментов;

2. Алгоритм параметрического синтеза предлагаемой модификации исходной модели, заключающийся в последовательном применении двух расчетных каскадов, использующих собственные параметры объекта и динамические параметры рассматриваемого процесса, а также численный метод, основанный на интеграции предлагаемой модели и авторского алгоритма, позволяющие проводить автоматизированную минимизацию отклонения моделируемой характеристики от контрольных данных, полученных в результате физических измерений;

3. Протокол расчета, осуществляющий связь всех компонентов пакета прикладных программ и управление основным исполняемым модулем, который позволяет проводить всю необходимую совокупность вычислительных процедур в рамках проведенного исследования.

Научная новизна результатов работы состоит в следующем:

1. Впервые получена новая математическая модель процесса упругой ионной поляризации двухатомного кристалла, позволяющая выделить аналитическую взаимосвязь динамических параметров процесса с собственными физическими свойствами поляризуемых частиц. Данная модель отличается своей структурой от известных описаний.

2. Предложен оригинальный алгоритм, основанный на циклическом применении последовательности алгоритма прямого перебора и метода покоординатного спуска. Данный метод, в рамках использования разработанной модификации системной модели, позволяет получить значения эффективных зарядов ионов и коэффициентов сжимаемости щелочно-галоидных кристаллов, близкие к результатам классических расчетов. В результате расчетов получены различные значения эффективных зарядов аниона и катиона одного и того же материала, что отличается от известных справочных данных. Также было рассчитано

значение коэффициента сжимаемости кристалла бромида цезия, ранее не отраженное в литературных источниках. Полученные значения физических величин позволяют повысить эффективность моделирования инфракрасных спектров соответствующих веществ.

3. Разработан авторский протокол, который лежит в основе реализованного пакета прикладных программ. Данный пакет позволяет осуществлять автоматизированный расчет собственных энергетических параметров кристаллов и динамических параметров процесса, а также проводить имитационное моделирование инфракрасных спектров рассматриваемых материалов.

Практическая значимость основных результатов проведенного исследования состоит в следующем: общая совокупность полученных математических моделей, а также метода синтеза численных значений энергетических параметров кристалла и динамических параметров рассматриваемого процесса, позволяет проводить имитационное моделирование инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов в области их ионной поляризации, адекватные данным их физических измерений. Также, основе разработанных математических моделей и методов реализованы и официально зарегистрированы три полезные модели [9 – 11] и две программы для ЭВМ [12, 13], которые используются для компьютерного моделирования инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов при обучении студентов Амурского государственного университета, проходящих подготовку по направлениям 09.03.02 – Информационные системы и технологии, 09.04.01 – Информатика и вычислительная техника, 09.04.04 – Программная инженерия.

Использование результатов проведенного исследования – их внедрение в научно-исследовательскую деятельность Дальневосточного государственного аграрного университета (г. Благовещенск) для компьютерного моделирования инфракрасных спектров типовых строительных бетонов Амурской области с минеральными добавками в целях комплексного исследования их теплозащитных свойств в рамках НИР № 21 «Строительство» (Раздел 7. Бетоны для малоэтажного строительства в условиях Дальнего Востока).

Апробация диссертационных материалов подтверждается участием в шести международных и одной Всероссийской научных конференциях и семинарах, среди которых: 52-я Всероссийская научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Москва, 2009); XXIII Международная научная конференция «Математические методы в технике и технологиях» (Саратов, 2010); VIII Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем» (Пенза, 2010); XXIV Международная научная конференция «Математические методы в технике и технологиях» (Пенза, 2011); I Международная научная конференция «Современное состояние минералогии» (Казань, 2013); XVIII-XIV Международная научно-практическая конференция «Научная дискуссия: вопросы технических наук» (Москва, 2013); Международная заочная научно-практическая конференция «Научная дискуссия: вопросы математики, физики, химии, биологии» (Москва, 2013); X International IEEE Scientific and Technical Conference «Dynamics of Systems, Mechanisms and Machines» (Omsk, 2016).

Публикации. По теме проведенного квалификационного исследования опубликовано 18 печатных работ, в число которых входит: 7 статей [1 – 7], опубликованных в рецензируемых журнальных изданиях, рекомендованных ВАК; 6 тезисов и материалов докладов на международных и всероссийских научных конференциях [8, 14 – 18]; три патента на полезные модели [9 – 11]; два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [12, 13].

Личный вклад состоит в математической обработке усложненной модификации исходной кибернетической модели исследуемого процесса; практической реализации всего набора необходимых вычислительных экспериментов; разработке алгоритмов и исходного кода защищаемых программных продуктов.

Участие соискателя в подготовке работ, опубликованных в соавторстве, состоит в следующем. В публикациях [9 – 11] им была составлена структурная схема, проведена практическая проверка разработанных моделей на различных видах кристаллов путем проведения серии вычислительных экспериментов. В работах [12, 13] осуществлена разработка вычислительных алгоритмов и реализация их в виде готового программного продукта. В статьях [1, 2, 4, 6, 7] представлены полученные диссертантом результаты моделирования поляризационных характеристик, рассматриваемых в работах диэлектриков. В статье [8] автором был предложен алгоритм определения численных значений параметров модели. В работах [14 – 16] автором были представлены результаты вычислительных экспериментов. В работах [17, 18] для практических расчетов поляризационных характеристик был использован представленный авторский программный продукт.

Структура и объем работы соответствует диссертационному паспорту специальности. Диссертационная работа состоит из введения, 4-х глав, заключения, списка цитируемой литературы содержащего 132 отечественных и зарубежных источника и 4-х приложений. Основной объем работы составляет 118 листов машинописного текста, 49 рисунков, 4 таблицы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, представлены научные положения, выносимые на защиту, приведены основные теоретические и практические результаты.

В **первой главе** – «Существующие физико-математические модели ионной поляризации» приведены общие понятия теории поляризации, а также проведен обзор отечественной и зарубежной литературы по тематике математических моделей поляризационных процессов.

На основании данного обзора можно сделать вывод о том, что на текущий момент существуют различные математические описания процесса упругой ионной поляризации, однако большинство из них сформировано в рамках классической теории, и они не могут предоставить адекватные результаты расчетов поляризационных спектров кристаллов. Также было выявлено, что рассмотрение процесса с точки зрения технической кибернетики позволило сформировать оригинальное математическое описание, путем отдельного рассмотрения собственных колебаний частиц и коллективной деформации решетки:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2\beta_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + K_1 \omega_{01}^2 \mu_1(t) &= \frac{2q_1^2}{m_1} E(t) + K_2 \omega_{01}^2 \frac{q_1}{q_2} \mu_2(t); \\ \frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} + 2\beta_2 \frac{d\mu_2(t)}{dt} + K_1 \omega_{02}^2 \mu_2(t) &= \frac{2q_2^2}{m_2} E(t) + K_2 \omega_{02}^2 \frac{q_2}{q_1} \mu_1(t); \end{aligned} \quad (1)$$

$$K_1 = (B-1) - A_M, \quad K_2 = A_M; \quad \omega_{0k}^2 = \frac{q_1 q_2}{4\pi \varepsilon_0 R^3 m_k}, \quad k = \overline{1,2},$$

где $E(t)$ – функция напряженности внешнего поля, A_M – постоянная Маделунга, R – величина межъядерного расстояния, B – показатель степени в потенциале отталкивания Борна, $\mu_k(t)$ – функции изменения дипольных моментов, q_k – их заряды, ω_{0k}^2 – частоты колебаний частиц составляющих кристалл, β_k – взвешенные коэффициенты затухания результирующих колебаний отдельных частиц.

Приведенная система (1) дифференциальных уравнений позволяет получить комплексные поляризуемости частиц следующего вида:

$$\begin{aligned} \alpha_1(j\omega) &= \frac{2 \left(\frac{e^2}{m_1} (K_1 \omega_{02}^2 - \omega^2) + \frac{e^2}{m_2} K_2 \omega_{01}^2 \right) + j\omega 4 \frac{e^2}{m_1} \beta_2}{\left(\omega^4 - \Omega_1 \omega^2 + \Omega_2 \right) + j\omega 2 \left(K_1 (b_1 \omega_{02}^2 + b_2 \omega_{01}^2) - \Omega_3 \omega^2 \right)}; \\ \alpha_2(j\omega) &= \frac{2 \left(\frac{e^2}{m_2} (K_1 \omega_{01}^2 - \omega^2) + \frac{e^2}{m_1} K_2 \omega_{02}^2 \right) + j\omega 4 \frac{e^2}{m_2} \beta_1}{\left(\omega^4 - \Omega_1 \omega^2 + \Omega_2 \right) + j\omega 2 \left(K_1 (b_1 \omega_{02}^2 + b_2 \omega_{01}^2) - \Omega_3 \omega^2 \right)}; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Omega_1 = \left(K_1 (\omega_{01}^2 + \omega_{02}^2) + 4\beta_1 \beta_2 \right), \quad \Omega_2 = (K_1^2 - K_2^2) \omega_{01}^2 \omega_{02}^2, \quad \Omega_3 = (\beta_1 + \beta_2).$$

Данные выражения позволяют провести вычислительный эксперимент, направленный на моделирование оптического показателя преломления кристалла $NaCl$, результаты которого представлены на рис. 1.

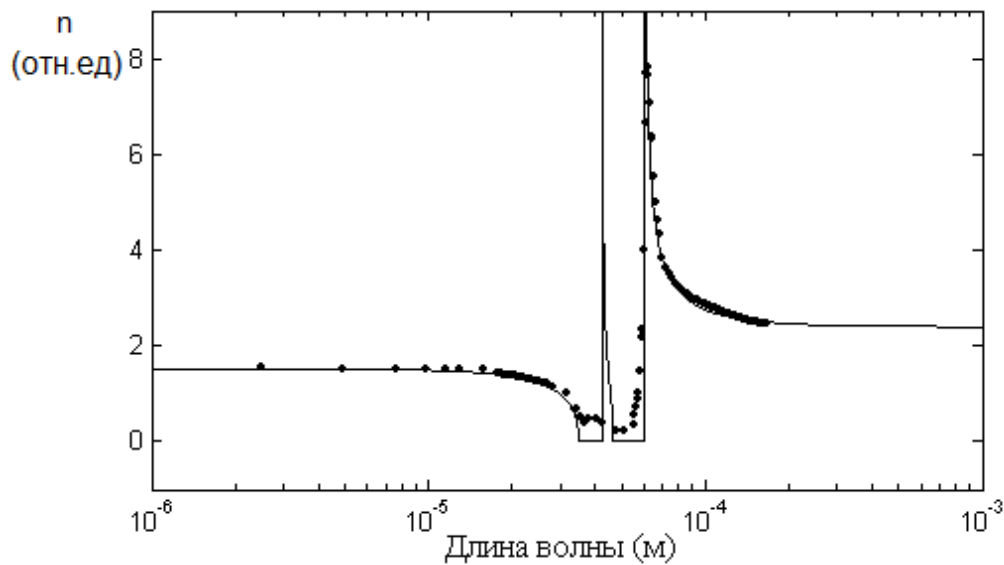


Рис. 1. Результаты имитационного моделирования показателя преломления кристалла $NaCl$ на базе кибернетической модели.

Анализ соответствия расчетного спектра показателя преломления рассматриваемого кристалла позволяет констатировать высокую эффективность применения предлагаемой кибернетической модели упругой ионной поляризации, учитывающую собственные колебания ионов и коллективную деформацию ионной связи.

Однако в рассматриваемом описании процесса упругой ионной поляризации, как и в корпускулярной модели, присутствует область, в которой показатель преломления оказывается равным нулю. Данный факт может быть связан с отсутствием учета затуханий.

Вторая глава – «Структурная модификация кибернетической модели процесса» посвящена устранению недостатка кибернетического описания, приведенного в конце первой главы, путем внесения структурных изменений в исходное описание процесса, которые основаны на декомпозиции параметров модели, а именно: собственных энергетических параметров кристалла (эффективные заряды частиц и коэффициент сжимаемости), динамических параметров процесса (собственные частоты колебаний частиц).

Подстановка расчетных выражений названных параметров в исходную кибернетическую модель дает возможность произвести структурную модификацию исходного описания.

Проведенный анализ литературных данных показал, что они представляют отличающиеся друг от друга численные значения показателя степени в потенциале отталкивания Борна. Также в ходе данного анализа было определено общепринятое выражение для расчета данного показателя:

$$B = 1 + \frac{4\pi\varepsilon_0 \cdot 9R^4 \gamma}{q_1 q_2 A_M \chi}, \quad (3)$$

где γ – коэффициент компактности кристалла, χ – коэффициент сжимаемости.

Подстановка в выражение (3) параметров кристалла $NaCl$: $q_1=q_2=e$; $A_M = 1.748$; $\gamma=2$; $R=2,81 \cdot 10^{-10}$ м; $\chi=3,3 \cdot 10^{-11}$ м²/Н, позволяет получить значение $B=9,4$. Данное значение хорошо согласуется с данными, полученными в ходе физических экспериментов. Также стоит отметить, что постоянная Борна B для большинства кристаллов принимает значения в пределах от 6 до 10.

Опытным путем доказано, что эффективный заряд атома, входящий в состав того или иного соединения, определяемый как алгебраическая сумма его отрицательного электронного и положительного заряда ядра, как правило не равен целому числу зарядов электрона и, находясь в разных химических соединениях, имеет различные значения эффективных зарядов. Следует отметить, что помимо прямых рентгеноструктурных методов, существует большое количество косвенных методов определения эффективных зарядов атомов, однако практически все они дают разнящиеся результаты в пределах обычной погрешности 0,1 – 0,2 e , свойственной большинству методов.

Подобная ситуация сложилась и в отношении коэффициента сжимаемости кристалла: на данный момент отсутствуют методики, позволяющие напрямую измерить данный показатель, а косвенные методики предоставляют разнящиеся результаты.

Таким образом, проведенная декомпозиция параметров модели позволяет констатировать, что выражение (3), предоставляет возможность произвести структурную модификацию кибернетической модели вида (1).

Также следует отметить тот факт, что в настоящий момент формулы для расчета значений коэффициентов затухания вынужденных колебаний β_k каждого из ионов отсутствуют. Однако физическая сущность процессов упругой ионной поляризации частиц, а также соотношение типовых параметров соответствующего математического описания $\beta_k \ll \omega_k$, позволяют с достаточной долей достоверности использовать приближенные значения:

$$\beta_k = b_k \omega_{0k}, \quad (4)$$

где b_k – коэффициент пропорциональности, принимающий значения от 0,1 до 0,01.

Для проведения модификации кибернетической модели обратимся к описанию частоты собственных колебаний частиц, составляющих кристалл, через упругие составляющие a , определяемые силами кулоновского взаимодействия, т.е:

$$\omega_{0k}^2 = \frac{a}{m_k}.$$

Поскольку введенные в рассмотрение упругие составляющие оказываются различными в левой и правой частях системы уравнений, исходная кибернетическая модель (1) будет представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2\beta_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \frac{Aa}{m_1} \mu_1(t) &= \frac{2q_1^2}{m_1} E(t) + \frac{A_M a}{m_1} \cdot \frac{q_1}{q_2} \mu_2(t); \\ \frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} + 2\beta_2 \frac{d\mu_2(t)}{dt} + \frac{Aa}{m_2} \mu_2(t) &= \frac{2q_2^2}{m_2} E(t) + \frac{A_M a}{m_2} \cdot \frac{q_2}{q_1} \mu_1(t); \end{aligned} \quad (5)$$

$$A = (B - 1 - A_M); \quad a = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 R^3}; \quad B = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot 9R^4 \gamma}{q_1 q_2 A_M \chi}; \quad \beta_k = b_k \sqrt{\frac{Aa}{m_k}}, \quad k = \overline{1,2},$$

где a – общая упругая составляющая, обусловленная чисто кулоновским взаимодействием.

Выполнив подстановку выражения показателя степени в потенциале отталкивания Борна и сокращение переменных, а также приведение подобных, получаем следующие значения типовых параметров колебательного процесса:

$$\omega_{0k}^2 = \frac{Aa}{m_k} = \left(\frac{9R\gamma}{A_M \chi} - \frac{q_1 q_2 A_M}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right) \cdot \frac{1}{m_k}; \quad (6)$$

$$\beta_k = b_k \omega_{0k}, \quad k = \overline{1,2}.$$

Подстановка выражений (6) в систему уравнений (5) и использование типовых математических преобразований позволяют вывести оригинальную систему уравнений, описывающую процесс упругой ионной поляризации:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \omega_{01} \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \omega_{01}^2 \mu_1(t) &= \frac{q_1^2}{m_1} (2E(t) + \Omega \mu_2(t)); \\ \frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} + 2b_2 \omega_{02} \frac{d\mu_2(t)}{dt} + \omega_{02}^2 \mu_2(t) &= \frac{q_2^2}{m_2} (2E(t) + \Omega \mu_1(t)); \end{aligned} \quad (7)$$

$$\omega_{0k}^2 = \frac{9R\gamma}{A_M \chi} - q_1 q_2 \Omega \quad k = \overline{1,2}, \quad \Omega = \frac{A_M}{4\pi\epsilon_0 R^3}.$$

Использование расчетной формулы показателя степени в потенциале отталкивания Борна B дало возможность получить более компактный вид кибернетической модели вида (7), которая, в свою очередь, имеет структурные отличия от ее исходного описания. Полученная система позволяет осуществить вывод явного вида уравнений упругой ионной поляризуемости. Для этого, во-первых, используем преобразование Лапласа и приведем систему ко второй стандартной форме записи, отражающей реакции каждого элемента рассматриваемой системы в зависимости от величин внешних вынуждающих их воздействий:

$$\begin{aligned} \mu_1(s) &= \frac{1}{s^2 + 2b_1 \omega_{01} s + \omega_{01}^2} \left(\frac{q_1^2}{m_1} (2E(s) + \Omega \mu_2(s)) \right); \\ \mu_2(s) &= \frac{1}{s^2 + 2b_2 \omega_{02} s + \omega_{02}^2} \left(\frac{q_2^2}{m_2} (2E(s) + \Omega \mu_1(s)) \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Полученное описание (8) позволяет сформировать структурную схему анализируемого процесса (рис. 2):

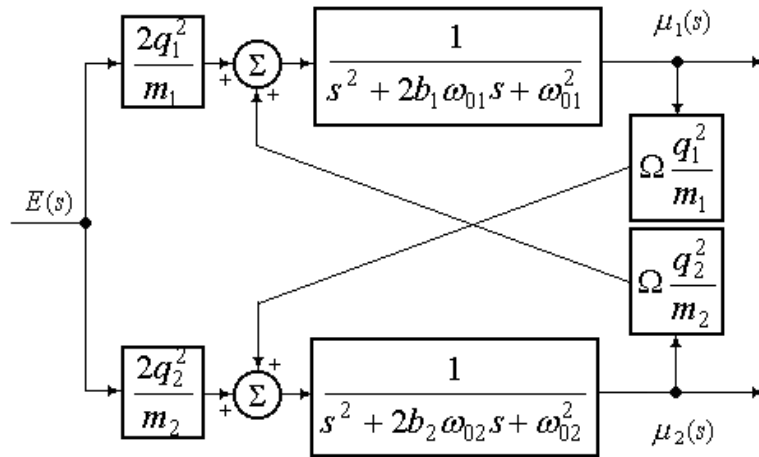


Рис. 2. Структурная схема процесса ионной поляризации модифицированной кибернетической модели.

Таким образом, на базе системы уравнений (8) в рамках типовых преобразований эквивалентной им структурной схеме (рис. 2) могут быть найдены передаточные функции $W_k(s)$, описывающие процессы поляризации каждого иона, которые, в свою очередь, представляют собой физические аналоги комплексных ионных поляризуемостей частиц:

$$\alpha_1(j\omega) = \frac{\frac{2q_1^2}{m_1} \left(\omega_{02}^2 + \frac{q_2^2}{m_2} \Omega - \omega^2 \right) + j\omega 4 \frac{q_1^2}{m_1} b_2 \omega_{02}}{\omega^4 - \Lambda_2 \omega^2 + \omega_{01}^2 \omega_{02}^2 - q_1^2 q_2^2 \Omega^2 + j\omega 2(\Lambda_3 - \Lambda_1 \omega^2)};$$

$$\alpha_2(j\omega) = \frac{\frac{2q_2^2}{m_2} \left(\omega_{01}^2 + \frac{q_1^2}{m_1} \Omega - \omega^2 \right) + j\omega 4 \frac{q_2^2}{m_2} b_1 \omega_{01}}{\omega^4 - \Lambda_2 \omega^2 + \omega_{01}^2 \omega_{02}^2 - q_1^2 q_2^2 \Omega^2 + j\omega 2(\Lambda_3 - \Lambda_1 \omega^2)}; \quad (9)$$

$$\Lambda_1 = b_1 \omega_{01} + b_2 \omega_{02}; \quad \Lambda_2 = \omega_{01}^2 + \omega_{02}^2 + 4b_1 \omega_{01} b_2 \omega_{02};$$

$$\Lambda_3 = b_1 \omega_{01} \omega_{02}^2 + b_2 \omega_{02} \omega_{01}^2.$$

Вводимые в рассмотрение дополнительные величины и коэффициенты, с одной стороны – упрощают общую математическую структуру кибернетического описания ионной поляризации, с другой стороны – расширяют набор исходных физических данных, необходимых для практических расчетов. При этом часть из них на текущий момент не имеет строгого математического толкования.

В *третьей главе* – «Вычислительная методика параметрического синтеза модели» приводится обзор численных методов многокритериальной оптимизации, а также синтез нового метода определения численных значений собственных параметров кристалла и динамических параметров рассматриваемого процесса.

Разработку численного метода определения параметров модели необходимо начать с выбора целевой функции. Целевая функция – функция, которая показывает, как зависит оптимизируемый показатель от других параметров. Другими словами, это формализация понятия цели, с тем преимуществом, что в таком случае можно более-менее четко оценить сокращение расстояния на пути ее достижения.

Критерием оптимальности при поиске энергетических параметров конкретного образца и динамических параметров процесса было выбрано наименьшее отклонение расчетной кривой $n(\omega)$ оптического показателя преломления, определяемой на основе, полученной в предыдущей главе модели, относительно кривой $S(\omega)$, интерполирующей точечные массивы контрольных данных физических экспериментов. Иными словами, в качестве целевой функции $\Phi(\chi, q_k, b_k)$ была выбрана площадь криволинейной трапеции, образованной этими двумя кривыми на участке частотного спектра.

$$\Phi(\chi, q_k, b_k) = \left| \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} S(\omega) d\omega - \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}} d\omega \right|, \quad (10)$$

где $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$ и $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$ – действительная и мнимая характеристики комплексной диэлектрической проницаемости образца.

Стоит отметить, что для поиска минимума функции (10) аналитическими методами следует найти ее первую производную и приравнять к нулю. В связи с этим необходимо детально рассмотреть ее составляющие.

Выражение (10) содержит мнимую и действительную части комплексной диэлектрической проницаемости вещества, которые, в свою очередь, определяются на основании выражений (9) комплексных ионных поляризуемостей частиц, входящих в состав диэлектрического материала. В связи с тем, что выражения ионных поляризуемостей являются достаточно сложными, поиск первообразной и определенного интеграла оптического показателя преломления весьма затруднительны. Таким образом, задача поиска производной полученного выражения, необходимой для аналитического определения условия существования экстремума функции $\Phi(\chi, q_k, b_k)$, практически неразрешима.

Поэтому для поиска минимума выбранной целевой функции необходимо использовать две группы численных методов:

Во-первых, для поиска определенного интеграла таблично заданной функции. В связи с тем, что аналитически вычислить интеграл оптического показателя преломления, основанного на модифицированной кибернетической модели, достаточно сложно, необходимо функцию расчета показателя преломления преобразовать в табличный вид, путем расчета ее значений на длинах волн, идентичных контрольным данным, и использовать численный метод (метод трапеций) для поиска площади, образованной расчетной кривой.

Во-вторых, для поиска минимума функции многих переменных применить численные методы многопараметрической оптимизации.

В связи с тем, что скорость метода прямого перебора резко снижается при большом количестве параметров, а прямое применение метода Гаусса в данном случае невозможно, предложено разделить все параметры на группы и внутри групп осуществлять полный перебор, а между группами использовать метод Гаусса. Так как расчетная формула частоты собственных колебаний частицы включает в себя одновременно эффективные заряды и коэффициент сжимаемости, решено выделить данные параметры в первую группу. Во вторую группу предложено выделить коэффициенты затухания колебаний.

Серия вычислительных экспериментов параметрического синтеза показала низкую эффективность использования в качестве целевой функции только площади криволинейной трапеции – как с количественной точки зрения, так и с точки зрения скорости выполнения операций. В связи с чем было принято решение расширить критерии оптимизации путем добавления условий соответствия частот и амплитуд большого и малого резонансных выбросов. Блок-схема итогового алгоритма представлена на рис. 3.

На основании предложенного метода параметрического синтеза кибернетической модели был произведен расчет требуемых параметров кристалла поваренной соли $NaCl$, с использованием модифицированной кибернетической модели. Полученный набор: $\chi=3,8 \cdot 10^{-11}$, $q_1=0,94 \cdot e$, $q_2=0,96 \cdot e$, $b_1=0,03$, $b_2=0,03$ вполне соответствует литературным данным. Результаты моделирования спектра показателя преломления, с использованием результатов параметрического синтеза, приведены на рис. 4.

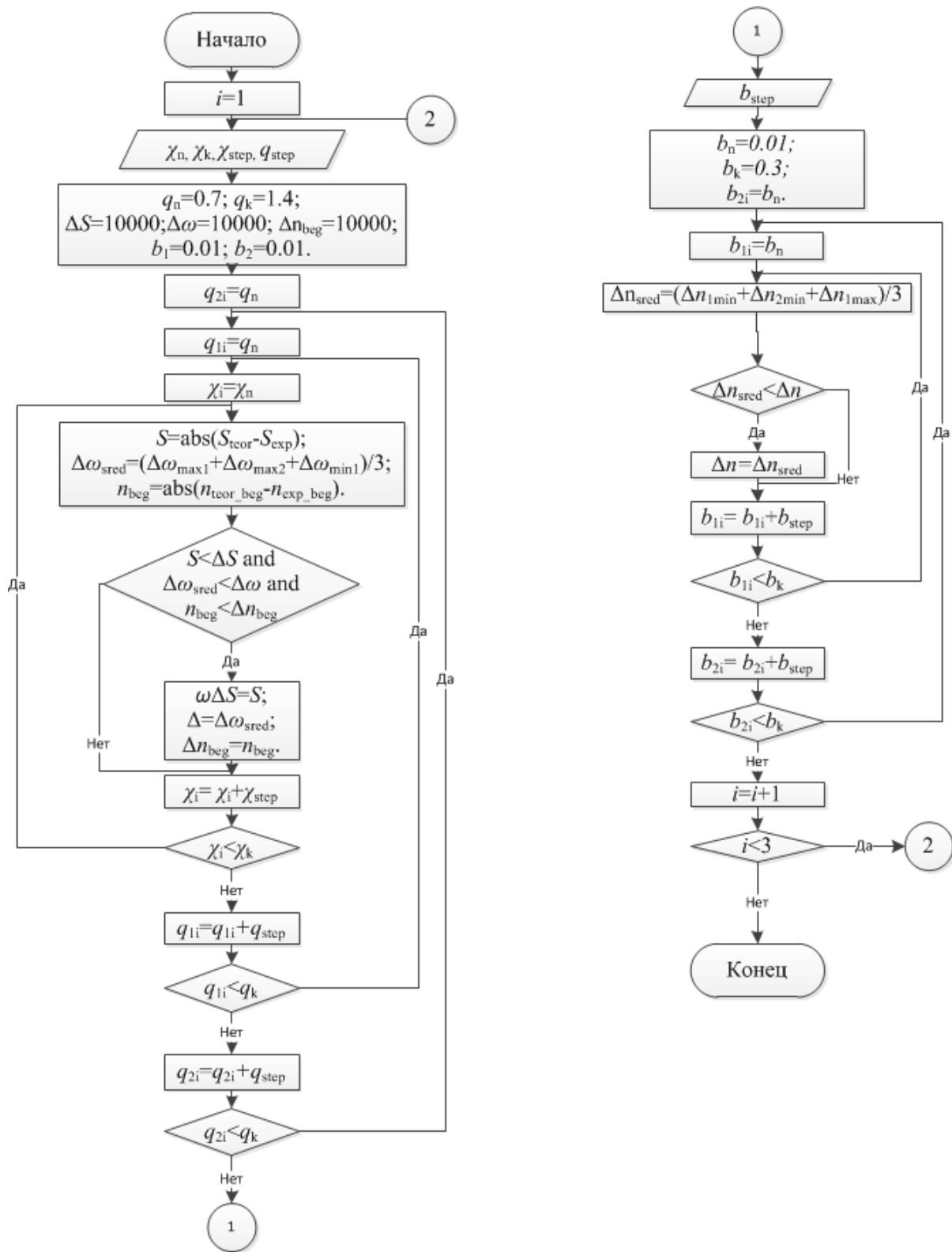


Рис. 3. Блок-схема предлагаемого алгоритма

С целью анализа проделанной работы по структурному и параметрическому синтезу, представим результаты расчетов спектра показателя преломления рассматриваемого кристалла со следующим набором параметров: $\chi=3,3 \cdot 10^{11}$, $q_1=1 \cdot e$, $q_2=1 \cdot e$, $b_1=0$, $b_2=0$, $p=9,4$ при использовании исходной кибернетической модели на рис. 5.

Отчетливо видно, что итоговый расчетный спектр выглядит лучше как с количественной, так и с качественной точки зрения; с учетом объективно существующих сил трения и, соответственно, затуханий, удалось избавиться от областей длин волн, в которых показатель преломления обращался в ноль, к тому же данное обстоятельство позволило сгладить интенсивность резонансных выбросов.

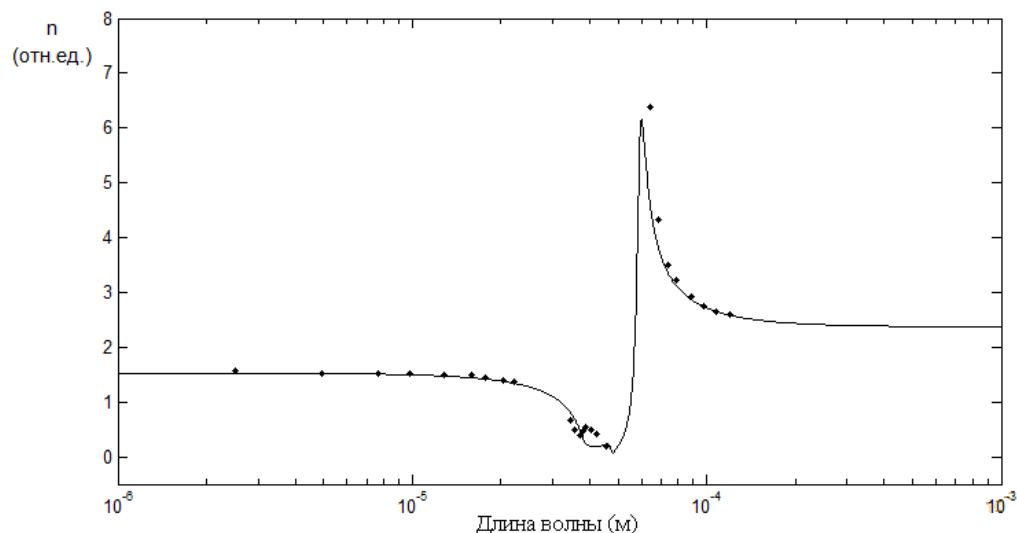


Рис. 4. Результат параметрического синтеза кристалла $NaCl$

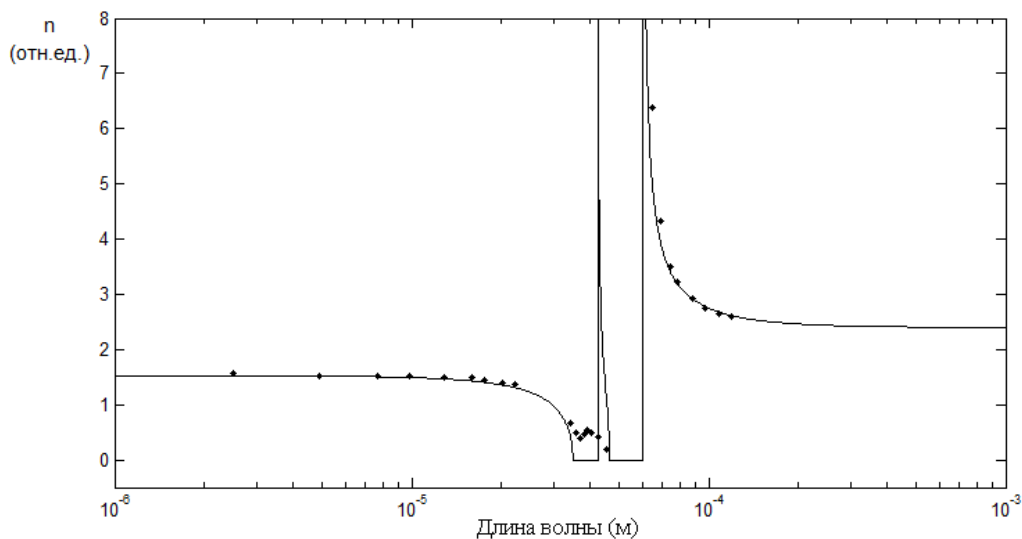


Рис. 5. Результат моделирования на основе кибернетической модели.

Полученные результаты моделирования позволяют предположить адекватность расчетной методики и применить ее для расчета параметров других кристаллов. Рассмотрим работу модели и численного метода для кристалла $CsBr$, обладающего отличным от рассмотренных кристаллов типом решетки ($CsCl$). Разработанный алгоритм параметрического синтеза определяет следующую совокупность параметров: $\chi=5,54 \cdot 10^{-11}$, $q_1=1,2 \cdot e$, $q_2=1 \cdot e$, $b_1=0,03$, $b_2=0,045$, которая была использована для расчета спектра показателя преломления, представленного на рис. 6.

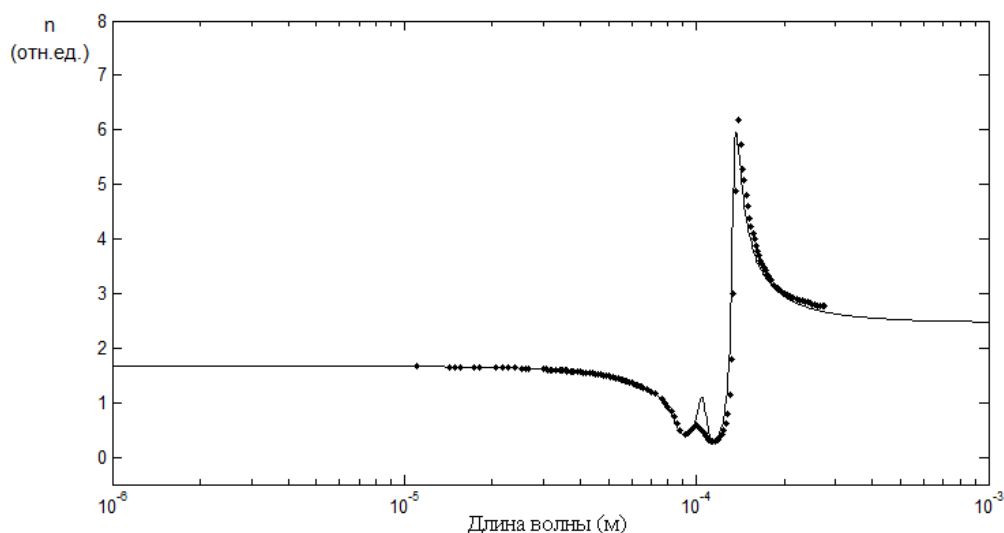


Рис. 6. Результаты моделирования спектра кристалла CsBr на основе модифицированной кибернетической модели

Поскольку и в этом случае модель показывает адекватные результаты, можно предположить, что она универсальна. Следует отметить также, что литературные источники не представляют данных о значении коэффициента сжимаемости для многих щелочно-галогидных кристаллов, в число которых входит и CsBr. В связи с этим можно использовать полученную модель для косвенного определения коэффициента сжимаемости кристаллов типа АВ.

В *четвертой главе* «ППП «Моделирование инфракрасных спектров кристаллов типа АВ» описана общая структура программного продукта и структура основного исполняемого модуля вместе с протоколом. Также в главе освещены вопросы моделирования поляризационных спектров кристаллических диэлектриков при помощи, разработанного ППП.

На основе предложенного алгоритма параметрического синтеза и модификации кибернетической модели упругой ионной поляризации кристаллического диэлектрика разработан пакет прикладных программ, направленный на решение следующих задач:

- 1) расчет собственных параметров кристалла – таких как эффективные заряды и коэффициент сжимаемости кристалла;
- 2) расчет динамических параметров процесса – таких как коэффициенты затухания колебаний;
- 3) расчет частотных диэлектрических спектров кристаллических диэлектриков типа АВ;
- 4) автоматизированное построение подробных спектров всех поляризационных характеристик процесса.

Структурная схема данного продукта представлена на рис. 7.

На основе полученных результатов расчета собственных параметров кристалла и динамических параметров процесса, а также поляризационных спектров щелочно-галогидных кристаллов, при помощи ППП «Моделирование инфракрасных спектров кристаллов типа АВ», можно сделать следующие выводы:

Во-первых, разработанный протокол управления основным исполняемым модулем является универсальным, поскольку может быть использован для про-

ведения расчетных процедур, использующих схожие с рассматриваемой методикой.

Во-вторых, сам разработанный пакет обладает свойством универсальности, поскольку позволяет успешно моделировать инфракрасные спектры набора разных щелочно-галоидных кристаллов (по которым были найдены данные о показателе преломления), практически соответствующие реально наблюдаемым.

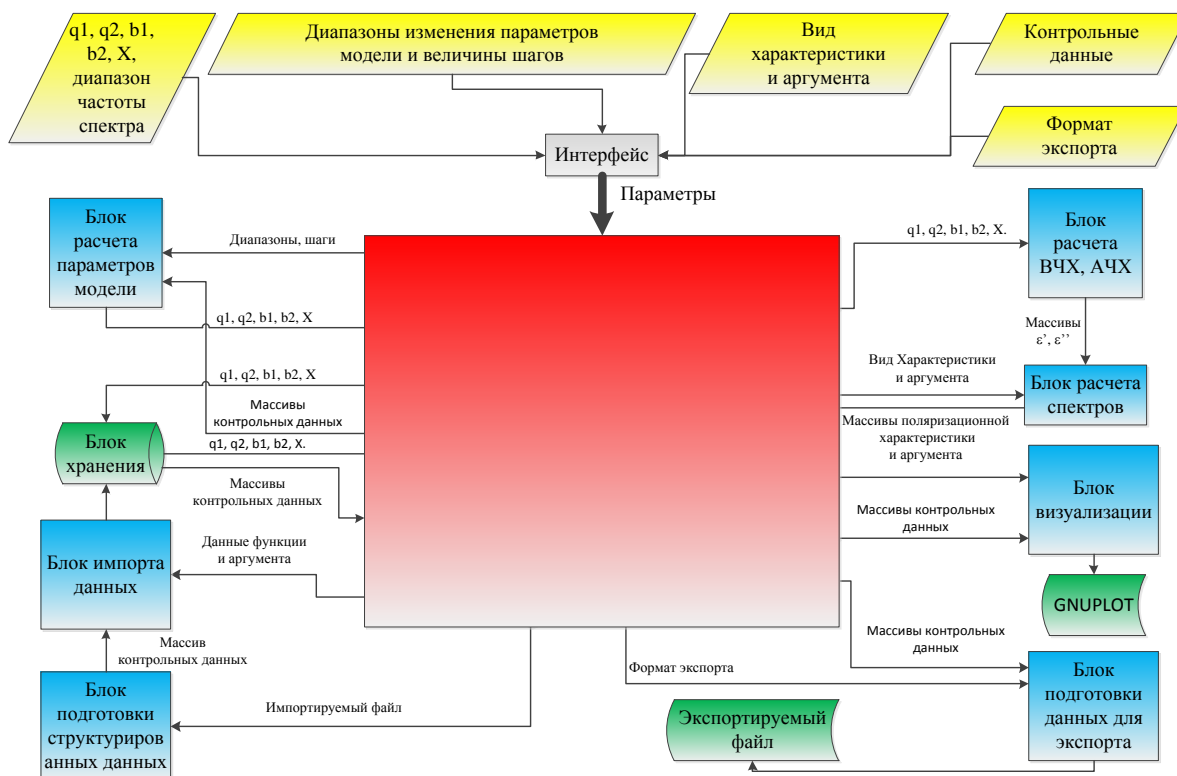


Рис. 7. Главное окно программы

В-третьих, пакет эффективен, поскольку расчет и визуализация поляризационных спектров выполняется практически с минимальными затратами процессорного времени, а расчет параметров процесса и кристалла при использовании среднестатистического настольного компьютера занимает немногим более часа.

ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

Основные теоретические и практические результаты, полученные в рамках представленной диссертационной работы, позволяют сформулировать следующие выводы:

Во-первых, ввод в рассмотрение динамических параметров процесса позволил сформировать оригинальные математические выражения, описывающие рассматриваемый процесс, и, с точки зрения структуры, отличающиеся от существующих аналогов.

Во-вторых, разработанный метод параметрического синтеза, полученный с использованием численных методов многопараметрической оптимизации, даст возможность получить более качественные результаты моделирования поляризационных характеристик. Данный метод может быть использован также

для поиска ранее неизвестных параметров кристалла, при наличии подробного контрольного спектра показателя преломления.

В-третьих, разработанная модель процесса упругой ионной поляризации двухкомпонентного кристалла и алгоритм параметрического синтеза позволили создать ряд официально зарегистрированных программных продуктов, ориентированных на имитационное моделирование поляризационных свойств диэлектрика.

В-четвертых, авторские вычислительные средства позволили провести тестирование разработанной математической модели и численного метода и констатировать практическую эффективность их применения.

Необходимо отметить, что предлагаемые модели, численные методы и комплексы программ могут рассматриваться не только в качестве прикладного дополнения теоретической базы традиционной теории поляризации, но и оказаться полезными для анализа поляризационных процессов, происходящих в различных технических материалах.

Таким образом, в рамках проведенного исследования были получены новые результаты в трех научных областях:

в области математического моделирования: сформирована оригинальная кибернетическая модель исследуемого процесса, синтезируемая посредством введения в рассмотрение коэффициента пропорциональности между частотой собственных колебаний частиц и коэффициентами их затухания, которая отличается от существующих аналогов своей математической структурой, что позволило сократить общее число параметров в исходной кибернетической модели, следовательно, снизить погрешность вычислений;

в области численных методов: на базе объединения методов покоординатного спуска каскадов и направленного перебора разработан алгоритм поиска с одной стороны – собственных параметров объекта, с другой стороны – динамических параметров процесса;

в области комплексов программ: реализован главный расчетный модуль на основе разработанного протокола, позволяющий управлять расчетными компонентами, осуществляющими детерминированное моделирование частотных характеристик ионной поляризации двухатомных кристаллов.

Все перечисленное позволяет сделать заключение, что настоящая диссертационная работа, выполненная в рамках специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», полностью соответствует паспорту специальности.

Дальнейшее развитие предлагаемого подхода может быть направлено на апробацию применения разработанной математической модели и вычислительной методики к исследованию других конденсированных диэлектриков, например, группы кристаллов A_xB_y . Кроме того, этот подход может оказаться полезным при постановке и решении задач виртуального проектирования кристаллических диэлектрических сред, с желаемыми поляризационными свойствами. Объединение аналитических методов технической кибернетики современных компьютерных технологий для исследования свойств физических объектов и систем – одно из объективных условий дальнейшего развития физики конденсированного состояния.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

Статьи в изданиях, рекомендованных ВАК

1. Еремин И.Е., Щербань Д.С. Кибернетическая модель упругой ионной поляризации кристалла фторида лития // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2011. – № 1(20). – С. 21-30.
2. Еремин И.Е., Щербань Д.С. Моделирование упругой ионной поляризации кристалла бромида калия // Информатика и системы управления. – 2012. – № 1(31). – С. 124-128.
3. Щербань Д.С. Моделирование упругой ионной поляризации кристалла бромида цезия // Информатика и системы управления. – 2012. – № 4(34). – С. 63-68.
4. Еремин И.Е., Щербань Д.С. Кибернетическая модель упругой ионной поляризации кристалла бромида калия // Вестник Саратовского государственного технического университета: по мат. XXIV междунар. науч. конф. «Математические методы в технике и технологиях». – 2012. – Т. 1, № 2(64). – С. 62-65.
5. Щербань Д.С. Модифицированная кибернетическая модель ионной поляризации щелочно-галоидных кристаллов // Информатика и системы управления. – 2013. – № 4(38). – С. 44-52.
6. Еремин И.Е., Щербань Д.С. Имитатор ионной поляризации щелочно-галоидных кристаллов // Информатика и системы управления – 2014. – № 3(41). – С. 60-70.
7. Михайлов М.М., Щербань Д.С. Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов // Информатика и системы управления. – 2016. – № 4(50). – С. 23-32.

Публикации в изданиях, цитируемых системой Scopus

8. Eremin I.E., Mikhailov M.M., Scherban' D.S. Structural and Parametrical Synthesis of Cybernetic Model of Elastic Ionic Polarization // Dynamics of Systems, Mechanisms and Machines: Materials of the X International IEEE Scientific and Technical Conference. – Omsk, Russia, 2016. – (Принята к печати).

Объекты интеллектуальной собственности

9. Патент на полезную модель № 132558 (РФ). Имитатор процессов общей поляризации кристаллов типа АВ / Амурский государственный университет; Еремин И.Е., Жилиндина О.В., Остапенко А.А., Бартошин А.С., Щербань Д.С. – Опубликовано 20.09.2013, бюллетень № 26.
10. Патент на полезную модель № 140030 (РФ). Имитатор процессов упругой ионной поляризации кристаллов типа АВ / Амурский государственный университет; Еремин И.Е., Жилиндина О.В., Остапенко А.А., Щербань Д.С., Колтыгин С.А. – Опубликовано 27.04.2014, бюллетень № 12.
11. Патент на полезную модель № 153033 (РФ). Имитатор комплексного показателя преломления электромагнитного поля света кристаллами типа АВ / Амурский государственный университет; Еремин И.Е., Еремина В.В., Жилиндина О.В., Щербань Д.С. – Опубликовано 27.06.2015, бюллетень № 18.

12. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011611813 (РФ). Программа имитационного моделирования спектров щелочно-галлоидных кристаллов / Еремин И.Е., Щербань Д.С. – Зарегистрировано 28.02.2011, бюллетень № 1.

13. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661130 (РФ). Программа кибернетического расчета динамических параметров ионной поляризации щелочно-галлоидных кристаллов / Амурский государственный университет; Еремин И.Е., Щербань Д.С. – Зарегистрировано 28.11.2013, бюллетень № 4.

Прочие публикации

14. Еремин И.Е., Сычев М.С., Щербань Д.С. Оптимизированный алгоритм прямого расчета постоянной Маделунга // Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук: тр. 52-й всерос. науч. конф. МФТИ – М.: МФТИ, 2009. – Ч. VIII. – С. 47-49.

15. Еремин И.Е., Сычев М.С., Щербань Д.С. Эффективная компьютерная реализация метода прямого расчета постоянной Маделунга // Математические методы в технике и технологиях: сб. тр. XXIII междунар. науч. конф. – Саратов: СГТУ, 2010. – Т. 7. – С. 132-133.

16. Щербань Д.С. Моделирование спектра диэлектрической проницаемости хлорида натрия // Современное состояние минералогии: сб. тр. I междунар. Интернет-конф. – Казань: «Казанский университет», 2013. – С. 63-65.

17. Щербань Д.С., Колтыгин С.А. Моделирование характеристик процесса упругой ионной поляризации бромида калия и оксида цинка // Научная дискуссия: вопросы технических наук: сб. статей по мат. XIII-XIV междунар. заоч. науч.-практ. конф. – М.: МЦНиО, 2013 – № 8-9(11). – С. 155-159.

18. Щербань Д.С., Колтыгин С.А. Моделирование поляризационных характеристик хлорида натрия и оксида бериллия // Научная дискуссия: вопросы математики, физики, химии, биологии: сб. статей по мат. VIII междунар. заоч. науч.-практ. конф. – М.: МЦНиО, 2013. – № 8(8). – С. 34-38.

Подписано в печать __.__.__. Формат 60x84/16.
Усл. печ. л. 1,95. Тираж 100. Заказ от __.__.__.

Отпечатано с готового оригинал-макета
в типографии ИП Сажинова А.А.
675022, Благовещенск, ул. Калинина, д. 127, кв. 45.