

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики  
Кафедра информационных и управляющих систем  
Направление подготовки 09.04.01 – Информатика и вычислительная техника  
Магистерская программа компьютерное моделирование

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ

Зав. кафедрой

\_\_\_\_\_ А.В. Бушманов  
« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2016 г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

на тему: Компьютерное моделирование электронной поляризации щелочно-галлоидных кристаллов

Исполнитель

студент группы 453ом

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

Т.Е.Тюстина

Руководитель

доцент, канд. физ.-мат.  
наук

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

В.В.Еремина

Руководитель

магистерской программы

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

Е.Л.Еремин

Нормоконтроль

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

В.В.Еремина

Рецензент

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

А.Г.Масловская

Рецензент

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

А.А.Божук

Благовещенск 2016

## РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 93 с., 27 рисунков, 4 таблиц, 21 источников, 3 приложения

АСНИ, ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ, ПРОЦЕСС УПРУГОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ, ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ, ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, МЕТОДИКА СЛЕЙТОРА, MATLAB

В настоящее время существует множество методик получения характеристик материалов, основой которых является эксперимент. Данные методики зачастую сложны, требуют значительных затрат времени и ресурсов. Альтернативой их являются методики, базирующиеся на использовании математического моделирования.

Сложность математических моделей требует выполнения большого объема задач, что приводит к необходимости использования вычислительной техники. В этих условиях особую актуальность приобретают вопросы создания специализированных программных продуктов, позволяющих сократить время проведения моделирования, а так же повысить точность расчетов.

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>			
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>				
<i>Разраб.</i>		Тюстина Т.Е.			<b>КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ</b>	<i>Лит.</i>	<i>Лист</i>	<i>Листов</i>
<i>Пров.</i>		Еремина В.В.				У	3	93
<i>Консульт.</i>						<b>АмГУ кафедра ИУС</b>		
<i>Н. контр.</i>		Еремина В.В.						
<i>Зав. каф.</i>		Бушманов А.В.						

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
1 Общая характеристика	7
1.1 Общая характеристика АСНИ	7
1.2 Основные понятие об электронных спектрах	13
1.3 Диэлектрическая проницаемость вещества	14
1.4 Процесс упругой электронной поляризации	16
2 Характеристика обеспечивающих подсистем	24
2.1 Математическое обеспечение	24
2.1.1 Моделирование линейных динамических систем	24
2.1.2 Методика расчета собственных параметров	29
2.2 Программное обеспечение	31
2.3 Техническое обеспечение	34
3 Разработка программного продукта	36
3.1 Алгоритм расчета	36
3.2 Программный код	38
3.3 Результаты моделирования	45
3.4 Руководство пользователя	60
3.4.1 Установка ПО	60
3.4.2 Использование ПО	61
Заключение	63
Список используемой литературы	64
Приложение А Техническое задание	66
Приложение Б Листинг программы	73
Приложение В Сертификаты об участии в конференции	92

## НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В настоящей магистерской диссертации использованы ссылки на следующие стандарты:

ГОСТ 24.103-84 Автоматизированные системы управления. Основные положения.

ГОСТ 24.104-85 Автоматизированные системы управления. Общие требования.

ГОСТ 34.602-89 Информационная технология. Комплекс стандартов на автоматизированные системы. Техническое задание на создание автоматизированной системы.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		4

## ОПРЕДЕЛЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

АЧХ – Амплитудно-частотная характеристика

ВЧХ – Вещественная частотная характеристика

МЧХ – Мнимая частотная характеристика

ОС – Операционная система

ПО – Программное обеспечение

ППП – Пакет прикладных программ

ФЧХ – Фазовая частотная характеристика

ЭВМ – Электронно-вычислительная машина

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		5

## ВВЕДЕНИЕ

Существует множество эмпирических методик выявления характеристик материалов, основой которых является эксперимент, которые часто довольно сложны, а также требуют значительных затрат времени и ресурсов. Их альтернативой являются методики, основанные на использовании математического или имитационного моделирования.

Сложность математических моделей требует выполнения большого объема расчетов, что приводит к необходимости использования вычислительной техники. В этих условиях особую актуальность приобретают вопросы создания специализированных программных продуктов, позволяющих сократить время проведения моделирования, а так же повысить точность расчетов.

Сложность химического состава современных конструкционных диэлектриков, разнообразие происходящих в них поляризационных процессов, а также разветвленность используемых математических моделей существенно затрудняют выполнение необходимых вычислений. В этих условиях особую актуальность приобретают вопросы разработки компьютерных программ, позволяющих значительно ускорить моделирование требуемых характеристик с желаемой точностью.

Целью работы является создание на основе имеющихся математических моделей удобного программного средства, которое позволит моделировать эксплуатационные характеристики диэлектриков в процессе упругой электронной поляризации. Разрабатываемое программное средство должно быть выполнено в виде toolbox'а системы MATLAB. Математический пакет MATLAB является одним из старейших, относительно времени своего появления на рынке программных продуктов, и тщательно проработанных систем автоматизации математических расчетов.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		6

# 1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА

## 1.1 Общая характеристика АСНИ

Один из важных факторов ускорения научно-технического прогресса является повышение эффективности прикладных и фундаментальных научных исследований. Автоматизация научных исследований имеет особое значение в повышении эффективности науки, так как получают более точные и полные модели исследуемых объектов и явлений, изучаются сложные объекты и процессы, ускоряется ход научных исследований и снижает их трудоемкость.

Наиболее эффективно применение автоматизированных систем научных исследований (АСНИ) в тех областях науки и техники, в которых используются большие объемы информации. К ним относятся: ядерная физика; радиофизика и электроника; физика твердого тела и плазмы; космические исследования; астрономия и радиоастрономия; геология и геофизика; биология и медицина; экологические исследования, прогнозирование погоды и стихийных бедствий, исследования Мирового океана; исследования сложных технологических процессов в промышленности; химическая технология; исследования и разработки в области энергетики; экономика, право и языкознание, социальные исследования; натурные и стендовые испытания сложных технических объектов; исследования и разработки в области транспортных коммуникаций, сетей вычислительных машин и сетей связи.

АСНИ и комплексных испытаний образцов новой техники обеспечивают получение максимального народнохозяйственного эффекта, который образуется от повышения производительности труда в исследовательских подразделениях, увеличения технико-экономических характеристик разрабатываемых объектов, уменьшения дорогостоящих натурных испытаний, исключения некоторых стадий опытно-конструкторских работ, что ведет к снижению затрат на разработку объектов новой техники.

От других типов автоматизированных систем, АСНИ отличаются характером информации, получаемой на выходе системы: обработанные или обобщенные экспериментальные данные и полученные на их основе математические модели исследуемых объектов. Точность и адекватность этих моделей обеспечивается комплек-

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		7

сом программных и методических средств системы. Для изучения поведения объектов и явлений в АСНИ могут использоваться готовые математические модели. АСНИ это системы получения или исследования моделей, которые используются в других типах автоматизированных систем для управления, проектирования или прогнозирования.

### Определение АСНИ

Автоматизированная система научных исследований это программно-аппаратный комплекс на базе средств вычислительной техники, предназначенный для получения, уточнения и апробации математических моделей исследуемых объектов, явлений, процессов.

Для АСНИ характерно:

- ключевая роль средств вычислительной техники;
- единство программных и аппаратных средств;
- ориентация АСНИ на получение математических моделей в виде формул, таблиц, графиков.

Программно-аппаратный комплекс АСНИ включает средства методического, программного, технического, организационно-правового, информационного обеспечения.

Через аппаратуру сопряжения, входящую в состав программно-аппаратного комплекса осуществляется взаимодействие исследуемого объекта, явления или процесса с АСНИ.

Средствами организационно-правового обеспечения системы регламентируется взаимодействие подразделений научно-исследовательской организации или предприятия с АСНИ.

### Цели создания АСНИ

В организациях и на предприятиях АСНИ создаются в целях:

- обеспечения высоких темпов НТП;
- получения математических моделей исследуемых объектов и применения этих моделей для проектирования, прогнозирования и управления и повышения на этой основе эффективности и качества научных исследований;

- сокращения сроков, уменьшения трудоемкости научных;
- повышения эффективности разрабатываемых объектов и уменьшения затрат на их создание;

- получения качественно новых научных результатов.

Достижение целей создания АСНИ обеспечивается путем:

- систематизации и совершенствования процессов научных исследований на основе применения математических методов и средств вычислительной техники;

- повышения качества управления научными исследованиями;

- применения эффективных математических методов организации и планирования экспериментов;

- комплексной автоматизации исследовательских работ в научно-исследовательской организации;

- автоматизации трудоемких работ;

- использования методов обработки и представления результатов научных в виде математических моделей;

- замены натурных испытаний математическим моделированием.

Составные части АСНИ

К числу составных частей АСНИ относят:

1 Техническое обеспечение АСНИ, которое включает комплекс используемых технических средств: измерительную аппаратуру, ЭВМ, устройства связи с объектом и другие устройства, экспериментальную установку.

2 Научно-методическое обеспечение включает в себя различные методы, методики, способы и алгоритмы проведения эксперимента, обработки и представления экспериментальных данных.

3 Информационное обеспечение АСНИ – справочные и обучающие системы, информационно-поисковые системы, базы данных, программные средства, которые обеспечивают работу с имеющейся и поступающей информацией.

4 Программное обеспечение АСНИ – документы с текстами программ, различные эксплуатационные документы, программы на машинных носителях, эффективное взаимодействие пользователей с техническими ресурсами АСНИ.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		9

5 Методическое обеспечение АСНИ – дополнительная аппаратура, методические инструкции и материалы, которые обеспечивают необходимые методические характеристики системы, достоверность и точность измерительной информации.

6 Организационно-правовое обеспечение – методические и руководящие материалы, приказы, положения, квалификационные требования, инструкции для пользователей, регламентирующие порядок эксплуатации и развития АСНИ, взаимодействие пользователей с системой, способы организации доступа исследователей к ресурсам коллективного пользования.

#### Типовая структура АСНИ

Для исследования разных элементов необходимы и разные технические базы в рамках АСНИ. Для реализации самых трудоемких элементов исследований при рациональных затратах на создание АСНИ современные системы строятся по многоуровневому принципу. Структура АСНИ содержит 3 уровня: объектный, инструментальный и сервисный.

Для объектного уровня характерно связь с объектом исследований.

Его назначение состоит в управлении экспериментальной установкой, регистрации данных, их оперативной обработки, накопления и представления основных результатов исследователю. На этот уровень возлагают операции, связанные с регистрацией и документированием данных, проверкой экспериментального оборудования.

Инструментальный уровень предназначен для проведения сложной обработки экспериментальных данных и научных расчетов, не требующих больших мощностей вычислительного оборудования. На этом уровне осуществляется отработка различных алгоритмов и программ, составленных пользователем, накопление и длительное хранение информации, которая была получена в результате исследований.

Сервисный (базовый) уровень используется для осуществления сложных научных расчетов, обработки и представления информации, моделирования, формирования баз данных.

Трехуровневая организация АСНИ позволяет предоставить исследователю

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		10

необходимые средства вычислительной техники на всех этапах исследования и сократить затраты на создание системы.

### Функции АСНИ

Основная функция АСНИ состоит в получении результатов научных исследований путем автоматизированной обработки экспериментальных данных, планировании и управлении экспериментом, получении и исследовании моделей объектов, процессов и явлений на основе математических методов и автоматизированных процедур.

Автоматизированные процедуры в АСНИ состоят в том, что путем взаимодействия пользователя с АСНИ в режиме диалога осуществляются исследования объектов, процессов, явлений, а также исследуются математические модели.

В АСНИ применяются процедуры планирования и управления экспериментом. При этих процедурах использование моделирования корректирует условия эксперимента. Экспериментальная информация используется для выбора математической модели из некоторого множества таких моделей.

Функционирование АСНИ должно обеспечивать получение документов, которые содержат результаты научных исследований и рекомендации по использованию этих результатов для проектирования, управления, прогнозирования.

Подтверждение или отклонение гипотез или совокупность законченных математических моделей, которое удовлетворяет заданным требованиям является результатом функционирования АСНИ.

### Принципы построения АСНИ

При создании АСНИ применяются следующие принципы:

1 Комплексность – направленность АСНИ на решение комплекса задач, стоящих перед исследователем; обеспечение возможности применения АСНИ на различных этапах исследований; реализация основных функций, возлагаемых на такого рода системы.

2 Последовательное расширение сферы автоматизации научных исследований - внедрение средств автоматизации в те области, где получение значительных результатов невозможно без использования средств автоматизации; расширение

контингента пользователей АСНИ.

3 Многоуровневая организация – при построении современных АСНИ выделяется несколько структурных уровней, ориентированных на решение однородных по сложности исследовательских задач, требующих соответствующих технических средств и организации режимов работы.

4 Применение единой методологии создания и развития АСНИ – методология должна учитывать достижения в связанных областях науки и техники и использовать влияние тенденций развития технологии, техники, производства, и автоматизации научных и производственных экспериментов.

5 Системный подход к проектированию – предполагает проведение проектирования на основе системного анализа, который включает решение комплекса экономических, технических, и организационных вопросов, решение которых в совокупности обеспечит создание АСНИ оптимальным способом.

6 Коллективность использования – АСНИ строятся как системы коллективного пользования, т. е. организацию коллективного доступа к наиболее сложным системам АСНИ и объединение усилий при создании и использовании АСНИ, когда отдельные удачные разработки становятся общедоступными и могут применяться всеми пользователями системы.

7 Адаптивность – предполагает легкую приспособляемость АСНИ к изменению решаемых с ее помощью задач, достижение большей гибкости АСНИ.

8 Разработка критериев эффективности АСНИ – должна позволить дать объективную оценку экономического эффекта, получаемого от внедрения АСНИ.

9 Интеграция АСНИ – включающая в себя использование технических ресурсов АСНИ для решения задач иного характера (организационно-управленческих, учебных, фоновых, расчетных) и тесное взаимодействие с другими автоматизированными системами (АСУТП, САПР, АСУП).

10 Типизация АСНИ: в качестве основы для создания АСНИ должны использоваться типовые, специализированные измерительно-вычислительные или проблемно-ориентированные комплексы. Особое внимание должно быть уделено созданию типовых программно-управляемых модульных систем для управления

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		12

сложными объектами и сбора информации, типовой аппаратуре сопряжения ЭВМ с объектом исследования.

АСНИ получили широкое распространение в молекулярной химии, биохимии, физике элементарных частиц, минералогии, астрономии и др. науках. Таким образом в результате применения АСНИ: уменьшается время проведения исследования; усиливается контроль за ходом эксперимента; увеличивается достоверность и точность результатов; повышается качество и информативность эксперимента; сокращается количество участников эксперимента и др.

## 1.2 Основные понятие об электронных спектрах

Электронные спектры – это спектры поглощения, испускания и флюоресценции. Спектр поглощения обычно возникает при переходе одного электрона с занятой молекулярной орбитали на свободную вплоть до отрыва (спектр ионизации). Кванты, вызывающие электронный переход, велики: частоты переходов лежат в видимой и ультрафиолетовой областях. Для молекулы возможен ряд возбужденных состояний, каждое из которых описывается своей потенциальной кривой (для многоатомной молекулы - потенциальной поверхностью). Возбужденному состоянию отвечает обычно меньшая энергия диссоциации и большее межъядерное расстояние. При переходе в возбужденное отталкивательное состояние молекула диссоциирует.

Квант, возбуждающий электронный переход, одновременно вызывает изменения колебательной и вращательной энергий. Соответствующая частота в спектре определяется по формуле:

$$\nu = \nu_{\text{кол}} + \nu_{\text{вр}} + \nu_{\text{эл.}}$$

В результате электронный спектр содержит богатейшую информацию об электронных, колебательных и вращательных состояниях молекул. Он сложен и состоит из нескольких серий полос. Каждая серия отвечает определенному электронному переходу. Положение отдельных полос в серии определяется переходами между разными колебательными состояниями, а тонкая структура вращательной полосы - вращательными переходами. Если удастся разрешить тонкую структуру полос, то из электронного спектра можно извлечь ту информацию, которую получают из

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		13

вращательных и колебательно-вращательных спектров. Важно и то, что при электронном переходе момент перехода отличен от нуля. Поэтому в электронном спектре активны гомоядерные молекулы  $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $O_2$  и другие молекулы, неактивные в ИК-спектре. В электронном спектре менее строги и некоторые правила отбора. Запрещены переходы между состояниями одинаковой четности  $g \leftarrow / \rightarrow g$  и  $u \leftarrow / \rightarrow u$ .

Электронные спектры позволяют обнаружить свободные радикалы и другие промежуточные продукты сложных газовых реакций. Молекулярные константы, полученные из спектров, дают возможность определять теплоты образования молекул из простых веществ и по формулам статистической термодинамики рассчитывать химическое равновесие в реакциях с учетом газов, а значит, и управлять процессами горения и другими высокотемпературными реакциями.

### 1.3 Диэлектрическая проницаемость вещества

Фарадей в своих экспериментах установил, что при заполнении диэлектриком пространства между пластинами конденсатора емкость последнего увеличивается в  $\epsilon$  раз. Значение величины  $\epsilon$ , которую называют диэлектрической проницаемостью, зависит только от свойств диэлектрика. Емкость  $C$  конденсатора связана с зарядом  $Q$  на его пластинах и разностью потенциалов  $V$  соотношением

$$C = Q/V, \quad (1)$$

Таким образом, увеличение емкости при постоянном заряде на электродах означает, что разность потенциалов уменьшается. (Предполагается, что конденсатор не подключен к источнику тока и электропроводность диэлектрика равна нулю, так что заряды не стекают.) Следует, что электрическое поле внутри конденсатора стало меньше, несмотря на то, что заряд на пластинах не изменился. Уменьшение напряженности поля можно объяснить, допустив, что на одной поверхности диэлектрика индуцируется положительный заряд, а на другой – отрицательный. Эти заряды нейтрализуют часть полного заряда на обкладках конденсатора, что и уменьшает напряженность поля в диэлектрике по сравнению с вакуумом.

Введем некоторые макроскопические параметры, характеризующие поляризацию диэлектрика в электрическом поле.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		14

Под действием электрического поля частицы, составляющие диэлектрик (атомы, ионы, молекулы), превращаются в диполи. Это связано со смещением в направлении поля и против положительных и отрицательных зарядов, из которых построены эти частицы. Полюса положительные всех диполей оказываются сдвинутыми в направлении поля, а отрицательные – в противоположном направлении. Таким образом, в диэлектрике, помещенном в электрическом поле, возникает электрический момент (дипольный момент), который связан с дипольными моментами отдельных частиц и их плотностью. Величину, равную отношению электрического момента диэлектрика к его объему, называют поляризуемостью. В общем случае

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i, \quad (2)$$

где  $\vec{p}_i$  – элементарные электрические моменты, возникающие в диэлектрике под действием поля;

$N$  – объемная плотность диполей.

В изотропных диэлектриках все элементарные дипольные моменты имеют одно и то же направление – направление поля. В этом случае векторную сумму в (2) можно заменить скалярной. Если смещение зарядов составляет  $\Delta x$ , то

$$P = N e \Delta x, \quad (3)$$

Таким образом, поляризуемость можно вычислить, если известны значения элементарных дипольных моментов и плотность диполей.

Кроме поляризуемости вводят еще такие макроскопические характеристики, как напряженность  $\vec{E}$  электрического поля в диэлектрике и электрическая индукция  $\vec{D}$ .  $\vec{E}$  и  $\vec{P}$  связаны соотношениями:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}, \quad (4)$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная ( $\varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$ )

Для большинства диэлектриков в слабых и умеренных полях  $\varepsilon$  не зависит от  $\vec{E}$  (по крайней мере, в полях с напряженностью до  $\sim 10^6$  В/м). В таком случае из (4) и (5) получим

$$\vec{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon - 1) \vec{E}. \quad (6)$$

Величину

$$\chi = \varepsilon - 1, \quad (7)$$

Называют относительной диэлектрической восприимчивостью. В изотропных диэлектриках векторы  $\vec{D}$ ,  $\vec{E}$  и  $\vec{P}$  имеют одно и то же направление, так что  $\chi$  и  $\varepsilon$  – простые числа.

Очевидно, что макроскопические свойства диэлектрических материалов обусловлены макроскопическими процессами, проходящими в них при наложении электрического поля. Существует несколько таких процессов, приводящих к возникновению поляризации: смещение электронных оболочек атомов и ионов, смещение положительных ионов относительно отрицательных, ориентация в электрическом поле молекул, обладающих постоянным дипольным моментом.

Для того, чтобы характеризовать различные виды поляризации, необходимо знать не только природу частиц, обуславливающих поляризацию, но и особенности межатомных и межмолекулярных взаимодействий. Если силы, стремящиеся вернуть в исходное положение смещенные электрическим полем частицы, носят квазиупругий характер, то говорят об упругой поляризации.

#### **1.4 Процесс упругой электронной поляризации**

Проблемы имитационного моделирования динамических систем, возникающие при решении ряда прикладных задач, в том числе характерных и для теоретической физики, по-прежнему остаются весьма актуальными. При этом качество

результатов или эффективность вычислительных экспериментов существенно зависит от уровня адекватности теоретической модели реальному физическому процессу.

Предлагается, для описания процесса поляризации воспользоваться, наряду с традиционными, кибернетической моделью, позволяющей описать свойства физической системы с помощью обратных связей.

Известно, что количественной мерой результата поляризации материала служит его поляризованность –  $P$ , которую можно описать выражением:

$$P = E \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (8)$$

где  $E$  – напряженность электрического поля внутри диэлектрика;

$K$  – число разновидностей индуцированных диполей;

$n_i$  и  $\alpha_i$  – соответственно концентрации и поляризуемости частиц.

Для вычисления диэлектрической проницаемости материала  $\varepsilon$ , традиционно используются соотношения, связывающие  $\varepsilon$  с поляризуемостями частиц, составляющих диэлектрик.

Следует отметить ради полноты изложения, что при вычислении диэлектрической проницаемости газов обычно используется формула Борна:

$$\varepsilon = 1 + \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (9)$$

где  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная ( $8,85418782 \cdot 10^{-12}$  Ф/м), при выводе которой предполагается, что  $E$  определяется напряженностью среднего макроскопического поля  $E_{cp}$  в материале:

$$E = E_{cp} = E_0 - E_1 = E_0 - \frac{P}{\varepsilon_0}, \quad (10)$$

где  $E_0$  – напряженность внешнего поля;

$E_1$  – напряженность деполяризующего поля, обусловливаемого наведенными поверхностными зарядами.

Действительно, если осуществить замену  $E_0 = \varepsilon E$ , то в результате преобразований получим соотношение:

$$E_{cp} = \frac{P}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)}, \quad (11)$$

из которого, с учетом выражения, будет следовать соотношение.

Итак, расчет диэлектрической проницаемости конденсированных материалов обычно осуществляется по формуле Клаузиуса-Мосотти:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (12)$$

Здесь, согласно модели Лорентца, величина  $E$  определяется не только напряженностью среднего макроскопического поля, но и напряженностями внутренних полей:

$$E = E_{cp} + E_2 + E_3, \quad (13)$$

где  $E_2$  – напряженность поля, создаваемого поляризованными молекулами, окружающими сферу Лорентца;

$E_3$  – напряженность поля, образованного молекулами, находящимися внутри сферы.

Значения напряженностей  $E_2$  и  $E_3$  определяются следующим образом:

$$E_2 = \frac{P}{3\varepsilon_0}, \quad E_3 = 0. \quad (14)$$

Можно записать соотношение:

$$E = \frac{P}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)} + \frac{P}{3\varepsilon_0} = \left( \frac{E}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)} + \frac{E}{3\varepsilon_0} \right) \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (15)$$

из которого непосредственно вытекает формула Клаузиуса-Мосотти.

При исследовании частотных характеристик материала, его диэлектрическую проницаемость принято рассматривать как комплексную функцию  $\varepsilon(j\omega)$ , принимают вид, во-первых, модели Борна

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega), \quad (16)$$

и, во-вторых, модели Клаузиуса-Мосотти-Лорентц-Лоренца

$$\frac{\varepsilon(j\omega) - 1}{\varepsilon(j\omega) + 2} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega), \quad (17)$$

где  $\alpha_k(j\omega)$  – так называемые комплексные поляризуемости частиц вида:

$$\alpha_k(j\omega) = \frac{q_k^2 / m_k}{\omega_{0k}^2 - \omega^2 + j2b_k \omega}, \quad (18)$$

При получении явного вида функций  $\alpha_k(j\omega)$ , используется математическое описание процесса поляризации, в котором участвует отдельно взятая заряженная частица. Если же ограничиться рассмотрением только одного вида поляризации – упругой электронной, то этот процесс можно описать системой уравнений:

$$\frac{d^2 \mu_k(t)}{dt^2} + 2b_k \frac{d\mu_k(t)}{dt} + \omega_{0k}^2 \mu_k(t) = \frac{q_k^2}{m_k} E_0(t), k = \overline{1, K}, \quad (19)$$

где  $k$  – индекс разновидности иона;

$K$  – их число;

$\mu_k(t)$  – индуцированный дипольный момент электронного облака отдельного иона;

$\omega_{0k}$  и  $b_k$  – собственная частота и коэффициент затухания колебаний облака;

$q_k$  и  $m_k$  – его заряд и масса;

$E_0(t)$  – напряженность внешнего переменного электрического поля с малой амплитудой.

Электронная упругая поляризация является наиболее общим видом поляризации.

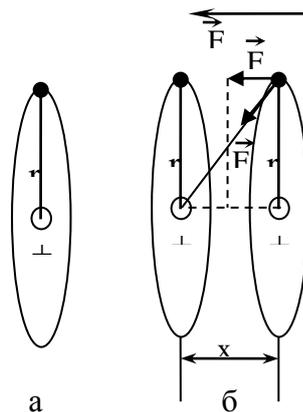


Рисунок 1– Поляризация водородоподобного атома

а – в отсутствии внешнего поля,

б – во внешнем электрическом поле

Она наблюдается во всех диэлектриках независимо от их агрегатного состояния (газ, жидкость, твердое тело) и структуры (кристалл, аморфное вещество). Атомы, из которых состоит диэлектрик, под действием внешнего электрического поля превращаются в электрические диполи вследствие того, что электронные оболочки и ядра смещаются относительно друг друга. Поскольку масса ядер во много

раз больше массы электронов, то практически следует говорить о смещении электронов. Время установления электронной упругой поляризации исключительно мало:  $10^{-16}$ – $10^{-17}$  с. Таким образом, электронная упругая поляризация успевает устанавливаться в переменных полях высоких частот. Период световых колебаний составляет  $10^{-14}$ – $10^{-15}$  с, так что запаздывание электронной поляризации наблюдается лишь в ультрафиолетовой области спектра, где частота электромагнитных колебаний  $10^{16}$ – $10^{17}$  Гц.

Механизм электронной упругой поляризации проще всего понять на примере водородоподобного атома. Если внешнее поле  $E=0$ , то центр положительного заряда в атоме совпадает с центром отрицательного (рисунок 1, а). Под действием электрического поля электронная оболочка сместится на некоторое расстояние, т. е. сместится геометрический центр отрицательного заряда. Обозначим смещение  $x$  (рисунок 1, б). Атом находится в равновесии, если

$$eE = kx, \quad (20)$$

Предполагается, что возвращающая сила  $F_1$  является упругой с коэффициентом упругости  $k$ . Смещение центров зарядов приводит к образованию электрического дипольного момента  $P = ex$ . С учетом того, что в равновесии  $x = \frac{eE}{k}$ , имеем

$$P = \frac{e^2}{k} E, \quad (21)$$

Индукцированный дипольный момент пропорционален напряженности поля. Коэффициент пропорциональности между  $P$  и  $E$  обычно обозначают  $\alpha_e$  и называют электронной поляризуемостью. Следует, что:

$$\alpha_e = e^2 / k, \quad (22)$$

Выше мы предположили, что возвращающая сила является квазиупругой, т. е.

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		21

$F_1=kx$ . То, что при малых смещениях  $x$  это так, нетрудно показать на примере об-суждаемой водородоподобной модели атома. Из рисунка 1 видно, что воз-вращающая сила представляет собой проекцию силы притяжения между ядром и электроном на направление напряженности поля, т. е.

$$F_1 = F \cdot \sin \alpha \quad , \quad (23)$$

Поскольку

$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r^2 + x^2)} \quad , \quad (24)$$

$$\sin \alpha = \frac{x}{\sqrt{r^2 + x^2}} \quad , \quad (25)$$

то

$$F = \frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0(r^2 + x^2)^{3/2}} \quad . \quad (26)$$

Внешние поля обычно значительно меньше внутреннего электрического поля в атоме. Поэтому смещение  $x$  невелико. При  $x \ll r$  получим

$$F_1 = \frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad , \quad (27)$$

т. е. действительно возвращающая сила пропорциональна смещению, а, что коэффициент упругости

$$k = \frac{F_1}{x} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad , \quad (28)$$

Подставляя полученное выражение для, найдем

$$\alpha_e = 4\pi\epsilon_0 r^3 \quad , \quad (29)$$

Видим, что электронная поляризуемость атома определяется его радиусом.

Интересно сравнить экспериментальные значения  $\alpha_e$  с вычисленными. Рассмотрим, например, поляризуемость атомов аргона.

Экспериментальное значение  $\alpha_e$  для этого газа равно

$$1.83 \cdot 10^{-40} \text{ Ф} \cdot \text{м}^2$$

Атомный радиус аргона

$$r = 1,91 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

Подставляя это значение, находим

$$\alpha_e = 7 \cdot 10^{-40} \text{ Ф} \cdot \text{м}^2$$

Вычисленное значение  $\alpha_e$ , конечно, больше наблюдаемого на опыте. Тем не менее, одинаковый порядок этих двух величин дает основание считать рассматриваемую картину явления электронной поляризации в общих чертах правильной.

Формула (29) неприменима для сложных атомов. Однако ясно, что поляризуемость таких атомов также должна сильно возрастать с увеличением радиуса электронных оболочек, поскольку связь между ядром и электроном при этом уменьшается. Наиболее слабо связаны с ядром валентные электроны, поэтому они испытывают под действием поля наибольшее смещение.

Для многих диэлектриков (ионные кристаллы, аморфные вещества) важно знать электронную поляризуемость ионов. Поляризация ионов имеет приблизительно тот же характер, что и поляризация атомов. Наименьшей поляризуемостью обладают такие ионы, у которых электронная оболочка соответствует электронной оболочке инертного газа. Имеется прямая связь между поляризуемостью иона и потенциалом ионизации. Значение потенциала ионизации зависит от энергии связи электрона с ядром. Чем выше эта энергия, тем устойчивее электронная оболочка, т. е. тем выше потенциал ионизации и меньше поляризуемость.

## 2 ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ ПОДСИСТЕМ

### 2.1 Математическое обеспечение

#### 2.1.1 Моделирование линейных динамических систем

Дифференциальные уравнения

Наиболее часто в качестве математической модели объекта управления используются обыкновенные дифференциальные уравнения, которые могут быть записаны в различной форме [2, с. 78/.

Линейные многоканальные объекты обычно описывают системой дифференциальных уравнений первого порядка, представленной в векторно-матричном виде:

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad (30)$$

где  $x \in R^n$  – вектор состояния;

$n$  – порядок объекта;

$u \in R^m$  – вектор управляющих воздействий,  $m \leq n$ ;

$A$  – квадратная матрица коэффициентов;

$B$  – прямоугольная матрица коэффициентов.

Уравнения (30) называются дифференциальными уравнениями состояния.

Выходные переменные объекта изменяются в соответствии с уравнением выхода

$$y = Cx \quad (31)$$

где  $y \in R^m$  – вектор выхода;

$C$  – прямоугольная матрица коэффициентов.

Уравнения (30) и (31) описывают линейный стационарный объект. Если его параметры меняются с течением времени, то такой объект называется нестационарным, а математическая модель имеет вид уравнений (30) – (31), где элементы матриц являются функциями времени:  $A=A(t)$ ;  $B=B(t)$ ;  $C=C(t)$ .

Для описания одноканального объекта обычно используется скалярное дифференциальное уравнение:

$$y^{(n)} + a_n y^{(n-1)} + \dots + a_2 y^{(1)} + a_1 y = bu, \quad (32)$$

которое также может быть приведено к описанию типа (30) и (31) после соответствующего выбора линейно-независимых переменных состояния. Их число всегда равно порядку объекта ( $n$ ), а  $u \in R^1$  и  $y \in R^1$ .

Наиболее простое (каноническое) описание получается в случае, когда в качестве переменных состояния выбирается выходная переменная  $y$  и ее производные до  $(n-1)$  включительно

$$x_1 = y; \quad x_2 = \dot{y}; \quad \dots \quad x_n = y^{(n-1)}. \quad (33)$$

При этом вместо (32) имеем систему уравнений в виде нормальной формы Коши,

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2; \\ \dot{x}_2 = x_3; \\ \dots \\ \dot{x}_n = -a_1 x_1 - a_2 x_2 - \dots - a_n x_n + b u \end{cases} \quad (34)$$

которая соответствует векторно-матричным уравнениям (30) и (31). Здесь матрицы  $A$ ,  $B$  и  $C$  имеют вид:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -a_1 & -a_2 & \dots & -a_n \end{bmatrix}; \quad B = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ b \end{bmatrix}; \quad C = [1 \quad 0 \quad \dots \quad 0] \quad (35)$$

причем  $\dim A = n \times n$ ,  $\dim B = n \times 1$ ,  $\dim C = 1 \times n$ .

Переход к описанию (30) – (31) не является однозначным: для одного объекта можно выбрать множество переменных состояния; важно, чтобы они были линейно-независимыми. При этом будут получаться различные матрицы объекта  $A$ ,  $B$  и  $C$ .

В общем случае одноканальный объект может описываться дифференциальным уравнением вида:

$$y^{(n)} + a_n y^{(n-1)} + \dots + a_1 y = b_m u^{(m)} + \dots + b_0 u; \quad n \geq m, \quad (36)$$

от которого также можно перейти к векторно-матричным уравнениям типа (30) – (31).

Таким образом, в качестве динамической характеристики линейных объектов управления используются дифференциальные уравнения, которые могут быть представлены в форме уравнений (30) – (31), (32), (34) или (36).

#### Составление математической модели

Процедуру получения математической модели объекта можно разбить на следующие этапы:

1 Составление гносеологической (мысленной) модели объекта. Исходя из технического задания и изучения режимов работы объекта, у инженера возникает приближенная мысленная модель, которая в дальнейшем уточняется и приобретает вид математической модели.

2 Определение независимых переменных, которые характеризуют объект, и уточнение их размерностей. При этом число управляющих воздействий не может быть меньше числа выходных переменных ( $\dim u \geq \dim y$ ). Размерность переменных состояния не может быть меньше размерности выходных переменных ( $\dim x \geq \dim y$ ). Размерность возмущающих воздействий  $M$  может быть произвольной и никак не связана с размерностью  $y, x, u$ .

3 Запись физических законов, в силу которых развиваются процессы в объекте.

4 Приведение уравнений объекта к стандартному, с точки зрения теории автоматического управления, виду.

Математическая модель никогда не бывает тождественна рассматриваемому объекту, так как при ее составлении всегда делают какие-либо допущения и упрощения. Поэтому для одной и той же системы, в зависимости от целей управления, она может быть разной.

При составлении математической модели приходится искать компромиссный вариант между двумя противоречивыми требованиями: с одной стороны, модель должна наиболее полно отражать свойства реальной системы; с другой стороны - она должна быть простой, чтобы не затруднять исследований.

#### Передаточная функция

Наряду с обыкновенными дифференциальными уравнениями в теории автоматического управления используются различные их преобразования. Для линейных

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		26

систем эти уравнения удобнее записывать в символической форме с использованием так называемого оператора дифференцирования,

$$p = \frac{d}{dt}, \quad (37)$$

что позволяет преобразовывать дифференциальные уравнения как алгебраические и ввести новую динамическую характеристику – передаточную функцию /2, с. 125/.

Рассмотрим этот переход для многоканальных систем вида (35)

$$\begin{cases} \dot{x} = Ax + Bu, & x \in R^n, \\ y = Cx, & (u, y) \in R^m, \quad n \geq m \end{cases} \quad (38)$$

Запишем уравнение состояния в символической форме:

$$px = Ax + Bu \quad (39)$$

что позволяет определить вектор состояния

$$x = (pI - A)^{-1} Bu \quad (40)$$

и выходные переменные системы

$$y = C(pI - A)^{-1} Bu \quad (41)$$

Матрица взаимосвязи между выходными переменными и управляющими воздействиями в выражении (41) при нулевых начальных условиях называется матричной передаточной функцией и обозначается

$$W(p) = C(pI - A)^{-1} B, \quad \dim W(p) = m \times m \quad (42)$$

Она представляет собой матрицу со следующими компонентами:

$$W(p) = \begin{bmatrix} W_{11} & \dots & W_{1m} \\ \cdot & \dots & \cdot \\ W_{m1} & \dots & W_{mm} \end{bmatrix}, \quad (43)$$

где  $W_{ij}(p) = y_i / u_j$  – скалярные передаточные функции, которые представляют собой отношение выходной величины к входной в символической форме при нулевых начальных условиях ( $i, j = \overline{1, m}$ ).

Собственными передаточными функциями  $i$ -го канала называются компоненты передаточной матрицы  $W_{ii}(p) = y_i / u_i$ , которые находятся на главной диагонали. Составляющие, расположенные выше или ниже главной диагонали, называются передаточными функциями перекрестных связей между каналами.

Обратная матрица  $(pI - A)^{-1}$  находится по выражению

$$(pI - A)^{-1} = \frac{(pI - A)^{\bullet}}{\det(pI - A)}, \quad (44)$$

где  $(pI - A)^{\bullet}$  – присоединенная матрица.

Как следует из (44), все скалярные передаточные функции, которые являются элементами передаточной матрицы уравнения (43), содержат одинаковый знаменатель –  $\det(pI - A)$ . Он называется характеристическим полиномом и имеет  $n$ -ый порядок.

Если теперь характеристический полином приравнять нулю, то получим характеристическое уравнение системы,

$$A(p) = \det(pI - A) = 0 \quad (45)$$

Используя оператор дифференцирования, запишем уравнение (37) в символической форме и найдем передаточную функцию как отношение выходной величины к входной:

$$W(p) = \frac{y}{u} = \frac{b_m p^m + \dots + b_1 p + b_0}{p^n + a_n p^{n-1} + \dots + a_2 p + a_1}, \quad (46)$$

где  $A(p) = p^n + a_n p^{n-1} + \dots + a_2 p + a_1$  – характеристический полином.

Передаточные функции принято записывать в стандартной форме:

$$W(p) = k \frac{d_m p^m + \dots + d_1 p + 1}{c_n p^n + \dots + c_1 p + 1}, \quad (47)$$

где  $k = b_0 / a_1$  – коэффициент передачи;

$$c_j = a_{j+1} / a_1, \quad j = \overline{1, n-1};$$

$$c_n = 1 / a_1, \quad d_i = b_i / b_0, \quad i = \overline{1, m}$$

Передаточную матрицу (передаточную функцию) можно также определить с помощью изображений Лапласа или Карсона–Хевисайда. Если подвергнуть одному из этих преобразований обе части дифференциального уравнения и найти соотношения между входными и выходными величинами при нулевых начальных условиях, то получим ту же самую передаточную матрицу (42) или функцию (46).

Для того, чтобы в дальнейшем различать преобразования дифференциальных уравнений, будем использовать следующие обозначения:

$p = d / dt$  – оператор дифференцирования;

$s = \alpha + j\omega$  – оператор преобразования Лапласа.

Получив одну из динамических характеристик объекта, можно определить все остальные. Переход от дифференциальных уравнений к передаточным функциям и обратно осуществляется с помощью оператора дифференцирования  $p$ .

Рассмотрим взаимосвязь между переходными характеристиками и передаточной функцией. Выходная переменная находится через импульсную переходную функцию:

$$y(t) = \int_0^t g(t - \tau)u(\tau)d\tau , \quad (48)$$

Подвергнем его преобразованию Лапласа,

$$L[y(y)] = L \left[ \int_0^t g(t - \tau)u(\tau)d\tau \right] , \quad (49)$$

и получим  $y(s) = g(s)u(s)$ . Отсюда определим импульсную переходную функцию:

$$g(s) = \frac{y(s)}{u(s)} = W(s) , \quad (50)$$

Таким образом, передаточная функция – есть преобразование по Лапласу от импульсной переходной функции.

### 2.1.2 Методика расчета собственных параметров

Определение величин эффективных зарядов может быть выполнено на базе методики, предложенной Слейтором, согласно которой:

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		29

- вклад электронов, внешних по отношению к группе X (предполагается что рассматриваемая орбиталь принадлежит некоторой группе X), равен 0;
- вклад электронов из группы X равен 0,30, если это  $s^1$ -электроны, и 0,35 в остальных случаях;
- если рассматриваемые электроны находятся на  $s^n$ - или  $p^n$ - орбиталях группы X, то вклад каждого из электронов, расположенных на внутренних орбиталях с главным квантовым числом  $n-1$ , равен 0,85, а вклады электронов, находящихся на орбиталях с главным квантовым числом  $n-2, n-3, \dots$  равны 1,00;
- если рассматриваются электроны, расположенные на  $d^n$ - или  $f^n$ -орбиталях группы X, то вклад каждого из электронов для групп, предшествующих рассматриваемой, равен 1,00.

В разных химических соединениях один и тот же ион обладает различной величиной заряда, оказывающего влияние на его молекулярных соседей. Учитывая данное обстоятельство, изложенную методику предлагается модифицировать применительно к расчету заряда атомного остатка, действующего на электроны заполняемой орбитали отрицательного иона, оставив ее без изменений для электронов, соответствующих невозбужденным состояниям атомов.

Таким образом, для электронов всех оболочек положительного иона, а также внутренних оболочек отрицательного можно использовать уравнения[4]:

$$Z_{\text{эфк}} = Z^+ - \left( \sum_{i=1}^{K-1} 2D_i + D_K \right), \quad k = \overline{1, K}; \quad (51)$$

$$Z_{\text{эфл}} = Z^- - \left( \sum_{i=1}^{M-1} 2D_i + D_M \right), \quad l = \overline{1, M}; \quad (52)$$

где  $Z^+$  и  $Z^-$  – соответственно полные заряды ядер положительного и отрицательного ионов;  $D_i$  – экранирующие вклады каждого из рассматриваемых электронов, задаваемые согласно методике Слейтора, т.е.  $D_1 = 0,30$  для  $K=1$ ;  $D_1 = 0,85$  для  $K=2, \dots, 5$ ;  $D_1 = 1,00$  для  $K=6, \dots, 9$  и т.д.

Для электронов, расположенных на внешней орбитали оптической оболочки отрицательного иона, расчетные формулы будут иметь вид:

$$Z_{эфl} = Z^- - \left( \sum_{i=1}^M 2D_i + \sum_{j=M+1}^{L-1} 2j + d_L \right), \quad l = \overline{M+1, L}; \quad (53)$$

где  $d_j$  – экранирующие вклады электронов оптической оболочки, которые могут быть определены с помощью модифицированной методики.

## 2.2 Программное обеспечение

В качестве основного программного обеспечения используется ППП MATLAB. Данный пакет позволяет производить математические вычисления. Для нашей задачи необходимо наличие комплексной арифметики, графический пользовательский интерфейс и возможность построения графиков, все эти возможности имеются в MATLAB. Для построения графиков используются функции subplot() и plot(), для комплексных вычислений arg(), abs(), real(), imag(), для построения графического интерфейса пользователя используется модуль LayoutEditor.

Зарождение системы MATLAB относится к концу 70-х годов, когда первая версия этой системы была использована в Университете Нью Мехико и Станфордском университете для преподавания курсов теории матриц, линейной алгебры и численного анализа.

MATLAB – это высокоэффективный язык инженерных и научных вычислений. Он поддерживает математические вычисления, визуализацию научной графики и программирование с использованием легко осваиваемого операционного окружения, когда задачи и их решения могут быть представлены в нотации, близкой к математической. Наиболее известные области применения системы MATLAB:

- математика и вычисления;
- разработка алгоритмов;
- вычислительный эксперимент, имитационное моделирование, макетирование;
- анализ данных, исследование и визуализация результатов;

- научная и инженерная графика;
- разработка приложений, включая графический интерфейс пользователя.

MATLAB – это интерактивная система, основным объектом которой является массив, для которого не требуется указывать размерность явно. Это позволяет решать многие вычислительные задачи, связанные с векторно-матричными формулировками, существенно сокращая время, которое понадобилось бы для программирования на скалярных языках типа C или FORTRAN.

В системе MATLAB реакция на действия пользователя осуществляется через выполнение команды, записанной в свойство «Callback» элемента управления.

Система MATLAB – это одновременно и операционная среда и язык программирования. Одна из наиболее сильных сторон системы состоит в том, что на языке MATLAB могут быть написаны программы для многократного использования. Пользователь может сам написать специализированные функции и программы, которые оформляются в виде М-файлов. По мере увеличения количества созданных программ возникают проблемы их классификации и тогда можно попытаться собрать родственные функции в специальные папки. Это приводит к концепции пакетов прикладных программ (ППП), которые представляют собой коллекции М-файлов для решения определенной задачи или проблемы.

В библиотеке control передаточная функция представляется в виде векторов коэффициентов числителя и знаменателя. Например запись «num=[1 4]; den=[1 2]»

В нашей разработке использовались функции MATLAB, перечисленные в таблице 1.

Таблица 1 – Используемые функции MATLAB

Название функции	Описание
1	2
Функции тулбокса control	
[num,den]=parallel(num1,den1,num2,den2)	Соединяет параллельно передаточные функции
[num,den]=feedback(num1,den1,num2,den2,fb k)	Замыкает передаточные функции в обратную связь, с коэффициентом обратной

Продолжение таблицы 1

1	2
	связи fbk
[re,im]=nyquist(num,den,w)	Вычисляет годограф Найквиста для передаточной функции в области w
[mag,phase]=bode(num,den,w)	Вычисляет амплитудную и фазовую частотные характеристики в области w
Функции MATLAB	
[Результат]=eval(Выражение)	Вычисляет выражение переданное в виде строки и возвращает результат вычисления
[Результат]=feval(ИмяФункции,Параметры)	Вызывает функцию, передавая ей параметры и возвращает результат, возвращаемый этой функцией
Ссылка=figure(СписокСвойств)	Создает окно GUI с заданными параметрами и делает его текущим, возвращает ссылку на это окно
Ссылка=icontrol(СписокСвойств)	Создает элемент управления GUI с заданным списком свойств в текущем окне и возвращает ссылку на созданный элемент

Еще одним достоинством системы MATLAB версии 6.0 можно считать поддержку технологии COM, и вместе с ней Automation. Эти технологии позволяют использовать функции системы MATLAB из других приложений, что, в свою очередь, позволяет строить программные комплексы, состоящие из множества компонентов, в том числе и MATLAB-а.

Интерфейс системы MATLAB включает объект «MATLAB.Application». Данный объект предоставляет интерфейс, включающий методы, перечисленные в таблице 2.

Таблица 2 – Методы интерфейса MATLAB.Application

Метод	Описание
-------	----------

Продолжение таблицы 2

1	2
GetCharArray(Name As String, Workspace As String) As String	Получить строковый массив с именем «Name» из рабочей области «Workspace»
PutCharArray(Name As String, Workspace As String, charArray As String)	Добавить строковый массив «charArray» с именем «Name» в рабочую область «Workspace»
GetFullMatrix(Name As String, Workspace As String, pr() As Double, pi() As Double)	Получить матрицу «Name» из рабочей области «Workspace», pr – вещественная матрица, pi – мнимая матрица (двух мерный массив)
PutFullMatrix(Name As String, Workspace As String, pr() As Double, pi() As Double)	Добавить матрицу «Name» в рабочую область «Workspace»
MaximizeCommandWindow()	Развернуть командное окно
MinimizeCommandWindow()	Свернуть командное окно
Quit()	Выключить приложение MATLAB

Для нашего приложения понадобится только метод Execute(), позволяющий запустить на выполнение М-файл.

При написании программы мы воспользовались языком написания сценариев VBScript. В данном языке программирования мы использовали функцию CreateObject(servername.typename [, location]), позволяющую создать объект с именем servername.typename, на сервере location (по умолчанию текущий компьютер).

### 2.3 Техническое обеспечение

Этот вид обеспечения представляет собой комплекс технических средств, с помощью которого осуществляется регистрация, сбор, обработка, отображение, защита и хранение информации.

Данные, необходимые для работы разрабатываемого программного комплекса хранятся на жестком диске ПК. Возможно также хранение информации на гибких и компакт дисках. Результаты моделирования отображаются на мониторе.

Разрабатываемый программный продукт не ориентирован на работу в сети, поэтому для эффективной работы необходим только один ПК.

Требования к аппаратной базе определяются исключительно требованиями, предъявляемыми системой Matlab. Для успешной установки MATLAB необходимы следующие минимальные средства:

– компьютер с микропроцессором не ниже Pentium и математическим сопроцессором, рекомендуются процессоры Pentium II, Pentium III, Pentium IV;

– устройство считывания компакт дисков (привод CD-ROM) (для установки), мышь, 8-разрядный графический адаптер и монитор, поддерживающие не менее 256 цветов;

– ОЗУ емкостью 128 Мбайт для минимального варианта системы (рекомендуется иметь память не менее 256 Мбайт);

– до 1000 Мбайт дискового пространства при полной установке всех расширений и всех справочных систем.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		35

## 3 Разработка программного продукта

### 3.1 Алгоритм расчета

Наше программное обеспечение будет иметь графический интерфейс пользователя, следовательно, программа не будет иметь глобального алгоритма, так как программы с GUI ориентированны на события, а не на алгоритм. В то же время можно разработать алгоритм высокого уровня, по которому должна будет работать программа. Изобразим блок-схему алгоритма на рисунке 2.

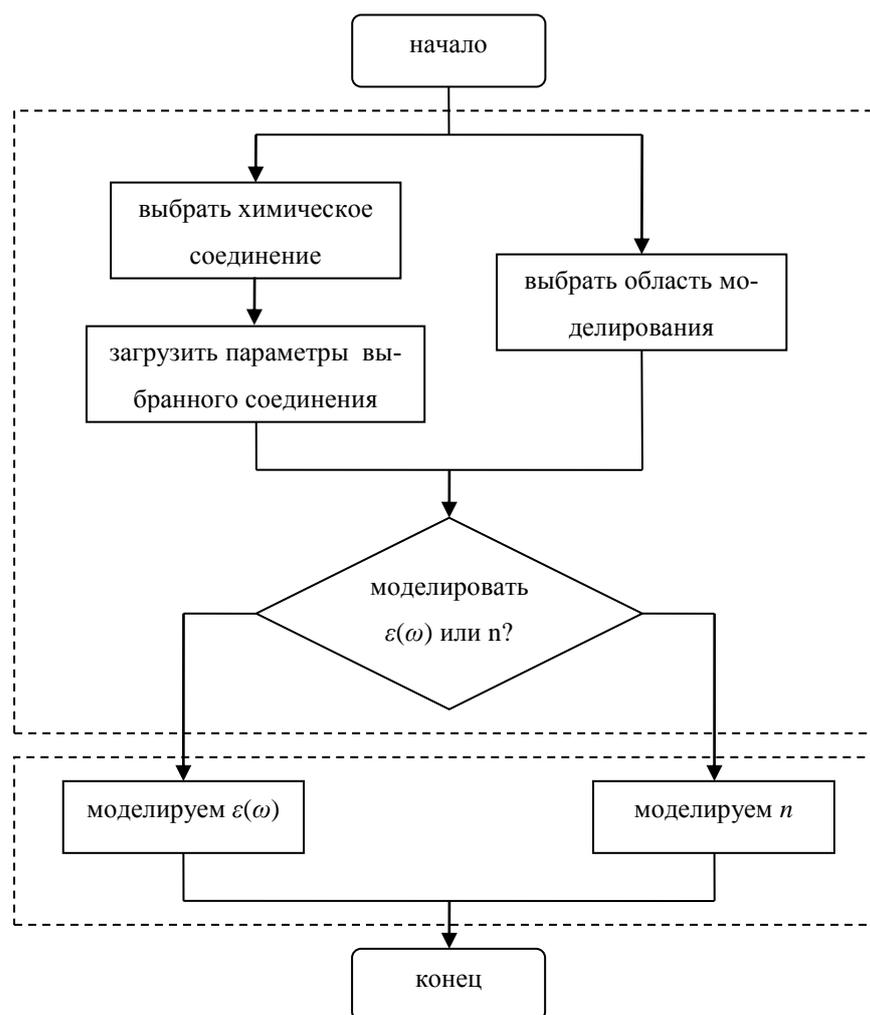


Рисунок 2 – Блок-схема алгоритма

Программу условно можно разделить на две части (выделены пунктирными прямоугольниками). Задача первой части – диалог с пользователем, для получения входных параметров (химическое соединение, область моделирования). Задача второй части – осуществить моделирование.

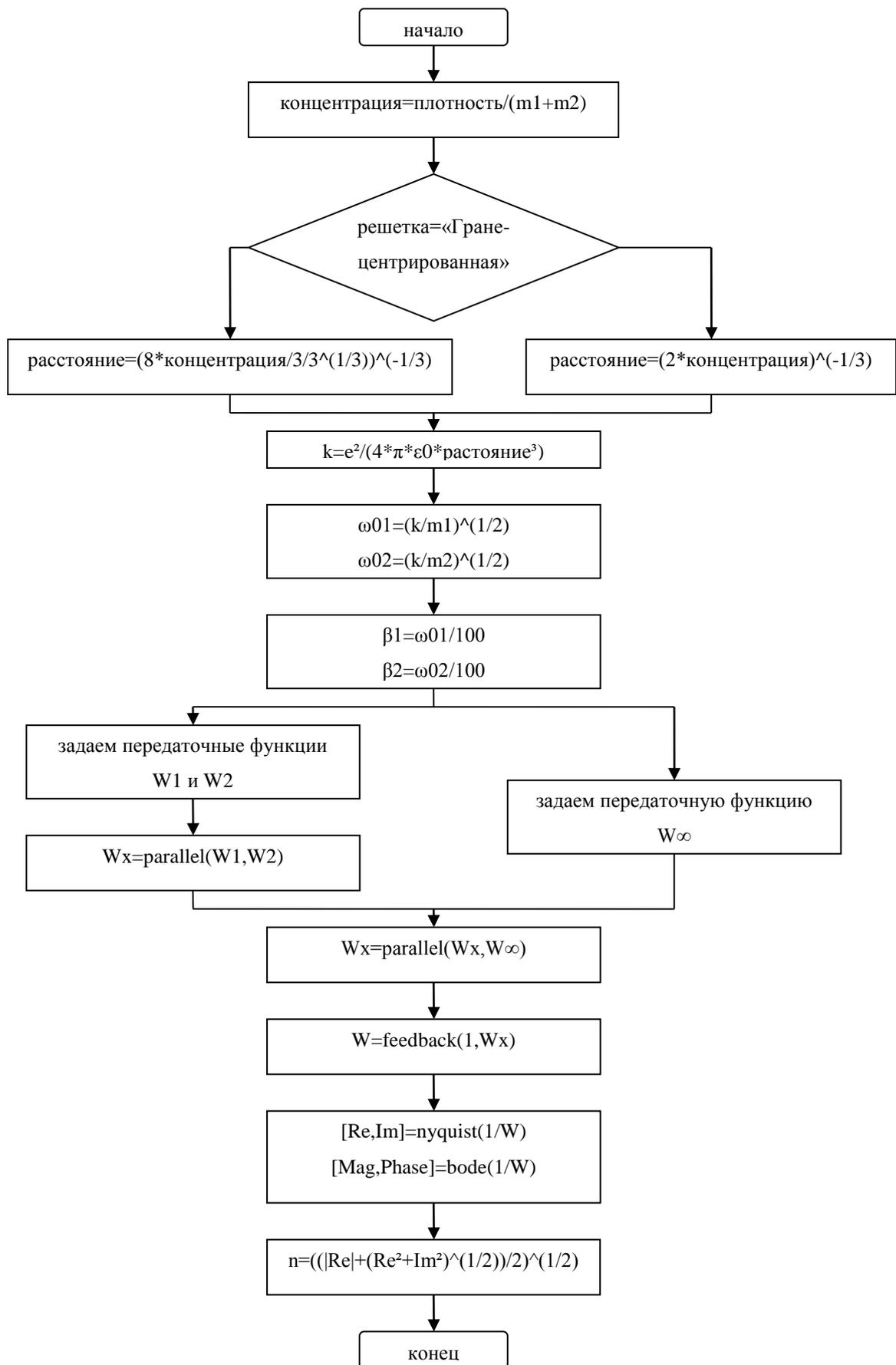


Рисунок 3 – Блок-схема алгоритма расчета характеристик

Теперь составим алгоритм моделирования заданных характеристик. Блок-схема представлена на рисунке 3.

### 3.2 Программный код

При разработке ПО целесообразно отделить пользовательский интерфейс от остальной части кода, путем разделения программы на модули. Это позволит менять интерфейс пользователя независимо от математической модели, а также пользоваться моделью в обход интерфейса пользователя. Поэтому разработку интерфейса пользователя будем рассматривать отдельно от разработки остальной части программы.

#### Реализация основной части

Основная часть отвечает за создание физической модели, моделирования созданной модели. Алгоритм работы основной части следующий:

- 1) загрузить параметры указанного химического соединения;
- 2) составить кибернетическую модель процесса;
- 3) осуществить имитационное моделирование;
- 4) вернуть результаты.

Рассмотрим алгоритм более детально.

#### Шаг 1.

Из таблицы 1 видно, что параметры соединения зависят как от соединения в целом (плотность, тип решетки), так и от элементов соединения (атомные массы галогена и щелочного металла). Поэтому запрос параметров соединения должен включать как название соединения в целом, так и его составных частей. Название соединения, как правило, строится по схеме: название щелочного металла + название галогена, следовательно, для запроса параметров достаточно указать названия щелочного металла и галогена, название соединения можно вычислить.

Для индексации параметров по названию можно использовать ассоциативный массив значений параметров соединения, но т. к. язык MATLAB является языком сценариев, то можно воспользоваться встроенными возможностями выполнения сценариев. В MATLAB есть функция выполнения сценария `eval()`, которая берет текстовую строку, в которой передается сценарий. Данный сценарий можно гене-

рировать в зависимости от параметров запроса. Если перед выполнением сценария сформировать окружение из переменных содержащих физические параметры всех соединений, то можно с помощью сценария выбрать нужные параметры.

...

% [Atom mass units]

mK\_amu=39.0983;

mNa\_amu=22.98977;

...

% плотности в [kg/m<sup>3</sup>]

pKCl=1988;

pNaCl=2165;

...

% Оптические диэлектрические проницаемости

eirNaCl=2.34;

eNaCl=5.62;

...

eval(['m1amu = m' alkaline '\_amu;...'

'm2amu = m' halogen '\_amu;...'

'density = p' element ';...'

'epsilon<sub>light</sub>=e' element ';...'

'epsilon<sub>infrared</sub>=eir' element ';']);

...

Приведенный выше фрагмент программы осуществляет выборку параметров по запросу. В переменную m1amu сохраняется атомная масса щелочного металла, в переменную m2amu сохраняется атомная масса галогена и т. д. для пяти параметров.

Тип кристаллической решетки определяется по щелочному металлу. Соединениям, включающим калий или натрий, соответствует гранецентрированная решетка, а галогенидам брома и цезия – объемно-центрированная.

...

					ВКР.145370.09.04.01.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		39

```

% Выбор типа решетки, для Na, K и Rb - (гранецентрированная),
% а для Cs - (объемно-центрированная)
if alkaline == 'Cs'
    meshtype = 'Объемно центрированная';
else
    meshtype = 'Гране-центрированная ';
end
...

```

В результате работы шага 1 будут инициализированы переменные содержащие параметры текущего соединения, следовательно, задача шага 1 выполнена.

Шаг 2 – составление кибернетической модели процесса.

На данном шаге можно воспользоваться тулбоксом control. Перед построением модели нужно получить значения констант модели, таких как частоты собственных колебаний и коэффициенты затухания, для этого воспользуемся формулой (52). После этого нужно составить передаточные функции  $W_1(p)$  и  $W_2(p)$ . В MATLAB линейная передаточная функция задается векторами коэффициентов числителя и знаменателя.

```

...
num1 = [m2 2*beta1*m2 2*omega02^2*m2-omega01^2*m1]*electroncharge^2;
num2 = [m1 2*beta2*m1 2*omega01^2*m1-omega02^2*m2]*electroncharge^2;
den = [1 2*(beta1 + beta2) 2*(omega01^2 + omega02^2 + 2*beta1*beta2)
4*(beta1*omega02^2 + beta2*omega01^2) 3*(omega01*omega02)^2]*m1*m2;
...

```

В приведенном фрагменте кода задаются два числителя и один общий знаменатель для передаточных функций  $W_1(p)$  и  $W_2(p)$ . Теперь нужно соединить их параллельно, для чего воспользуемся функцией `parallel(num1, den1, num2, den2)`, которая возвращает числитель и знаменатель получившейся передаточной функции.

Шаг 3 – имитационное моделирование.

Для полученной системы можно провести моделирование с целью получения вещественной и мнимой характеристик, для этого можно воспользоваться функци-

ей `nyquist(num, den, w)`, которая позволяет получить вещественную и мнимую характеристики годографа Найквиста для линейной передаточной функции, заданной векторами коэффициентов числителя и знаменателя.

...

```
[re im] = nyquist(tnum*concentr*2/3/epsilon0, tden, omega);
```

```
re=re+epsiloninfrared;
```

...

Приведенный фрагмент кода рассчитывает вещественную и мнимую характеристики диэлектрической проницаемости.

Для нахождения АЧХ и ФЧХ может использоваться функция `bode(num, den, w)`. Но перед нахождением этих характеристик нужно найти передаточную функцию по рассогласованию с помощью функции `feedback(num1, den1, num2, den2, k)`, данная функция позволяет получить передаточную функцию замкнутой системы, заданной передаточными функциями прямого и обратного каналов, и коэффициентом обратной связи. Для нашего случая прямой канал задается единичной передаточной функцией, а коэффициент обратной связи равен минус 1.

...

```
[tnum tden] = feedback(1, 1, tnum*2/3/epsilon0, tden, -1);
```

...

Теперь можно получить модуль и фазу диэлектрической проницаемости, для чего можно воспользоваться функцией `bode(num, den, w)`, которая вычисляет данные характеристики из годографа передаточной функции заданной векторами коэффициентов числителя и знаменателя, в области частот заданной вектором `w`.

...

```
[mag phase] = bode(tden, tnum, omega);
```

...

В нашем случае числитель и знаменатель меняются местами, т. к. диэлектрическая проницаемость является обратной величиной по отношению к передаточной функции по рассогласованию.

Имея вещественную и мнимую характеристики диэлектрической проницаемо-

сти можно определить показатель преломления. Код выполняющий вычисление может выглядеть следующим образом

...

```
n=sqrt((abs(re)+sqrt(re.^2+im.^2))./2).
```

Шаг 4 – возврат вычисленных характеристик.

Возврат характеристик можно осуществить через глобальные переменные, либо через возвратное значение функции. Например, так:

...

```
function [mag, phase, re, im, n] = epsilon_via_omega(m1, m2, density, meshtype, epsilonlight, omega)
```

...

На этом заканчивается описание основной части программного обеспечения, эта часть располагается в модулях phis.m и epsilon\_via\_omega.m.

Реализация интерфейса пользователя.

При реализации интерфейса пользователя, очевидно, что нужно создать два модуля:

- Модуль главного меню;
- Модуль интерфейса графика.

Для работы интерфейса должна быть произведена инициализация, в результате которой на экране появляется окно графического интерфейса. Последующая работа осуществляется путем выполнения функций реакции системы на внешние воздействия пользователя. Особенностью MATLAB является то, что для созданного окна, функции, расположенные в модуле инициализации, не видны. Т.е. окно работает в глобальном окружении и ему видны только глобальные функции. Для того чтобы расположить функции ответственные за обработку событий окна в модуле инициализации нужно использовать параметры модуля инициализации, через которые передавать функция, которую нужно вызвать и её параметры. Для этого воспользуемся параметрами переменной длины «varargin».

Для того чтобы отличить вызов функции от инициализации, можно инициализацию проводить при отсутствии передаваемых параметров «nargin=0». В

MATLAB передача функции может осуществляться только по имени, для вызова функции по имени имеются функции «eval» и «feval», которые отличаются тем, что функция «eval» принимает строку в виде сценария, а «feval» принимает строку имени функции и параметры, что, естественно, быстрее, так как не нужно преобразовывать параметры в строку. Следовательно, в этом случае функция «feval» подходит больше чем «eval». Исходя из вышперечисленного можно составить алгоритм, приведенный на рисунке 10.

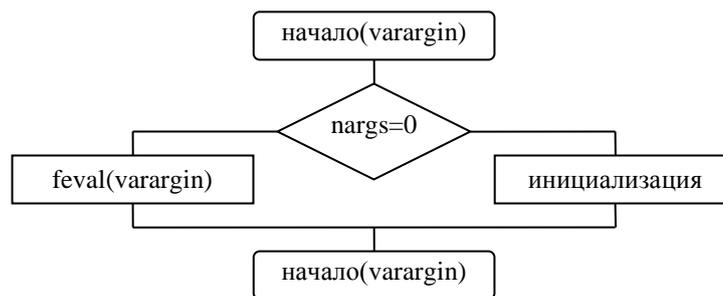


Рисунок 4 – Блок-схема модуля интерфейса

После глобальной функции располагаются локальные функции, которые вызываются при определенных событиях.

В соответствии с интерфейсом, разработанным в предыдущем пункте, должны обрабатываться события:

- выбор химического соединения;
- изменение значений на табло области регулирования;
- нажатие кнопки начала моделирования.

Функция, обрабатывающая событие выбора химического соединения, должна вывести характеристики соединения в соответствующие поля. Для этого она должна определить выбранное соединение и вызвать функцию «phis» передавая ей название щелочи и галогена, а потом обновить значения полей характеристик химического соединения.

При изменении значения на табло должны обновиться другие связанные поля. Для этого определяется шкала в которую было введено значение, вычисляются значения для других шкал, обновляются поля этих шкал.

Нажатие кнопки начала моделирования вызывает модуль интерфейса графика,

передавая в качестве параметра тип характеристики.

Модуль интерфейса графика строится по тому же принципу что и модуль главного меню. Отличия состоят в обрабатываемых событиях и естественно процедуры инициализации. При чем для моделирования той или иной характеристики инициализация модуля происходит по-разному. Для диэлектрической проницаемости не добавляются элементы выбора шкалы по аргументу, а для показателя преломления не выводятся элементы выбора функции. Этот модуль обрабатывает следующие события:

- изменение диапазона шкалы по аргументу;
- изменение диапазона по значению функции;
- выбор другой функции отображения (только для диэлектрической проницаемости);
- выбор другой шкалы по аргументу (только для показателя преломления);

При изменении диапазона шкалы по аргументу функция должна быть вычислена заново, для новых значений аргумента с помощью функции «`epsilon_via_omega`».

При изменении диапазона по значению функции достаточно указать новый масштаб с помощью функции «`axis`».

При выборе другой функции нужно стереть текущую функцию, зарисовав новую с помощью оператора «`hold off`» и «`plot`», вычислять функцию не нужно т.к. при расчетах нам доступны одновременно все функции.

При выборе другой шкалы по аргументу тоже достаточно изменить масштаб и аргумент в функции «`plot`».

Для выбора шкалы и функции, мы использовали стандартный элемент управления «`radiobutton`», который характеризуется тем, что одновременно может быть выбран только один элемент группы. К сожалению, в системе MATLAB нет встроенного механизма управления этим элементом, поэтому алгоритм пришлось реализовывать.

Алгоритм состоит в следующем: во время инициализации создается переменная, которая указывает какой элемент выбран, при воздействии пользователя на

элемент, если переменная не указывает на этот элемент, старый элемент сбрасывает свойство «value» в 0, а новый в 1, значение переменной устанавливается на новый элемент.

Данные модули названы «dielectric\_gui» и «plot\_gui».

### 3.3 Результаты моделирования

Осуществим моделирование характеристик кристаллов с использованием программного продукта.

Моделирование характеристик хлорида лития LiF.

Атомная масса LiF

$$M_{LiCl} = (M_{Li} + M_{F}) = 6,943 + 19 = 25,943 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность LiF

$$\rho_{LiF} = 2640 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 5.

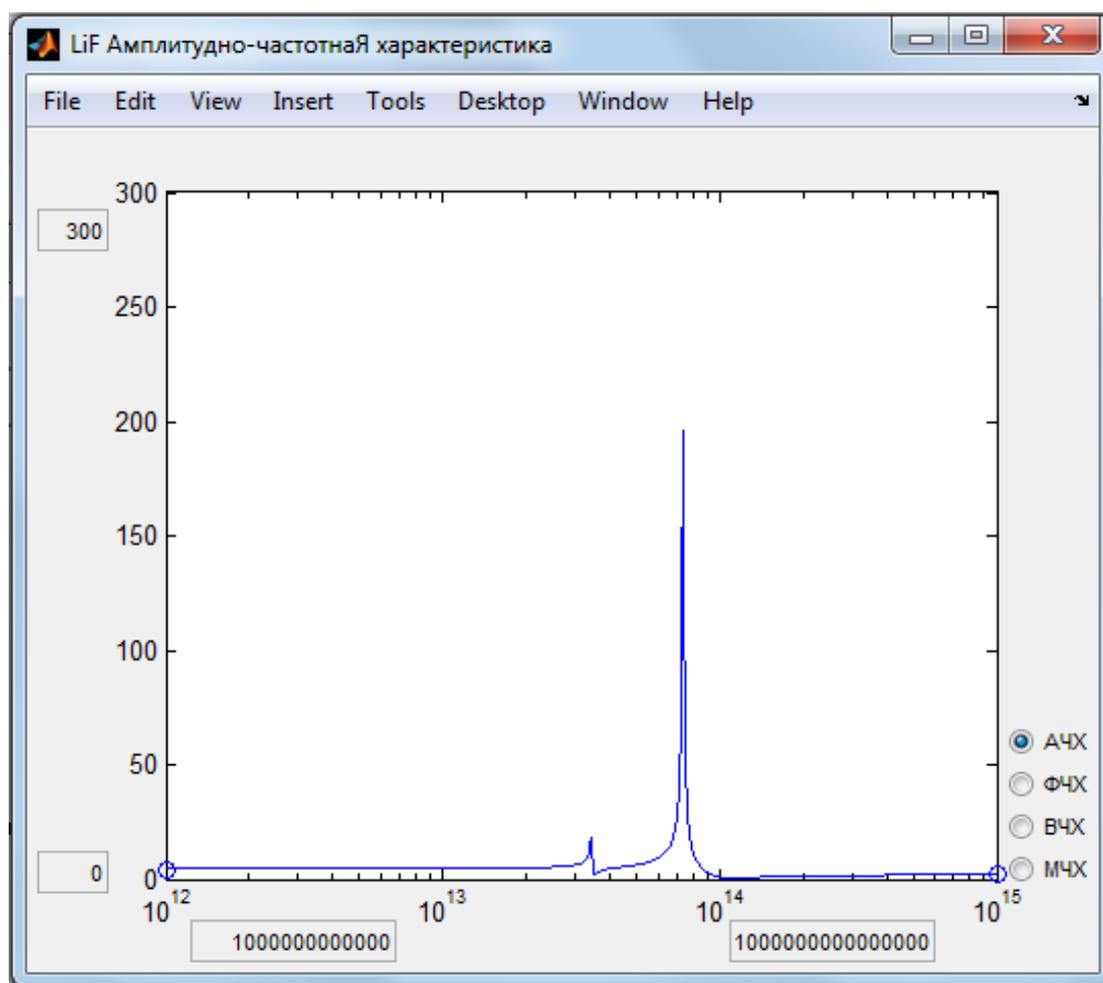


Рисунок 5 – График амплитудно-частотной характеристики

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

45

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 6.  
Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

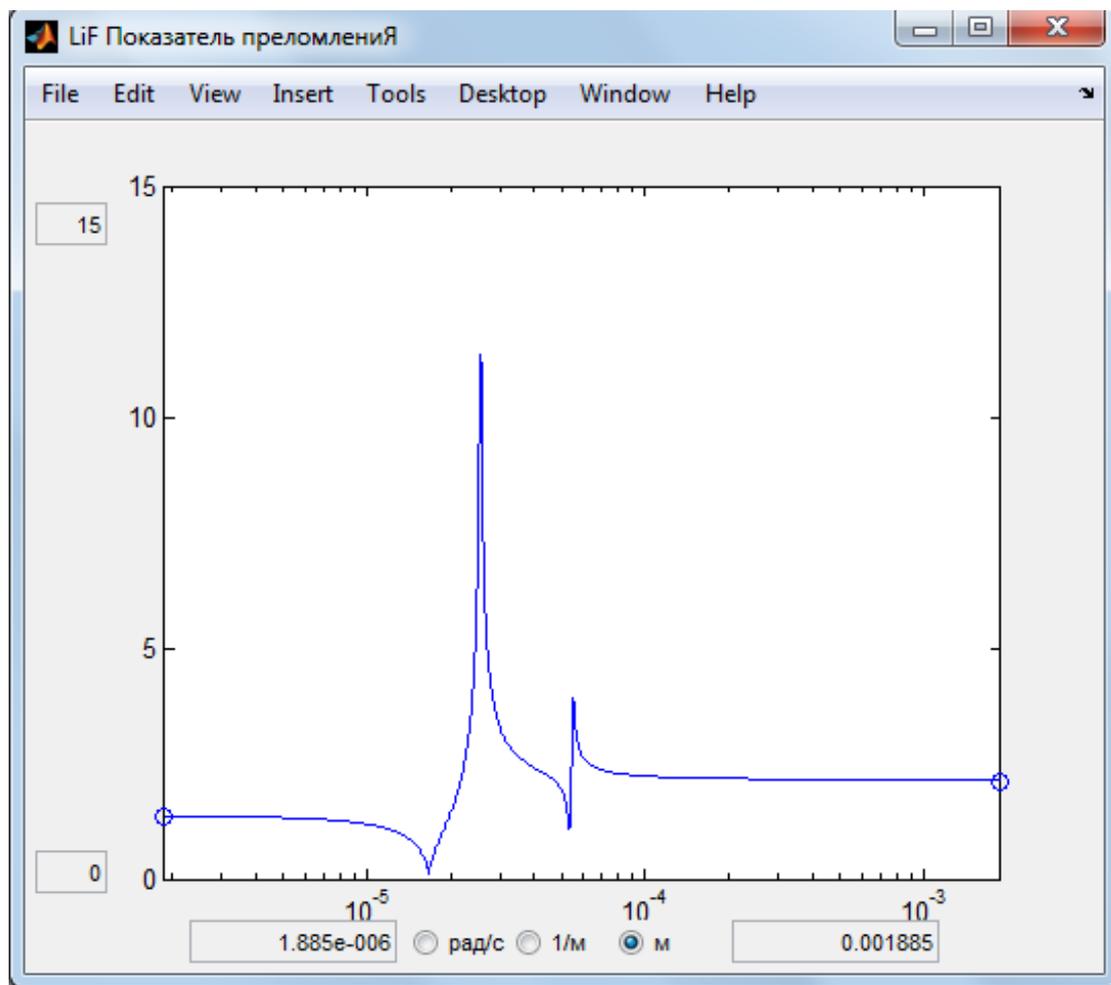


Рисунок 6 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития NaF.

Атомная масса NaF

$$M_{\text{NaCl}} = (M_{\text{Na}} + M_{\text{F}}) = 22,98977 + 19 = 41,98977 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность NaF

$$\rho_{\text{NaF}} = 2558 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 7.

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 8.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

46

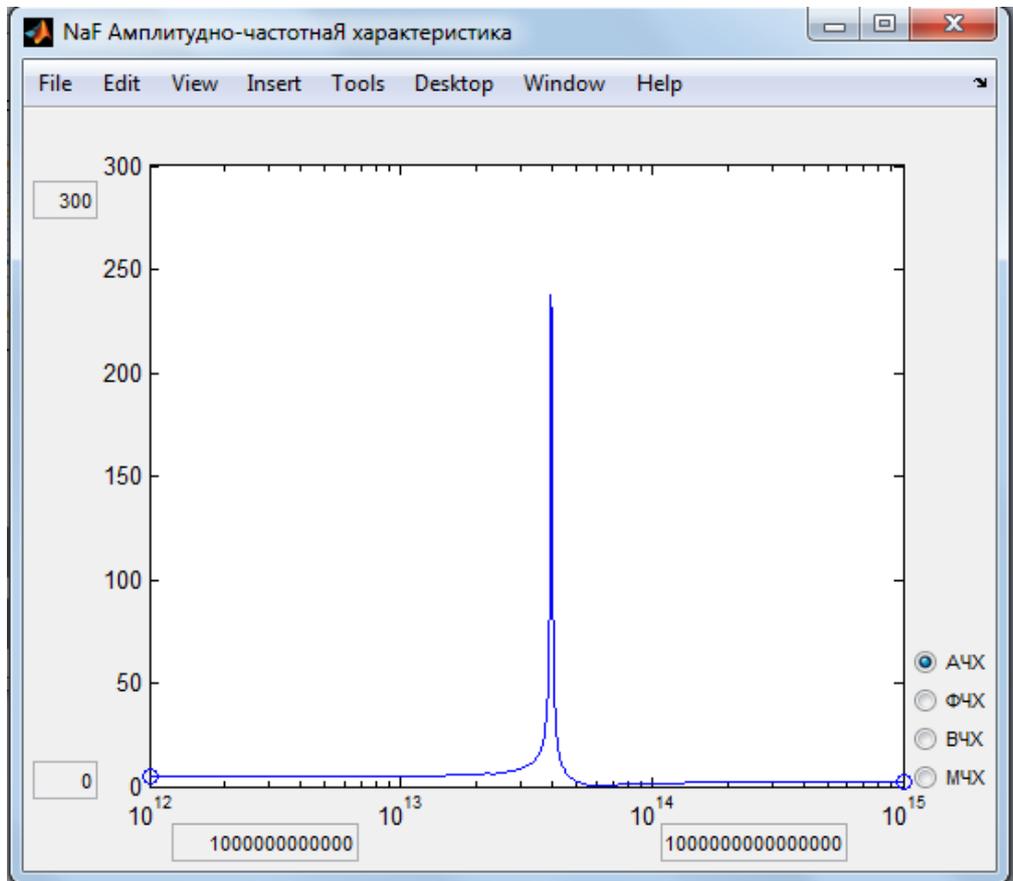


Рисунок 7 – График амплитудно-частотной характеристики

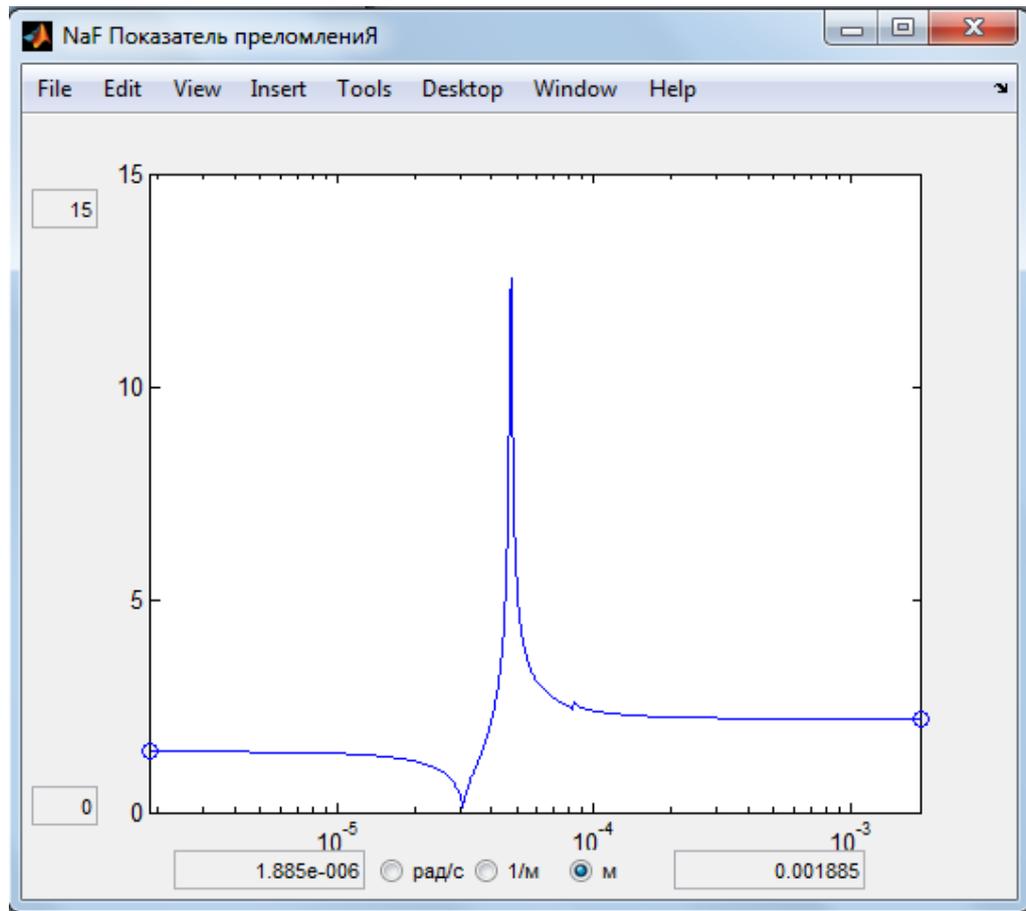


Рисунок 8 – График частотной зависимости показателя преломления

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

47

Моделирование характеристик хлорида лития KF.

Атомная масса KF

$$M_{KF} = (M_K + M_F) = 39,0983 + 19 = 58,0983 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность KF

$$\rho_{KF} = 3180 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 9.

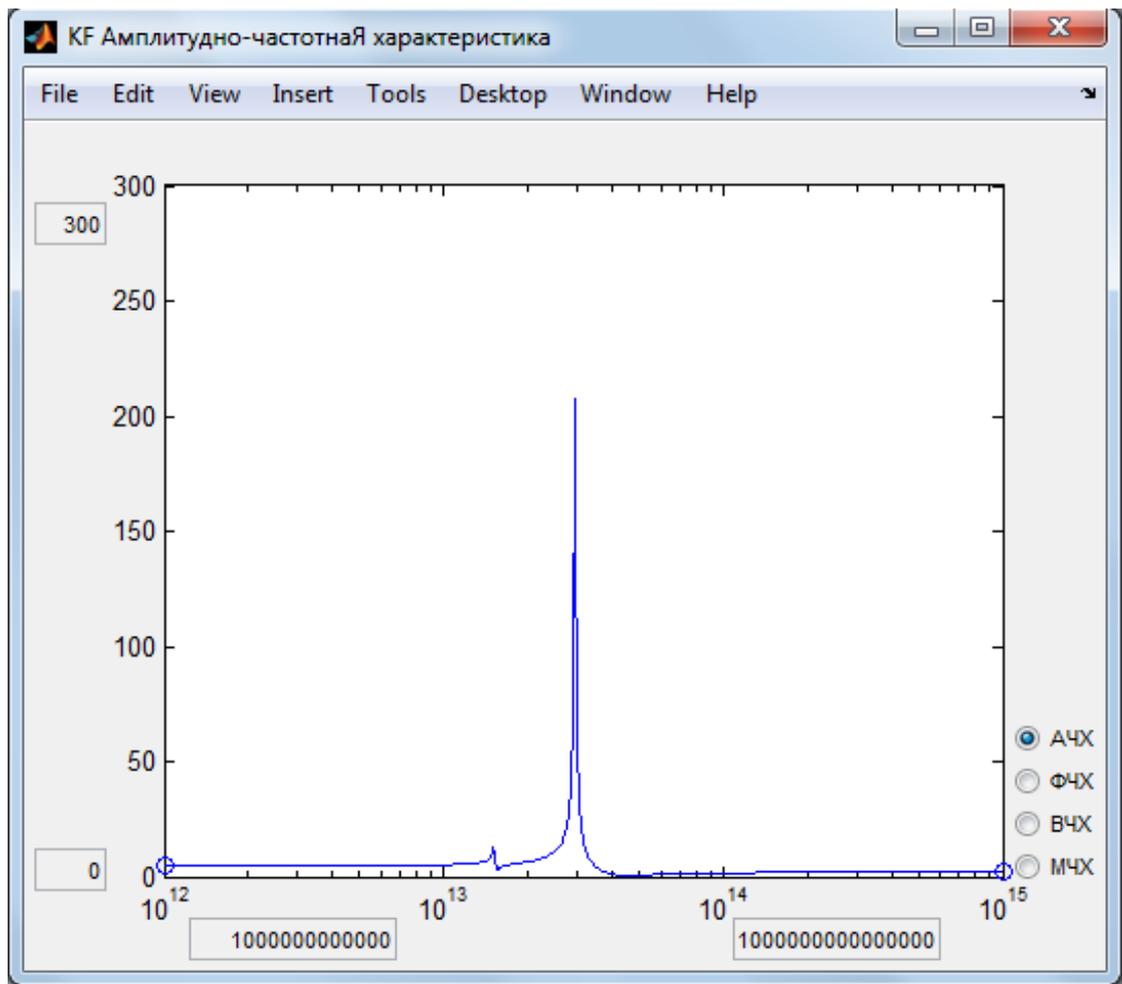


Рисунок 9 – График амплитудно-частотной характеристики

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 10.  
Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

48

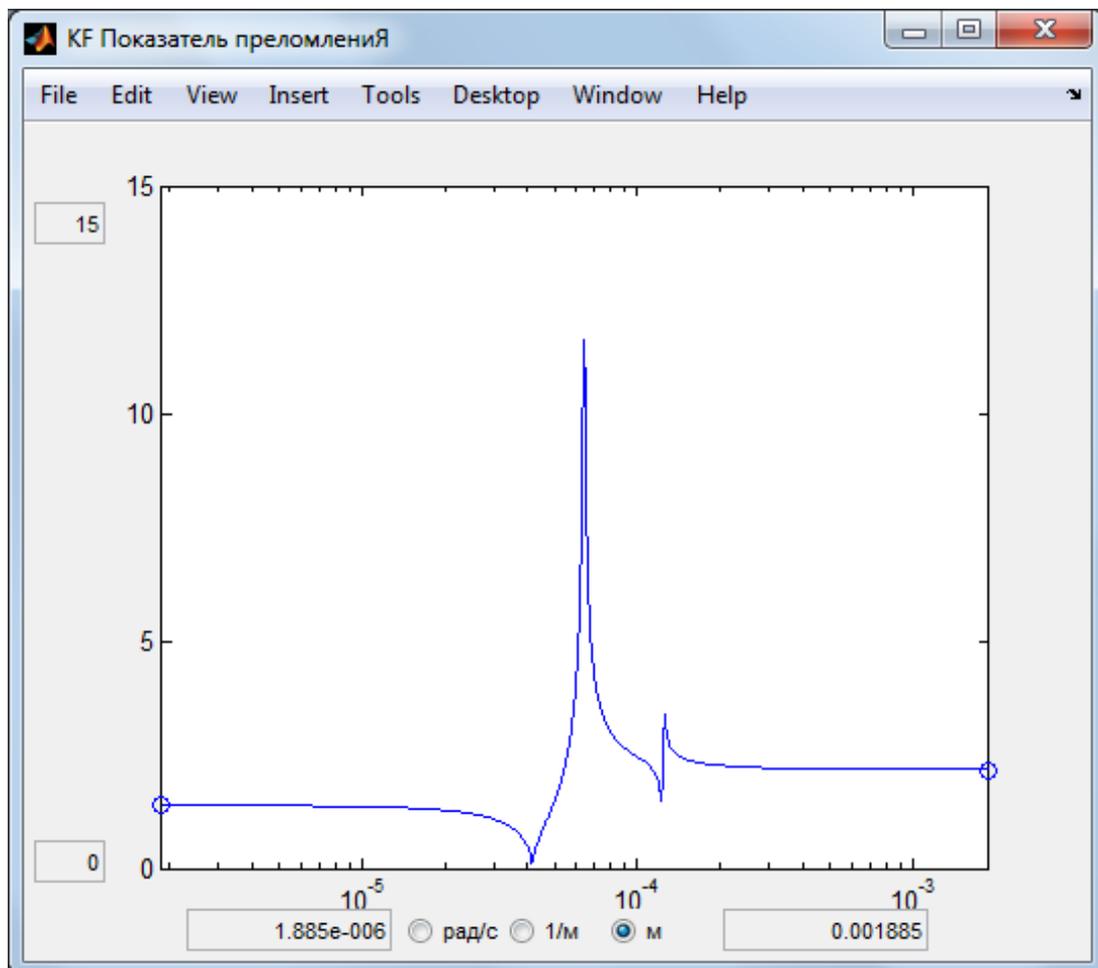


Рисунок 10 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития RbF.

Атомная масса RbF

$$M_{RbCl} = (M_{Rb} + M_F) = 85,4678 + 19 = 104,4678 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность RbF

$$\rho_{RbF} = 1396 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 11.

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 12.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

49

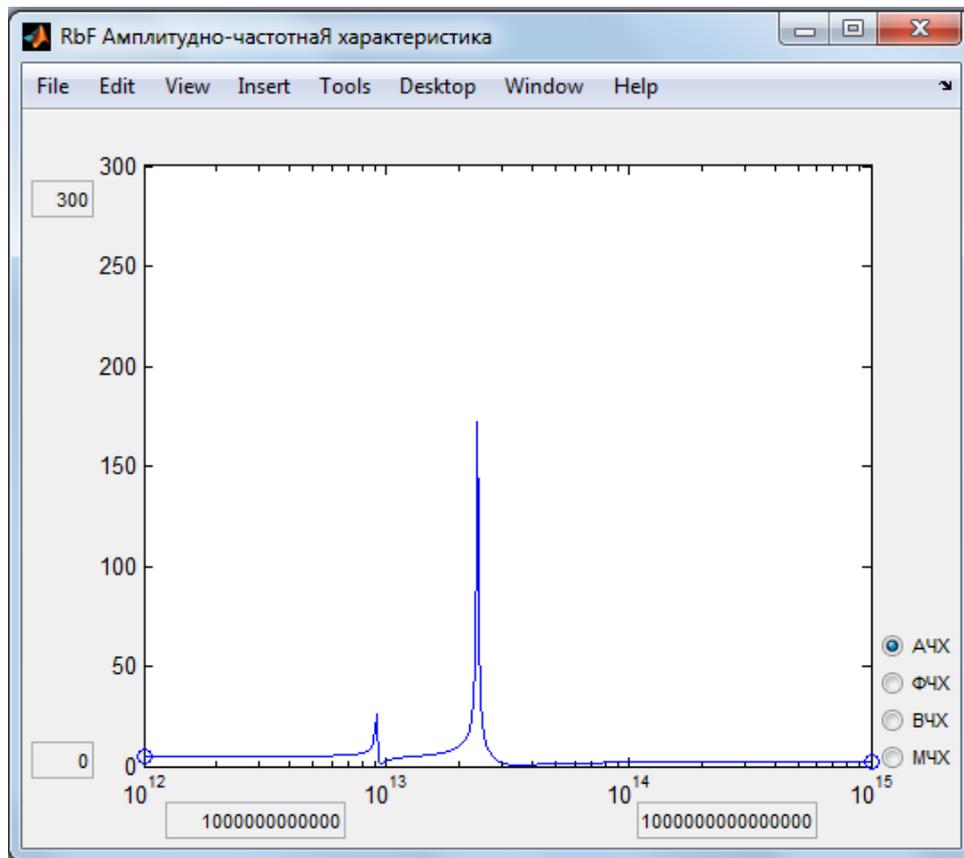


Рисунок 11 – График амплитудно-частотной характеристики

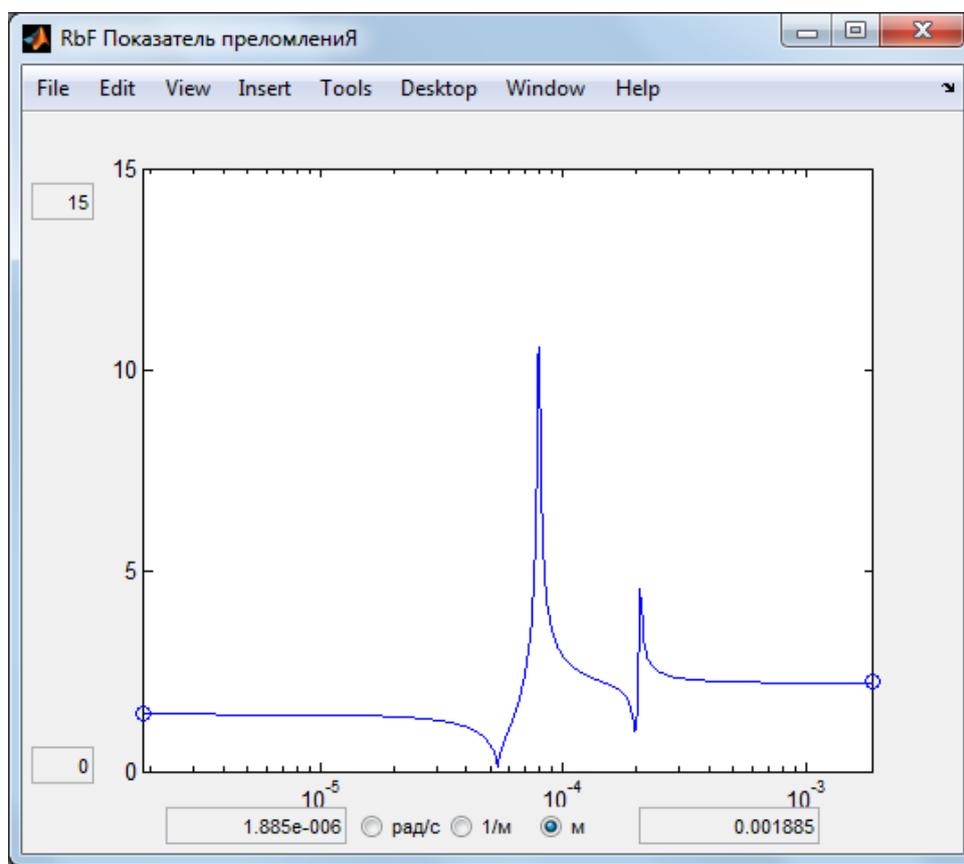


Рисунок 12 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития CsF.

Атомная масса CsF

$$M_{CsCl} = (M_{Cs} + M_F) = 132,90545 + 19 = 151,90545 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность CsF

$$\rho_{CsF} = 3586 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 13.

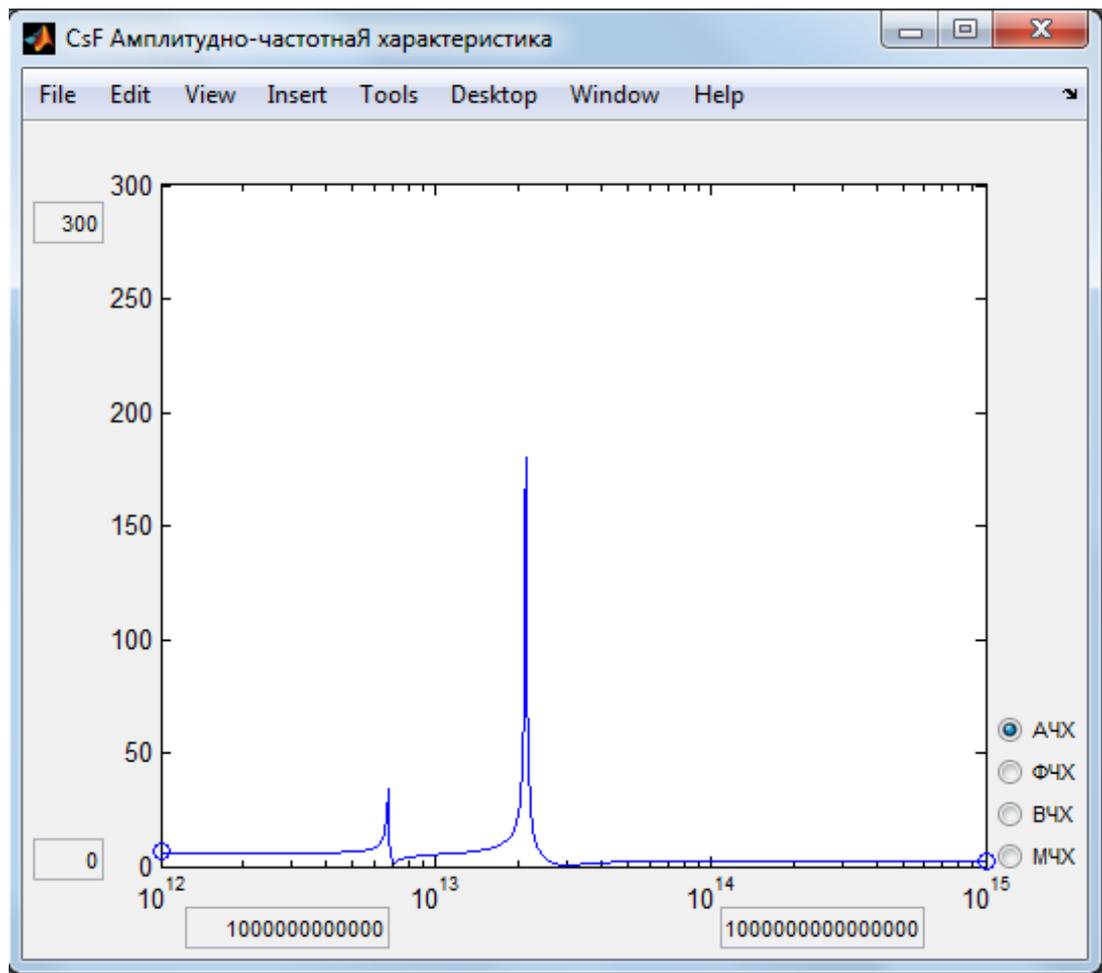


Рисунок 13 – График амплитудно-частотной характеристики

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 14.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

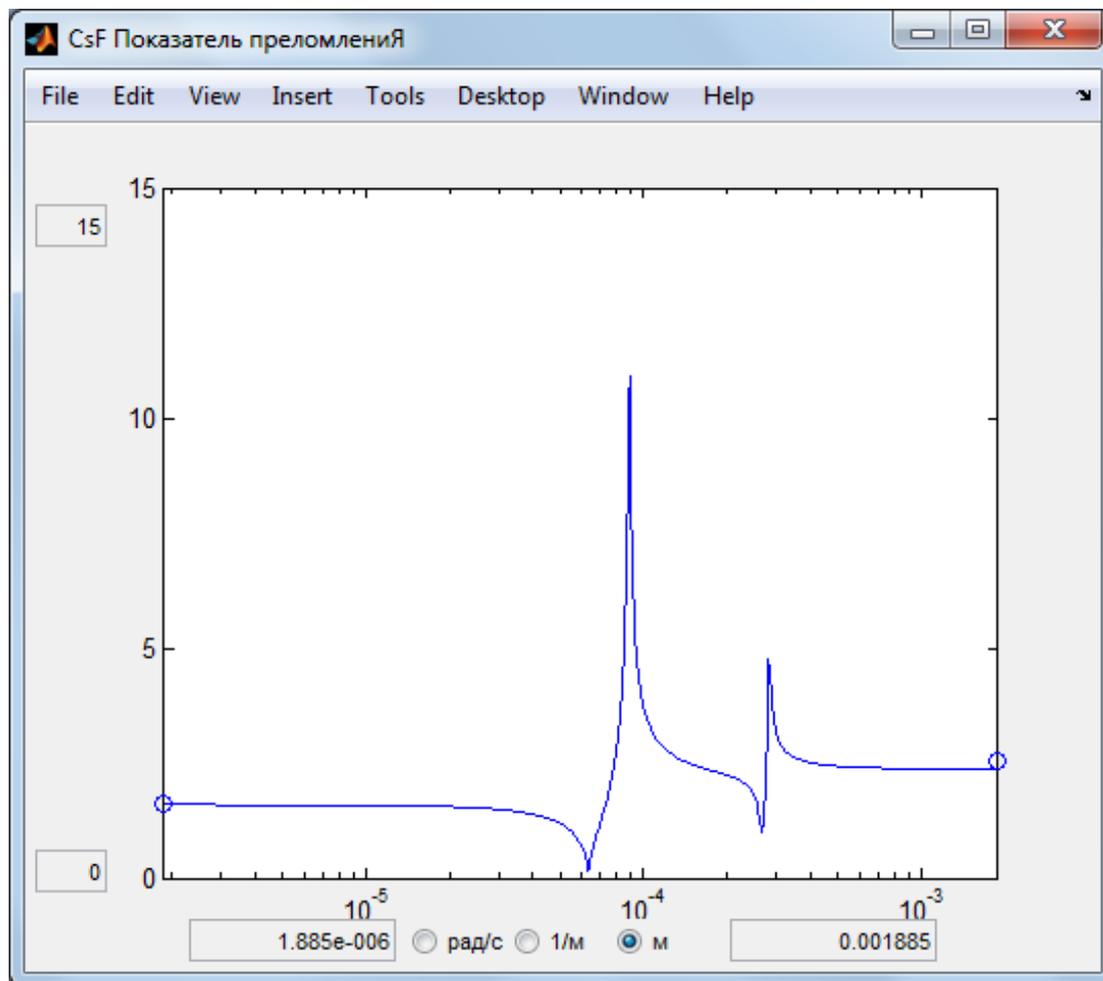


Рисунок 14 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития LiCl.

Атомная масса LiCl

$$M_{\text{LiCl}} = (M_{\text{Li}} + M_{\text{Cl}}) = 6,943 + 35,453 = 42,396 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность LiCl

$$\rho_{\text{LiCl}} = 2070 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 15.

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 16.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

52

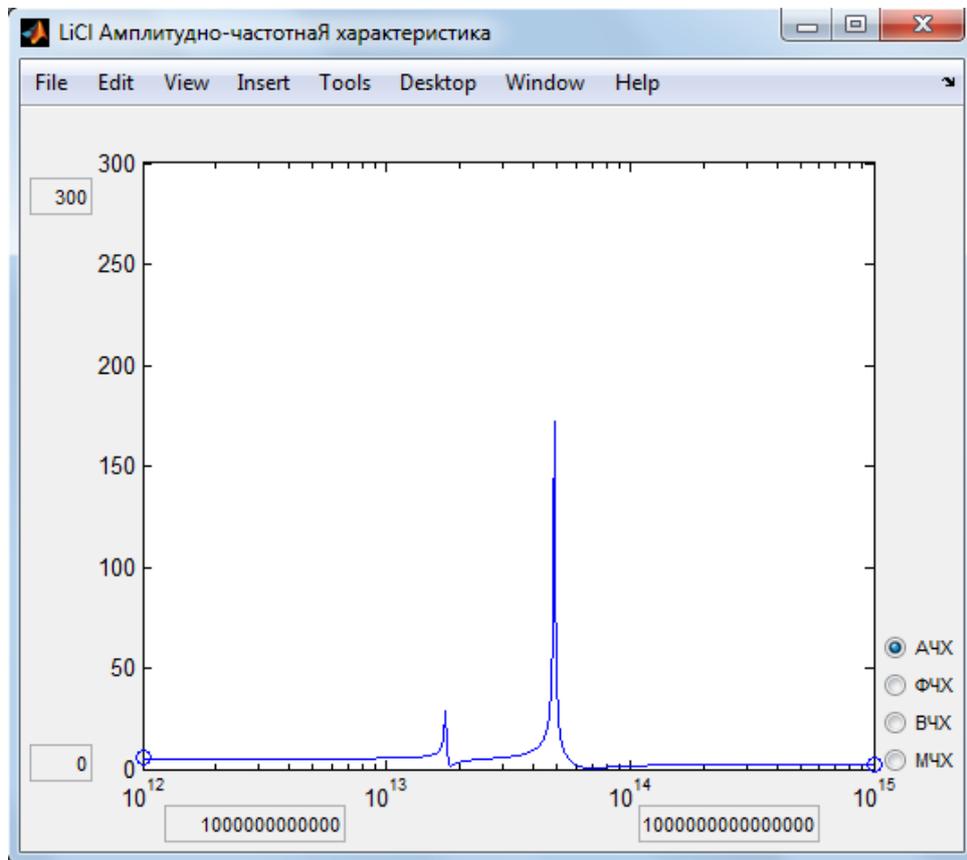


Рисунок 15 – График амплитудно-частотной характеристики

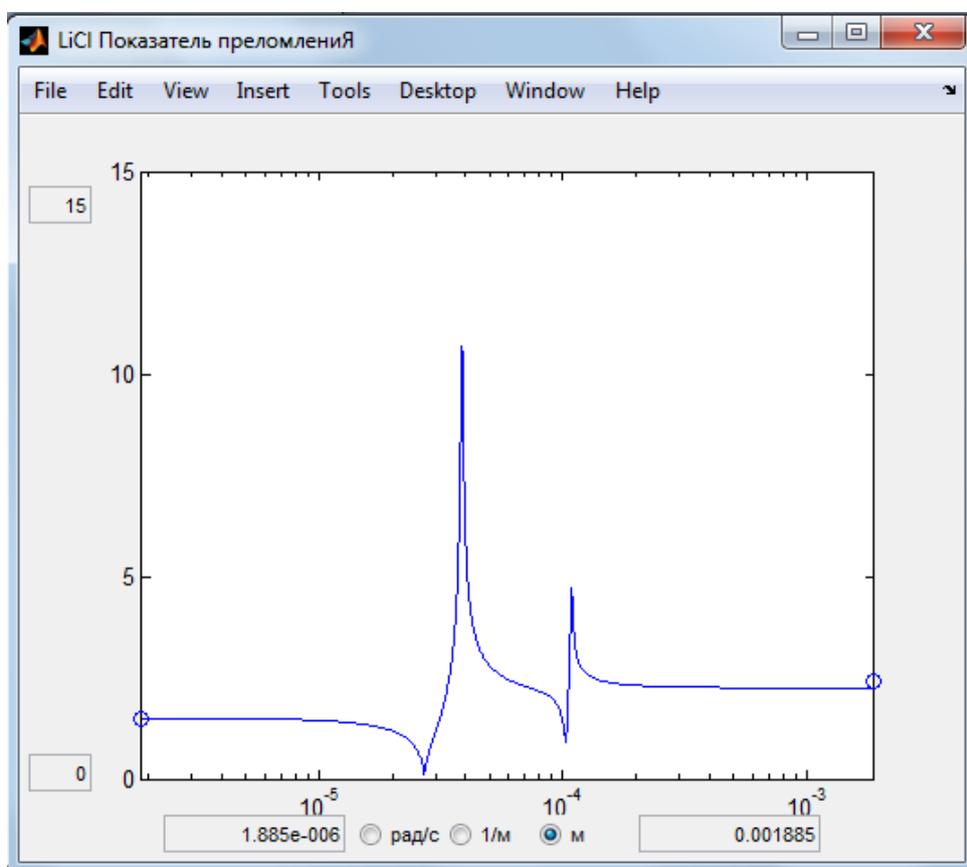


Рисунок 16 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития NaCl.

Атомная масса NaCl

$$M_{\text{NaCl}} = (M_{\text{Na}} + M_{\text{Cl}}) = 22,98977 + 35,453 = 58,44277 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность NaCl

$$\rho_{\text{NaCl}} = 2165 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 17.

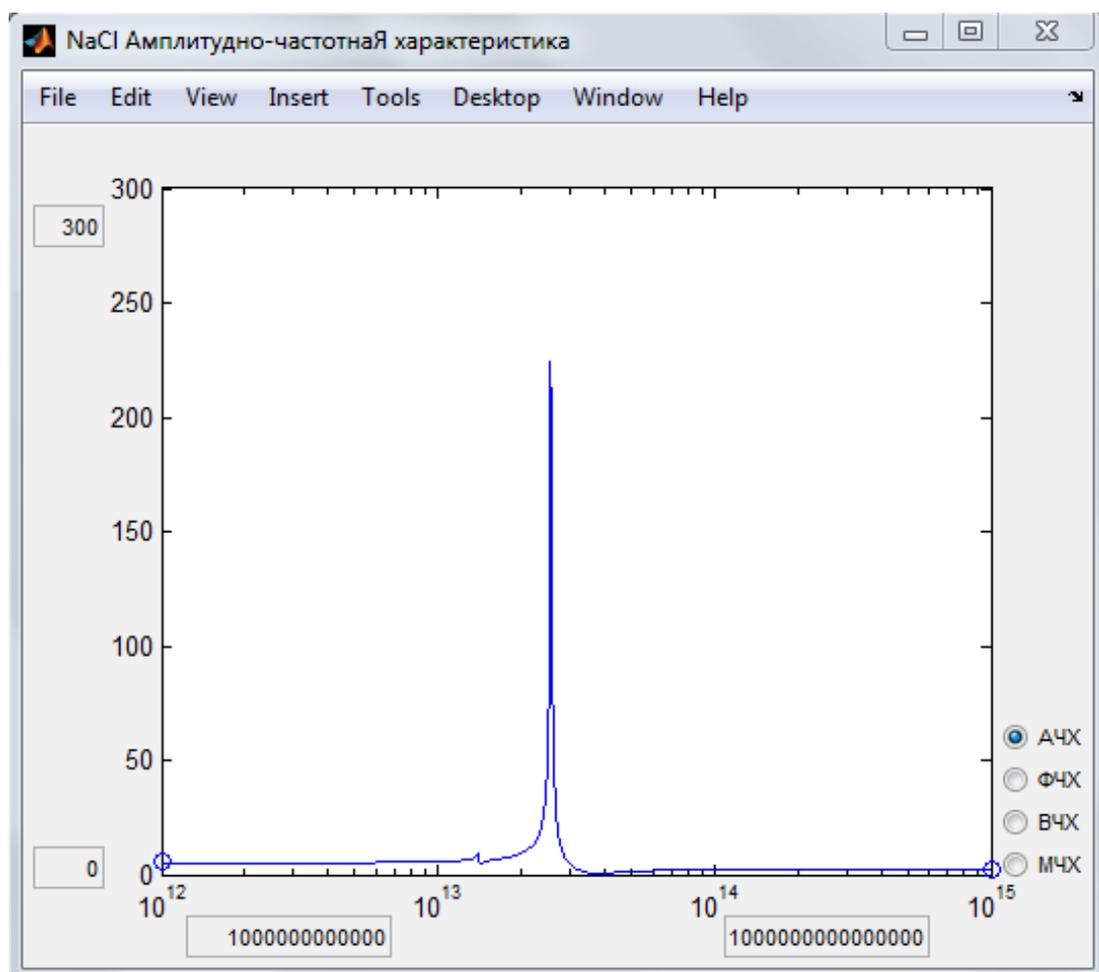


Рисунок 17 – График амплитудно-частотной характеристики

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 18.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

54

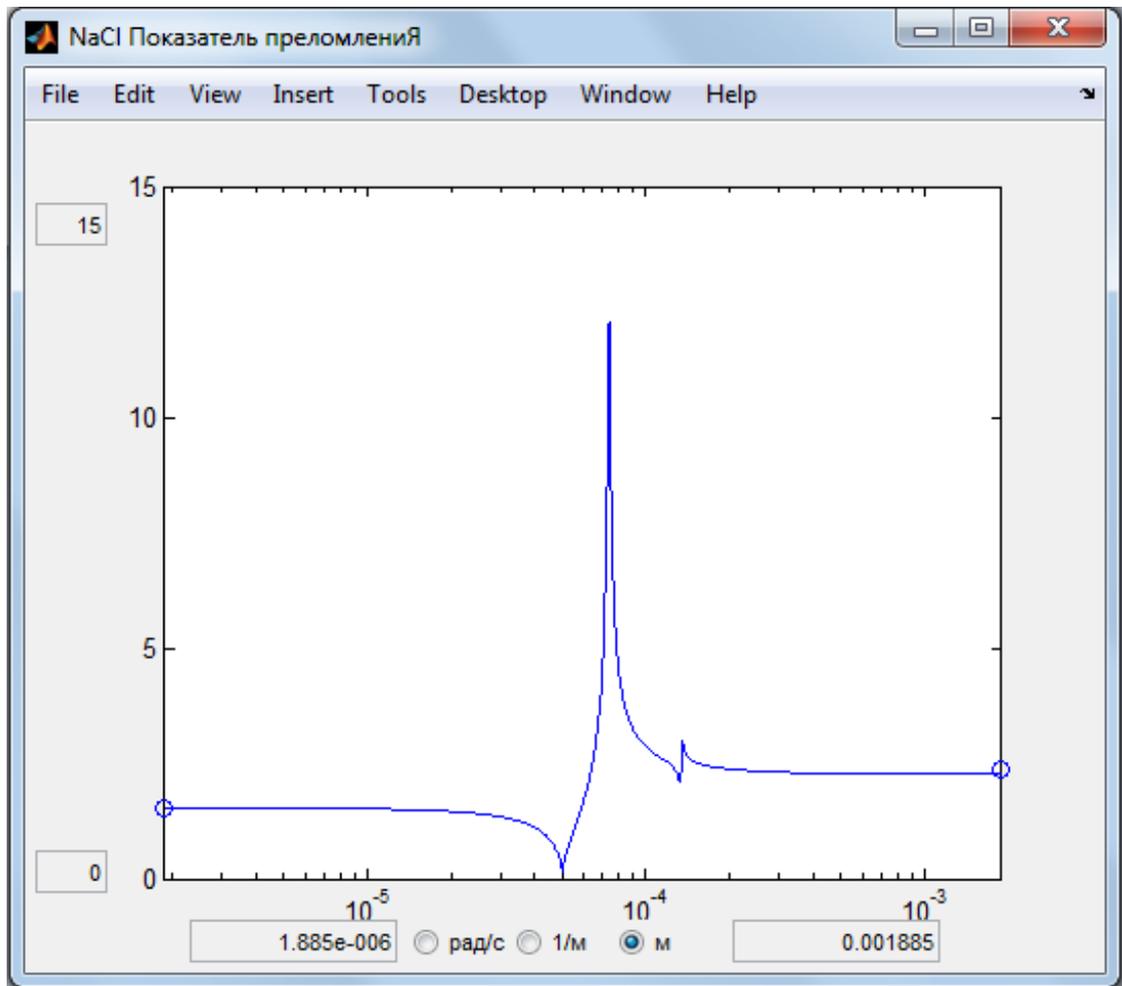


Рисунок 18 – График частотной зависимости показателя преломления  
 Моделирование характеристик хлорида лития KCl.

Атомная масса KCl

$$M_{KCl} = (M_K + M_{Cl}) = 39,0983 + 35,453 = 74,5513 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность KCl

$$\rho_{KCl} = 1984 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 19.

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 20.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

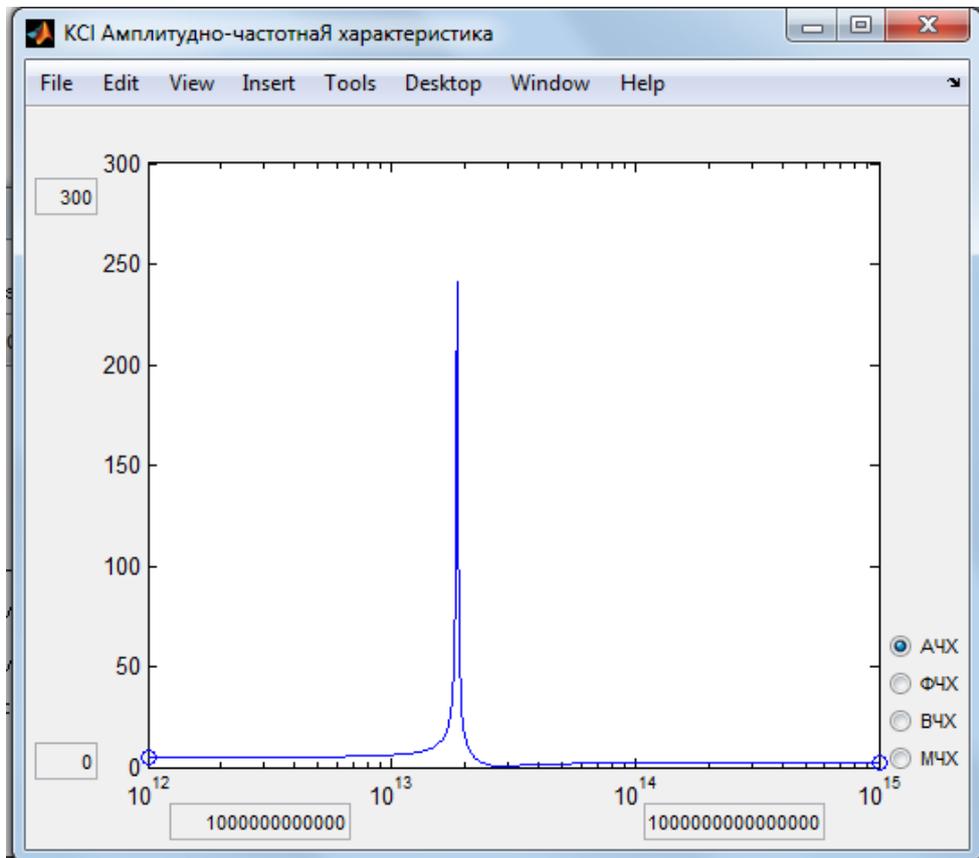


Рисунок 19 – График амплитудно-частотной характеристики

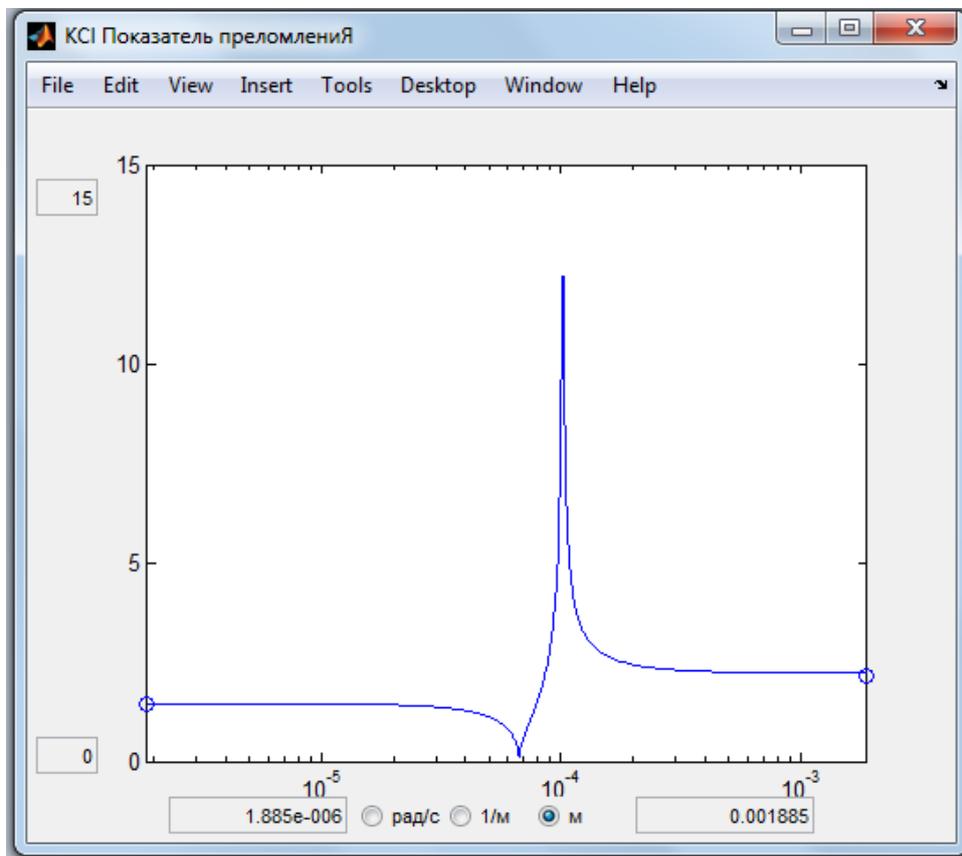


Рисунок 20 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития RbCl.

Атомная масса RbCl

$$M_{\text{RbCl}} = (M_{\text{Rb}} + M_{\text{Cl}}) = 85,4678 + 35,453 = 120,9208 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность RbCl

$$\rho_{\text{RbCl}} = 2798 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 21.

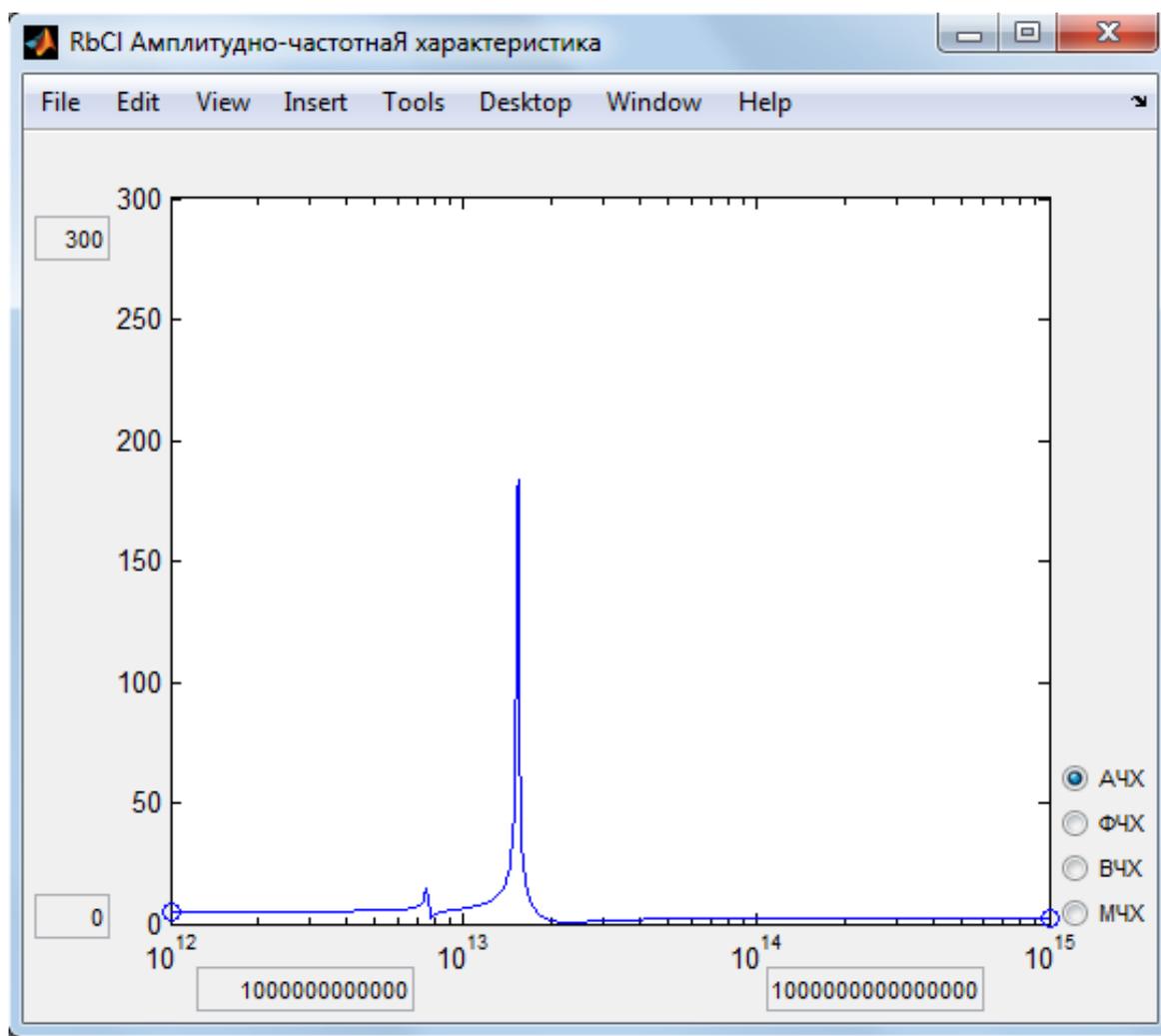


Рисунок 21 – График амплитудно-частотной характеристики

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 22.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

57

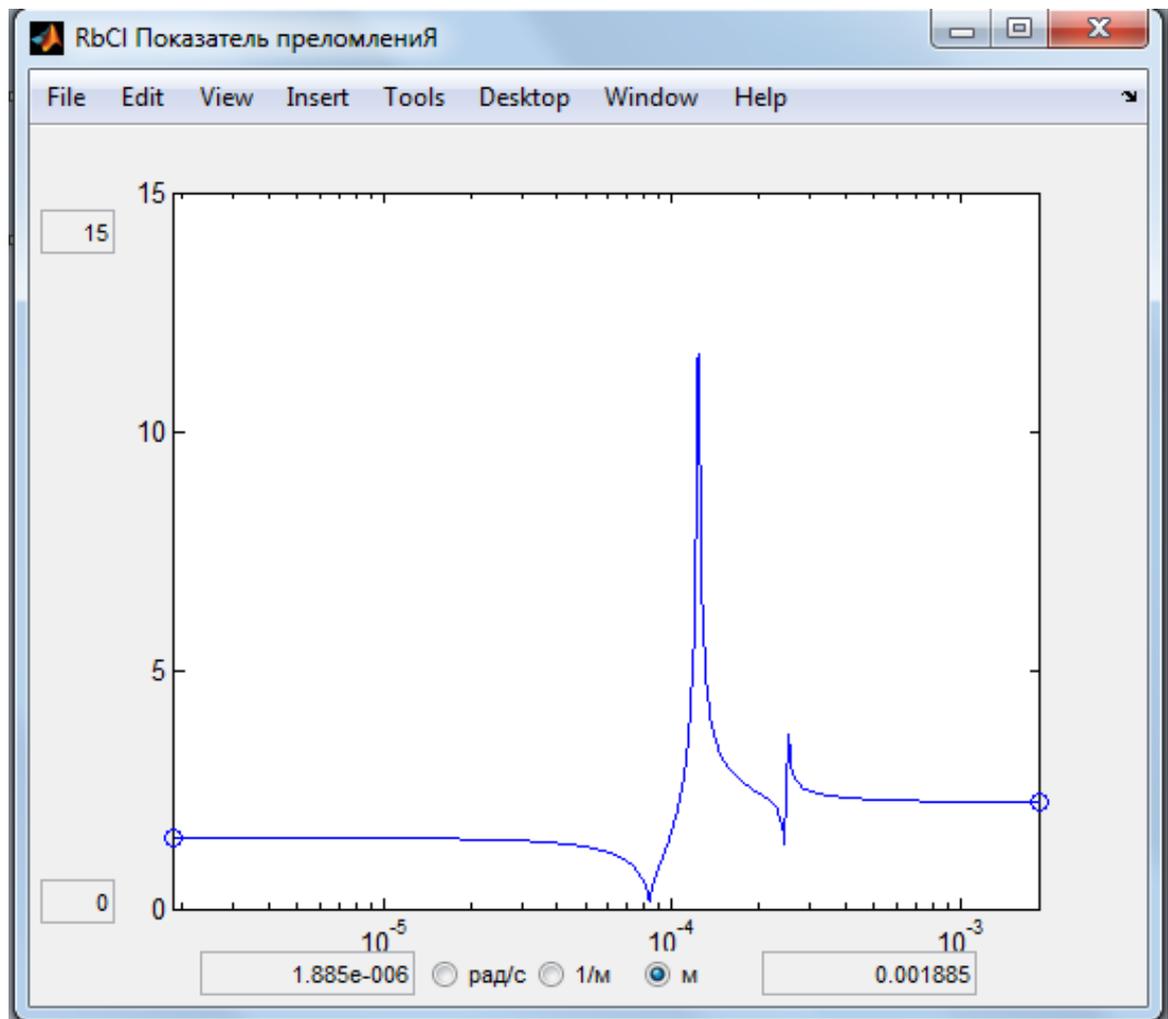


Рисунок 22 – График частотной зависимости показателя преломления

Моделирование характеристик хлорида лития CsCl.

Атомная масса CsCl

$$M_{\text{CsCl}} = (M_{\text{Cs}} + M_{\text{Cl}}) = 132,90545 + 35,453 = 168,36 \text{ (a.e.m)}$$

Плотность CsCl

$$\rho_{\text{LiCl}} = 3590 \text{ (кг/м}^3\text{)}$$

Получим график амплитудно-частотной характеристики, рисунок 23.

Получим график частотной зависимости показателя преломления, рисунок 24.

Для показателя преломления характерно за шкалу x брать длину волны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

58

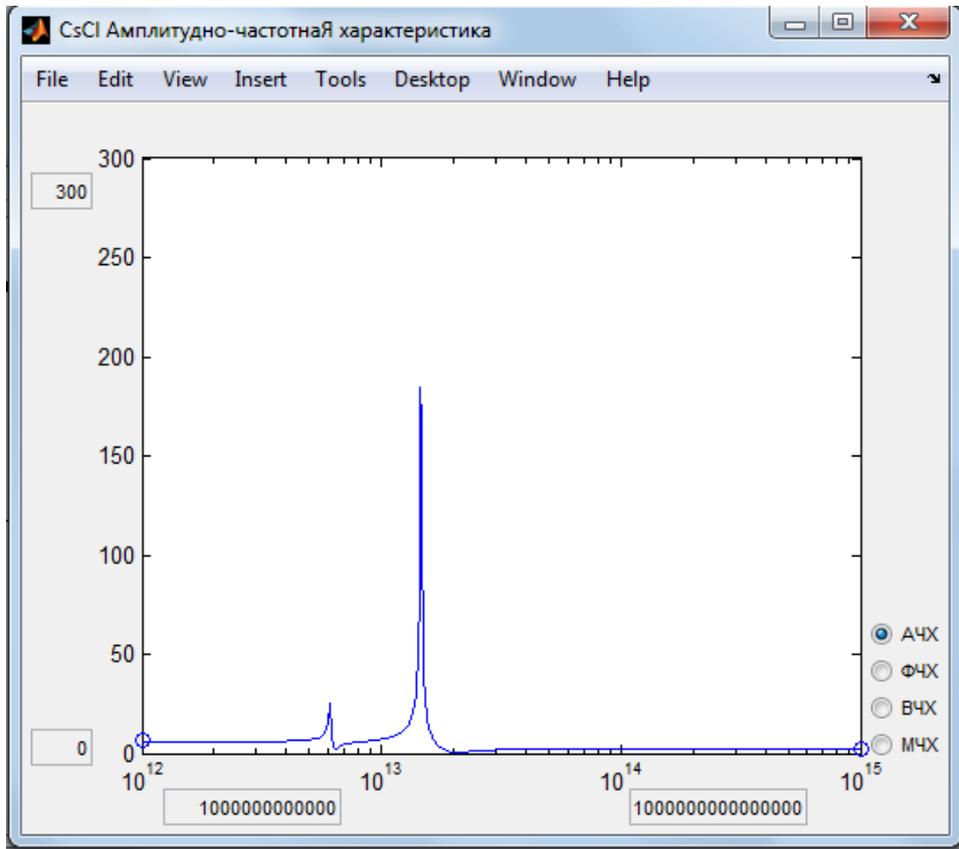


Рисунок 23 – График амплитудно-частотной характеристики

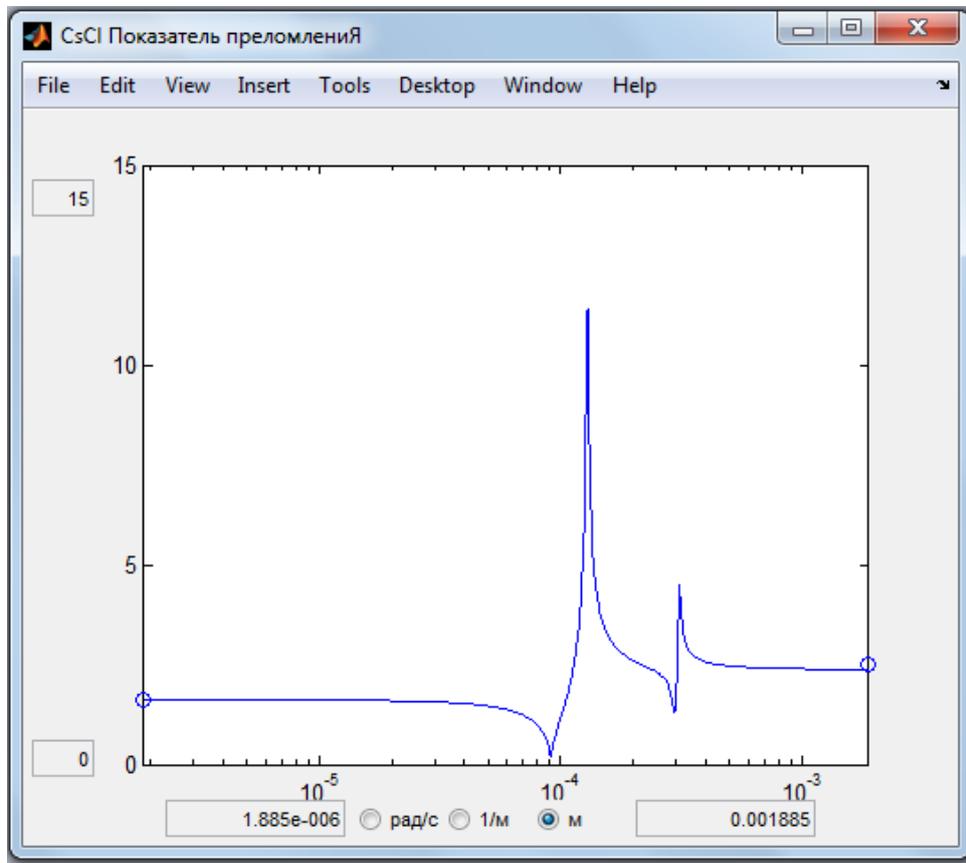


Рисунок 24 – График частотной зависимости показателя преломления

Из полученных графиков хорошо видно, что теоретическая модель хорошо согласуется с экспериментальными данными. Графики проходят близко от контрольных точек.

Данные графики также подтверждает согласованность теоретической модели и экспериментальных данных.

На графиках отчетливо видны два всплеска и два провала, которые можно объяснить резонансными явлениями для каждого из двух атомов, при совпадении частоты электрического поля с собственной частотой того или иного атома

### 3.4 Руководство пользователя

В этом разделе описываются правила работы с ПО.

#### 3.4.1 Установка ПО

Для установки ПО нужно в среде MATLAB, в диалоге списка директорий, изображенного на рисунке 25, добавить директорию, в которой находятся файлы программы. Сделать это можно нажав на кнопку «Add folder...» и в открывшемся диалоге указать путь к директории. Для того чтобы не было необходимости в проведении этих действий при каждом использовании ПО, нужно сохранить сделанные изменения списка директорий (кнопка «Save»).

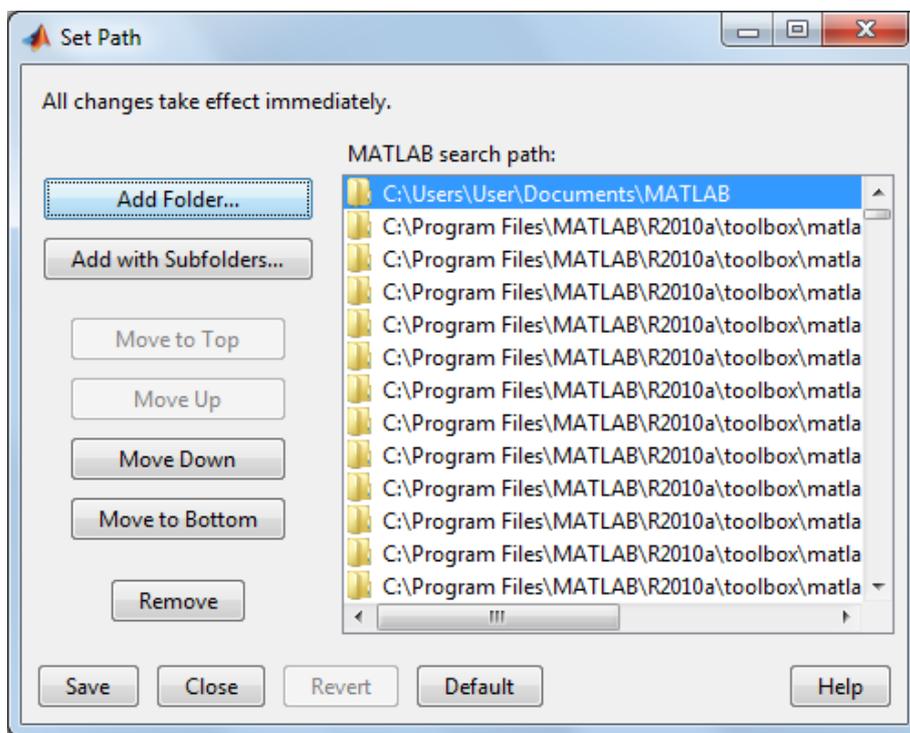


Рисунок 25 – Диалог списка директорий

В результате проведенных действий программа будет доступна из командной строки MATLAB.

### 3.4.2 Использование ПО

Для запуска программы нужно в командной строке MATLAB ввести «diel» и нажать enter.

На экране появится главное окно приложения, изображенное на рисунке 26.

В этом окне можно выбрать химическое соединение, частотную область моделирования. Для того чтобы выполнить моделирование, нужно указать для какой области осуществлять моделирование или оставить значения по умолчанию. Поля области моделирования являются связанными, при изменении значения в одном из этих полей происходит автоматический пересчет других полей, в соответствии с физическими формулами, связывающими длину волны, круговую частоту и волновое число.

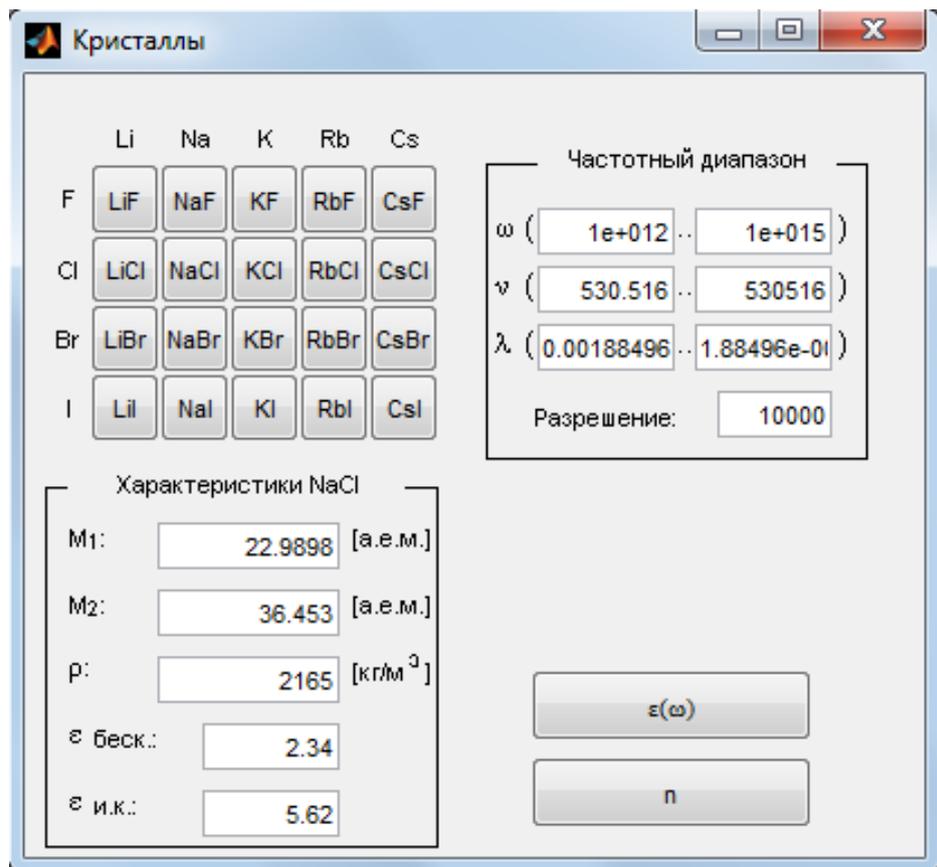


Рисунок 26 – Главное окно

Далее нужно выбрать химическое соединение, нажав на кнопку нужного хи-

мического соединения. После чего в окне характеристики соединения появятся характеристики выбранного соединения.

Теперь можно выбрать моделируемую характеристику: диэлектрическая проницаемость или показатель преломления, после нажатия на кнопку выбора характеристики на экране появится окно моделирования диэлектрической проницаемости 27.

В окне моделирования можно выбрать требуемую характеристику (АЧХ, ФЧХ, ВЧХ, МЧХ; для диэлектрической проницаемости), и шкалу по x (волновое число, длина волны; для показателя преломления). Здесь же можно выбрать диапазон по шкалам x и y. В заголовке окна выводится название выбранного соединения и изображенная характеристика.

Для завершения работы нужно закрыть все окна, открытые программой и выйти из системы MATLAB.

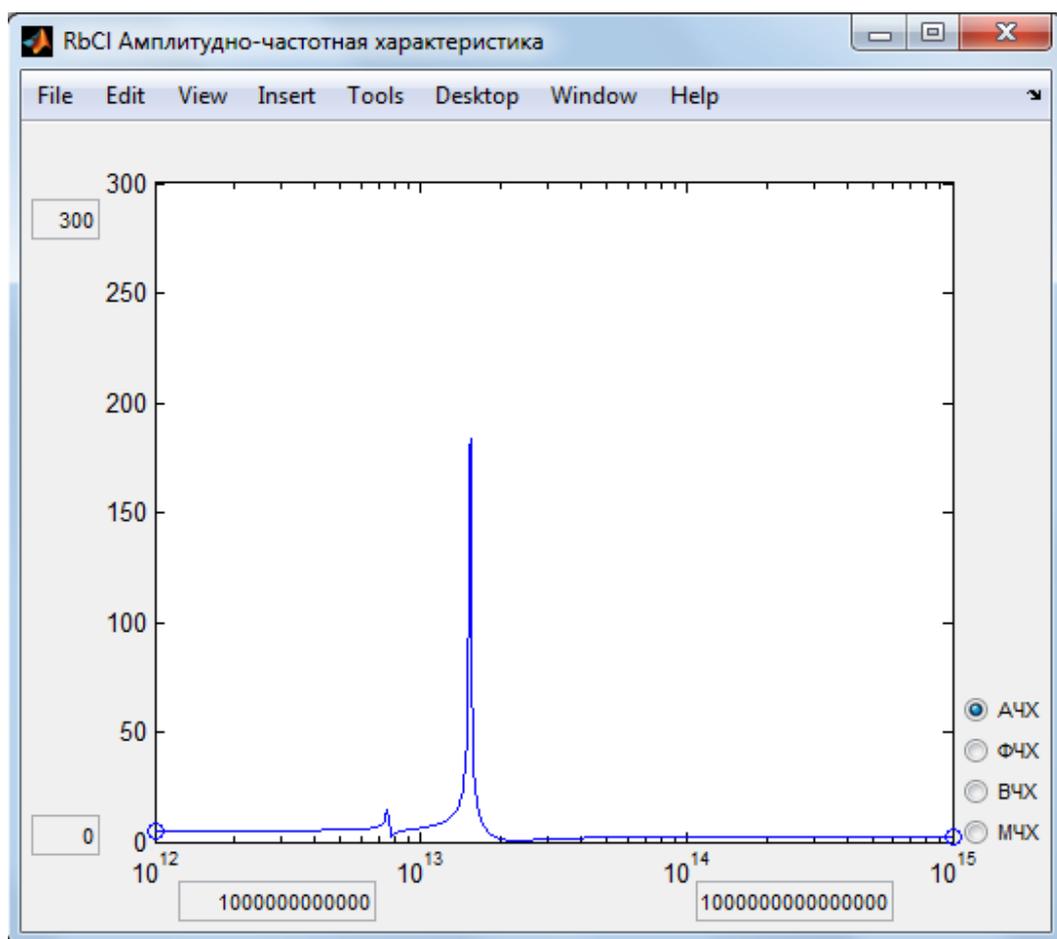


Рисунок 27 – Окно моделирования диэлектрической проницаемости

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенной работы был получен следующие результаты:

Исследован процесс упругой электронной поляризации и получена математическая модель, описывающая диэлектрическую проницаемость и показатель преломления.

Программный продукт, позволяющий получить частотные характеристики диэлектрической проницаемости и показателя преломления, для ряда кристаллов.

Полученная математическая модель позволяет вычислить комплексную диэлектрическую проницаемость и скалярный показатель преломления как функцию от круговой частоты.

При разработке программного комплекса использовались следующие технологии программирования – модульное программирование, процедурное программирование, обработка исключений, сценарии.

Математическое описание процесса упругой электронной поляризации является довольно сложным. Его использование требует значительного объема вычислений. Прилагаемый пакет прикладных программ позволяет решать поставленную задачу достаточно эффективно. При этом от исследователя требуются лишь навыки работы на персональном компьютере.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		63

## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ефимов, А.И. и др. Свойства неорганических соединений: Справочник. – Л.: Химия, 1983.
2. Бесекерский, В.А. Теория систем автоматического управления / В.А. Бесекерский, Е.М. Попов. – М., 2004. – 747 с.
3. Li H.H. Refractive Index of Alkali Halides and its Wavelength and Temperature Derivative // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1976. Vol. 5. No. 2. P. 329-528.
4. Упругая электронная поляризации конденсированных диэлектриков / И.Е. Еремин, В.В. Еремина, Н.С. Костюков, В.Г. Моисеенко // Доклады Академии наук. – 2010. – Т. 432, № 5. – С. 612-615.
5. Дьяконов, В. MATLAB: учебный курс / В. Дьяконов. – СПб: Питер, 2001. – 560 с.: ил.
6. Еремин, И.Е., Сычева М.П. Моделирование частотных спектров электронной поляризации щелочных фторидов // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2013. – № 1(28). – С. 69-76
7. Потемкин, В.Г. Вычисления в среде MatLab / В.Г. Потемкин – М.: Диалог-Мифи, 2004. – 714 с.
8. Потемкин, В.Г. Система MATLAB. Справочное пособие / В.Г. Потемкин – М.: Диалог-МИФИ, 2006. – 350 с
9. Дьяконов, В.П. Справочник по применению системы PC MatLab / В.П. Дьяков – М.: Физматлит, 2007. – 112 с.
10. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Кибернетическая модель процесса упругой электронной поляризации диэлектрика // Электричество. – 2004. – № 1. – С. 50-54.
11. Воробьев А.А. Ионные и электронные свойства щелочно-галогидных кристаллов. – Томск: ТГУ, 1968.
12. Костюков, Н.С. Системная модель упругой электронной поляризации кристалла фторида лития / Н.С. Костюков, И.Е. Еремин, В.А. Оверчук // Перспективные материалы. - 2006. - № 2. - С. 33-38.
13. Еремин, И.Е. Кибернетическая теория поляризации щелочно-галогидных кристаллов. I / И.Е. Еремин // Информатика и системы управления. - 2009.-№

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		64

1(19).-С. 40-45.

14. Еремин, И.Е. Кибернетическая теория поляризации щелочно-галлоидных кристаллов. II / И.Е. Еремин // Информатика и системы управления. - 2009.- №2(20).-С. 50-59.

15. Потапов, А.А., Мецик, М.С. Диэлектрическая поляризация. – Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 1986. – 265 с.

16. Костюков, Н.С., Еремин, И.Е. Погрешность приближенных формул упругой электронной поляризуемости диэлектрика // Вестник Амурского научного центра ДВО РАН. – 1999. – Вып. 2. – Сер. 2. «Физика. Химия. Материаловедение». – С. 125-129.

17. Фрадков А.И. Кибернетическая физика. Принципы и примеры. -СПб.: Наука, 2003. 208 с.

18. Полторац О.М., Ковба Л.М. Физико-химические основы неорганической химии. М.: Изд-во МГУ, 1984. - 288 с.

19. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. М.: Высшая школа, 2001.-343 с.

20. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. М.: Наука, 1988. -234 с.

21. Костюков Н. С., Еремин И. Е. Математическое и имитационное моделирование диэлектрической проницаемости материалов // Математические методы в технике и технологиях (ММТТ-14): Сб. трудов 14 междунар. научн. конф. Смоленск, 2001. - Т. 6. - С. 79-80.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		65

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ

#### 1 Общие сведения

Наименование работы: «Компьютерное моделирование электронной поляризации щелочно-галоидных кристаллов».

Разработчик: студент факультета математики и информатики Амурского государственного университета Тюстина Татьяна Евгеньевна.

Заказчик: Амурский государственный университет.

#### 2 Назначение и цели создания системы

##### 2.1 Назначение системы

Назначение разрабатываемой системы состоит в моделировании электронной поляризации щелочно-галоидных кристаллов. Результатами работы системы являются:

- 1) вывод графика частотной зависимости коэффициента диэлектрической проницаемости от электрического поля.
- 2) вывод графика временной зависимости коэффициента диэлектрической проницаемости от электрического поля.
- 3) вывод графика зависимости показателя преломления от электрического поля.
- 4) вывод справочных данных для выбранного соединения.

Причем, графики диэлектрической проницаемости должны строиться относительно круговой частоты, а график показателя преломления относительно длины волны.

##### 2.2 Цели создания системы

Возможность быстрого получения частотных характеристик для выбранного кристалла.

#### 3 Характеристика объекта автоматизации

Объектом автоматизации является работа по получению частотных характеристик диэлектрической проницаемости для ряда кристаллов из таблицы А1.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		66

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

Таблица А1 – Химические соединения

Химическое соединение	Плотность, кг/м <sup>3</sup>	Тип решетки	Экспериментальная диэлектрическая проницаемость в диапазоне	
			инфракрасный	видимый
NaF	2780	ГЦ		
NaCl	2165	ГЦ	2,25	5,62
NaBr	3200	ГЦ	2,65	5,99
NaI	3670	ГЦ	2,91	6,60
KF	2480	ГЦ		
KCl	1988	ГЦ	2,13	4,68
KBr	2750	ГЦ	2,33	4,78
KI	3120	ГЦ	2,69	4,94
RbF	3200	ГЦ		
RbCl	2760	ГЦ	2,19	5,00
RbBr	3350	ГЦ	2,33	5,00
RbI	3550	ГЦ	2,63	5,00
CsF	4115	ОЦ		
CsCl	3990	ОЦ	2,60	7,20
CsBr	4440	ОЦ	2,78	6,51
CsI	4510	ОЦ	3,03	5,65

Атомные массы приведены в таблице А2

Таблица А2 – Массы атомов

Химический элемент	Масса (а.е.м)
1	2
К (Калий)	39,0983
Na (Натрий)	22,98977
Rb (Рубидий)	85,4678

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
------	------	----------	-------	------

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

67

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

Продолжение таблицы А2

1	2
Cs (Цезий)	132,9054
F (Фтор)	18,998403
Cl (Хлор)	36,453
Br (Бром)	79,904
I (Йод)	126,9045

4 Требования к системе

4.1 Требования к функциям, выполняемым системой

Система должна предоставлять следующие функции:

- 1) выбор исследуемого кристалла;
- 2) вывод справочной информации о выбранном кристалле;
- 3) вывод графиков частотных характеристик диэлектрической проницаемости;
- 4) вывод на график контрольных точек, для проверки кривой диэлектрической проницаемости.

Приложение должно обеспечивать получение результатов, которые были бы с достаточной достоверностью близки к результатам найденным экспериментальным путем.

4.2 Описание функций

Программный продукт должен иметь следующий набор выполняемых функций:

- вывод характеристик выбранного соединения;
- задание диапазона изменения аргумента;
- задание диапазона изменения функции от соответствующего аргумента;
- построение графика частотной зависимости оптического показателя преломления;
- построение графиков частотных характеристик диэлектрической проницаемости (АЧХ, ВЧХ);

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

- построение графика временной зависимости диэлектрической проницаемости;
- построение контрольных точек, для проверки достоверности получаемых результатов.

### 5 Стандарты

В ходе работы должны быть учтены следующие стандарты:

1. ГОСТ 24.103-84 – Автоматизированные системы управления. Основные положения.
2. ГОСТ 24.104-85 – Автоматизированные системы управления. Общие требования.
3. ГОСТ 34.602-89 – Информационная технология. Комплекс стандартов на автоматизированные системы. Техническое задание на создание автоматизированной системы.

### 6 Информационная совместимость

Программный продукт для имитационного моделирования характеристик процесса упругой ионной поляризации разрабатывается на языке совместимом с языком системы Matlab. Машинный язык совместим с ЭВМ на базе процессоров серии x86. Приложение должно работать с данными, представленными в десятичной форме. Сообщения и экранные формы должны иметь стандартный вид операционной системы Windows.

### 7 Программные ограничения, совместимость

Сложность математических моделей поляризационных процессов в диэлектриках делает автоматизацию вычислительных процедур необходимым условием качественного исследования их свойств. Для этих целей могут использоваться интегрированные системы и пакеты прикладных программ для выполнения расчетов.

Программное обеспечение должно предоставлять возможность для корректной работы разрабатываемого приложения, кроме того, оно должно обеспечивать выполнение процессов моделирования с заданной точностью и быстродействием.

Для корректной работы приложения необходимо наличие операционной системы Windows XP/7/Vista и среды MatLab 7 или более поздних версий. Указанная

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		69

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

среда должна содержать ToolBox Control.

8 Требования к составу и параметрам технических средств (аппаратные ограничения)

Для работы программы необходима среда на которой она будет выполняться. Такой средой является MATLAB версии 7.

Аппаратное и программное обеспечение должно в первую очередь соответствовать минимальным требованиям, предъявляемым выбранной версией MATLAB. Минимальные требования:

- 1) Intel совместимый процессор не ниже Pentium;
- 2) операционная система Windows XP/7/Vista;
- 3) устройство CD-ROM для инсталляции;
- 4) минимально 128 МВ ОЗУ, рекомендуется 256 МВ;
- 5) свободное пространство на жестком диске, в зависимости от комплекта установки, от 400 МВ;
- 6) указатель «мышь».

### 9 Входные данные

Входными данными разрабатываемого программного продукта являются числовые значения параметров химического соединения. Входные данные должны быть представлены в соответствующих полях данных. Входные данные также могут извлекаться из внешних носителей информации. Эти данные необходимы для проведения вычислительного эксперимента и анализа адекватности модели.

### 10 Процессы обработки

В соответствии с входными данными программное изделие должно вычислять ряд характеристик и коэффициентов, позволяющих проводить дальнейший анализ модели, а так же осуществлять корректное моделирование процесса упругой ионной поляризации и на выходе давать графическое представление результатов протекания процесса.

### 11 Выходные данные

Логическим завершением преобразования входных данных будут являться характеристики процесса упругой электронной поляризации, полученные при реали-

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		70

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

зации кибернетического подхода, на основе которого проводится имитационное моделирование и сравнение с физическими экспериментами.

Результатами моделирования являются длинноволновый спектр оптического показателя преломления, частотная и временная зависимость диэлектрической проницаемости.

### 12 Результирующие компоненты изделия

Программное изделие должно содержать тексты программ (листинги), представляющие собой комплект распечаток, полученных при трансляции программного изделия, а также тексты программ в виде исходных модулей, представляющие собой совокупность операторов, которые должны быть откомпилированы для получения готовой программы. Необходимо так же наличие руководства пользователя.

### 13 Носители информации

В качестве основного носителя информации для разрабатываемого программного изделия выступает жесткий диск, на котором хранится данное приложение, который позволит достаточно быстро запускать программное изделие, осуществлять моделирование и сохранять результаты его работы. Для переноса программного продукта на другие персональные компьютеры в качестве носителей могут выступать гибкие и компакт диски.

### 14 Требования к надежности

Основное требование к надежности – это высокая вероятность работы системы без отказов в течение определенного периода времени, это функция воздействия ошибок на пользователя системы. Надежность зависит от многих причин, в том числе из – за проявления ошибок, допущенных в процессе разработки алгоритма и построения программ по этим алгоритмам, а также и от того, как программа используется.

Ошибки выявляются и устраняются в процессе отладки и опытной эксплуатации. На стадии опытной эксплуатации основная задача заключается в снижении качества ошибок, до заданного уровня. На стадии промышленной эксплуатации ошибки ПО, как правило, не исправляются.

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		71

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

Для надежной работы также необходимо, чтобы надежно работала аппаратная и программная части персонального компьютера, на котором работает данное приложение а также отсутствие перебоев в питании компьютера.

Возникающие ошибки по возможности могут быть исправлены оператором (например, ошибки из-за неправильно введенных данных). После обнаружения ошибки необходимо повторно ввести данные в поля данных или перезапустить приложение MATLAB для имитационного моделирования. Контроль входной и выходной информации осуществляется с помощью специальных процедур используемых в приложении.

### 15 Рабочие характеристики

Эффективность программного изделия измеряется временем расчета результатов моделирования, которое не должно превышать заданное время моделирования. Данный параметр также зависит от заданной точности вычислений и характеристик программного и аппаратного обеспечения.

### 16 Стадии и этапы разработки

Разработка включает следующие стадии: теоретические и экспериментальные исследования, разработка приложения для имитационного моделирования, тестирование разработанного приложения.

					<i>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		72

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

### Исходные тексты программы

#### Список файлов программного продукта

```
$/Диплом/Программа  
diel.m  
dielectric_gui.m  
epsilon_via_omega.m  
lamda2omega.m  
omega2lamda.m  
omega2wave.m  
phis.m  
plot_gui.m  
wave2omega.m
```

#### Листинг файлов

```
DIEL.M  
function diel  
% Функция diel  
% запуск программы  
dielectric_gui;  
  
DIELECTRIC_GUI.M  
function varargout = dielectric_gui(varargin)  
% dielectric_gui Application M-file  
% dielectric_gui - launch dielectric GUI.  
% dielectric_gui('callback_name', ...) invoke the named callback.  
  
if nargin == 0 % LAUNCH GUI  
    global lightspeed;  
    global omegal omega2 nu1 nu2 lamda1 lamda2 resolution epsiloninfrared;  
    global heditM1amu heditM2amu heditDensity heditEpsilonLight heditEpsilonIR;  
    global heditResolution;  
    global heditOmegal heditOmega2;  
    global heditNu1 heditNu2;  
    global heditLamda1 heditLamda2;  
  
    lightspeed=3000000000; % [m/s]  
    omegal=10E11; % [rad/s]  
    omega2=10E14; % [rad/s]  
    nu1=omega2wave(omegal); % [1/s]  
    nu2=omega2wave(omega2);  
    lamda1=omega2lamda(omegal); % [m]  
    lamda2=omega2lamda(omega2);  
    resolution = 10000;  
    epsiloninfrared = 2;  
    fontname = 'Arial CYR';  
  
    fig = figure('Name','Кристаллы','Numbertitle','off','Resize','on','Color',...  
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'),'Menubar','none','Units','characters',...  
..  
    'Position',[2, 10, 80, 27]);  
    % Кнопки выбора соединения  
    for i=1:5  
        switch i  
            case 1  
                alkaline = 'Li';  
            case 2  
                alkaline = 'Na';
```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

73

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

alkaline = 'K';
    case 4
        alkaline = 'Rb';
    case 5
        alkaline = 'Cs';
    end
    try
        uicontrol('Style','text','String',alkaline,'Units','characters', ...
            'Position',[5.8+(i-1)*6.2 23.8 6.2 1.5],...
            'HorizontalAlignment','center','FontName',fontname);
    catch
        disp(lasterr);
    end
    for j=1:4
        switch j
            case 1
                halogen = 'F';
            case 2
                halogen = 'Cl';
            case 3
                halogen = 'Br';
            case 4
                halogen = 'I';
        end
        if i == 1
            try
                uicon-
trol('Style','text','String',halogen,'Units','characters', ...
                    'Position',[1.8 20.8-(j-1)*2.4 4 2.4],...
                    'HorizontalAlignment','center','FontName',fontname);
            catch
                disp(lasterr);
            end
        end
        try
            uicontrol('Style','pushbutton','String',[alkaline halogen],...
                'Units','characters','Position',[5.8+(i-1)*6.2 21.5-(j-1)*2.4
6.2 2.4], ...
                'Callback',['dielectric_gui('pushElement','' alkaline
''','' halogen '')'],...
                'FontName',fontname);
        catch
            error(dlg(lasterr));
        end
    end
end
end
% Рамка характеристик соединения
try
    % Создаем не обязательные элементы (надписи, рамки)
    uicontrol('Style','frame','Units','characters','Position',[1.8 0.3 35
12.5]);
    global hPropCaption;
    hPropCaption = uicontrol('Style','text','String','Характеристики
NaCl','Units','characters',...
        'Position',[3.8 12 30 1.4],'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','M :','Units','characters',...
        'Position',[3.8 9.92 6.2
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicon-
trol('Style','text','String','1','Units','characters','Position',[5.3 10.2 1
1],...
        'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname,'FontSize',7);

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		74

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

uicontrol('Style','text','String','[a.e.m.]','Units','characters',...
    'Position',[29 9.92 7
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','M :','Units','characters',...
    'Position',[3.8 7.6 6.2
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicon-
trol('Style','text','String','2','Units','characters','Position',[5.3 7.9 1
1]),...
    'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname,'FontSize',7);
    uicontrol('Style','text','String','[a.e.m.]','Units','characters',...
    'Position',[29 7.6 7
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','r:','Units','characters',...
    'Position',[3.8 5.6 10.2
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','[кг/м ]','Units','characters',...
    'Position',[29 5.3 7
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','3','Units','characters','Position',[34
5.5 0.9 1.6]),...
    'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname,'FontSize',6);
    uicon-
trol('Style','text','String','e','Units','characters','Position',[3.8 3.3 10.2
1.6]),...
    'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','беск.:','Units','characters',...
    'Position',[6 3 10.2
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    uicon-
trol('Style','text','String','e','Units','characters','Position',[3.8 1 10.2
1.6]),...
    'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','и.к.:','Units','characters',...
    'Position',[6 .7 10.2
1.6],'HorizontalAlignment','left','FontName',fontname);
    catch
        disp(lasterr);
    end
    try
        % Создаем обязательные элементы (едиты, кнопки)
        heditM1amu = uicon-
trol('Style','edit','Units','characters','Position',[11.8 9.92 16.2 1.6]),...
        'HorizontalAlignment','right','BackgroundColor',[1 1 1]),...
        'TooltipString','Масса 1-го элемента [атомная единица
массы]','FontName',fontname);
        heditM2amu = uicon-
trol('Style','edit','Units','characters','Position',[11.8 7.6 16.2 1.6]),...
        'HorizontalAlignment','right','BackgroundColor',[1 1 1]),...
        'TooltipString','Масса 2-го элемента [атомная единица
массы]','FontName',fontname);
        heditDensity = uicon-
trol('Style','edit','Units','characters','Position',[11.8 5.3 16.2 1.6]),...
        'HorizontalAlignment','right','BackgroundColor',[1 1 1]),...
        'TooltipString','Плотность кристалла
[кг/куб.м]','FontName',fontname);
        heditEpsilonLight = uicon-
trol('Style','edit','Units','characters','Position',[15.8 3 12.2 1.6]),...
        'HorizontalAlignment','right','BackgroundColor',[1 1 1]),...
        'TooltipString','Диэлектрическая проницаемость
(бесконечность)','FontName',fontname);
        %uicontrol('Style','pushbutton','String','OK','Units','characters','Position',[32.
4 1.3 8 2.8], ...

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		75

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

% 'Callback','dielectric_gui('pushbuttonOK'),'FontName',fontname);
catch
    errordlg(lasterr);
end

% Рамка спектр
try
    % Создаем не обязательные элементы (надписи, рамки)
    uicontrol('Style','frame','Units','characters','Position',[41 13.7 33.9
10.2]);
    uicontrol('Style','text','String','Частотный
диапазон','Units','characters',...
        'Position',[45.5 23.6 26.7 1],'FontName',fontname);

    uicon-
trol('Style','text','String','w','Units','characters','Position',[41.5 20.77 1.8
1.6],...
        'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','(','Units','characters',...
        'Position',[43.5 20.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','..','Units','characters',...
        'Position',[57.5 20.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String',')','Units','characters',...
        'Position',[71.5 20.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);

    uicon-
trol('Style','text','String','n','Units','characters','Position',[41.5 18.77 1.8
1.6],...
        'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','(','Units','characters',...
        'Position',[43.5 18.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','..','Units','characters',...
        'Position',[57.5 18.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String',')','Units','characters',...
        'Position',[71.5 18.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);

    uicon-
trol('Style','text','String','l','Units','characters','Position',[41.5 16.77 1.8
1.6],...
        'HorizontalAlignment','left','FontName','Symbol','FontSize',10);
    uicontrol('Style','text','String','(','Units','characters',...
        'Position',[43.5 16.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String','..','Units','characters',...
        'Position',[57.5 16.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);
    uicontrol('Style','text','String',')','Units','characters',...
        'Position',[71.5 16.77 2.2 1.6],'FontSize',10,'FontName',fontname);

    uicontrol('Style','text','String','Разрешение:','Units','characters',...
        'Position',[43.5 14.1 16.2 1.6],'FontName',fontname);
catch
    disp(lasterr);
end
try
    % Создаем обязательные элементы (едиты)
    heditOmega1 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[45.5 20.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',omega1,...

'Callback','dielectric_gui('editLoHiFreq_Callback',gcbo,'omega1'));
    heditOmega2 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[59.5 20.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		76

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',omega2,...
'Callback','dielectric_gui(''editLoHiFreq_Callback'',gcbo,''omega2'')');

    heditNu1 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[45.5 18.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',nul,...
        'Callback','dielectric_gui(''editLoHiFreq_Callback'',gcbo,''nu1'')');
    heditNu2 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[59.5 18.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',nu2,...
        'Callback','dielectric_gui(''editLoHiFreq_Callback'',gcbo,''nu2'')');

    heditLamda1 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[45.5 16.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',lamda1,...

'Callback','dielectric_gui(''editLoHiFreq_Callback'',gcbo,''lamda1'')');
    heditLamda2 = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[59.5 16.77 12.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',lamda2,...

'Callback','dielectric_gui(''editLoHiFreq_Callback'',gcbo,''lamda2'')');

    heditResolution = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'Position',[61.5 14.46 10.2 1.6],'HorizontalAlignment','right', ...
        'BackgroundColor',[1 1 1],'FontName',fontname,'String',resolution);
catch
    errordlg(lasterr);
end

try
    uicon-
trol('Style','pushbutton','Units','characters','Position',[45,4,25,2.5],...
    'FontNam-
e','Symbol','String','e(w)','Callback','dielectric_gui(''make_plot'',gcbo)',...
    'TooltipString','Диэлектрическая проницаемость');
catch
    errordlg(lasterr);
end

try
    uicon-
trol('Style','pushbutton','Units','characters','Position',[45,1,25,2.5],...
    'FontNam-
e',fontname,'String','n','Callback','dielectric_gui(''make_plot'',gcbo)',...
    'TooltipString','Показатель преломления');
catch
    errordlg(lasterr);
end

% По умолчанию NaCl
global m1amu m2amu density meshtype epsilonLight epsiloninfrared;
[m1amu, m2amu, density, meshtype, epsilonLight, epsiloninfrared]=phis('Na',
'Cl');
display_parameters_nothrow;

elseif ischar(varargin{1})

    try

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		77

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

        feval(varargin{:});
    catch
        errordlg(lasterr);
    end

end

% -----
% Функция вызывается при нажатии кнопки с именем хим. элемента
% для соответствующего элемента создает графическое изображение
% диэлектрической проницаемости
function pushElement(alkaline, halogen)
%global alkaline halogen element;
global element;
element = [alkaline halogen];
global hPropCaption;
set(hPropCaption, 'String', ['Характеристики ' element]);
% Загрузка физических параметров веществ
global m1amu m2amu density meshtype epsilonLight epsilonInfrared;
[m1amu, m2amu, density, meshtype, epsilonLight, epsilonInfrared]=phis(alkaline,
halogen);
% считываем параметры спектра (омега1 омега2 разрешение)
%read_spectrum_params_nothrow;
% Отображаем параметры хим. элемента в рамке 'параметры'
display_parameters_nothrow;
% Вызываем функцию графического отображения параметров хим. элемента
% параметры передаются через глобальные переменные
%plot_gui;

% -----
% Функция действует аналогично pushElement
%function varargout = pushbuttonOK()
%read_parameters_nothrow;
%read_spectrum_params_nothrow;
%display_parameters_nothrow;
%plot_gui;

% -----
% считывает параметры хим. соединения из соответствующей рамки
function read_parameters_nothrow()
global m1amu m2amu density epsilonLight epsilonInfrared;
global heditM1amu heditM2amu heditDensity heditEpsilonLight heditEpsilonIR;

try
    m1amu=abs(str2num(get(heditM1amu, 'String')));
catch
    disp(lasterr);
end

try
    m2amu=abs(str2num(get(heditM2amu, 'String')));
catch
    disp(lasterr);
end

try
    density=abs(str2num(get(heditDensity, 'String')));
catch
    disp(lasterr);
end
end

```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

**ВКР.145370.09.04.01.ПЗ**

Лист

78

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```
try
    epsilonlight=abs(str2num(get(heditEpsilonLight, 'String')));
catch
    disp(lasterr);
end

try
    epsiloninfrared=abs(str2num(get(heditEpsilonIR, 'String')));
catch
    disp(lasterr);
end

% -----
% Выводит параметры хим. соединения в рамку 'Параметры соедин-я'
function display_parameters_nothrow()
global mlamu m2amu density epsilonlight epsiloninfrared;
global heditMlamu heditM2amu heditDensity heditEpsilonLight heditEpsilonIR;

try
    set(heditMlamu, 'String', mlamu);
catch
    disp(lasterr);
end

try
    set(heditM2amu, 'String', m2amu);
catch
    disp(lasterr);
end

try
    set(heditDensity, 'String', density);
catch
    disp(lasterr);
end

try
    set(heditEpsilonLight, 'String', epsilonlight);
catch
    disp(lasterr);
end

try
    set(heditEpsilonIR, 'String', epsiloninfrared);
catch
    disp(lasterr);
end

% -----
% Считывает параметры спектра из рамки 'Спектр'
% вызывается из make_plot()
function read_spectrum_params_nothrow()
global heditOmega1 heditOmega2 heditResolution;
global omega1 omega2 resolution;

try
    omega1 = abs(str2num(get(heditOmega1, 'String')));
catch
    error('dlg(lasterr)');
end
```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

79

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

try
    omega2 = abs(str2num(get(heditOmega2, 'String')));
catch
    errordlg(lasterr);
end

try
    resolution=str2num(get(heditResolution, 'String'));
catch
    errordlg(lasterr);
end
% -----
% strcmp не проверена
function editLoHiFreq_Callback(h, param)
global heditOmega1 heditOmega2;
global heditNu1 heditNu2;
global heditLamda1 heditLamda2;

newvalstr = get(h, 'String');
eval(['global ' param ';' param '=' newvalstr ';' ]);

newval = str2num(newvalstr);
purepar = param(1:length(param)-1);
indx=param(length(param));
if strcmp(purepar, 'omega')
    h1 = eval(['global heditNu' indx]);
    h2 = eval(['global heditLamda' indx]);
    val1 = omega2wave(newval);
    val2 = omega2lamda(newval);
elseif strcmp(purepar, 'nu')
    h1 = eval(['global heditOmega' indx]);
    h2 = eval(['global heditLamda' indx]);
    val1 = wave2omega(newval);
    val2 = omega2lamda(val1);
elseif strcmp(purepar, 'lamda')
    h1 = eval(['heditOmega' indx]);
    h2 = eval(['heditNu' indx]);
    val1 = lamda2omega(newval);
    val2 = omega2wave(val1);
end
set(h1, 'String', val1);
set(h2, 'String', val2);
% -----
% Вызывается из кнопок выбора графика
function make_plot(h)
global plot_type;
plot_type=get(h, 'String');
read_spectrum_params_nothrow;
plot_gui;

    EPSILON_VIA_OMEGA.M
function [mag, phase, re, im, n] = epsilon_via_omega(m1, m2, density, meshtype,
epsilononlight, omega)

% World constants. Defined here. Used inside local functions.
global epsilon0 electroncharge lightspeed;
epsilon0 = 8.85E-12; % [coul^2/N/m^2]
electroncharge = 1.6E-19; % [Coulombs]
%lightspeed = 3.0E8; % [m/s]

% Calculating secondary parameters
concentr = density/(m1 + m2);

```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
------	------	----------	-------	------

**ВКР.145370.09.04.01.ПЗ**

Лист

80

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

if meshtype == 'Гране-центрированная' % Edge centered cristal
    radius = (2*concentr)^(-1/3);
elseif meshtype == 'Объемно центрированная' % Volume centered crislal
    radius = (8*concentr/3/3^(1/3))^(-1/3);
else % Неправильный тип решетки
    radius = (2*concentr)^(-1/3);
end
k=electroncharge^2/(4*pi*epsilon0*radius^3); % Коэф упругости
omega01 = sqrt(k/m1); % omega01 [1/s]
omega02 = sqrt(k/m2); % omega02 [1/s]
beta1 = omega01/100; % [1/s]
beta2 = omega02/100; % [1/s]

num1 = [m2 2*beta1*m2 2*omega02^2*m2-omega01^2*m1]*electroncharge^2;
num2 = [m1 2*beta2*m1 2*omega01^2*m1-omega02^2*m2]*electroncharge^2;
den = [1 2*(beta1 + beta2) 2*(omega01^2 + omega02^2 + 2*beta1*beta2)
4*(beta1*omega02^2 + beta2*omega01^2) 3*(omega01*omega02)^2]*m1*m2;
[tnum tden] = parallel(num1, den, num2, den);
%[re im] = nyquist(tnum*concentr*2/3/epsilon0, tden, omega);
%re=re+epsilon0light;
%[tnum tden] = feedback(1, 1, tnum*concentr*2/3/epsilon0, tden, -1);
%[mag phase] = bode(tden, tnum-tden+tden*epsilon0light, omega);
[tnum tden] = parallel(tnum*concentr*2/3/epsilon0, tden, epsilon0light - 1, 1);
[tnum tden] = feedback(1, 1, tnum, tden, -1);
[re im] = nyquist(tden, tnum, omega);
[mag phase] = bode(tden, tnum, omega);
n=sqrt((abs(re)+sqrt(re.^2+im.^2))./2);

LAMDA2OMEGA.M
function y=lamda2omega(x)
% Преобразование длины волны в круговую частоту
global lightspeed;
y = lightspeed./x.*2*pi;

OMEGA2LAMDA.M
function y=omega2lamda(x)
% Преобразование круговой частоты в длину волны
global lightspeed;
y = lightspeed.*2*pi./x;

OMEGA2WAVE.M
function y=omega2wave(omega)
% omega2wave(omega)
% преобразование круговой частоты в волновое число
global lightspeed;
y=omega/2/pi/lightspeed;

WAVE2OMEGA.M
function y=wave2omega(wave)
% wave2omega(wave)
% преобразование волнового числа в круговую частоту
global lightspeed;
y=wave*2*pi*lightspeed;

PHIS.H
function [mlamu, m2amu, density, meshtype, epsilon0light, epsiloninfra-
red]=phis(alkaline, halogen)
%global mK_amu mNa_amu mRb_amu mCs_amu mF_amu mCl_amu mBr_amu;

% [Atom mass units]
mLi_amu=6.9412;
mK_amu=39.0983;

```

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

mNa_amu=22.98977;
mRb_amu=85.4678;
mCs_amu=132.9054;
mF_amu=18.998403;
mCl_amu=36.453;
mBr_amu=79.904;
mI_amu=126.9045;
%global pLi pKCl pKF pKBr pKI pNaCl pNaF pNaBr pNaI pRbCl pRbF pRbBr pRbI pCsCl
pCsF pCsBr pCsI;

```

% плотности в [kg/m3]

```

pLiCl=2070;
pLiF=2640;
pLiBr=3464;
pLiI=4076;
pKCl=1988;
pKF=2480;
pKBr=2750;
pKI=3120;
pNaCl=2165;
pNaF=2780;
pNaBr=3200;
pNaI=3670;
pRbCl=2760;
pRbF=3200;
pRbBr=3350;
pRbI=3550;
pCsCl=3990;
pCsF=4115;
pCsBr=4440;
pCsI=4510;

```

% Оптические диэлектрические проницаемости

```

eLiF=1.86;% 'no';
eLiCl=2.25;
eLiBr=2.0;
eLiI=2.0;
eNaF=2.03;% 'no';
eNaCl=2.34;
eNaBr=2.65;
eNaI=2.91;
eKF=1.91;% 'no';
eKCl=2.13;
eKBr=2.33;
eKI=2.69;
eRbF=2.01;% 'no';
eRbCl=2.19;
eRbBr=2.33;
eRbI=2.63;
eCsF=2.54;% 'no';
eCsCl=2.60;
eCsBr=2.78;
eCsI=3.03;

```

```

eirLiF=4.35;% 'no';
eirLiCl=5.78;
eirLiBr=5.0;
eirLiI=5.0;
eirNaF=4.80;% 'no';
eirNaCl=5.62;
eirNaBr=5.99;
eirNaI=5.60;
eirKF=4.55;% 'no';

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		82

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

eirKCl=4.68;
eirKBr=4.78;
eirKI=4.94;
eirRbF=4.98;%'no';
eirRbCl=5.00;
eirRbBr=5.00;
eirRbI=5.00;
eirCsF=6.44;%'no';
eirCsCl=6.20;%change
eirCsBr=6.51;
eirCsI=5.65;

%global m1amu m2amu density epsilonflight epsiloninfrared element alkaline halogen
meshtype;

% Выбор типа решетки, для Na и K Rb - 1(гранецентрированная), а для Cs -
2(объемоцентрированная)
if alkaline == 'Cs'
    meshtype = 'Объемно центрированная';
else
    meshtype = 'Гране-центрированная ';
end

% Выполнение скрипта выбора нужных параметров по химическому соединению
element = [alkaline halogen];
eval(['m1amu = m' alkaline '_amu;m2amu = m' halogen '_amu;density = p' element
';']);
try
    epsilonflight=eval(['e' element]);
catch
    errordlg(['Нет значения диэлектрической проницаемости в верхней границе для '
element ', по умолчанию будет 0.']);
    epsilonflight=0;
end
try
    epsiloninfrared= eval(['eir' element]);
catch
    errordlg(['Нет значения диэлектрической проницаемости в нижней границе для '
element ', по умолчанию будет 0.']);
    epsiloninfrared=0;
end

PLOT_GUI.M
function varargout = plot_gui(varargin)
% $Revision: 9 $
function varargout = plot_gui(varargin)
if nargin == 0 % LAUNCH GUI
    global m1amu m2amu element;
    global m1 m2;
    global minamplitude maxamplitude;
    global lightspeed;
    global omegal omega2;
    global heditLoFreq heditHiFreq heditHiAmplitude heditLoAmplitude;
    global x_scale1 x_scale2 x_scale_lo x_scale_hi;

    global plot_type;
    %global diel_pronic pokaz_prel;
    diel_pronic='e(w)';
    pokaz_prel='n';

    atommassunit=1.67E-27; % [kg]
    lightspeed=300000000;

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		83

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```
m1 = m1amu*atommassunit; % [kg]
m2 = m2amu*atommassunit; % [kg]
minamplitude = 0;
if plot_type == diel_pronic
    maxamplitude = 300;
    caption = 'Амплитудно-частотная характеристика';
else
    maxamplitude = 15;
    caption = 'Показатель преломления';

end

x_scale1 = omega1;
x_scale_lo = omega1;
x_scale2 = omega2;
x_scale_hi = omega2;
fontname = 'Arial CYR';

% Создание формы
fig = figure('Name',[element ' ' caption],'NumberTitle','off',...
    'Color',get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'),...
    'ResizeF-
cn','plot_gui('placeControls',gcb0),'Units','characters','Position',[73,10,85+
20,27+5]);

% Контролы редактирования области графика
% Min область X
try
    heditLoFreq = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname, ...
'Callback','plot_gui('editLoHiFreq_Callback',gcb0,'x_scale_lo'),'String',ome
ga1,...
        'Position',[16 0.4 20.2 1.6]);
catch
    disp(lasterr);
end

% Max область X
try
    heditHiFreq = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname, ...
'Callback','plot_gui('editLoHiFreq_Callback',gcb0,'x_scale_hi'),'String',ome
ga2);
catch
    disp(lasterr);
end

% Max область Y
try
    heditHiAmplitude = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname, ...
'Callback','plot_gui('editLoHiAmplitude_Callback',gcb0,'maxamplitude'),'Stri
ng',maxamplitude);
catch
    disp(lasterr);
end
% min область Y
try
    heditLoAmplitude = uicontrol('Style','edit','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname, ...
```

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

'Callback','plot_gui(''editLoHiAmplitude_Callback'',gcbo,''minamplitude''),'Stri
ng',minamplitude,...
        'Position',[1 3 7 1.6]);
catch
    disp(lasterr);
end

global currentPlot;
if (plot_type == diel_pronic)

    % Радиобатоны выбора типа графика (АЧХ, ФЧХ, РеЧХ, ImЧХ)
    global hradioAF hradioPhaseF hradioReF hradioImF;
    currentPlot = 1;    % АЧХ
    % АЧХ
    try
        hradioAF = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','АЧХ','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,'Value',1,...
        'Callback','plot_gui(''SelectPlotRadioButtonCallback'',1)',...
        'TooltipString','Амплитудно-частотная характеристика');
    catch
        disp(lasterr);
    end

    % ФЧХ
    try
        hradioPhaseF = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','ФЧХ','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,...
        'Callback','plot_gui(''SelectPlotRadioButtonCallback'',2)',...
        'TooltipString','Фазовая частотная характеристика');
    catch
        disp(lasterr);
    end

    % ВЧХ
    try
        hradioReF = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','ВЧХ','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,...
        'Callback','plot_gui(''SelectPlotRadioButtonCallback'',3)',...
        'TooltipString','Вещественная частотная характеристика');
    catch
        disp(lasterr);
    end

    % МЧХ
    try
        hradioImF = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','МЧХ','Units','characters',...
        'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,...
        'Callback','plot_gui(''SelectPlotRadioButtonCallback'',4)',...
        'TooltipString','Мнимая частотная характеристика');
    catch
        disp(lasterr);
    end

    % Показатель преломления
    %try
    %    hradioN = uicon-
    trol('Style','radiobutton','String','n','Units','characters',...

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		85

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

%      'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,...
%      'Callback','plot_gui(''SelectPlotRadioButtonCallback'',5)',...
%      'TooltipString','Показатель преломления');
%catch
%      disp(lasterr);
%end

else
% Показатель преломления
currentPlot = 5;
end
end
global currentX;
if plot_type == pokaz_prel

% Радиобаттоны контроля шкалы X
% круговая частота
global hradioOmega hradioNu hradioLamda;
currentX = 3;
try
    hradioOmega = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','рад/с','Units','characters',...
    'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,'Value',0,...
    'Callback','plot_gui(''SelectXRadioButtonCallback'',1)',...
    'TooltipString','Круговая частота');
catch
    disp(lasterr);
end

% тактовая частота
try
    hradioNu = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','1/м','Units','characters',...
    'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,'Value',0,...
    'Callback','plot_gui(''SelectXRadioButtonCallback'',2)',...
    'TooltipString','Волновое число');
catch
    disp(lasterr);
end

% длина волны
try
    hradioLamda = uicon-
trol('Style','radiobutton','String','м','Units','characters',...
    'HorizontalAlignment','right','FontName',fontname,'Value',1,...
    'Callback','plot_gui(''SelectXRadioButtonCallback'',3)',...
    'TooltipString','Длина волны');
catch
    disp(lasterr);
end

else
% Круговая частота
currentX = 1;
end
% Преобразование шкалы
fullConvertScale(1, currentX);
makeScaleLoHi;
global heditLoFreq heditHiFreq;
global x_scale_lo x_scale_hi;
set(heditLoFreq,'String',num2str(x_scale_lo));
set(heditHiFreq,'String',num2str(x_scale_hi));

```

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```
% Расположить контролы в соответствии с размером фигуры
try
    placeControls(fig);
catch
    disp(lasterr);
end
% Вывести график
try
    recalculateCurrentPlot;
catch
    errordlg(lasterr);
end

elseif ischar(varargin{1}) % INVOKE NAMED SUBFUNCTION OR CALLBACK
try
    feval(varargin{:}); % FEVAL switchyard
catch
    errordlg(lasterr);
end
end

% -----
% Преобразование шкалы x из from в to
% вызывается из:
% fullConvertScale()
% recalculateCurrentPlot()
function y=convertScale(x, from, to)
global lightspeed;
switch from
case 1
    omega = x;
case 2
    omega = wave2omega(x);
case 3
    omega = lamda2omega(x);
end
switch to
case 1
    y = omega;
case 2
    y = omega2wave(omega);
case 3
    y = omega2lamda(omega);
end
% -----
% вызывается из:
% plot_gui()
% SelectXRadioButtonCallback()
function fullConvertScale(from, to)
global x_scale1 x_scale2 x_scale;
x_scale1 = convertScale(x_scale1, from, to);
x_scale = convertScale(x_scale, from, to);
x_scale2 = convertScale(x_scale2, from, to);

% -----
% вызывается из
% editLoHiFreq_Callback()
% plot_gui()
function recalculateCurrentPlot()
global currentX;
global x_scale x_scale1 x_scale2 resolution;
```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

87

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

omega1 = convertScale(x_scale1, currentX, 1);
omega2 = convertScale(x_scale2, currentX, 1);
omega = omega1:(omega2-omega1)/resolution:omega2;
x_scale = convertScale(omega, 1, currentX);
global m1 m2 density meshtype epsilon_light epsilon_infrared;
global mag phase re im n;
[mag, phase, re, im, n] = epsilon_via_omega(m1, m2, density, meshtype, epsilon_light, omega);
drawCurrentPlot;
% -----
% Вызывается из
% recalculateCurrentPlot()
% SelectPlotRadioButtonCallback()
function drawCurrentPlot()
global currentPlot;
global mag phase re im n;
global x_scale1 x_scale2 x_scale;
global epsilon_light epsilon_infrared;

switch currentPlot
case 1
    semilogx(x_scale, mag);
    hold on;
    semilogx([x_scale1 x_scale2],[epsilon_infrared epsilon_light],'o');
    hold off;
case 2
    loglog(x_scale, -phase);
case 3
    semilogx(x_scale, re);
    %hold on;
    %semilogx([omega1 omega2],[epsilon_infrared epsilon_light],'o');
    %hold off;
case 4
    loglog(x_scale, -im);
case 5
    semilogx(x_scale, n);
    hold on;
    semilogx([x_scale1 x_scale2],[epsilon_infrared^.5 epsilon_light^.5],'o');
    hold off;
end
xlabel('omega [rad/s]');
rescaleCurrentPlot;

% -----
% Вызывается из
% editLoHiAmplitude_Callback()
% drawCurrentPlot()
function rescaleCurrentPlot()
global x_scale_lo x_scale_hi minamplitude maxamplitude;
axis([x_scale_lo x_scale_hi minamplitude maxamplitude]);

% -----
% Управление радиобаттонами
% вызывается из функций
% SelectPlotRadioButtonCallback()
% SelectXRadioButtonCallback()
function radioControl(new, global_var_name, decoder)
eval(['global ' global_var_name ';was=' global_var_name ';']);
if new == was
    return;
end
h=feval(decoder, new);

```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

**ВКР.145370.09.04.01.ПЗ**

Лист

88

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

try
    set(h, 'Value', 1);
catch
    disp(lasterr);
end
h=feval(decoder, was);
try
    set(h, 'Value', 0);
catch
    disp(lasterr);
end
eval([global_var_name '=' num2str(new) ';']);

% -----
% Вызывается из
% SelectPlotRadioButtonCallback через radioControl
function y=DecodeYRadioButton(num)
global hradioAF hradioPhaseF hradioReF hradioImF hradioN;
switch num
case 1
    y=hradioAF;
case 2
    y=hradioPhaseF;
case 3
    y=hradioReF;
case 4
    y=hradioImF;
case 5
    y=hradioN;
end

% -----
% Вызывается из radiobutton control callback
function SelectPlotRadioButtonCallback(plotnum)
radioControl(plotnum, 'currentPlot', 'DecodeYRadioButton');
h=DecodeYRadioButton(plotnum);
global element;
try
    set(gcf, 'Name', [element ' ' get(h, 'TooltipString')]);
catch
    disp(lasterr);
end
drawCurrentPlot;

% -----
% Вызывается из
% SelectXRadioButtonCallback через radioControl
function y=DecodeXRadioButton(num)
global hradioOmega hradioNu hradioLamda;
switch num
case 1
    y=hradioOmega;
case 2
    y=hradioNu;
case 3
    y=hradioLamda;
end

% -----
% Вызывается из
% SelectXRadioButtonCallback()
% plot_gui()

```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

**ВКР.145370.09.04.01.ПЗ**

Лист

89

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

function makeScaleLoHi()
global x_scale1 x_scale2 x_scale_lo x_scale_hi;
if x_scale1 < x_scale2
    x_scale_lo = x_scale1;
    x_scale_hi = x_scale2;
else
    x_scale_lo = x_scale2;
    x_scale_hi = x_scale1;
end

% -----
% Вызывается из радиобаттонов контроля шкалы X
function SelectXRadioButtonCallback(scalenum)
global currentX;
global x_scale1 x_scale2 x_scale x_scale_lo x_scale_hi;
fullConvertScale(currentX, scalenum);
%x_scale1 = convertScale(x_scale1, currentX, scalenum);
%x_scale = convertScale(x_scale, currentX, scalenum);
%x_scale2 = convertScale(x_scale2, currentX, scalenum);
radioControl(scalenum, 'currentX', 'DecodeXRadioButton');
makeScaleLoHi;
global heditLoFreq heditHiFreq;
set(heditLoFreq, 'String', num2str(x_scale_lo));
set(heditHiFreq, 'String', num2str(x_scale_hi));
drawCurrentPlot;

% -----
% Вызывается из figure resize callback и из функции plot_gui
function placeControls(fig)
global heditLoFreq heditHiFreq heditHiAmplitude heditLoAmplitude;
global hradioAF hradioPhaseF hradioReF hradioImF hradioN;
global hradioOmega hradioNu hradioLamda;
figpos = get(fig, 'Position');
figwidth = figpos(3);
figheight = figpos(4);
try
    set(heditHiFreq, 'Position', [figwidth-16-20.2 0.4 20.2 1.6]);
catch
    % disp(lasterr);
end

try
    set(heditHiAmplitude, 'Position', [1 figheight-3-1.6 7 1.6]);
catch
    % disp(lasterr);
end

try
    set(hradioAF, 'Position', [figwidth-9 32-24 9 1.6]);
catch
    % disp(lasterr);
end

try
    set(hradioPhaseF, 'Position', [figwidth-9 30.4-24 9 1.6]);
catch
    % disp(lasterr);
end

try
    set(hradioReF, 'Position', [figwidth-9 28.8-24 9 1.6]);
catch

```

					<b>ВКР.145370.09.04.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		90

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

```

% disp(lasterr);
end

try
    set(hradioImF,'Position',[figwidth-9 27.2-24 9 1.6]);
catch
% disp(lasterr);
end

try
    set(hradioN,'Position',[figwidth-9 25.2-24 9 1.6]);
catch
% disp(lasterr);
end

try
    set(hradioOmega,'Position',[figwidth/2-15 0.4 10 1.6]);
catch
% disp(lasterr);
end

try
    set(hradioNu,'Position',[figwidth/2-5 0.4 10 1.6]);
catch
% disp(lasterr);
end

try
    set(hradioLamda,'Position',[figwidth/2+5 0.4 10 1.6]);
catch
% disp(lasterr);
end

% -----
% global param=str2num(get(h,'String'))
% Вызывается из
% editLoHiFreq_Callback()
% editLoHiAmplitude_Callback()
function paramUpdate(param, h)
eval(['global ' param ';' param '=str2num('' get(h, 'String') '');']);

% -----
% Callback для editLoFreq и editHiFreq
function editLoHiFreq_Callback(h, param)
paramUpdate(param, h);
global x_scale1 x_scale2 x_scale_lo x_scale_hi;
if x_scale1 < x_scale2
    x_scale1 = x_scale_lo;
    x_scale2 = x_scale_hi;
else
    x_scale1 = x_scale_hi;
    x_scale2 = x_scale_lo;
end
recalculateCurrentPlot;

% -----
% Callback для editLoAmplitude и editHiAmplitude
function editLoHiAmplitude_Callback(h, param)
paramUpdate(param, h);
rescaleCurrentPlot;

```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

**ВКР.145370.09.04.01.ПЗ**

Лист

91

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

### Сертификаты об участии в конференции



Рисунок В1 – Сертификат об участии в конференции



Рисунок В2 – Сертификат об участии в конференции

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

92



# СЕРТИФИКАТ

## УЧАСТНИКА

ХVII РЕГИОНАЛЬНОЙ  
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ  
«МОЛОДЕЖЬ XXI ВЕКА: ШАГ В БУДУЩЕЕ»

выдан

*Люстиной Татьяне*  
*Евгеньевне*

Председатель Совета ректоров  
вузов Амурской области,  
ректор ФГБОУ ВПО «ДальГАУ»,  
доктор сельскохозяйственных наук,  
профессор, председатель оргкомитета  
конференции

*П.В. Тихончук* П.В. Тихончук

Начальник военного факультета ФГБОУ ВПО «ДВОКУ»,  
доктор военных наук, профессор,  
председатель оргкомитета конференции



*В.М. Грызлов*

В.М. Грызлов

24 мая 2016 г.  
г. Благовещенск

Рисунок В3 – Сертификат об участии в конференции

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.145370.09.04.01.ПЗ

Лист

93