



УДК 519.714+517.977.1

© 2018 г. А.Д. Плутенко, д-р техн. наук,  
В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук  
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

## НЕПРЕРЫВНО-ДЕТЕРМИНИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ШИРОКОДИАПАЗОННЫХ СПЕКТРОВ ВОДЫ. II

Рассматривается возможность эффективного имитационного моделирования оптических спектров, характерных для жидкого полярного диэлектрика. Во второй части работы представлен авторский вариант численного метода определения динамических параметров поляризационных процессов.

**Ключевые слова:** собственные параметры частицы, динамические параметры процесса, частотный диапазон, направленный перебор, величина усредненной ошибки.

DOI: 10.22250/isu.2018.57.33-41

### Введение

В работе [1] было показано, что математические модели отдельных процессов поляризации воды могут быть описаны с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений, достаточно однозначно вытекающих на базе соответствующих ньютоновских балансов сил. Таким образом, структурный синтез решаемой задачи можно считать полностью рассмотренным.

В свою очередь, для практической реализации имитационного моделирования исследуемых спектров необходимо определить конкретные численные значения каждого из динамических параметров – коэффициентов затухания  $\beta_i$  и частот собственных колебаний  $\omega_{0i}$  отдельных колебательных процессов. Следует учесть, что для воды различают следующие виды поляризации: упругая электронная, упругая ионная, упругая дипольная и релаксационная. Следовательно, параметрический синтез в рамках поставленной задачи должен производиться взаимосвязано для отдельных колебательных процессов каждого типа поляризации.

Наглядным представлением корректного определения параметров является количественное и качественное совпадение теоретических кривых и экспериментальных (контрольных) данных. В свою очередь оптимальные значения параметров могут быть найдены с помощью обширного набора традиционных численных методов и алгоритмов, применяемых на практике.

### Существующие численные методы решения задачи

Как было отмечено, для нахождения оптимальных значений динамических параметров  $\omega_0$  и  $\beta$  могут быть применимы традиционные численные методы.

Одним из них является генетический алгоритм подбора параметров [2]. Классический генетический алгоритм (также называемый элементарным, или простым генетическим алгоритмом) состоит из следующих шагов:

- 1) инициализация, или выбор исходной популяции генов;
- 2) оценка приспособленности генов в популяции – расчет функции приспособленности для каждого гена;
- 3) селекция генов – выбор тех, которые будут участвовать в создании потомков для следующей популяции или будут являться решением задачи;
- 4) проверка условия остановки алгоритма: если цель достигнута, решением будет являться результат, полученный на третьем шаге, если нет – выборка, полученная на 3 этапе, переходит на 5 этап;
- 5) применение генетических операторов – мутации и скрещивания; итерационный переход ко второму шагу.

Рассмотрим блок-схему описанного выше алгоритма (рис. 1).

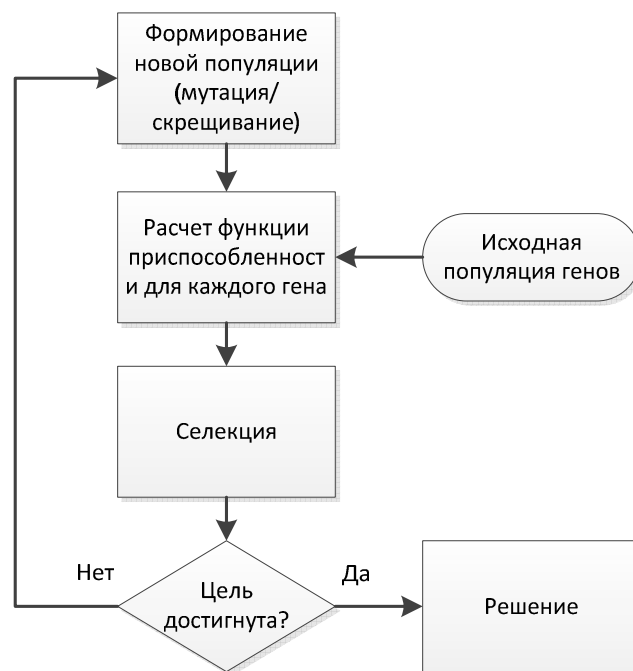


Рис. 1. Блок-схема генетического алгоритма.

Чаще всего в качестве генов выступают данные, которые нужно вычислить, или параметры модели, которые нужно подобрать для физической симуляции. При этом в рамках поставленной задачи генами выступают динамические параметры  $\omega_0$  и  $\beta$ . Согласно рис. 1, условием организации рассматриваемого вычислительного цикла является цель, в роли которой может быть дифференциальное уравнение определенного колебательного процесса. В свою очередь численное определение частоты  $\omega_0$  определяет вытекающее значение  $\beta$ , а общая оптимизация соответствующей математической модели обеспечивает наиболее точное совпадение теоретических и экспериментальных данных.

Однако генетические алгоритмы имеют ряд недостатков: во-первых, сложность программной реализации, во-вторых, дегенерацию «популяций», в-третьих, сложность оценки оптимальности решений.

Еще одним численным методом для решения задачи является метод наименьших квадратов. В этом случае проводится некоторая аппроксимирующая кривая, которая не проходит через экспериментальные точки, но в то же время отражает исследуемую зависимость, сглаживает возможные выбросы за счет погрешности эксперимента [3]. Пусть экспериментальные данные представлены в виде набора значений  $\omega_i$  и задают дискретную зависимость  $\varepsilon_{\text{Im}_i} = f(\omega_i)$ . Введем непрерывную функцию  $\varphi(\omega)$  для аппроксимации дискретной зависимости  $f(\omega_i)$ . Значения функции в узлах  $\omega_i$  будут отличаться на некоторую величину  $\sigma_i$ , т.е.  $\sigma_i = \varphi(\omega_i) - \varepsilon_{\text{Im}_i}$ . Отклонения  $\sigma_i$  могут принимать как положительные, так и отрицательные значения; чтобы не учитывать знаки, каждое отклонение возводится в квадрат, все квадраты отклонений суммируются по всем узлам:

$$Q = \sum_{i=0}^n \sigma_i^2 = \sum_{i=0}^n (\varphi(\omega_i) - \varepsilon_{\text{Im}_i})^2.$$

Таким образом, метод наименьших квадратов сводится к построению аппроксимирующей функции  $\varphi(\omega)$  из условия минимума величины  $Q$ . При этом наиболее распространенным является способ выбора функции  $\varphi(\omega)$  в виде линейной комбинации параметров  $p_k$ :

$$\varphi(\omega) = p_0\varphi_0(\omega) + p_1\varphi_1(\omega) + \dots + p_m\varphi_m(\omega),$$

где  $\varphi_0(\omega)$ ,  $\varphi_1(\omega)$ , ...,  $\varphi_m(\omega)$  – базисные функции.

Рассмотрим применение метода наименьших квадратов для мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости ионной поляризации (рис. 2).

Для построения показанных графиков использовалась библиотека Matlab – Spline toolbox [4], функции которой позволяют аппроксимировать ряд экспериментальных данных с помощью рассматриваемого алгоритма.

При этом в качестве базисных функций были выбраны полиномы 2-й, 3-й, 5-й и 6-й степеней.

Данный подход имеет ряд недостатков решения поставленной задачи.

Во-первых, количество поляризационных процессов усложняет поиск базисных функций. Прохождение теоретических кривых по экспериментальным данным всего диапазона должно обеспечиваться за счет итерационного возвращения к данным предыдущих процессов.

Во-вторых, как видно на рис. 2, кривые базисных функций не обеспечивают точное попадание в данные эксперимента, а увеличение степени увеличивает амплитуду, что также не дает оптимального результата.

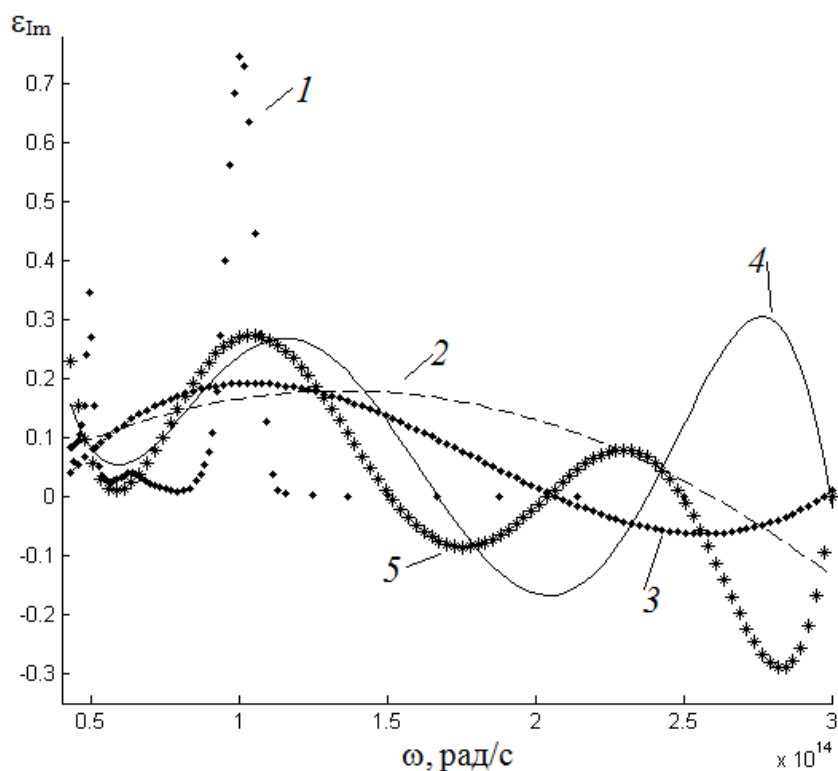


Рис. 2. Применение метода наименьших квадратов для графика:

- 1 – экспериментальные данные; 2 – аппроксимирующая кривая 2-го порядка;
- 3 – кривая 3-го порядка; 4 – кривая 5-го порядка; 5 – кривая 6-го порядка.

Еще одним численным методом, потенциально подходящим для дефиниции значений динамических параметров, может являться метод разложения теоретических кривых в спектр с помощью гауссианов или лоренцианов [5, 6].

Рассмотрим их применимость для моделирования мнимой части комплексной диэлектрической электронной поляризации воды (рис. 3).

Как видно из представленных графиков, типовые уравнения Лоренца и Гаусса не совпадают с порядком теоретических уравнений модели, следовательно, набор данных для динамических параметров, полученных при аппроксимации, не является оптимальным решением.

Таким образом, классические численные методы в общем случае не подходят для решения рассматриваемой задачи. Следовательно, необходимо разработать модифицированный алгоритм направленного перебора параметров.

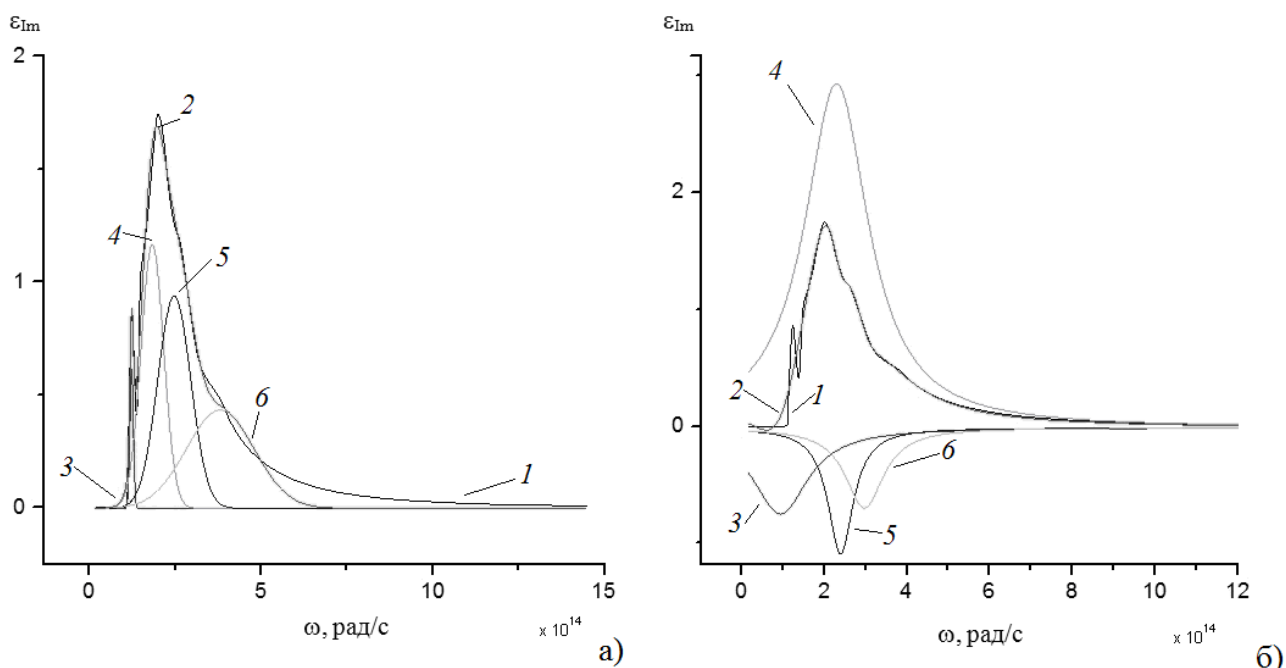


Рис. 3. Разложение экспериментальных данных с помощью уравнений Гаусса и Лоренца: а) гауссианы: 1 – экспериментальные данные; 2 – аппроксимирующая теоретическая кривая; 3 – кривая Гаусса 1-го пика; 4 – кривая 2-го пика; 5 – кривая 3-го пика; 6 – кривая 4-го пика; б) лоренцианы: 1 – экспериментальные данные; 2 – аппроксимирующая теоретическая кривая; 3 – кривая Лоренца 1-го пика; 4 – кривая 2-го пика; 5 – кривая 3-го пика; 6 – кривая 4-го пика.

### Предлагаемый вариант численного метода

Как было отмечено выше, традиционные численные методы не являются оптимальными в рамках решения поставленной задачи по тем или иным причинам. В качестве предлагаемого варианта рассматривается алгоритм направленного перебора параметров. В соответствии с этим методом вариант, у которого совокупность качественных параметров обеспечивает минимальное значение критерия оптимальности, считается наилучшим среди рассматриваемых вариантов.

Приведем преобразованный для решения поставленной задачи алгоритм метода направленного перебора параметров.

*Шаг 1.* Определяется первый максимум экспериментальной зависимости  $\varepsilon_{im\_эксп}(\omega)$ , следующий сразу за установившимися процессами упругой электронной поляризации. Кроме того, формируется контрольная группа точек, охватывающая не менее десяти контрольных значений в левую и правую сторону от выделенного максимума.

*Шаг 2.* Задается первое значение коэффициента пропорциональности  $k$  динамических параметров соответствующего поляризационного процесса ( $\beta = k\omega_0$ ) из диапазона  $0 < k \leq 0,707$  – для упругих процессов; из диапазона  $0,707 < k$  – в случае релаксационной поляризации.

*Шаг 3.* Рассчитывается частота собственных колебаний  $\omega_0$  по формуле

$$\omega_0 = \omega_p \sqrt{2\beta^2 - 1 + \sqrt{(2\beta^2 - 1)^2 + 3}}, \quad (1)$$

где  $\omega_p$  – максимум экспериментальной зависимости  $\varepsilon_{\text{Im\_эксн}}(\omega)$ , частота резонанса колебаний.

*Шаг 4.* Используя заданные вышеописанным образом  $\beta$  и  $\omega_0$ , рассчитываем теоретическую зависимость  $\varepsilon_{\text{Im\_теор}}(\omega)$  по уравнениям

$$\alpha_{\text{Im\_теор}}(\omega) = \frac{q^2}{m} \frac{2\beta\omega_0}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2\omega^2}; \quad (2)$$

$$\varepsilon_{\text{Im\_теор}}(\omega) = -\frac{2}{3\varepsilon_0} \sum \alpha_{\text{Im\_теор}} N,$$

где  $\alpha_{\text{Im\_теор}}(\omega)$  – мнимая часть комплексной поляризуемости;  $q$  и  $m$  – собственные параметры, характеризующие соответственно заряд и массу частицы;  $\omega$  – частотный диапазон, эквивалентный значениям частот, указанным в п.1;  $N$  – объемные концентрации частиц.

*Шаг 5.* Рассчитывается среднее значение частной ошибки

$$\Delta_{\text{ср}} = \frac{\sum_{i=1}^{21} (\varepsilon_{\text{Im\_эксн}_i} - \varepsilon_{\text{Im\_теор}_i})}{21}. \quad (3)$$

*Шаг 6.* Оценивается значение  $\Delta_{\text{ср}}$ . Если  $\Delta_{\text{ср}} < 0$ , то алгоритм прекращается, строится график  $\varepsilon_{\text{Im\_теор}}(\omega)$ . Иначе: текущее  $k$  увеличивается на 0,01, формируется соответствующее значение  $\omega_0$ , реализуется итерационный переход к шагу 3.

*Шаг 7.* Алгоритм повторяется до тех пор, пока не будут найдены оптимальные значения  $\beta$  и  $\omega_0$ . После того, как значения данных параметров станут известны, они сохраняются в специальном массиве и используются для задания динамических параметров текущего процесса.

*Шаг 8.* Определяется следующий максимум экспериментальной зависимости  $\varepsilon_{\text{Im\_эксн}}(\omega)$  и формируется контрольная группа точек аналогично шагу 1, алгоритм продолжается до тех пор, пока не будут рассмотрены все максимумы широкодиапазонного спектра оптического показателя поглощения воды.

На основании рассмотренного словесного описания алгоритма была сформирована блок-схема для его дальнейшей программной реализации (рис. 4).

Проведем практическую проверку общей работоспособности предлагаемого численного метода.

Процесс упругой электронной поляризации будем считать установившимся.

Ионная поляризация захватывает валентные и деформационные колебания, поэтому будем рассматривать численный метод для двух установленных максимумов.

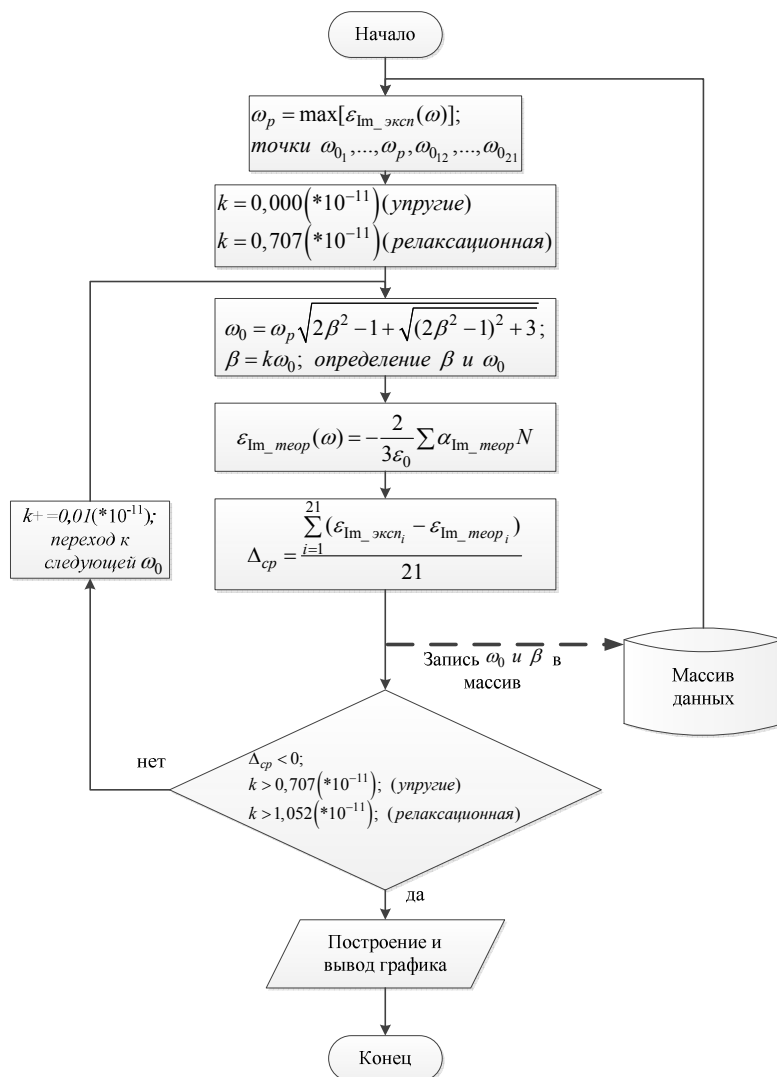


Рис. 4. Блок-схема предлагаемого варианта численного метода.

Численные значения массивов контрольных данных для ионной поляризации, валентных колебаний представлены в табл. 1, где частота валентного резонанса определена 11-й контрольной точкой.

Таблица 1

	Значения параметров										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\omega_0$	5.3819	5.4599	5.5402	5.6228	5.7080	5.7959	5.8864	5.9798	6.0763	6.1759	<b>6.2788</b>
$\beta$	0.0513	0.0521	0.0538	0.0546	0.0544	0.0553	0.0561	0.0570	0.0580	0.0589	<b>0.0599</b>
$\Delta_{cp}$	15.121	14.974	13.583	11.991	9.862	7.651	5.141	3.152	2.157	0.0725	<b>0.0253</b>
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	
$\omega_0$	6.3853	6.4954	6.6093	6.7273	6.8496	6.9765	7.1081	7.2448	7.8485	8.5621	
$\beta$	0.0609	0.0620	0.0630	0.0642	0.0653	0.0665	0.0678	0.0691	0.0749	0.0817	
$\Delta_{cp}$	-0.012	...	...	...	...	...	...	...	...	...	

Как следует из табл. 1, величина расхождения  $\Delta_{cp}$  стала отрицательной на 12-й итерации, однако на предыдущей ее значение по отношению к 0 остается достаточно велико, следовательно, уточним значения динамических параметров за счет уменьшения шага дискретизации.

После итерационного уточнения получаем:  $\omega_0 = 6.2901 \cdot 10^{14}$ ;  $\beta = 0.06 \cdot 10^{-17}$ .

Численные значения массивов контрольных данных для ионной поляризации в случае деформационных колебаний представлены в табл. 2, при этом частота соответствующего резонанса определена 11-й контрольной точкой.

Таблица 2

	Значения параметров										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\omega_0$	2.6530	2.6909	2.7299	2.7701	2.8114	2.8540	2.8979	2.9432	2.9899	3.0381	<b>3.0880</b>
$\beta$	0.0643	0.0652	0.0661	0.0671	0.0681	0.0691	0.0702	0.0713	0.0724	0.0736	<b>0.0748</b>
$\Delta_{cp}$	4.1256	3.2569	3.1498	2.9873	2.5874	2.0358	1.0245	0.4548	0.3236	0.2125	<b>0.0157</b>
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	
$\omega_0$	3.1394	3.1926	3.2477	3.3047	3.3637	3.4248	3.4882	3.5541	3.6224	3.6934	
$\beta$	0.0760	0.0773	0.0787	0.0800	0.0815	0.0829	0.0845	0.0861	0.0877	0.0895	
$\Delta_{cp}$	-0.059	...	...	...	...	...	...	...	...	...	

Как видно из табл. 2, величина  $\Delta_{cp}$  стала отрицательной на 12-й итерации, но на предыдущей ее значение остается достаточно большим, аналогично предыдущему после итерационного уточнения получаем:  $\omega_0 = 3.0967 \cdot 10^{14}$ ;  $\beta = 0.07510^{-16}$ .

Предварительная оценка порядка найденных численных значений динамических параметров обеих разновидностей упругой ионной поляризации молекулы воды может быть признана удовлетворительной. Таким образом, предлагаемый численный метод вполне работоспособен.

### Заключение

Численные методы направленного перебора динамических параметров поляризационных процессов различных веществ, рассмотренные в работах [7 – 11], а также результаты имитационного моделирования их диэлектрических и оптических спектров, представленные в [12 – 20], подтверждают эффективность данных алгоритмов направленного перебора параметров в рамках решаемых задач, что должно существенно повысить эффективность имитационного моделирования.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Еремин И.Е., Еремина В.В., Онищенко Е.Ю. Непрерывно-детерминированная модель широкодиапазонных спектров воды. I // Информатика и системы управления. – 2016. – № 4(50). – С. 44-57.
2. William H. Press Numerical recipes: the art of scientific computing. – Cambridge University Press, 2002.
3. Элементы численных методов и обработки экспериментальных данных. Учебное пособие / Б.А. Балаганский, В.Г. Боровиков, Л.Н. Гаджала, Г.Г. Туякова, В.А. Соловьев. – Чита: ООП ЧитПИ, 1992.
4. Потемкин В.Г. Система MatLAB 5 для студентов. Справочное пособие. – М.: Диалог-



МИФИ. 1998.

5. *Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., Юзюк Ю.И.* Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Анализ и обработка спектров: Учебно-методическое пособие. – Ростов-н/Д: Южный федеральный университет, 2007.
6. *Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю.* Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. – Астрахань. 2007.
7. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А.* Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
8. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – № 3(29). – С. 60-69.
9. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С.* Моделирование электронно-атомной структуры конденсированных диэлектриков. – Благовещенск: АмГУ. 2006.
10. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Методика расчета экранирующих вкладов оптических электронов аниона кислорода // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2009. – № 4(15). – С. 17-24.
11. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Ланина С.Ю.* Устранение катастрофы Мосотти с позиций системного подхода // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2010. – № 2. – С. 284-297.
12. *Жилиндина О.В., Еремин И.Е.* Моделирование упругой электронной поляризации кордиеритовой керамики Л-24 // Стекло и керамика. – 2012. – № 7. – С. 30-32.
13. *Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю.* Моделирование оптического спектра воды в области упругих видов поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 2(6). – С. 9-14.
14. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.
15. *Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю.* Моделирование оптического спектра воды в области упругой ионной поляризации // Информатика и системы управления. – 2004. – № 2(8). – С. 32-36.
16. *Еремина В.В.* Имитационные модели релаксационной поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2008. – № 1(15). – С. 38-45.
17. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
18. *Еремин И.Е.* Кибернетическая теория поляризации щелочно-галоидных кристаллов. III // Информатика и системы управления. – 2009. – № 3(21). – С. 20-26.
19. *Еремин И.Е., Сычева М.П.* Альтернативный способ визуализации электронной структуры ионного кристалла // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2010. – № 3(18). – С. 73-80.
20. *Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Построение модели процесса поляризации диэлектриков с помощью обратных связей // Информатика и системы управления. – 2001. – № 1. – С.45-53.

*E-mail:*

*Плутенко Андрей Долиевич – plutenko@bk.ru;*

*Еремина Виктория Владимировна – banysheva@mail.ru.*