

**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 09.03.01 – Информатика и вычислительная техника  
Профиль: Автоматизированные системы обработки информации и управления

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ**  
Зав. кафедрой

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

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

на тему: Разработка имитационной модели широкодиапазонных спектров полярной жидкости

Исполнитель

студент группы 253-об

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

О. И. Тарасенко

Руководитель

профессор, докт. техн. наук

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

И. Е. Еремин

Нормоконтроль

инженер кафедры

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

В. В. Романико

Благовещенск 2016

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

УТВЕРЖДАЮ  
Зав. кафедрой

\_\_\_\_\_ А.В. Бушманов

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2015 г.

**З А Д А Н И Е**

К выпускной квалификационной работе студента Тарасенко Ольги Игоревны

1. Тема выпускной квалификационной работы: Разработка имитационной модели широкодиапазонных спектров полярной жидкости

(утверждена приказом от 03.06.2016 № 1215-уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы: 27.06.2016.

3. Исходные данные к выпускной квалификационной работе: отчет о прохождении преддипломной практики, специальная литература, нормативные документы, техническое задание.

4. Содержание выпускной квалификационной работы: анализ предметной области, характеристика функциональных подсистем проектируемой АСНИ; характеристика обеспечивающих подсистем проектируемой АСНИ; имитационное моделирование процесса поляризации воды; надежность программного обеспечения.

5. Перечень материалов приложения: техническое задание, алгоритм расчета динамических параметров, описание программы, листинг программы, список публикаций.

6. Дата выдачи задания: 10.09.2015.

Руководитель выпускной квалификационной работы: Еремин Илья Евгеньевич, профессор, докт. техн. наук.

Задание принял к исполнению: 15.09.2015 \_\_\_\_\_ О.И. Тарасенко

## РЕФЕРАТ

Бакалаврская работа содержит 74 с., 30 рисунков, 2 таблицы, 5 приложений, 23 источника.

ИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ, ДИПОЛЬНАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ, РЕЛАКСАЦИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ, ОПТИЧЕСКИЙ ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ, ОПТИЧЕСКИЙ ПОКАЗАТЕЛЬ ПОГЛОЩЕНИЯ, ДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ, ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Объектом проводимых исследований является построение широкодиапазонных оптических спектров воды.

Целью работы является разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости, предполагающая создание программного продукта, позволяющего моделировать ее поляризационные характеристики.

Для выполнения поставленной цели было спроектировано ТЗ, а также выполнены следующие задачи: изучены существующие модели поляризационных процессов, проведен их синтез; разработан численный метод определения динамических параметров; непосредственно создан программный продукт.

В данной дипломной работе представлены результаты проектирования упомянутого выше программного продукта. Система может быть использована для исследования оптических свойств воды или полярной жидкости схожей структуры во время ее ионной, дипольной и релаксационной видов поляризации.

					<b>ВКР. 125011.09.03.01.ПЗ</b>			
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата	<b>РАЗРАБОТКА ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ШИРОКОДИАПАЗОН- НЫХ СПЕКТРОВ ПОЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ</b>	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Тарасенко О.И.				У	3	74
Пров.		Еремин И.Е.						
Н. контр.		Романико В.В.						
Зав. каф.		Бушманов А.В.						
						<b>АмГУ кафедра ИУС</b>		

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение	8
1 Анализ предметной области	10
1.1 Научные исследования как объект автоматизации	10
1.2 Характеристика объекта исследования	11
1.2.1 Понятие поляризации диэлектриков	11
1.2.2 Особенности микроструктуры типичной полярной жидкости	13
1.2.3 Разновидности поляризационных процессов	17
2 Характеристика функциональных подсистем проектируемой АСНИ	20
2.1 Макроскопические характеристики объекта исследования	20
2.1.1 Комплексная диэлектрическая проницаемость	20
2.1.2 Оптические показатели преломления и поглощения	22
2.2 Модели поляризационных микропроцессов	23
2.2.1 Модель ионной поляризации	24
2.2.2 Модель дипольной поляризации	29
2.2.3 Модель релаксационной поляризации	33
3 Характеристика обеспечивающих подсистем проектируемой АСНИ	36
3.1 Математическое обеспечение	36
3.1.1 Уравнения вынужденных гармонических колебаний	36
3.1.2 Аппарат передаточных функций и их частотных аналогов	39
3.2 Программное обеспечение	41
3.3 Алгоритмическое обеспечение	44
3.4 Техническое обеспечение	45
3.5 Эргономическое обеспечение	46
4 Имитационное моделирование процесса поляризации воды	47
4.1 Математический синтез поляризационных уравнений	47
4.2 Численный метод определения динамических параметров	51
4.3 Существующие методы расчета динамических параметров	52
4.4 Программная реализация	54

4.5 Руководство пользователя	56
5 Надежность программного обеспечения	62
5.1 Обзор моделей надежности программного обеспечения	63
5.1.1 Динамические модели надежности	64
5.1.2 Статические модели надежности	66
5.2 Расчет надежности программного обеспечения	68
Заключение	71
Библиографический список	73
Приложение А Техническое задание	75
Приложение Б Алгоритм расчета динамических параметров	83
Приложение В Описание программы	84
Приложение Г Текст программы	89
Приложение Д Список публикаций	99

## НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В настоящей бакалаврской работе использованы ссылки на следующие стандарты и нормативные документы:

ГОСТ 19.101-77	ЕСПД	Виды программ и программных документов
ГОСТ 19.102-77	ЕСПД	Стадии разработки
ГОСТ 19.105-78	ЕСПД	Общие требования к программным докумен-там
ГОСТ 19.201-78	ЕСПД	Техническое задание, требования к содержанию и оформлению
ГОСТ 19.401-78	ЕСПД	Текст программы. Требования к содержанию и оформлению
ГОСТ 19.402-78	ЕСПД	Описание программы
ГОСТ 24.103-84	ЕСПД	Автоматизированные системы управления. Основные положения
ГОСТ 24.104-85	ЕСПД	Автоматизированные системы управления. Общие требования
ГОСТ 27.002-89		Общероссийский классификатор стандартов Надежность в технике. Основные понятия. Термины и определения

## ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ

АСНИ – автоматизированная система научных исследований;

АСОИУ – автоматизированные системы обработки информации и управления;

ОС – операционная система;

ОЗУ – оперативное запоминающее устройство;

ПЗУ – постоянное запоминающее устройство;

ПО – программное обеспечение;

ТЗ – техническое задание;

ЭВМ – электронная вычислительная машина;

GUI – graphical user interface – графический интерфейс пользователя;

GUIDE – graphical user interface layout editor – подсистема разработки интерфейса пользователя;

MATLAB – matrix laboratory – матричная лаборатория.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		7

## ВВЕДЕНИЕ

Сегодня в науке является актуальным изучение свойств такой полярной жидкости как воды, параметров как одной ее молекулы, так и молекулярных образований. Исследования ведутся для лучшего понимания процессов, происходящих ней; для получения единой точки зрения в вопросе структуры исследуемой жидкости.

В данной работе интерес представляют поляризационные процессы, происходящие на различных уровнях строения воды в широком диапазоне частот. И, так как в данной работе рассматривается молекула воды и ее образования, а расчет характеристик с помощью стандартных методов исследований на молекулярном уровне является трудоемким из-за большого числа операций, а также из-за невозможности (или ограниченной возможности) визуализации этих явлений, то данные процессы представляются в виде системной последовательности: «вход-реакция-выход». Перенесение стандартных трактовок изучения поляризационных процессов на рассмотрение их с точки зрения систем управления встречается в работах Еремина И.Е., Ереминой В.В., Ланиной С.Ю. и Ульяхиной Д.А. Результатами этих работ явились программные продукты, которые позволяют исследовать характеристики воды в разных видах ее поляризации. Кроме того, предложенные расчеты тех или иных параметров жидкости существенно отличаются друг от друга.

Разработка имитационной модели широкодиапазонных спектров воды предполагает создание программного продукта, позволяющего моделировать поляризационные характеристики воды, адекватные данным физических экспериментов. Поэтому *основная цель* данной работы заключается в разработке такого программного продукта.

Для достижения поставленной цели вынесены следующие задачи:

1) изучение существующих моделей поляризационных процессов, их синтез в рамках наиболее общего подхода для получения математической модели поляризации воды, адекватной наблюдаемым экспериментальным данным;

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		8



2) разработка численного метода определения динамических параметров поляризационных процессов;

3) непосредственно создание программного продукта, предназначенного для моделирования соответствующих поляризационных характеристик воды и основывающегося на разработанном численном методе.

*Научная новизна* заключается в том, что в рамках проекта предложен новый метод расчета динамических параметров поляризационных процессов.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		9

# 1 АНАЛИЗ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

## 1.1 Научные исследования как объект автоматизации

Автоматизированная система научных исследований (АСНИ) – комплекс программ и аппаратного обеспечения, предназначенный для проведения научных исследований на основе разработки и использования моделей исследуемых объектов, явлений и процессов реального мира. АСНИ нашли применение во многих областях науки. С их использованием значительно повышается эффективность исследований, производительность труда, сократить сроки обработки результатов экспериментов и получить результаты, являющиеся качественно новыми.

Целью любого научного исследования является построение модели, наилучшим образом отражающей свойства реального объекта, процесса или явления. Создание модели осуществляется сопоставлением теории и эксперимента. Это сопоставление носит, как правило, итерационный характер.

Как объект автоматизации научные исследования обладают следующими особенностями [21]:

- 1) многогранность исследовательской деятельности;
- 2) роль человеческого фактора;
- 3) высокий уровень априорной неопределенности хода и результатов исследований;
- 4) непрерывность процесса научного исследования;
- 5) уникальность научного исследования;
- 6) многообразие исследовательских задач.

Многогранность исследовательской деятельности подразумевает наличие в исследовании элементов разнообразного характера, таких как постановка задачи, проведение экспериментов, разработка теории, моделирование и т.д. Все эти элементы обладают неравной способностью реализоваться в АСНИ.

Роль человеческого фактора подразумевает необходимость обеспечения при разработке возможности наиболее эффективного и удобного взаимодейст-

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		10

вия пользователя с АСНИ.

Научные исследования проводятся для получения новых знаний об объекте исследования. При этом при разработке АСНИ есть недостаток необходимой информации, что является одним из основных принципиальных отличий АСНИ от автоматизированных систем другого вида.

Каждое научное исследование обладает определенными особенностями, которые отличают его от аналогичных исследований. Эти особенности могут проявляться по-разному в разных исследованиях и в неодинаковой степени, но их наличие является обязательным, в противном случае исследование уже не может претендовать на научность. Черты уникальности могут быть связаны с особенностями самого объекта исследования, постановки задачи, метода экспериментирования, используемого оборудования и т.д. В связи с уникальностью научных исследований каждая АСНИ, как правило, обладает специфическими чертами, присущими только данной системе в части ее технического, программного или научно-методического обеспечения.

Многообразие исследовательских задач обуславливается: большим числом объектов исследований в различных областях науки; разнообразием физических процессов, протекающих в любых, сколь угодно сложных объектах; разнообразие условий реализации исследований и разные характеры самих исследований. С точки зрения разработки АСНИ многообразие исследовательских задач затрудняет использование стандартных решений, требуя учета специфических черт данного научного исследования.

## **1.2 Характеристика объекта исследования**

### **1.2.1 Понятие поляризации диэлектриков**

Вещества, которые практически не проводят электрический ток, называются диэлектриками. Все диэлектрики, в зависимости от строения молекул, можно разделить на полярные и неполярные диэлектрики. В неполярных диэлектриках центры распределения положительных и отрицательных зарядов совпадают. Полярные диэлектрики состоят из таких молекул, у которых центры положительных и отрицательных зарядов не совпадают. Другими словами, мо-

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		11

лекулы полярных диэлектриков даже в отсутствие внешнего электрического поля будут представлять собой электрические диполи с отличным от нуля постоянным электрическим моментом. Электрический диполь представляет собой пару зарядов, равных по модулю, но противоположных по знаку, и расположенных на малом расстоянии друг от друга.

На рисунке 1 представлено поведение неполярных и полярных диэлектриков во внешнем электрическом поле.

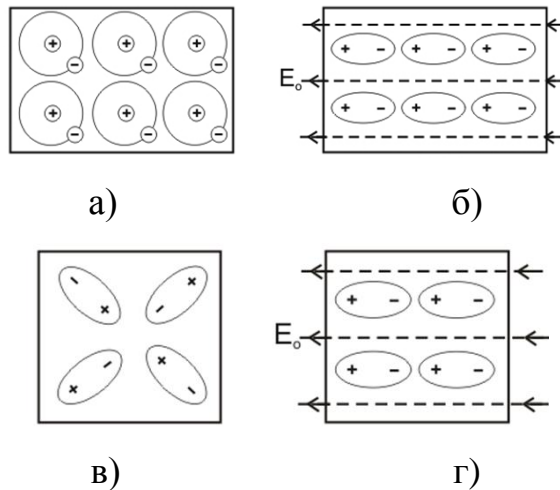


Рисунок 1 – Поведение а) неполярных и в) полярных диэлектриков в отсутствии внешнего электрического поля; поведение б) неполярных, г) полярных диэлектриков при воздействии внешнего электрического поля

При внесении диэлектрика в электрическое поле происходит процесс его поляризации, которая вызывается смещением электрических зарядов под действием внутреннего и внешнего электрических полей. Поэтому в любом элементарном объеме диэлектрика возникает отличный от нуля суммарный дипольный момент.

Дипольным моментом  $\vec{\mu}$  называется произведение величины одного заряда на расстояние между зарядами в электрическом диполе, и в векторной форме запишется следующим образом:

$$\vec{\mu} = q\vec{d}, \quad (1)$$

где  $q$  – величина заряда;

$\vec{d}$  – расстояние между зарядами.

Дипольный момент направлен от положительного заряда к отрицательному. Для системы, образуемой молекулой и состоящей из положительных и отрицательных зарядов, предполагается ее рассмотрение как единого диполя или системы диполей, ориентированных вдоль молекулярных осей. Векторная сумма дипольных моментов этой системы образует молекулярный дипольный момент  $\vec{M}$  :

$$\vec{M} = \sum_{i=0}^N \vec{\mu}_i. \quad (2)$$

Векторная сумма дипольных моментов равна нулю, так как в результате теплового движения электрические моменты диполей хаотически распределены по направлениям.

Диэлектрик, внесенный в электрическое поле и для которого возникает отличный от нуля суммарный дипольный момент, называется поляризованным.

Часто вводят представление о дипольных моментах отдельных хим. связей, векторная сумма которых дает дипольный момент молекулы. При этом дипольный момент связи определяют двумя положительными зарядами ядер атомов, образующих связь, и распределением отрицательного (электронного) заряда. Дипольный момент химической связи обусловлен смещением электронного облака в сторону одного из атомов.

### 1.2.2 Особенности микроструктуры типичной полярной жидкости

Типичным полярным диэлектриком является такая полярная жидкость как вода. Основной структурной единицей воды является молекула, состоящая из атома кислорода и двух атомов водорода, связанных ковалентными химическими связями. Химическая формула молекулы –  $H_2O$ .

При рассмотрении молекулы в предполагаемом равновесном состоянии, без смещений и колебаний, ее структура имеет вид равнобедренного треуголь-

ника с атомом кислорода в вершине и атомами водорода в основании. Угол при вершине составляет  $\alpha = 104,523^\circ$ , а длина химических связей кислород-водород –  $R_{OH} = 0,95718 \cdot 10^{-10} \text{ м}$  [22]. Геометрия молекулы воды и ее представление как диполя изображены на рисунке 2.

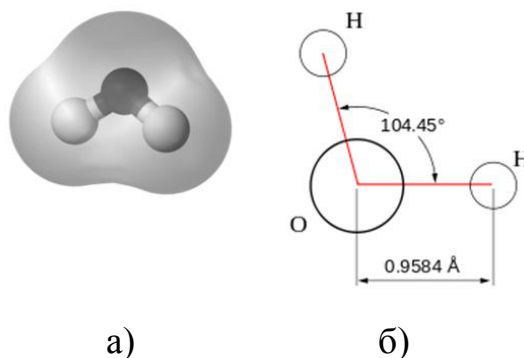


Рисунок 2 – а) Представление молекулы как диполя; б) геометрическое представление молекулы воды

В молекуле воды главный атом – атом кислорода [15]. Электроны в атоме кислорода распределяются на двух уровнях. Электронно-графическая формула кислорода представлена на рисунке 3а, а соответствующая электронная конфигурация записывается в виде  $1s^2 2s^2 2p^4$ .

Энергетическая диаграмма атома водорода представлена на рисунке 3б. Его электронная конфигурация записывается как  $1s^1$ .

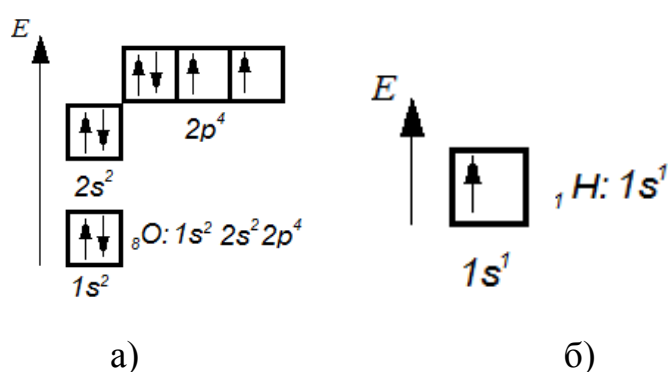


Рисунок 3 – Распределение электронов на энергетических уровнях в атомах: а) кислорода; б) водорода

Молекула воды формируется в результате  $sp^3$ -гибридизации, в которой участвуют атомные орбитали одного  $s$ - и трех  $p$ -электронов (рисунок 4а). Четы-

ре  $sp^3$ -гибридные орбитали симметрично ориентированы в пространстве под углом  $109^\circ 28'$  (рисунок 4б).

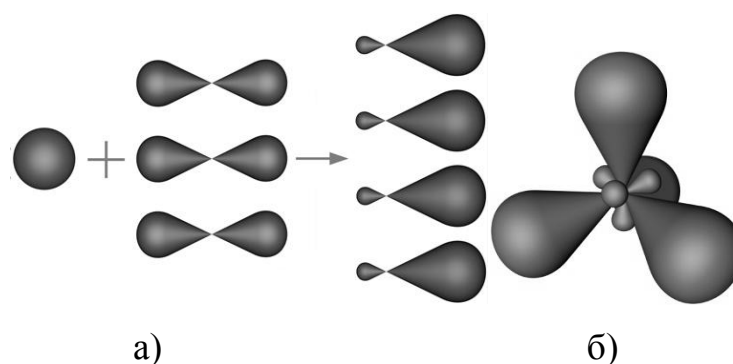


Рисунок 4 – а) Процесс  $sp^3$ -гибридизации; б) Сформированная молекула

Пространственная конфигурация молекулы, центральный атом которой образован  $sp^3$ -гибридными орбиталями – тетраэдр (рисунок 5а) [14]. Так как молекула воды имеет две пары связей О – Н и две неподеленные пары электронов, она также должна иметь форму тетраэдра. Реально этот тетраэдр слегка искажен, потому что неподеленные пары отталкиваются между собой несколько сильнее, чем от поделенных пар, и чем поделенные пары отталкиваются друг от друга. Поэтому реальный угол при атоме кислорода составляет не  $109^\circ 28'$ , а  $104,523^\circ$ . Однако по центрам атомов, как можно видеть, молекула воды имеет угловую форму (рисунок 5б ).

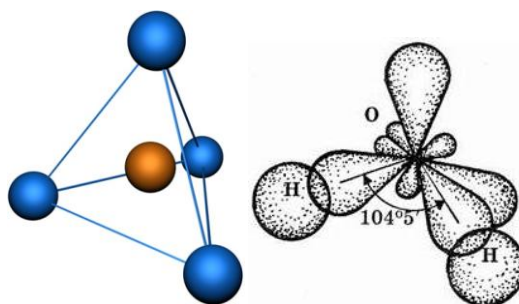


Рисунок 5 – Пространственная конфигурация: а) тетраэдрическая; б) искаженная для молекулы воды

Около ядер водорода имеется недостаток электронной плотности, а на противоположной стороне молекулы, около ядра кислорода, наблюдается избыток электронной плотности. Это приводит к тому, что молекула воды представляет собой маленький диполь, содержащий положительный и отрицатель-

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ный заряды на полюсах. Именно такая структура и определяет полярность молекулы воды.

Молекула воды способна образовывать с соседними молекулами водородные связи, из-за наличия двух свободных электронных пар у атома кислорода, тем самым образуя водные ассоциаты или кластеры.

Водородная связь имеет глобальное значение в химии межмолекулярных взаимодействий и обусловлена в основном слабыми электростатическими силами и воздействиями. Она возникает при взаимодействии обедненной электронами атома водорода одной молекулы воды с неподеленной электронной парой атома кислорода соседней молекулы воды (рис 6).

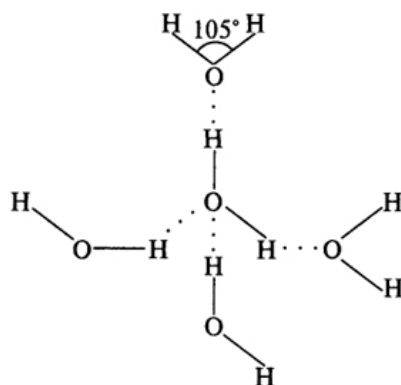


Рисунок 6 – Образование ассоциатов воды за счет водородных связей

Элементарной ячейкой воды являются тетраэдры, содержащие связанные между собой водородными связями четыре (простой тетраэдр) или пять молекул H<sub>2</sub>O (рисунок 7).

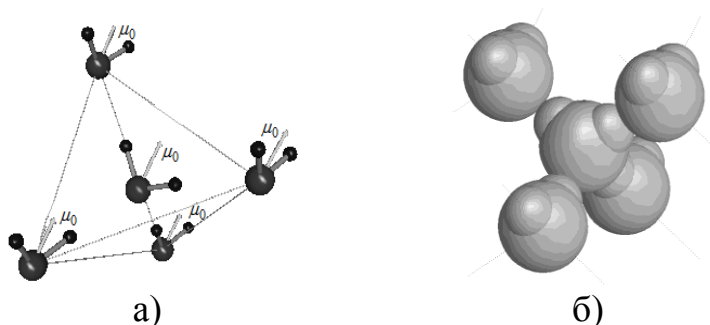


Рисунок 7 – пятимолекулярный конгломерат воды:

а) – строение атомного каркаса; б) – электронная конфигурация

При этом у каждой из молекул воды в простых тетраэдрах сохраняется способность образовывать водородные связи. За счет их простые тетраэдры мо-



гут объединяться между собой вершинами, ребрами или гранями, образуя различные кластеры со сложной структурой, например, в форме додекаэдра (рисунок 8).

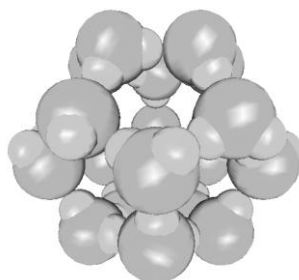


Рисунок 8 – Додекаэдрический кластер воды

### 1.2.3 Разновидности поляризационных процессов

При рассмотрении общей совокупности процессов поляризации, происходящих в воде под действием внешнего электрического поля, принято выделять следующие их виды:

- 1) электронная поляризация;
- 2) ионная поляризация, обусловленная внутримолекулярными колебаниями;
- 3) поляризационные процессы, которым соответствуют межмолекулярные колебания.

Электронная поляризация предполагает упругое смещение и деформацию электронных оболочек атомов и ионов. Время установления электронной поляризации ничтожно мало (около  $10^{-15}$  секунд) и сравнимо с периодом световых колебаний. Поэтому электронную поляризацию условно называют мгновенной. Она проявляется при всех частотах, вплоть до  $10^{-14} - 10^{-16}$  Гц. В данной работе данный вид поляризации не рассматривается.

Внутримолекулярные колебания – это такие колебания, при которых изменяются только внутренние, естественные координаты молекулы: длины связей и угол между ними. К этой группе относятся валентные и деформационные колебания химических связей О-Н.

Валентные колебания представляют собой растяжение или сжатие связей атомов в молекуле; углы между связями остаются примерно неизменными. Ион водорода в каждой из связей смещается вдоль их направления.

Деформационные колебания – это типы колебаний, которые сопровождаются изменением углов между связями молекул. Ионы водорода двигаются в направлении, перпендикулярном связям, тем самым меняя величину угла, при этом длины связей не изменяются.

Смещение иона кислорода для указанных видов является незначительным, так как его масса значительно больше массы ионов водорода.

Эти виды колебаний обуславливают ионную упругую поляризацию и их можно изобразить так, как показано на рисунке 9.

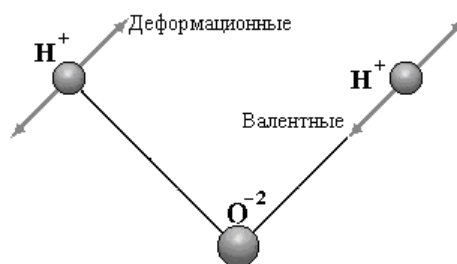


Рисунок 9 – Валентные и деформационные колебания молекулы воды

Межмолекулярные колебания характеризуются изменением положения молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  относительно ее исходного состояния равновесия и возникают при образовании связей между молекулами собой. Выделяют следующие виды межмолекулярных колебаний: либрационные и трансляционные.

Либрационным колебаниям соответствует поворот молекулы как целого вокруг некоторой оси, при этом, как и для рассмотренной внутримолекулярной группы колебаний, учитывается смещение только атомов водорода, а атом кислорода остается неподвижным. Поэтому для воды либрационными будут являться колебания, при которых совершается поворот молекулы около иона кислорода. Трансляционные колебания соответствуют смещению положения молекулы воды как единого целого в пространстве, при котором длина связей и валентный угол остаются без изменения. Данные виды показаны на рисунке 10.

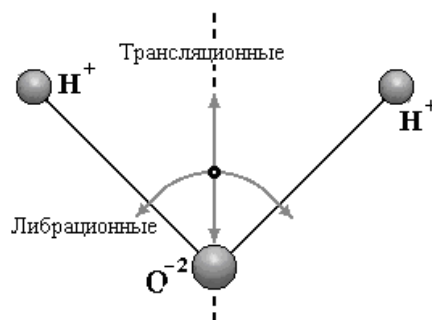


Рисунок 10 – Либрационные и трансляционные колебания

В виду того, что коэффициенты затухания для названных выше поляризационных процессов представляют собой небольшие величины, обусловленные слабостью сил внутреннего трения, каждый процесс представляет соответствующий вид упругой поляризации воды [16].

С другой стороны, отдельно выделяют сильнозатухающие гармонические колебания многомолекулярных образований типа  $(\text{H}_2\text{O})_n$ , описанных в пункте 1.2.2, которые, в свою очередь, определяют процессы релаксационной поляризации воды. При этом подобные явления, учитывая высокую инерционность участвующих в них частиц, начинают проявляться только в области достаточно низких частот оптического спектра.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

## 2 ХАРАКТЕРИСТИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОДСИСТЕМ ПРОЕКТИРУЕМОЙ АСНИ

Как разновидность АСОИУ, АСНИ имеют в своем составе функциональные подсистемы.

Функциональные подсистемы составляют содержательную часть автоматизированной системы. Можно сказать, что функциональные подсистемы – это перечень функций (задач), реализуемых в разрабатываемой системе.

В соответствии с поставленными задачами моделирования можно выделить подсистему реализации моделей поляризионных микропроцессов и подсистему расчета широкодиапазонных спектров макроскопических характеристик, как для экспериментальных данных, так и для теоретических данных по полученной модели.

### 2.1 Макроскопические характеристики объекта исследования

Взаимодействие диэлектрика с переменным электрическим полем характеризуется такими макроскопическими показателями как, диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, показатель поглощения.

#### 2.1.1 Комплексная диэлектрическая проницаемость

Диэлектрическая проницаемость – есть отношение напряженности внешнего поля к напряженности среднего поля в диэлектрике, и является безразмерным показателем, характеризующим степень поляризуемости вещества.

Диэлектрическая проницаемость существенно зависит от частоты прикладываемого электрического поля, и, в силу того, что для рассмотрения в данной работе выбраны виды поляризации, лежащие в частотном диапазоне до видимого спектра, необходимо учитывать значение ее на высоких частотах.

Для воды в случае статического поля диэлектрическая проницаемость приблизительно равна 80 ( $\epsilon=80$ ), что имеет место до инфракрасной части спектра. Затем значение показателя начинает падать и в видимом диапазоне составляет примерно 1.77 ( $\epsilon=1,77$ ).

Данное значение рассчитывается исходя из уравнений Максвелла, согласно которым квадрат показателя преломления равен произведению относительных электрической и магнитной проницаемостей среды. При этом учитывается то, что электрическая составляющая оказывает более существенное влияние на частицы вещества, чем магнитная, поэтому значение данного оптического показателя определяется только диэлектрической проницаемостью:

$$\varepsilon = n^2, \quad (3)$$

где  $n$  – показатель преломления, который для видимой части спектра  $n=1,33$ .

Обозначим относительную диэлектрическую проницаемость для видимой части спектра как  $\varepsilon_\infty$ .

Свойства диэлектрика на переменном токе принято рассматривать, применяя понятие частотной комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega), \quad (4)$$

где  $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$  – действительная и мнимая части соответственно.

Мнимую часть комплексной диэлектрической проницаемости называют коэффициентом диэлектрических потерь.

Известным методом [11, с. 10] нахождения теоретической комплексной диэлектрической проницаемости является ее расчет с использованием комплексной поляризуемости, при этом учитывается  $\varepsilon_\infty$ :

$$\varepsilon(j\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \alpha_i(j\omega) N_i, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная;

$\alpha_i(j\omega)$  – частотная комплексная поляризуемость;

$N_i$  – концентрация молекул.

Выражение  $\varepsilon(j\omega)$  можно представить через вещественную и мнимую частотные характеристики, соответственно  $\varepsilon'(\omega)$  и  $\varepsilon''(\omega)$ :

$$\varepsilon(j\omega) = \varepsilon'(\omega) - j\varepsilon''(\omega); \quad (6)$$

$$\varepsilon'(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \alpha_i(\omega) N_i \quad (7)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \alpha_i''(\omega) N_i$$

### 2.1.2 Оптические показатели преломления и поглощения

При рассмотрении взаимодействия полярной жидкости с переменным электромагнитным полем выражение оптического показателя преломления  $n(j\omega)$  также имеет вид комплексных функций общего вида, согласно (8).

$$n(j\omega) = n(\omega) + j\chi(\omega), \quad (8)$$

где  $n(\omega)$  и  $\chi(\omega)$  – частотные зависимости показателя преломления и показателя поглощения соответственно.

Связь комплексной функции  $n(j\omega)$  с комплексной функцией  $\varepsilon(j\omega)$  описывается соотношением (9):

$$\varepsilon_{Re}(\omega) + j\varepsilon_{Im}(\omega) = n^2(\omega) + 2jn(\omega)\chi(\omega) - \chi^2(\omega). \quad (9)$$

Выделив явно действительную и мнимую составляющие, получим уравнения, описывающие взаимно оптические и диэлектрические характеристики:

$$\varepsilon_{Re}(\omega) = n^2(\omega) - \chi^2(\omega); \quad (10)$$

$$\varepsilon_{Im}(\omega) = 2n(\omega)\chi(\omega). \quad (11)$$

По соотношениям (10-11) можно получить набор экспериментальных значений вещественной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости, имея наборы данных оптических показателей.

Для построения теоретических кривых оптические показатели рассчитываются по имеющимся известным формулам (12) [9, с. 62]:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{Re}^2(\omega) + \varepsilon_{Im}^2(\omega)} + \varepsilon_{Re}(\omega)}{2}}; \chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{Re}^2(\omega) + \varepsilon_{Im}^2(\omega)} - \varepsilon_{Re}(\omega)}{2}}. \quad (12)$$

## 2.2 Модели поляризационных микропроцессов

Физическая сущность поляризационных явлений, вызванных взаимодействием диэлектрика с переменным электромагнитным полем малой амплитуды, заключается в вынужденном смещении его заряженных микрочастиц из своих исходных состояний, что приводит к индукции дипольных моментов, ослабляющих напряженность результирующего электрического поля, наведенного внутри диэлектрика. Поскольку линейные величины подобных отклонений от стабильных положений зарядов оказываются существенно меньше молекулярных структурных параметров конденсированных диэлектрических сред, то разбираемые процессы традиционно полагаются линейными, так как объективная нелинейность их динамических параметров весьма незначительна.

Таким образом, рассматриваемые физические явления вполне адекватно описываются линейными дифференциальными уравнениями вида (13):

$$\frac{d^2\mu_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{d\mu_l(t)}{dt} + \omega_{0l}^2\mu_l(t) = \frac{q_l^2}{m_l} E(t), \quad (13)$$

где  $l$  – индекс конкретной частицы;

$\mu_l(t)$  – индуцированный дипольный момент;

$b_l$  и  $\omega_{0l}$  – коэффициент затухания и частота его собственных колебаний;

$q_l$  и  $m_l$  – электрический заряд и масса частицы;

$E(t)$  – функция напряженности эффективного поля.

### 2.2.1 Модель ионной поляризации

Считается, что для входящих в ионную поляризацию видов колебаний, при их рассмотрении, ион кислорода жестко закреплен, и двигаются только ионы водорода.

Процесс валентных колебаний, согласно известной модели [10, с. 44], описывается следующим образом.

На рисунке 11 процесс валентных колебаний молекулы воды под действием внешнего электрического поля изображен графически.

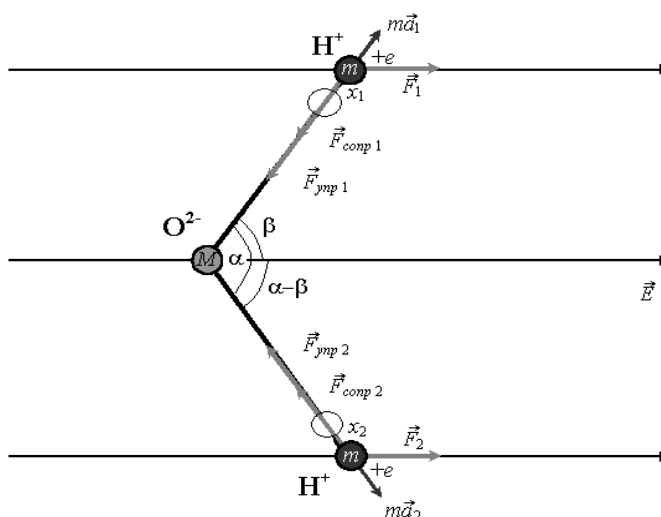


Рисунок 11 – Валентные колебания молекулы воды в электрическом поле

Принимая ион кислорода за начало отсчета, составляются уравнения баланса сил:

$$\begin{cases} ma_1 = F_1 \cos \beta - F_{ynp1} - F_{conp1}, \\ ma_2 = F_2 \cos(\alpha - \beta) - F_{ynp2} - F_{conp2}, \end{cases} \quad (14)$$

где  $m$  – масса водорода;

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата



$a_1, a_2$  – ускорения, приобретаемые ионами водорода под действием внешнего электрического поля;

$F_{упр1}, F_{упр2}$  – сила упругости, стремящаяся вернуть смещенные ионы в исходное положение;

$F_{сопр1}, F_{сопр2}$  – сила сопротивления, вызванная существованием внутреннего трения;

$F_1, F_2$  – сила, действующая на ионы водорода со стороны поля;

$\alpha$  – валентный угол молекулы воды.

Учитывая физический смысл каждой из сил [23], вводя соответствующие обозначения и применяя простейшие алгебраические преобразования, получаем систему дифференциальных уравнений относительно линейного смещения:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_1}{dt^2} + 2b_1 \frac{dx_1}{dt} + \omega_{01}^2 x_1 = \frac{eE}{m} \cos \beta, \\ \frac{d^2 x_2}{dt^2} + 2b_2 \frac{dx_2}{dt} + \omega_{02}^2 x_2 = \frac{eE}{m} \cos(\alpha - \beta), \end{cases} \quad (15)$$

где  $x_1$  и  $x_2$  – смещения ионов водорода;

$b_1$  и  $b_2$  – коэффициенты затухания каждой из связей  $OH$ ;

$\omega_{01}^2$  и  $\omega_{02}^2$  – соответственно, собственные частоты связей молекулы  $H_2O$ .

Осуществляется переход от линейного смещения, к дипольному моменту каждой из связей, учитывая, что дипольный момент находится как произведение величины заряда на его смещение под действием переменного электрического поля [20]:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mu_1}{dt^2} + 2b_1 \frac{d\mu_1}{dt} + \omega_{01}^2 \mu_1 = \frac{e^2 E}{m} \cos \beta, \\ \frac{d^2 \mu_2}{dt^2} + 2b_2 \frac{d\mu_2}{dt} + \omega_{02}^2 \mu_2 = \frac{e^2 E}{m} \cos(\alpha - \beta). \end{cases} \quad (16)$$

Средние значения  $\cos\beta$  и  $\cos(\alpha - \beta)$  находятся интегрированием их в интервале  $\left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ , и подставляются в (16):

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \omega_{01}^2 \mu_1(t) = \frac{e^2}{m} \cdot \frac{1}{\pi/2} E(t), \\ \frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} + 2b_2 \frac{d\mu_2(t)}{dt} + \omega_{02}^2 \mu_2(t) = \frac{e^2}{m} \cdot \left( \frac{\sin \alpha + \cos \alpha}{\pi/2} \right) E(t). \end{cases} \quad (17)$$

Система уравнений (17) является математической моделью упругих валентных колебаний изолированной молекулы воды.

Выполнив прямое преобразование ( $L$ -преобразование) Лапласа над каждым из линейных дифференциальных уравнений для нулевых начальных условий и перейдя ко второй форме записи, получим следующую систему:

$$\begin{cases} \mu_1(s) = W_1(s) \cdot E(s), W_1(s) = \frac{2e^2}{m\pi} \cdot \frac{1}{s^2 + 2b_1s + \omega_{01}^2} \\ \mu_2(s) = W_2(s) \cdot E(s), W_2(s) = \frac{2e^2}{m\pi} \cdot \frac{\sin \alpha + \cos \alpha}{s^2 + 2b_2s + \omega_{02}^2} \\ E(s) = E_0(s) - \frac{2}{3} \sum_{i=1}^K N_i \mu_i(s). \end{cases} \quad (18)$$

Процесс деформационных колебаний также описывается известной математической моделью [10, с. 46].

Графически данный процесс представлен на рисунке 12.

За оси абсцисс приняты прямые, лежащие на линиях смещения, за начало отчета системы координат – ионы водорода.

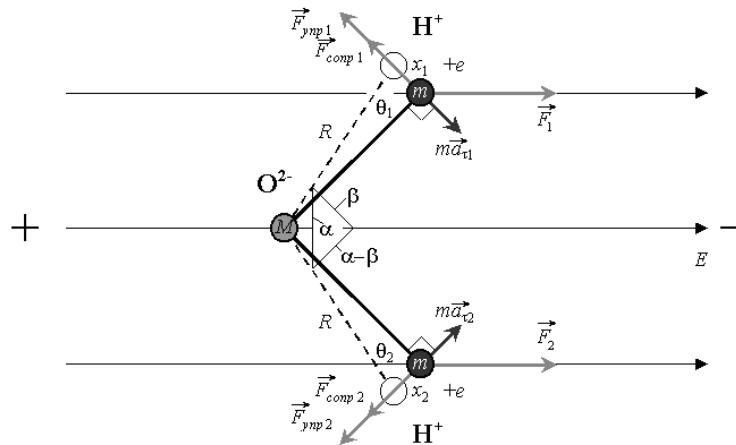


Рисунок 12 – Деформационные колебания молекулы воды

Тогда уравнения проекций сил на линии смещения для рассматриваемого случая имеет вид:

$$\begin{cases} ma_1 = F_1 \sin(\beta - \theta_1) - F_{упр1} - F_{сопр1}, \\ ma_2 = F_2 \sin(\alpha - \beta - \theta_2) - F_{упр2} - F_{сопр2}. \end{cases} \quad (19)$$

где  $m$  – масса водорода;

$\theta_1$  и  $\theta_2$  – угловое смещение каждой из связей  $OH$ ;

$F_{упр1}, F_{упр2}$  – сила упругости, стремящаяся вернуть смещенные ионы в исходное положение;

$F_{сопр1}, F_{сопр2}$  – сила сопротивления, вызванная существованием внутреннего трения;

$F_1, F_2$  – сила, действующая на ионы водорода со стороны поля.

Осуществляется переход от линейного смещения к угловому смещению, с учетом физической сущности каждой из сил, входящих в систему (19), и с вводом обозначений и применением алгебраических и тригонометрических преобразований, получатся система вида:

$$\begin{cases} \frac{d^2\theta_1}{dt^2} + 2b_3 \frac{d\theta_1}{dt} + \omega_{03}^2 \theta_1 = \frac{eE}{mR} \sin \beta, \\ \frac{d^2\theta_2}{dt^2} + 2b_4 \frac{d\theta_2}{dt} + \omega_{04}^2 \theta_2 = \frac{eE}{mR} \sin(\alpha - \beta). \end{cases} \quad (20)$$

Согласно известной модели осуществляется переход от углового смещения к индуцированным дипольным моментам каждой из связей  $OH - \mu_3$  и  $\mu_4$ :

$$\begin{cases} \frac{d^2\mu_3}{dt^2} + 2b_3 \frac{d\mu_3}{dt} + \omega_{03}^2 \mu_3 = \frac{\mu_0 eE}{mR} \sin^2 \beta, \\ \frac{d^2\mu_4}{dt^2} + 2b_4 \frac{d\mu_4}{dt} + \omega_{04}^2 \mu_4 = \frac{\mu_0 eE}{mR} \sin^2(\alpha - \beta), \end{cases} \quad (21)$$

где  $\mu_0$  – собственный дипольный момент связи  $OH$ .

С учетом соотношений:  $\mu_0 = eR$  и  $I = mR^2$ , получается система:

$$\begin{cases} \frac{d^2\mu_3}{dt^2} + 2b_3 \frac{d\mu_3}{dt} + \omega_{03}^2 \mu_3 = \frac{\mu_0^2}{I} E \sin^2 \beta, \\ \frac{d^2\mu_4}{dt^2} + 2b_4 \frac{d\mu_4}{dt} + \omega_{04}^2 \mu_4 = \frac{\mu_0^2}{I} E \sin^2(\alpha - \beta). \end{cases} \quad (22)$$

Находя интегрированием среднее значение  $\sin^2 \beta$  и  $\sin^2(\alpha - \beta)$  на интервале  $\left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ , и подставляя их в (22), получим:

$$\begin{cases} \frac{d^2\mu_3}{dt^2} + 2b_3 \frac{d\mu_3}{dt} + \omega_{03}^2 \mu_3 = \frac{\mu_0^2}{I} \frac{1}{2} E, \\ \frac{d^2\mu_4}{dt^2} + 2b_4 \frac{d\mu_4}{dt} + \omega_{04}^2 \mu_4 = \frac{\mu_0^2}{I} \left( \frac{1}{2} - \frac{\sin 2\alpha}{2} \right) E. \end{cases} \quad (23)$$

Таким образом, выражение (23) – является математической моделью упругих деформационных колебаний молекулы воды.

Аналогично, применяя прямое преобразование Лапласа для случая деформационных колебаний молекулы воды при нулевых начальных условиях, и переходя к форме записи через передаточные функции, система линейных дифференциальных уравнений (23) имеет вид:

$$\begin{cases} \mu_3(s) = W_3(s) \cdot E(s), W_3(s) = \frac{\mu_0^2 / (2I)}{s^2 + 2b_3s + \omega_{03}^2} \\ \mu_4(s) = W_4(s) \cdot E(s), W_4(s) = \frac{\mu_0^2 / I \cdot (1/2 - 1/\pi \cdot \sin 2\alpha)}{s^2 + 2b_4s + \omega_{04}^2} \\ E(s) = E_0(s) - \frac{2}{3} \sum_{i=1}^k N_i \mu_i(s). \end{cases} \quad (24)$$

### 2.2.2 Модель дипольной поляризации

Математическое описание упругой дипольной поляризации молекулы воды, предполагающей ее либрационные колебания, получено в работах [7–8].

Согласно ей рассматривается ориентация молекулы H<sub>2</sub>O относительно координатной оси *x* и относительно координатной оси *y* ввиду различия моментов инерции для молекулярных осей, при этом принимается во внимание совпадение оси *z* с направлением собственного дипольного момента.

Так как модели описывающие повороты молекулы относительно координатных осей выводятся аналогично, рассмотрим получение существующей модели для варианта относительно оси *x*.

Диполь молекулы ориентирован под углом  $\alpha$  к оси *x* своим внутренним полем. Под действием внешнего электрического поля он отклоняется относительно исходного положения на малый угол  $\varphi$ . Данный процесс представлен на рисунке 13, при этом  $\mu_0$  – собственный дипольный момент молекулы воды.

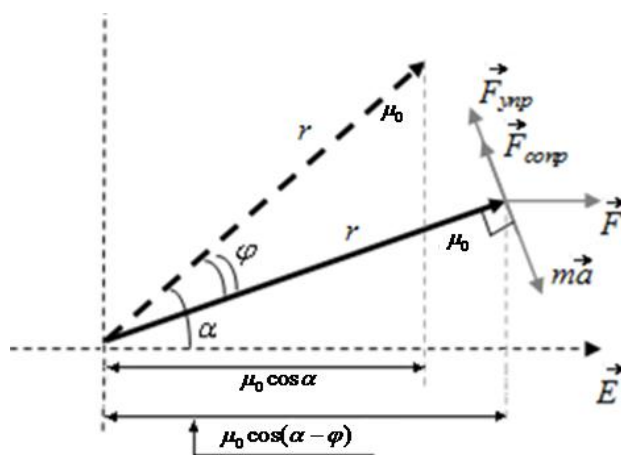


Рисунок 13 – Либрационные колебания относительно молекулярной оси

Уравнение баланса запишется следующим образом:

$$ma = F \sin(\alpha - \phi) - F_{\text{corp}} - F_{\text{yup}}. \quad (25)$$

Согласно известной модели, осуществляется переход от линейного смещения к угловому, при этом учитывается физическая сущность каждой из сил уравнения баланса и малость угла  $\phi$ , в виду чего можно предположить  $\sin(\alpha - \phi) \approx \sin(\alpha)$ :

$$mr \frac{d^2 \phi}{dt^2} + \frac{mr}{\tau} \frac{d\phi}{dt} + kr\phi = qE \sin \alpha, \quad (26)$$

где  $k$  – коэффициент упругости;

$\tau$  – время релаксации.

Произведя простейшие алгебраические преобразования (27), а также учитывая, что по определению дипольный момент есть произведение величины зарядов на расстояние между ними, а произведение массы на квадрат расстояния это осевой момент инерции, получим соответствующее уравнение (28).

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\phi}{dt} + \frac{kr}{mr} \phi = \frac{q}{mr} E \sin \alpha, \quad (27)$$

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\phi}{dt} + \frac{k}{m} \phi = \frac{\mu_0}{I_x} E \sin \alpha, \quad (28)$$

где  $I_x$  – момент инерции относительно оси  $Ox$ .

В таблице приведены значения для моментов инерций относительно молекулярных осей  $Ox$  и  $Oy$ .

Таблица 1 – Моменты инерции молекулы воды

Моменты инерции, $10^{-47}$ кг·м <sup>2</sup>	
$I_x$	$I_y$
2,9376	1,0220

С учетом замены (29), обратная величина времени релаксации – это удвоенный коэффициент затухания, а отношение коэффициента упругости к массе – квадрат частоты собственных колебаний (аналогичные замены вводились и для процессов ионной поляризации), итоговое уравнение (27) представляется в виде (30):

$$\frac{1}{\tau} = 2b, \quad \frac{k}{m} = \omega_0^2, \quad (29)$$

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + 2b \frac{d\phi}{dt} + \omega_0^2 \phi = \frac{\mu_0}{I_x} E \sin \alpha. \quad (30)$$

Из анализа рисунка видно, что поворот диполя на угол  $\phi$  в направлении поля  $E$  эквивалентен возникновению дипольного момента  $\mu$ , который определится следующим образом:

$$\mu = \mu_0 \cos(\alpha - \phi) - \mu_0 \cos \alpha. \quad (31)$$

Применяя тригонометрические формулы косинуса разности аргументов и косинуса двойного угла и приводя подобные, осуществим переход от уравнения (31) к следующему его виду:

$$\begin{aligned}
 \mu &= \mu_0 \cos\alpha \cos\varphi + \mu_0 \sin\alpha \sin\varphi - \mu_0 \cos\alpha = \\
 &= \mu_0 \cos\alpha (\cos\varphi - 1) + \mu_0 \sin\alpha \sin\varphi = \\
 &= \mu_0 \cos\alpha (1 - 2\sin^2 \frac{\varphi}{2} - 1) + \mu_0 \sin\alpha \sin\varphi = \\
 &= \mu_0 \sin\alpha \sin\varphi - 2\mu_0 \cos\alpha \sin^2 \frac{\varphi}{2}.
 \end{aligned} \tag{32}$$

Ввиду малости угла  $\varphi$  слагаемым  $2\mu_0 \cos\alpha \sin^2 \frac{\varphi}{2}$  правой части уравнения (32) по сравнению с первым членом конечного выражения можно пренебречь. Также допустимо использование приближения  $\sin\varphi \approx \varphi$ . Следовательно:

$$\mu = \mu_0 \varphi \sin\alpha. \tag{33}$$

Таким образом, при переходе от угловых смещений к индуцированным дипольным моментам уравнение (30) с учетом (33) оказывается возможным записать в виде:

$$\frac{d^2 \mu}{dt^2} + 2b \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \mu = \frac{\mu_0^2}{I_x} E \sin^2 \alpha. \tag{34}$$

Учитывая случайность изначального расположения диполя воды относительно молекулярных осей, среднее значение величины  $\sin^2 \alpha$  может быть найдено путем интегрирования значения угла между направлением собственного дипольного момента молекулы и силовыми линиями приложенного электромагнитного поля в диапазоне ее изменения от 0 до  $2\pi$  в виде:



$$\begin{aligned} \sin^2 \alpha &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \alpha d\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left( \frac{1}{2} - \frac{\cos 2\alpha}{2} \right) d\alpha = \\ &= \frac{1}{4\pi} \left( \alpha \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \cos 2\alpha d\alpha \right) = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (35)$$

В результате чего итоговые уравнения дипольной поляризации, описывающие либрационные колебания молекулы относительно осей  $Ox$  и  $Oy$ , предстанут в виде:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mu_5(t)}{dt^2} + 2b_5 \frac{d\mu_5(t)}{dt} + \omega_{05}^2 \mu(t) = \frac{\mu_0^2}{2I_y} E(t) \\ \frac{d^2 \mu_6(t)}{dt^2} + 2b_6 \frac{d\mu_6(t)}{dt} + \omega_{06}^2 \mu(t) = \frac{\mu_0^2}{2I_x} E(t). \end{cases} \quad (36)$$

После перехода к форме записи через передаточные функции, система линейных дифференциальных уравнений (36) примет вид:

$$\begin{cases} \mu_5(s) = W_5(s) \cdot E(s), W_5(s) = \frac{\mu_0^2 / (2I_y)}{s^2 + 2b_5 s + \omega_{05}^2} \\ \mu_6(s) = W_6(s) \cdot E(s), W_6(s) = \frac{\mu_0^2 / 2I_x}{s^2 + 2b_6 s + \omega_{06}^2} \\ E(s) = E_0(s) - \frac{2}{3} \sum_{i=1}^K N_i \mu_i(s). \end{cases} \quad (37)$$

### 2.2.3 Модель релаксационной поляризации

В случае релаксационной поляризации процесс рассматривается для тетраэдрического конгломерата молекулы воды и описывается известной математической моделью [4-6].

Диполь конгломерата первоначально ориентирован в пространстве своим внутренним полем. Под действием внешнего электрического поля он отклоня-

ется на некоторый угол от исходного положения. Схематично данный процесс изображен на рисунке 14.

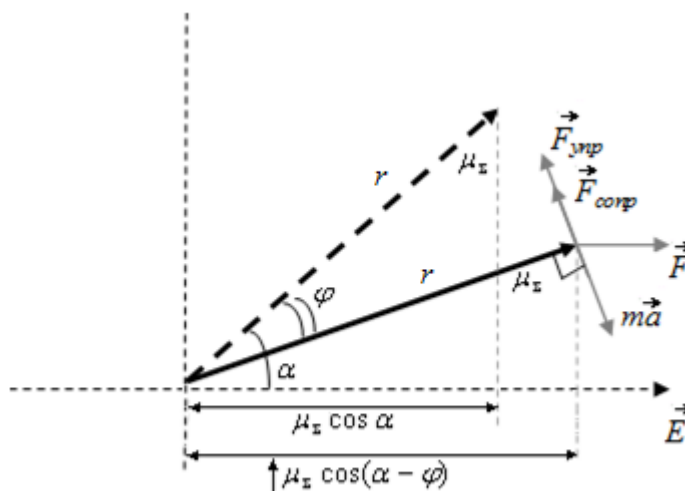


Рисунок 14 – Схема смещения диполя под действием электрического поля

Здесь  $\alpha$  – угол, под которым был направлен диполь в исходном состоянии;  $\varphi$  – угол, на который отклонился диполь;  $\mu_{\Sigma}$  – суммарный дипольный момент тетраэдрического конгломерата, который рассчитывается по выведенной формуле:

$$\mu_{\Sigma} = 5\mu_0. \quad (38)$$

Анализируя рисунок 14, видно, что для процесса релаксационной поляризации соответствующие алгебраические преобразования аналогичны выводу, представленному для процесса либрационных колебаний молекулы относительно оси  $Ox$  в пункте 2.2.2.

Основным отличием при получении уравнения, описывающего процесс релаксационной поляризации, является расчет осевых моментов инерции для тетраэдрического сферического волчка.

Значение суммарного момента инерции  $I_{\Sigma}$  будет равным для каждой из трех ортогональных осей, заданных относительно центральной молекулы, и может быть рассчитано согласно формуле [13, с. 92]:

$$I_{\Sigma} = \frac{8}{3}(2m_{\text{H}} + m_{\text{O}})(R_{\text{OH}} + r_{\text{H}} + r_{\text{O}})^2 = 801,472 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2, \quad (39)$$

где  $m_{\text{H}}$  и  $m_{\text{O}}$  – атомные массы водорода и кислорода;

$R_{\text{OH}}$  – длина молекулярной валентной связи  $\text{OH}$ ;

$r_{\text{H}}$  и  $r_{\text{O}}$  – внешние радиусы частиц водорода и кислорода, рассчитываемые на базе кибернетической модели упругой электронной поляризации воды.

Отметим, что рассчитанная величина  $I_{\Sigma}$  оказывается на два порядка больше осевых моментов инерции изолированной молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ , что хорошо согласуется с разницей значений частот электрического поля, соответствующих пикам полос поглощения, реально наблюдаемым в областях установления процессов ее релаксационной и упругой дипольной поляризации.

Поэтому, с учетом (39) и (38) и по аналогии с (34-36), итоговое уравнение релаксационной поляризации имеет вид:

$$\frac{d^2 \mu_{\gamma}(t)}{dt^2} + 2b_{\gamma} \frac{d \mu_{\gamma}(t)}{dt} + \omega_{07}^2 \mu(t) = \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} E(t). \quad (40)$$

### 3 ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ ПОДСИСТЕМ ПРОЕКТИРУЕМОЙ АСНИ

Обеспечивающие подсистемы – совокупность функционально-ориентированных элементов автоматизированной системы, предназначенных для обеспечения эффективной работоспособности функциональных подсистем, то есть необходимых для организации взаимосвязи отдельных элементов системы при ее функционировании.

В составе типового перечня обеспечений могут быть выделены математическое, алгоритмическое, программное, техническое, эргономическое, а также другие виды обеспечения.

Требования не предъявляются к правовому, организационному, кадровому, методическому, диалоговому, лингвистическому видам обеспечения.

#### 3.1 Математическое обеспечение

Математическое обеспечение, по определению, есть совокупность математических методов, алгоритмов, моделей, используемых при решении задач в автоматизированной системе.

##### 3.1.1 Уравнения вынужденных гармонических колебаний

Исследование поляризационных процессов и построение их моделей основывается, в том числе на понятии вынужденных гармонических колебаний теории колебаний.

Вынужденные колебания – колебания, которые совершаются под действием внешних периодических сил. Рассмотрим общий вид уравнения гармонических вынужденных колебаний.

Пусть колебательная система подвергается действию внешней силы, изменяющейся со временем по гармоническому закону:

$$F_x = F_0 \cos \omega t. \quad (41)$$

В этом случае уравнение второго закона Ньютона имеет вид:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx - r \frac{dx}{dt} + F_0 \cos \omega t. \quad (42)$$

Здесь слагаемое  $kx$  – сила сопротивления, возникающая в результате внутреннего трения, а  $r \frac{dx}{dt}$  – сила упругости, возвращающая систему в исходное положение.

Введя обозначения  $2\beta = r/m$ ,  $\omega_0^2 = k/m$ ,  $f_0 = F_0/m$ , можно записать уравнение (42) следующим образом:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + 2\beta \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = f_0 \cos \omega t. \quad (43)$$

При этом коэффициент  $\beta$  – коэффициент затухания, характеризующий скорость затухания колебаний, а  $\omega_0$  – частота собственных колебаний.

Решая уравнение (43), можно получить уравнение амплитуды колебаний:

$$A = \frac{F_0 / m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}}. \quad (44)$$

Решением данного уравнения, состоящего из общего и частного решений, является уравнение:

$$x = \frac{F_0 / m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}} \cos \left( \omega t - \arctg \frac{2\beta \omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \right). \quad (45)$$

Анализируя уравнение (44) можно видеть, что при некоторой определенной частоте амплитуда достигает максимального значения. Резкое возрастание амплитуды колебаний называется резонансом, а соответствующая частота, при которой амплитуда достигает максимального значения, называется резонансной частотой.

Для определения резонансной частоты нужно найти максимум функции (44), продифференцировав это выражение по  $\omega$  и приравняв его к нулю, при этом получится условие (46), определяющее резонансную частоту:

$$\frac{d}{d\omega} \left[ (\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2 \right] = 0. \quad (46)$$

В ходе решения (46) становятся известны корни:  $\omega_1=0$  и  $\omega_{2,3} = \pm\sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}$ . Первый корень соответствует максимуму знаменателя. Отрицательный третий корень не имеет физического смысла – частота не может быть отрицательной, поэтому его можно не учитывать. Таким образом, частоте резонанса соответствует уравнение (47). Подставив второй корень, получим выражение для амплитуды при резонансе (48).

$$\omega_{рез} = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}. \quad (47)$$

$$A_{рез} = \frac{F_0/m}{2\beta\sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}}. \quad (48)$$

Зависимость амплитуды вынужденных колебаний от частоты вынуждающей силы показана на рисунке 15.

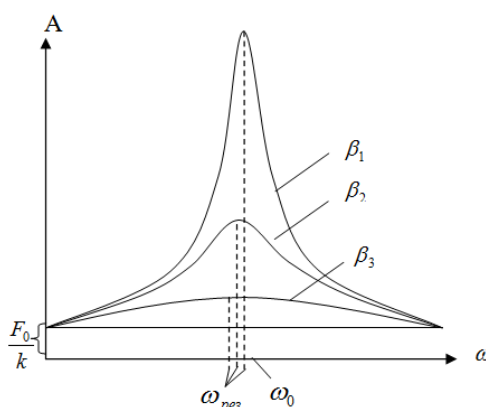


Рисунок 15 – Резонансные кривые

Отдельные кривые на графике соответствуют различным значениям параметра  $\beta$ . В соответствии с (47) и (48), чем меньше  $\beta$ , тем выше и правее ле-

жит максимум данной кривой. Изображенная на рисунке 15 совокупность графиков функций (48), соответствующих различным значениям параметра  $\beta$ , называется резонансными кривыми.

### 3.1.2 Аппарат передаточных функций и их частотных аналогов

При моделировании поляризационных процессов применялся аппарат передаточной функции. Введем это понятие, для чего рассмотрим систему описываемую неоднородным дифференциальным уравнением второго порядка:

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + a_1 \frac{dy}{dt} + a_2 y(t) = ku(t), \quad (49)$$

где  $y(t)$  – выход системы;

$u(t)$  – вход системы;

$a_1, a_2, k$  – некоторые коэффициенты.

Применяя к системе (49) прямые преобразования Лапласа и явно выражая вход и выход системы, найдем отношение выхода ко входу условиях, обозначив его  $W(s)$ :

$$W(s) = \frac{y(s)}{u(s)} = \frac{k}{s^2 + a_1 s + a_2}. \quad (50)$$

Таким образом, передаточная функция представляет собой отношение выхода  $y(s)$  ко входу  $u(s)$ , полученных в результате прямого преобразования Лапласа при нулевых начальных условиях.

При построении схем системы представляются в виде динамических звеньев подобно тому, как показано на рисунке 16.

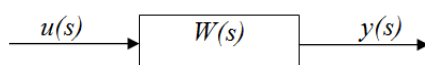


Рисунок 16 – Динамическое звено

При построении схем сложных систем, состоящих из многих элементов, выделяют следующие способы соединения передаточных функций: последовательное соединение и параллельное, которое может быть согласованным или являться соединением с обратной связью.

Рассмотрим соединение двух систем. Обозначим через  $W_1(s)$  и  $W_2(s)$  – передаточные функции соединяемых систем, а через  $W(s)$  – общую передаточную функцию.

При параллельном соединении (рисунок 17) общая передаточная функция имеет вид (51), а при соединении с обратной связью (рисунок 18) – вид (52).

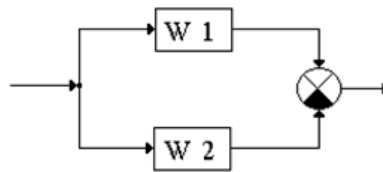


Рисунок 17 – Параллельное соединение двух систем

$$W(s) = \sum_{i=1}^2 W_i(s) \quad (51)$$

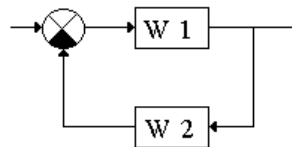


Рисунок 18 – Соединение с отрицательной обратной связью

$$W(s) = \frac{W_1(s)}{1 + W_1(s)W_2(s)} \quad (52)$$

Важной характеристикой динамической системы является ее частотная передаточная функция, которая представляется в виде комплексного числа:

$$W(j\omega) = A(\omega)e^{i\varphi} = U(\omega) + jV(\omega), \quad (53)$$

где  $\varphi$  – аргумент;



$A(\omega)$  – амплитуда;

$U(\omega)$  и  $V(\omega)$  – вещественная и мнимая составляющие частотной передаточной функции.

Частотная передаточная функция легко получается из обычной путем замены переменной  $s$  на  $j\omega$ . Таким образом, уравнение (50) принимает вид:

$$W(j\omega) = \frac{y(j\omega)}{u(j\omega)} = \frac{k}{-\omega^2 + a_1 j\omega + a_2}. \quad (54)$$

Основываясь на правилах действий с комплексными числами и выполняя алгебраические преобразования с (54), выделим явно вещественную (55) и мнимую (56) составляющие частотной передаточной функции:

$$U(\omega) = \frac{k(a_2 - \omega^2)}{a_1^2 \omega^2 + (a_2 - \omega^2)^2}, \quad (55)$$

$$V(\omega) = \frac{k a_1 \omega}{a_1^2 \omega^2 + (a_2 - \omega^2)^2}. \quad (56)$$

### 3.2 Программное обеспечение

Моделирование по полученной модели поляризации полярной жидкости проводилось на персональной ЭВМ с применением пакета математического моделирования MATLAB.

Современная компьютерная математика предлагает целый набор интегрированных программных систем и пакетов программ для автоматизации математических расчетов, наиболее известными из которых являются OriginPro, MatLAB, MathCAD, Maple V и др.

В настоящее время MATLAB является мощным и универсальным средством решения задач, возникающих в человеческой деятельности. Спектр проблем, исследование которых может быть осуществлено при помощи MATLAB, обширен. Типичное использование MATLAB – это:

- 1) математические вычисления;
- 2) создание алгоритмов;

- 3) моделирование;
- 4) анализ данных, исследования, визуализация;
- 5) научная и инженерная графика;
- 6) разработка приложений, включая создание графического интерфейса.

Язык программирования MATLAB достаточно прост по сравнению с традиционными языками программирования, такими как, C/C++, Java, Pascal, FORTRAN. Он позволяет сократить время решения типовых задач и существенно упрощает разработку алгоритмов, потому что нет необходимости таких низкоуровневых организационных операций как объявление переменных, определение типов и выделение памяти.

Важными достоинствами системы являются ее открытость и расширяемость. Большинство команд и функций системы реализованы в виде текстовых m-файлов (с расширением \*.m) и файлов на языке C, причем все файлы доступны для модификации. Пользователю дана возможность создавать не только отдельные файлы, но и библиотеки файлов для реализации специфических задач.

Подсистема разработки графического интерфейса GUIDE упрощает создание и выполнение операций с объектами дескрипторной графики. В первую очередь это касается редактирования свойств графических объектов. Кроме того, упрощается процедура размещения элементов GUI, которая может быть выполнена, используя только кнопки манипулятора мышь.

В состав интерактивного средства GUIDE входят пять инструментальных средств: панель управления, редактор свойств, средство выравнивания, редактор ответных вызовов, редактор меню. Каждый инструмент выполняет определенную задачу и может взаимодействовать с другими инструментами. Для инициализации инструментальных средств предназначены следующие команды:

- 1) guide – инициализация панели управления;
- 2) propedit – инициализация редактора свойств;
- 3) cbedit – инициализация редактора ответных вызовов;
- 4) align – инициализация средств выравнивания;
- 5) menuedit – инициализация редактора меню.

На панели управления расположены: поле кнопок для инициализации инструментальных средств, поле для контроля и активизации графических объектов, поле графических объектов GUI. Среди списка графических объектов можно выделить несколько управляющих элементов: кнопка вызова (push button), кнопка выбора отклика (radio button), окно контроля (check box), окно редактируемого текста (edit box), окно фиксируемого текста (text box), окно списка (list box), скользящая шкала (slider), ниспадающее меню (pop-up menu), окно для объединения элементов управления (frame) [18].

С помощью средств панели управления можно размещать управляющие элементы в той части графического окна, которая называется редактируемым полем GUI. Характерными особенностями редактируемого поля являются нанесенная сетка и удаленное меню графического редактирования [19].

Это далеко не все преимущества среды MatLAB, именно поэтому данная система и была выбрана в качестве среды разработки программы.

Основные функции системы MatLAB, используемые при создании программного продукта:

1) global – объявленные за этим ключевым словом переменные становятся глобальными, то есть доступными с любой точки программы;

2) axis – масштабирование осей. axis(h), где вектор  $h=[x_{min}, x_{max}, y_{min}, y_{max}]$  – вектор, элементы которого указывают разметку осей x и y;

3) clear – очистка рабочего пространства. clear all; очищает содержимое рабочего пространства. clear A; удаляет переменную A из рабочего пространства;

4) hold on – сохранение текущего графика на экране. Последующие команды построения графиков будут добавлять графики (накладывать на ранее созданный), используя уже существующие оси. Оператор hold off; - прекращает наложение графиков, а оператор hold on; возобновляет его. Оператор hold сам по себе прекращает режим накопления графиков;

5) semilogx – изображение графика с логарифмическим (по основанию 10) масштабом по оси X и линейным по оси Y;

- 6) axes – создает систему координат для построений;
- 7) subplot – позволяет вывести графики в одном открытом окне;
- 8) set – устанавливает свойства того или иного объекта;
- 9) get – извлекает свойства того или иного объекта;
- 10) findpeaks – возвращает вектор с локальными максимумами входного сигнала;

11) parallel – формирует передаточную функцию параллельного соединения, представляется выражением:  $[num,den]=parallel(num1,den1,num2,den2)$ , где num1, den1 – соответственно числитель и знаменатель первой передаточной функции, num2, den2 – соответственно числитель и знаменатель второй передаточной функции, num, den – соответственно числитель и знаменатель результирующей передаточной функции. Числители и знаменатели формируются в виде массивов данных.

12) uigetfile – отображение диалогового окна открытия файла.

13) xlsread – импорт данных из книги Excel.

14) xlabel, ylabel – размещение наименований осей на графике xlabel – под осью x; ylabel – под осью y.

Входные данные для разрабатываемой АСНИ будут храниться в электронных таблицах Excel, поэтому для корректной работы программы должен быть установлен Microsoft Office Excel версии 2007 или выше или пакет программ Microsoft Office. Excel позволяет в удобном виде хранить, добавлять и изменять данные в виде таблиц, при этом MATLAB обладает функциями, обеспечивающими взаимодействие с электронными таблицами. К ним относится названная функция xlsread, возвращающая численный массив, считанный из указанного файла Excel при необходимости с указанного листа или столбца.

### 3.3 Алгоритмическое обеспечение

К алгоритмическому обеспечению относятся математические методы, модели и алгоритмы, используемых в системе для решения задач и обработки информации.

В данной работе, для получения теоретических характеристик исследуемой системы и для определения ее параметров используется численный метод, конкретная реализация которого представлена в пункте 4.2. Дадим общую характеристику применяемого алгоритма.

Предлагаемый подход основан на анализе условия существования максимумов теоретических функций вещественной и мнимой частотных характеристик комплексной диэлектрической проницаемости, которые имеют место в области резонансных частот каждого вида поляризационного процесса. При этом для расчета динамических параметров процессов будет использоваться уравнение:

$$\frac{d\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)}{d\omega} = 0. \quad (57)$$

В аналитическое решение данного уравнения, которое находится относительно переменной  $\omega$ , подставляются физически фиксируемые экстремальные значения, которые определяются исходя из предварительно сформированных массивов контрольных данных. Экспериментальные данные определяются на основании уравнений (10) и (11).

### 3.4 Техническое обеспечение

Этот вид обеспечения включает в себя комплекс аппаратно-технических средств, используемых для функционирования АСОИУ. С его помощью осуществляется регистрация, сбор, обработка, отображение, защита и хранение информации, а также средств оргтехники и устройств управления ими.

Аппаратные требования к вычислительной технике обуславливают быстродействие и надежность решения вычислительных задач. Для комфортабельной работы с приложением предъявляются относительно высокие требования к аппаратным средствам:

- 1) любой Intel или AMD x86 процессор;
- 2) объем ОЗУ –1 Гбайт (2 Гбайт рекомендуется);

- 3) объем ПЗУ – не менее 10 Гбайт;
- 4) видеоадаптер, поддерживающий разрешение 800x600 и имеющий объем видеопамати не менее 16 Мбайт, с аппаратной поддержкой OpenGL;
- 5) монитор разрешения 800x600. частоты не менее 75 Гц;
- 6) клавиатура, мышь;
- 7) ОС – Windows XP/7/8.

### **3.5 Эргономическое обеспечение**

Программное изделие должно использоваться одним человеком, имеющим основные навыки работы с ЭВМ в операционной среде «Windows».

Для удобного взаимодействия пользователя с ЭВМ необходимо предусмотреть диалоговый режим, удобное меню, подсказки, справку, наглядный графический интерфейс. Интерфейс должен иметь параметры, которые позволят конкретному пользователю выбрать наиболее подходящий вид программы.

## 4 ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВОДЫ

### 4.1 Математический синтез поляризационных уравнений

В целях обеспечения общности подхода к построению модели, найдем средние значения  $\cos \beta$  и  $\cos(\alpha - \beta)$  в системе (16) для валентных колебаний и средние значения  $\sin^2 \beta$  и  $\sin^2(\alpha - \beta)$  в системе (22) для деформационных колебаний, проинтегрировав их в интервале  $[0; \pi]$ .

$$\frac{\int_0^{\pi} \cos \beta d\beta}{\pi} = \frac{\sin \beta \Big|_0^{\pi}}{\pi} = 0 \quad (58)$$

$$\frac{\int_0^{\pi} \cos(\alpha - \beta) d\beta}{\pi} = \frac{\sin(\alpha - \beta) \Big|_0^{\pi}}{\pi} = \frac{2}{\pi} \sin \alpha \quad (59)$$

$$\frac{\int_0^{\pi} \sin^2 \beta d\beta}{\pi} = \frac{(\beta/2 - \sin(2\beta)/4) \Big|_0^{\pi}}{\pi} = \frac{1}{2} \quad (60)$$

$$\frac{\int_0^{\pi} \sin^2(\alpha - \beta) d\beta}{\pi} = \frac{(\beta/2 - \sin(2\alpha - 2\beta)/4) \Big|_0^{\pi}}{\pi} = \frac{1}{2} \quad (61)$$

Результатом синтеза и коррекции моделей, полученных в указанных работах, явилось наиболее адекватное математическое описание совокупности названных поляризационных процессов, происходящих с водой под действием внешнего электрического поля. Математическое описание представлено системой уравнений (62):

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \omega_{01}^2 \mu_1(t) &= 0 \cdot E(t), \\ \frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} + 2b_2 \frac{d\mu_2(t)}{dt} + \omega_{02}^2 \mu_2(t) &= \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} (\sin \alpha) E(t), \\ \frac{d^2 \mu_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{d\mu_l(t)}{dt} + \omega_{0l}^2 \mu_l(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{1}{2} E(t), l = \overline{3, 4}, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\frac{d^2 \mu_5(t)}{dt^2} + 2b_5 \frac{d\mu_5(t)}{dt} + \omega_{05}^2 \mu_5(t) = \frac{\mu_0^2}{I_y} E(t),$$

$$\frac{d^2 \mu_6(t)}{dt^2} + 2b_6 \frac{d\mu_6(t)}{dt} + \omega_{06}^2 \mu_6(t) = \frac{\mu_0^2}{I_x} E(t),$$

$$\frac{d^2 \mu_7(t)}{dt^2} + 2b_7 \frac{d\mu_7(t)}{dt} + \omega_{07}^2 \mu_7(t) = \frac{\mu_\Sigma^2}{2I_\Sigma} E(t);$$

$$E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^7 \mu_i(t) N_i,$$

где  $\mu_i(t)$  – наведенные дипольные моменты соответствующих частиц;

$b_i$  и  $\omega_{0i}$  – соответственно коэффициент затухания и частота собственных колебаний;

$e$  – заряд электрона;

$m_H$  – масса иона водорода;

$\alpha$  – величина валентного угла НОН;

$\mu_{ОН}$  и  $I_{ОН}$  – собственный дипольный момент и осевой момент инерции химической связи ОН;

$\mu_0$  – собственный дипольный момент молекулы  $H_2O$ ;

$I_y$  и  $I_x$  – моменты ее инерции относительно молекулярных осей  $y$  и  $x$ ;

$\mu_\Sigma$  – суммарный дипольный момент водного ассоциата;

$I_\Sigma$  – суммарный момент инерции рассматриваемой молекулярной связки;

$E_0(t)$  и  $E(t)$  – функции напряженности внешнего и эффективного полей.

Согласно (62), упругая ионная поляризация характеризуется процессами 1 – 4, процессы 5 – 6 описывают упругую дипольную поляризацию, а процесс 7 обуславливает релаксационную поляризацию.

Используя метод преобразования Лапласа, во второй стандартной форме записи систему уравнений (62) можно представить в виде выражений (63).

$$\mu_1(s) + 2b_1 \mu_1(s) + \omega_{01}^2 \mu_1(s) = 0 \cdot E(s),$$



$$\mu_2(s) + 2b_2\mu_2(s) + \omega_{02}^2\mu_2(s) = \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} (\sin \alpha) E(s),$$

$$\mu_l(s) + 2b_l\mu_l(s) + \omega_{0l}^2\mu_l(s) = \frac{\mu_{0H}^2}{I_{0H}} \frac{1}{2} E(s), l = \overline{3,4},$$

$$\mu_5(s) + 2b_5\mu_5(s) + \omega_{05}^2\mu_5(s) = \frac{\mu_0^2}{I_y} E(s), \quad (63)$$

$$\mu_6(s) + 2b_6\mu_6(s) + \omega_{06}^2\mu_6(s) = \frac{\mu_0^2}{I_x} E(s),$$

$$\mu_7(s) + 2b_7\mu_7(s) + \omega_{07}^2\mu_7(s) = \frac{\mu_\Sigma^2}{2I_\Sigma} E(s);$$

$$E(s) = E_0(s) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^7 \mu_i(s) N_i.$$

На основании данных выражений и правил построения схем для динамических систем, представленных в пункте 3.1.2 можно построить структурную схему, наглядно отображающую вход и выход системы, взаимосвязь блоков (рисунок 19).

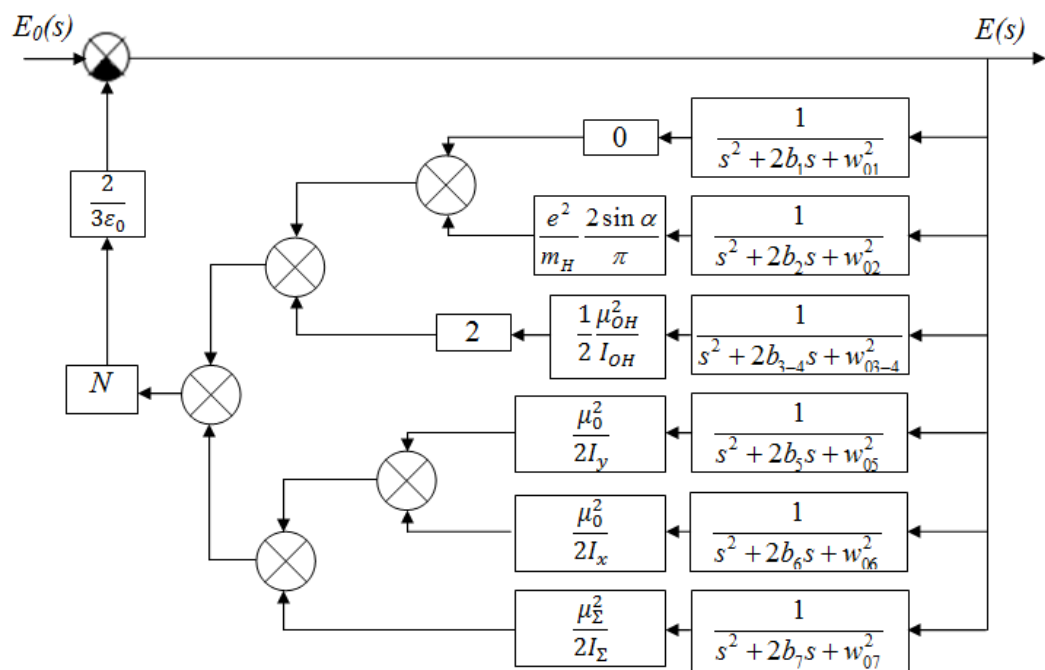


Рисунок 19 – Структурная схема общей поляризации воды

Согласно (5) вещественная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости определяются на основе поляризуемостей. Учитывая то, что комплексные поляризуемости определяются как  $\alpha_l(j\omega) = \frac{\mu_l(j\omega)}{E(j\omega)}$ , вещественная часть комплексной поляризуемости для каждого вида поляризационного процесса будет находиться по выражениям (64):

$$\alpha_{\text{Re}1} = 0 \cdot \frac{\omega_{01}^2 - \omega^2}{(\omega_{01}^2 - \omega^2)^2 + 4b_1^2\omega^2},$$

$$\alpha_{\text{Re}2} = \frac{e^2}{m_H} \frac{2 \sin \alpha}{\pi} \frac{\omega_{02}^2 - \omega^2}{(\omega_{02}^2 - \omega^2)^2 + 4b_2^2\omega^2},$$

$$\alpha_{\text{Re}l} = \frac{1}{2} \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{\omega_{0l}^2 - \omega^2}{(\omega_{0l}^2 - \omega^2)^2 + 4b_l^2\omega^2}, \quad l = \overline{3,4}, \quad (64)$$

$$\alpha_{\text{Re}5} = \frac{\mu_0^2}{2I_y} \frac{\omega_{05}^2 - \omega^2}{(\omega_{05}^2 - \omega^2)^2 + 4b_5^2\omega^2},$$

$$\alpha_{\text{Re}6} = \frac{\mu_0^2}{2I_x} \frac{\omega_{06}^2 - \omega^2}{(\omega_{06}^2 - \omega^2)^2 + 4b_6^2\omega^2},$$

$$\alpha_{\text{Re}7} = \frac{\mu_\Sigma^2}{2I_\Sigma} \frac{\omega_{07}^2 - \omega^2}{(\omega_{07}^2 - \omega^2)^2 + 4b_7^2\omega^2}.$$

Мнимые части комплексной поляризуемости определяются по выражениям (65):

$$\alpha_{\text{Im}1} = 0 \cdot \frac{2b_1\omega_{01}}{(\omega_{01}^2 - \omega^2)^2 + 4b_1^2\omega^2},$$

$$\alpha_{\text{Im}2} = \frac{e^2}{m_H} \frac{2 \sin \alpha}{\pi} \frac{2b_2\omega_{02}}{(\omega_{02}^2 - \omega^2)^2 + 4b_2^2\omega^2},$$

$$\alpha_{1ml} = \frac{1}{2} \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{2b_l \omega_{0l}}{(\omega_{0l}^2 - \omega^2)^2 + 4b_l^2 \omega^2}, \quad l = \overline{3,4}, \quad (65)$$

$$\alpha_{1m5} = \frac{\mu_0^2}{2I_y} \frac{2b_5 \omega_{05}}{(\omega_{05}^2 - \omega^2)^2 + 4b_5^2 \omega^2},$$

$$\alpha_{1m6} = \frac{\mu_0^2}{2I_x} \frac{2b_6 \omega_{06}}{(\omega_{06}^2 - \omega^2)^2 + 4b_6^2 \omega^2},$$

$$\alpha_{1m7} = \frac{\mu_\Sigma^2}{2I_\Sigma} \frac{2b_7 \omega_{07}}{(\omega_{07}^2 - \omega^2)^2 + 4b_7^2 \omega^2}.$$

Динамические параметры определяются по численному методу, описанному в пункте 4.2.

#### 4.2 Численный метод расчета динамических параметров

Динамические параметры поляризационных процессов  $\omega_0$  и  $\beta$  определяются по следующему разработанному численному методу.

Для нахождения параметров использовалась модель вида (66):

$$\varepsilon_{1m}(\omega) = \frac{2q^2 N}{3\varepsilon_0 m} \cdot \frac{2\beta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}, \quad (66)$$

где  $q, m$  – энергетический и инерциальный параметры объекта (заряд и масса частицы, или собственный электрический момент и момент инерции диполя).

Получение представленной базовой модели описано в работе [9, с. 63], где она применялась в других численных методах нахождения параметров.

Найдем первую производную указанной модели:

$$\frac{d\varepsilon_{1m}(\omega)}{d\omega} = \frac{4q^2 N}{3\varepsilon_0 m} \cdot \frac{\beta(\omega_0^4 + 2\omega_0^2 \omega^2 - 3\omega^4 - 4\omega^2 \beta^2)}{((\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\beta\omega)^2)^2}. \quad (67)$$

Подставив вместо некоторого абстрактного значения  $\omega$  ее физически фиксируемую величину – частоту резонанса  $\omega_{рез}$ , определяемую на основе обработки контрольного массива  $\varepsilon_{lm}(\omega)$ , сформируем уравнение:

$$\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega_{рез}^2 - 3\omega_{рез}^4 - 4\omega_{рез}^2\beta^2 = 0. \quad (68)$$

Далее, предположим, что параметр  $\beta$  прямо пропорционален частоте собственных колебаний  $\omega_0$ :

$$\beta = k\omega_0, \quad (69)$$

где  $k$  – некоторый коэффициент, который задается для каждого вида поляризационных процессов в виде ранжированной переменной изменяемой в пределах  $k_{min} < k < k_{max}$  с заданным шагом дискретизации.

Для процессов упругой поляризации  $k$  изменяется в пределах  $[0; 1]$ , тогда  $\omega_0 \approx \omega_{рез}$ ; для релаксационных колебаний  $k > 1$ , тогда  $\omega_0 > \omega_{рез}$ .

Подставим полученное соотношение (69) в уравнение (68) и решим последнее относительно переменной  $\omega_0$ , тем самым получая уравнение для нахождения этого динамического параметра:

$$\omega_0 = \omega_{рез} \sqrt{2k^2 - 1 + \sqrt{(2k^2 - 1)^2}}. \quad (70)$$

Таким образом, получены уравнения (69) и (70) для нахождения динамических параметров: коэффициента затухания и частоты собственных колебаний соответственно. Блок-схема данного алгоритма представлена на рисунке Б.1.

### 4.3 Существующие методы расчета динамических параметров

Для расчета динамических параметров поляризационных процессов применялись различные методы.

Так в работах [10,11] для упругих видов поляризации значения коэффициентов затухания и частот собственных колебаний определялись эмпирически на основе экспериментальных данных исследования инфракрасных спектров поглощения воды [22]. В приведенном источнике величины данных динамических параметров приводятся как волновые числа пиков поглощения  $\nu_k$  и их полуширины  $\Delta\nu_k$ . Перерасчет в соответствующие частоты собственных колебаний и коэффициенты затухания производился по формулам:  $\omega_k = 2\pi\nu_k$  и  $b_k = 2\pi c\Delta\nu_k$ .

Данный метод приемлем, однако его привязка к имеющимся табличным данным не дает возможности повышения точности соответствия модели с экспериментальными данными. Также, так как указанные справочные данные справедливы только для молекулы воды, то применение данного подхода при развитии модели для молекул схожей структуры не применим.

В работе [13] для релаксационной поляризации применялся итерационный метод расчета параметров, также основанный на выполнении условия существования экстремума для мнимой характеристики комплексной диэлектрической проницаемости в виде (57). Согласно ему коэффициент затухания вычислялся по формуле:

$$b = \sqrt{\frac{\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega_{рез}^2 - 3\omega_{рез}^4}{4\omega_{рез}^2}}. \quad (71)$$

Частота собственных колебаний  $\omega_0$  задается в виде ранжированной переменной, изменяемой с желаемым шагом дискретизации в следующем диапазоне ее допустимых значений:

$$\omega_{погл} < \omega_0 < \omega_{уст}, \quad (72)$$

где  $w_{ногл}$  – частота поглощения, отвечающая максимуму исходного контрольного спектра  $\chi(l)$  показателя поглощения воды;

$w_{уст}$  – частота, соответствующая началу релаксационных колебаний воды.

При этом нахождение собственных параметров релаксационных колебаний сводилось к минимизации расхождения его теоретических характеристик  $\varepsilon_{Re}(\omega)$  и  $\varepsilon_{Im}(\omega)$  с их контрольными экспериментальными спектрами.

Данный подход достаточно эффективен, но, по сравнению с предлагаемым, предполагает обработку большего числа экспериментальных данных входных спектров: показатель поглощения, вещественной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости.

#### 4.4 Программная реализация

Современные методы программирования подразумевают не последовательное выполнение программы, а реакцию ее на действие пользователя, для успешной реализации данного подхода, необходимо использовать современные концепции программирования. К ним можно отнести концепцию модульного программирования, суть которой заключается в том, что создается готовый программный продукт, состоящий из модулей, которые можно собирать как конструктор. Частным случаем модульного программирования является выделение часто повторяющихся кусков кода в функции.

Программная реализация велась в соответствии с требованиями ТЗ на проектирование, которое представлено в приложении А настоящей работы. ТЗ составлено в соответствии с ГОСТ 19.201-78. Описание программы в соответствии с ГОСТ 19.402-78 представлено в приложении В.

ПО PolarizationModel состоит из следующих модулей:

1) пользовательский интерфейс, включающий блоки:

- а) блок ввода экспериментальных данных;
- б) подсистему вывода результатов;
- в) блок управления графической подсистемой;

2) модуль обработки входных данных;

3) модуль расчета оптимальных динамических параметров;

4) модуль, реализующий математическую модель широкодиапазонных спектров – основной модуль, включающий модули реализации математической модели и расчета макроскопических характеристик.

В файле PolarizationModel.m описана основная часть работы программы. Модуль пользовательского интерфейса представлен в виде следующих типов функций:

- 1) функции, в которых выполняется создание элементов GUI;
- 2) обработчиков событий соответствующих кнопок.

Обработчик элемента управления, отвечающего за загрузку входных данных, является частью модуля обработки входных данных. В нем происходит открытие файла с расширением .xlsx с помощью встроенной функции MATLAB uigetfile('\* .xlsx') и чтение данного файла с помощью функции xlsread(). Из файла считываются экспериментальные массивы. Затем файл передается в качестве параметра в m-функцию Parameters.m. Этот файл также является частью модуля обработки входных данных, и в нем происходит обработка основных структурных параметров, необходимых для построения модели. Обработка считанных экспериментальных точек включает формирование соответствующих массивов и поиск локальных максимумов с помощью встроенной функции MATLAB findpeaks().

Обработчик элемента управления, соответствующего модулю расчета оптимальных динамических параметров, содержит реализацию основного алгоритма, представленного в пункте 4.2. Блок-схема алгоритма показана на рисунке Б.1. В ходе выполнения алгоритма в теле обработчика запрашивается m-функция Model(), описанная в файле Model.m, в которой описаны основные функциональные модули реализации модели и расчета теоретических макроскопических показателей: вещественной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости, показателей преломления и поглощения.

Реализация модели осуществляется с помощью предоставляемых MATLAB функций parallel() и nyquist() на основании математического описания, представленного в пункте 4.1 в уравнениях (63-65).

Расчет макроскопических характеристик осуществляется, на основании уравнений (7), (12).

Текст программы оформлялся в соответствии с ГОСТ 19.401-78 и представлен в приложении Г.

#### 4.5 Руководство пользователя

Программный продукт обеспечит быстрое действие выполняемых функций в случае, если аппаратное и программное обеспечение компьютера будут отвечать требованиям, представленным в ТЗ. В противном случае корректную и комфортную работу программа обеспечить не сможет.

Перед запуском системы необходимо подготовить исходные данные для обработки программой, включающие наборы экспериментальных точек показателей преломления и поглощения и соответствующих им длин волн, а также структурные параметры для молекулы воды или полярной жидкости схожего строения.

Для подготовки данных следует запустить программу Microsoft Office Excel, создать новый файл, сохранить его в формате .xlsx и заполнить его в следующем порядке:

- 1) на первом листе в столбце А должны быть записаны длины волн, в столбце В – экспериментальные точки показателя преломления, в столбце С – показателя поглощения (рисунок 20а);
- 2) на листе 2 в столбце В должны быть записаны структурные параметры в соответствии с шаблоном на рисунке 20б.

А	В	С	А	В	
1,0000000000	1,3270000000	0,0000017080	1	угол Н-О-Н [рад], hoh	1,823869068
1,2000000000	1,3240000000	0,0000119900	2	межъядерное расстояние О-Н [м], r	9,57E-11
1,4000000000	1,3210000000	0,0001530000	3	плотность [кг/м <sup>3</sup> ], ρo	997,1
1,6000000000	1,3170000000	0,0000934700	4	химическая формула pi1	2
1,8000000000	1,3120000000	0,0001359000	5	pi2	1
2,0000000000	1,3060000000	0,0011010000	6	собственный дипольный момент молекулы H2O, mu0	6,10E-30
2,2000000000	1,2960000000	0,0003387000	7	порядковый номер атома Н q1	1
2,4000000000	1,2790000000	0,0009095000	8	порядковый номер атома О q2	8
2,6000000000	1,2420000000	0,0025750000	9	главное квантовое число атома Н nk1	1
2,6500000000	1,2190000000	0,0048280000	10	главное квантовое число атома О nk2	2
2,7000000000	1,1880000000	0,0164000000	11	момент инерции Iy	1,02E-47
2,7500000000	1,1570000000	0,0548000000	12	момент инерции Ix	2,94E-47
2,8000000000	1,1420000000	0,1210000000	13	момент инерции крнгломерата isum	8,06E-45
2,8500000000	1,1490000000	0,1940000000			
2,9000000000	1,2010000000	0,2647000000			
2,9500000000	1,2920000000	0,2824000000			
3,0000000000	1,3710000000	0,2721000000			
3,0500000000	1,4260000000	0,2398000000			

Рисунок 20 – Входные данные: а) Набор экспериментальных точек; б) Структурные параметры



В директории «Поляризация» имеется уже подготовленный файл Data.xlsx с входными данными для молекулы воды.

Для запуска системы возможно выполнение следующих шагов.

Скопировать из директории «Поляризация» файлы PolarizationModel.m, PolarizationModel.fig, Model.m, Parameters.m и поместить их в основную директорию MATLAB, как показано на рисунке 21.

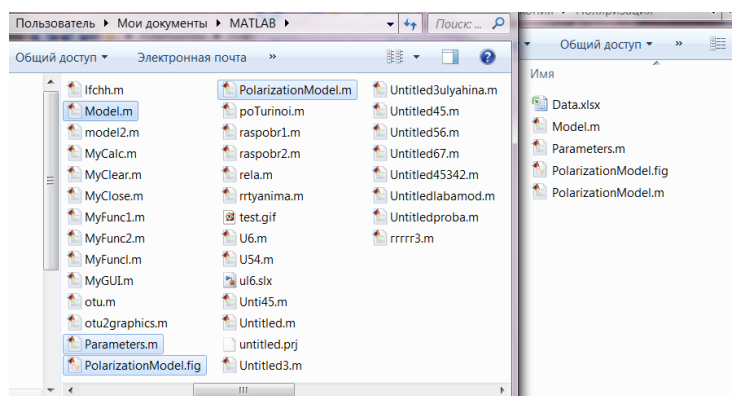


Рисунок 21 – Копирование элементов

Далее необходимо открыть систему MATLAB и в панели CurrentFolder выбрать файл PolarizationModel.m и нажав клавишу F9 или, кликнув по выбранному файлу правой кнопкой мыши, выбрать пункт «Run» (рисунок 22).

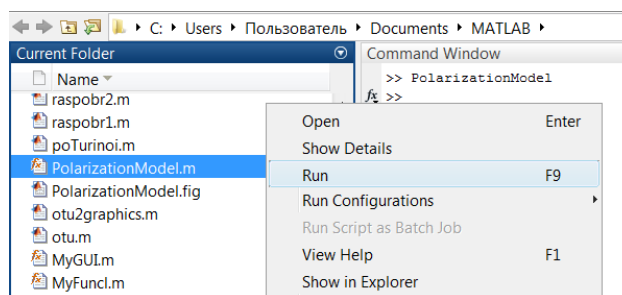


Рисунок 22 – Запуск программы из основной директории MATLAB

Также можно запустить систему, открыв файл PolarizationModel.m непосредственно из директории «Поляризация». После открытия файла запустится система MATLAB и откроется окно Editor с указанным файлом. Далее необходимо на вкладке EDITOR выбрать нажать кнопку Run или нажать клавишу F5 и подтвердить в появившемся окне смену текущей директории, кликнув по кнопке Change Folder (рисунок 23).

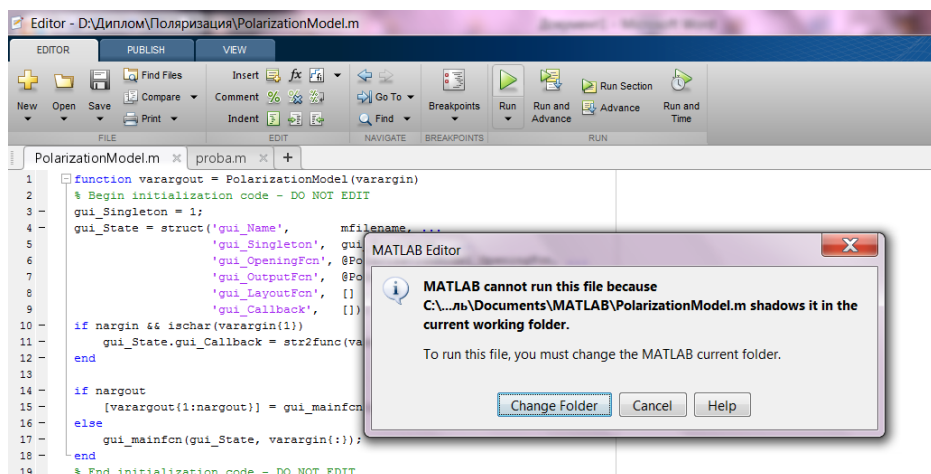


Рисунок 23 – Запуск программы из директории «Поляризация»

После запуска появляется главное окно программы, состоящее из следующих частей:

- 1) кнопку для загрузки исходных данных ;
- 2) таблицу вывода найденных резонансных частот и динамических параметров;
- 3) кнопку для запуска моделирования;
- 4) ряда кнопок, при взаимодействии с которыми можно управлять построением графиков модели и экспериментальных кривых, вызывать справочные данные;
- 5) системы координат для вывода графиков, отражающих результаты моделирования;

Необходимо отметить, что программный продукт имеет дружелюбный интерфейс, повышающий продуктивность работы пользователя с ним, и отвечает требованиям эргономичности.

Цветовое решение удовлетворяет следующим требованиям:

- 1) отсутствие ярких цветов, т. к. это вызывает быстрое утомление и раздражение глаз;
- 2) отличие цвета фона и объектов;
- 3) разные цвета у каждой модели, что обеспечивает удобную работу пользователя с графиками.

Интерфейс представлен на рисунке 24.

Сразу после запуска графические формы и таблица остаются пустыми и неактивны кнопки кроме кнопки загрузки параметров.

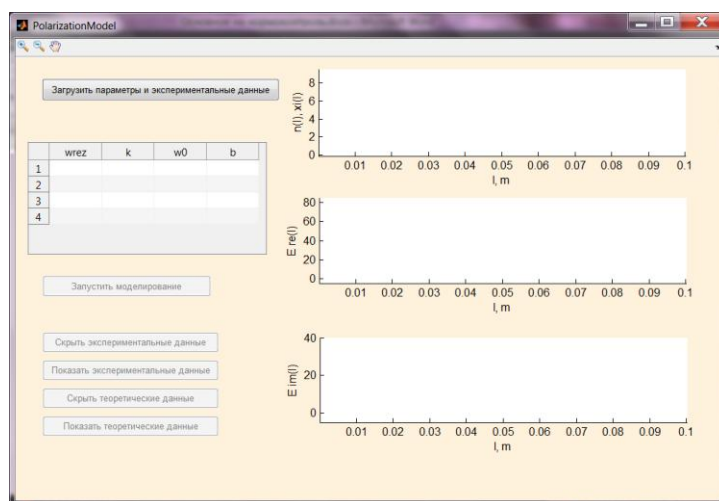


Рисунок 24 – Интерфейс программы

После нажатия на кнопку «Загрузить параметры и экспериментальные данные» откроется диалоговое окно как показано на рисунке 25. Пользователю требуется выбрать файл с входными данными.

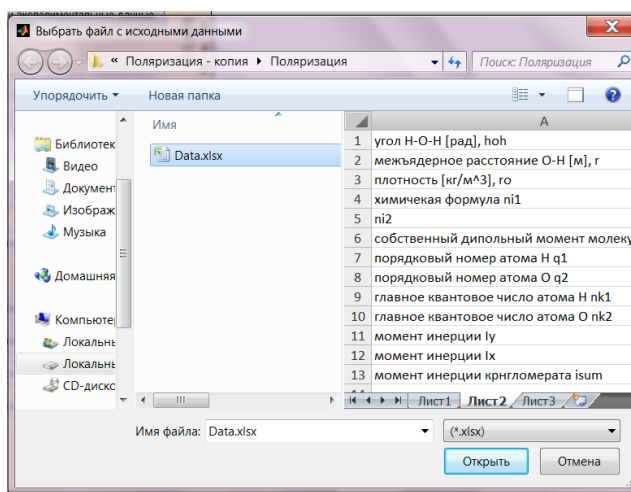


Рисунок 25 – Выбор файла с входными данными

Если файл заполнен не в соответствии с правилами указанными выше, программа выведет сообщение (рисунок 26), другие кнопки останутся неактивными.

Если выбранный файл заполнен корректно, программа выведет экспериментальные данные и резонансные частоты.

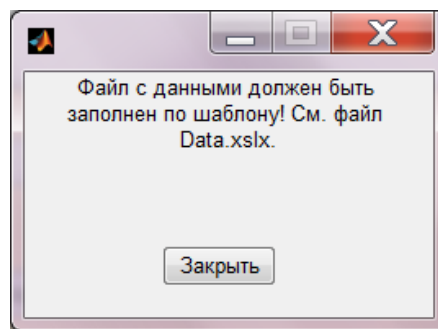


Рисунок 26 – Сообщение об ошибке

Для получения теоретических кривых нужно кликнуть на ставшую активной кнопку «Запустить моделирование». На рисунке 27 показаны результаты моделирования.

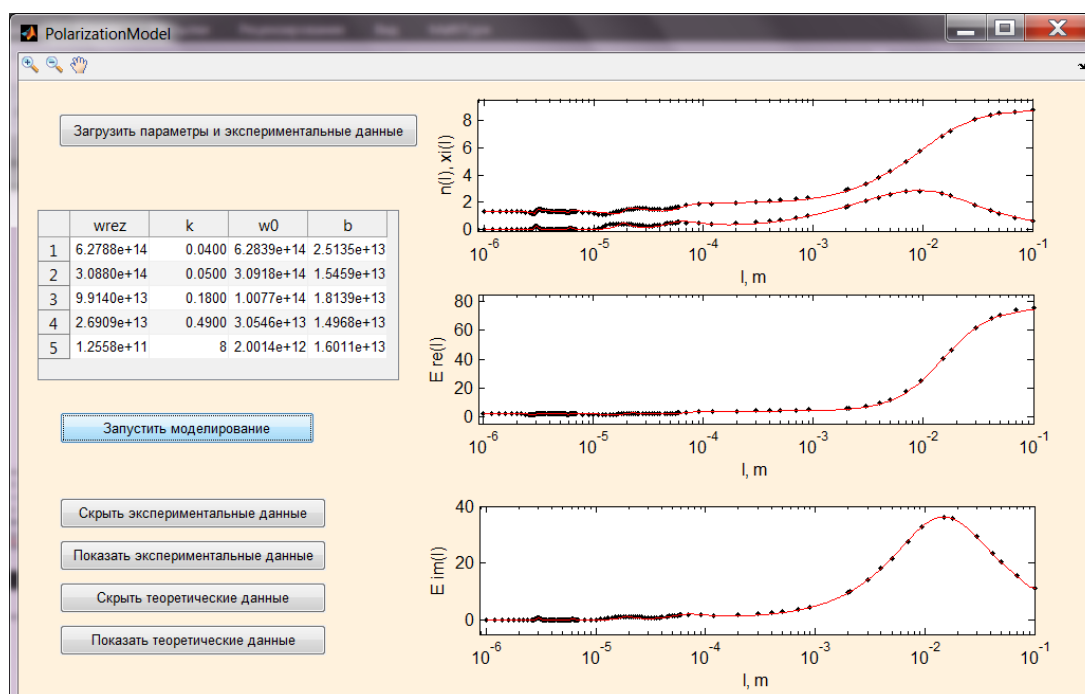


Рисунок 27 – Результаты моделирования

По желанию пользователя можно скрывать или показывать графики или теоретической модели или экспериментальных данных. Для этого необходимо кликнуть на соответствующие кнопки «Скрыть» и «Показать».

Для масштабирования графиков и перемещения по ним на панели инструментов расположены специальные значки: «лупа: увеличение», «лупа: уменьшение», «рука». Для масштабирования нужно кликнуть соответствующий значок лупы и кликнуть, затем по нужному графику. Для перемещения следует выбрать инструмент «рука» и, зажав левую кнопку мыши, перемещать нужный

график. Чтобы выйти из режимов масштабирования или перемещения, следует повторно кликнуть по соответствующему значку. Пример масштабирования и перемещения показан на рисунке 28.

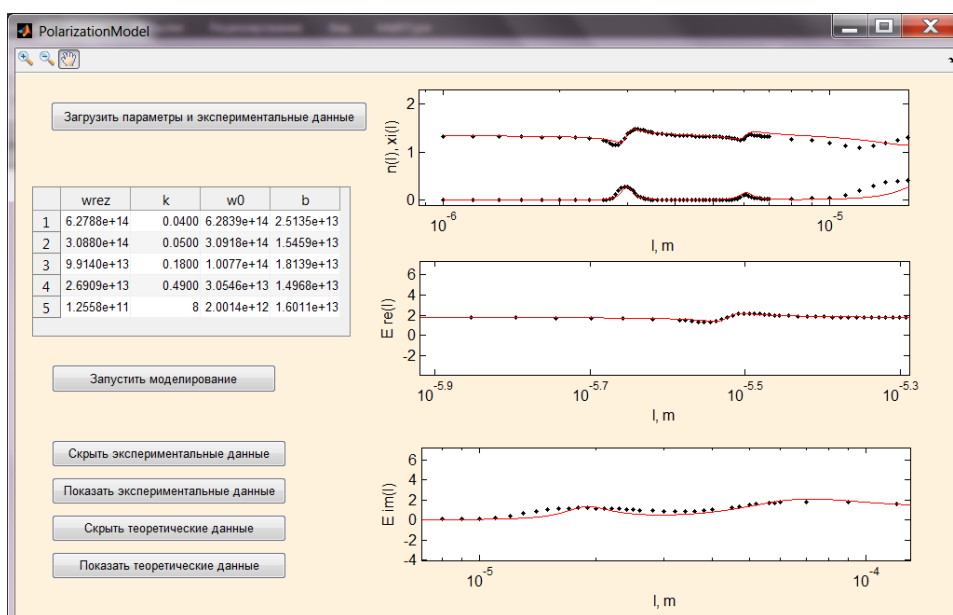


Рисунок 28 – Масштабирование графиков

## 5 НАДЁЖНОСТЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Одним из основных требований к программному обеспечению является надёжность его работы. В соответствии с ГОСТ 27.002-89 надёжность в технике – это свойство объекта сохранять во времени в установленных пределах значения всех параметров, характеризующих способность выполнять требуемые функции в заданных режимах и условиях применения, технического обслуживания, хранения и транспортирования. Применительно к программному продукту можно сказать, что надёжность – это свойство сохранять в течение требуемого интервала времени способность правильно выполнять заданные спецификацией правила переработки информации в заданных условиях эксплуатации.

Вообще, термин «надёжность программных средств» возник по аналогии с понятием надёжности технических изделий. В отличие от технических изделий программные средства не подвержены износу и физическому старению. Однако программная продукция характеризуется высокими темпами морального старения, что требует ее постоянного обновления для обеспечения необходимого научно-технического уровня информационных систем.

Необходимо отметить, что надёжность программного обеспечения 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. Кстати отладка ПО не может устранить все ошибки, так как число возможных комбинаций входных данных настолько велико, что заранее проверить все возможные ветви исполнения программы практически невозможно. Поэтому моменты появления отказов носят случайный характер.

Существуют два подхода к выбору показателей надёжности программного обеспечения. С одной стороны, можно использовать обычные показатели надёжности: вероятность отсутствия отказов за время  $t$ , среднее время между отказами и т.п. Такие показатели целесообразно использовать для непрерывно

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		62

применяемого ПО (например, операционных систем). С другой стороны, для описания надежности ПО могут быть использованы специальные показатели, характерные только для него, например, показатель корректности программного обеспечения: предполагаемое число ошибок в программе.

Ошибки программного обеспечения выявляются и устраняются в процессе отладки и опытной эксплуатации.

### 5.1 Обзор моделей надежности программного обеспечения

Модели надёжности ПО подразделяются на аналитические и эмпирические. Классификация моделей надежности отражена на схеме, изображенной на рисунке 29.

Аналитические модели дают возможность рассчитать количественные показатели надежности, основываясь на данных о поведении программы в процессе тестирования. Эмпирические – основаны на анализе структурных особенностей ПО и рассматривают зависимость показателей надежности от числа межмодульных связей, количество циклов в модулях, отношения числа прямолинейных участков программы к числу точек ветвления и т.д. Эти модели можно использовать на этапе проектирования ПО, когда осуществлена разбивка на модули и известна структура ПО.

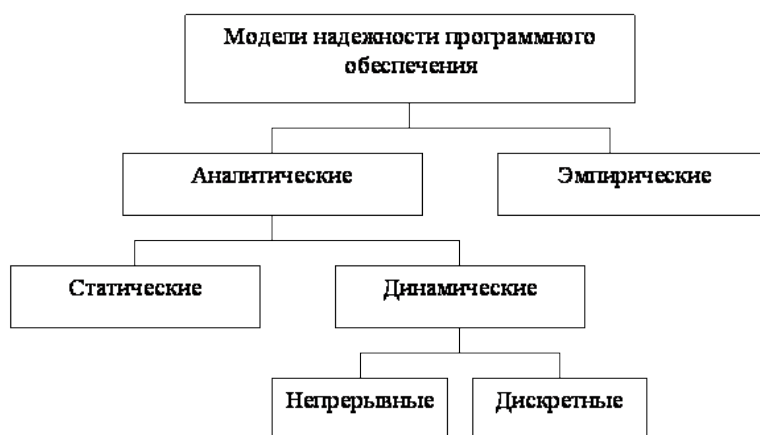


Рисунок 29 – Классификация моделей надежности ПО

Аналитические модели делятся на две группы: динамические модели и статические. В динамических моделях появление отказов рассматривается во времени. В статических моделях не анализируют время появления отказов, а

рассматривают зависимость количества оставшихся ошибок от числа тестовых прогонов или зависимость вероятности отказов от характеристики входных данных.

Для использования динамических моделей необходимо иметь данные о появлении отказов во времени. С другой стороны, может фиксироваться только число отказов за произвольный интервал времени. В этом случае поведение ПО может быть представлено только в дискретных точках (группа дискретных динамических моделей).

### 5.1.1 Динамические модели надёжности

Выделяют следующие аналитические динамические модели: модель Шумана, модель роста надёжности (Джилинского-Моранды) и ее модификации (в частности, модель Шика-Волвертона), а также модель Ла Падула, модель Муса, модель переходных вероятностей и др. Рассмотрим подробнее некоторые из них с целью последующего выбора при расчете надёжности разработанного в данной работе

Для модели Шумана исходные данные собираются в процессе тестирования ПО в течение временных интервалов, фиксированных или временных. При этом предполагается, что тестирование будет проводиться в несколько этапов. На каждом этапе программное изделие выполняется на полном наборе разработанных тестовых данных. Ошибки выявляются и регистрируются, но не исправляются. В завершении каждого этапа данная модель используется для расчета количественных показателей надёжности на основе собранных данных. Перед проведением следующего этапа исправляются ошибки, выявленные на предыдущем, корректируются тестовые наборы.

Использование модели Шумана предполагает, что исходное количество ошибок в программе постоянно и в процессе тестирования может уменьшаться по мере того, как ошибки выявляются и исправляются.

Модель Шика-Волвертона применяется для случая, когда на интервале времени тестирования, возникает более одной ошибки. Ошибки исправляются только по истечении интервала времени, на котором они возникли.



В основе этой модели лежит предположение, по которому частота появления ошибок пропорциональна как количеству ошибок в программах, так и времени тестирования, то есть вероятность обнаружения ошибок возрастает со временем.

Интенсивность обнаружения ошибок  $\lambda_i$  предполагается постоянной в течение интервала времени  $t_i$  и пропорциональна числу ошибок, оставшихся в программе по истечении  $(i - 1)$ -го интервала; но она пропорциональна также и суммарному времени, уже затраченному на тестирование:

$$\lambda_i = C(N - n_{i-1} + t_i / 2), \quad (73)$$

где  $C$  – коэффициент пропорциональности;

$N$  – число ошибок, первоначально присутствующих в программе;

$n_{i-1}$  – число ошибок, оставшихся в программе по истечении  $(i - 1)$ -го интервала;

$T_{i-1}$  – суммарное время, затраченное на тестирование в течение  $(i - 1)$  этапов;

$t_i$  – среднее время выполнения программы в текущем интервале.

По модели Ла Падула выполнение последовательности тестов производится в  $m$  этапов. Каждый этап заканчивается внесением изменений (исправлений) в программу. Возрастающая функция надежности базируется на числе ошибок, обнаруженных в ходе каждого тестового прогона.

Надежность программы в течение  $i$  – го этапа при параметре роста  $A$  находится согласно выражению (74).

$$R(t) = R(\infty) - \frac{A}{i}, i = 1, 2, 3 \dots \quad (74)$$

При  $i \rightarrow \infty$ , т.е.  $R(\infty)$  достигается предельная надежность программы.

Эти неизвестные возможно вычислить, решив уравнения (75-76).

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		65

$$\sum_{i=1}^m \left\{ \frac{S_i - m_i}{S_i} - R(\infty) + \frac{A}{i} \right\} = 0; \quad (75)$$

$$\sum_{i=1}^m \left\{ \left( \frac{S_i - m_i}{S_i} - R(\infty) + \frac{A}{i} \right) \left( \frac{1}{i} \right) \right\} = 0, \quad (76)$$

где  $S_i$  – число тестов;

$m_i$  – число отказов во время  $i$  – го этапа;

$m$  – число этапов; ( $i=1, 2, \dots, m$ ).

Определяемый по этой модели показатель – надежность программы на  $i$  – м этапе определяется по формуле (77).

$$R(t) = R(\infty) - \frac{A}{i}, i = m + 1, m + 2, \dots \quad (77)$$

Преимущество модели заключается в том, что она является прогнозной и, основываясь на данных, полученных в ходе тестирования, дает возможность предсказать вероятность безотказной работы программы на последующих этапах ее выполнения.

### 5.1.2 Статические модели надёжности

Отличие статических моделей от динамических заключается в отсутствии учета времени появления ошибок в процессе тестирования, при этом не выдвигаются никакие гипотезы о поведении функции риска  $X(t)$ .

Выделяют следующие статические модели: модель Миллса, модель Липова, простая интуитивная модель, модель Коркоэна.

Модель Миллса предполагает перед началом тестирования искусственное внесение в программный продукт некоторое количество известных ошибок. Они вносятся случайно и фиксируются в протоколе искусственных ошибок.

При этом предполагается, что ошибки обоих типов: искусственные и естественные – имеют одинаковую вероятность быть найденными в ходе тестирования. Программа тестируется в течение некоторого времени, в ходе чего собирается статистика об ошибках.

Модель Липова дополняет модель Миллса, давая возможность оценить вероятность обнаружения определенного количества ошибок к моменту оценки.

Использование простой интуитивной модели предполагает проведение тестирования программного изделия двумя группами программистов или двумя программистами, в зависимости от величины изделия, независимо друг от друга и используя независимые тестовые наборы. В процессе тестирования каждая из групп фиксирует все найденные ею ошибки. При оценке числа оставшихся в программе ошибок результаты тестирования обеих групп собираются и сравниваются.

При применении модели Коркоэна учитывается только результат  $N$  испытаний, в которых выявлено  $n$  ошибок  $i$ -го типа, и не учитываются параметры времени тестирования. Это позволяет отнести модель Коркоэна к статическим моделям. Модель использует изменяющиеся вероятности отказов для различных типов ошибок.

В отличие от других статических моделей, где оценивалось количество первоначальных ошибок в программе, а также их количество, оставшееся после некоторого периода тестирования (модель Миллса, Липова), по модели Коркоэна оценивается вероятность безотказного выполнения программы на момент оценки (формула (78), (79)).

$$R = \frac{N_0}{N} + \sum_{i=1}^K \frac{Y_i(N_i - 1)}{N}, \quad (78)$$

где  $N_0$  – число безотказных выполнений программы;

$N$  – общее число прогонов;

$N_i$  – число обнаруженных ошибок  $i$ -го типа, устраняемых с вероятностью  $a_i$ ;

$K$  – априорно известное число типов.

$$Y_i = \begin{cases} a_i, & \text{если } N_i > 0, \\ 0, & \text{если } N_i = 0, \end{cases} \quad (79)$$

где  $a_i$  – вероятность выявления при тестировании ошибки одного типа.

В этой модели вероятность  $a_i$  должна оцениваться на основании априорной информации или данных предшествующего периода функционирования однотипных программных средств [2].

## 5.2 Расчёт надежности программного обеспечения

Прежде чем рассчитывать надежность работы пакета прикладных программ, необходимо выбрать наиболее удобную модель из предложенных вариантов.

Следует отметить, что выбранная модель не должна быть громоздкой, должна содержать как можно меньше расчетных формул, рассчитываемых и подставляемых параметров, по причине того, что оценка надежности сложной моделью займет довольно длительное время. Кроме прочего, анализ надежности должен исходить из проведения небольшого количества тестов, иначе будет трудно оценить результат и время, затраченное на проведение тестирования, увеличивается с увеличением количества проводимых тестов.

Для расчета надежности системы была использована методика динамического моделирования, поскольку динамические модели надежности учитывают время появления ошибок в процессе тестирования и основываются на предположении о поведении функции риска.

Среди динамических моделей был выбран метод Ла Падула. Эта методика выбрана главным образом потому, что она является прогнозной и, основываясь на данных, полученных в ходе тестирования, дает возможность предсказать вероятность безотказной работы программы на последующих этапах ее выполнения.

Для получения исходных данных модели весь процесс тестирования был разбит на 7 этапов. На каждом этапе проводилось 3 теста.

Результаты тестов представлены в таблице 2.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		68

Таблица 2 – Результаты тестирования

$i$	1	2	3	4	5	6	7
$m_i$	2	1	0	0	0	0	0
$S_i$	3	3	3	3	3	3	3

Используя тестовые данные, решается система уравнений (80). Были рассчитаны параметр роста ( $A$ ) и предел надежности  $R(\infty)$ :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m \left\{ \frac{S_i - m_i}{S_i} - R(\infty) + \frac{A}{i} \right\} = 0, \\ \sum_{i=1}^m \left\{ \left( \frac{S_i - m_i}{S_i} - R(\infty) + \frac{A}{i} \right) \binom{1}{i} \right\} = 0. \end{cases} \quad (80)$$

Решив систему (80), получим  $A=0.84$ ,  $R(\infty)=1.17$ .

По формуле (77) получаем вид функции надежности:

$$R(t) = R(\infty) - \frac{A}{i} = 1.17 - \frac{0.84}{i} \quad (81)$$

График этой функции представлен на рисунке 30.

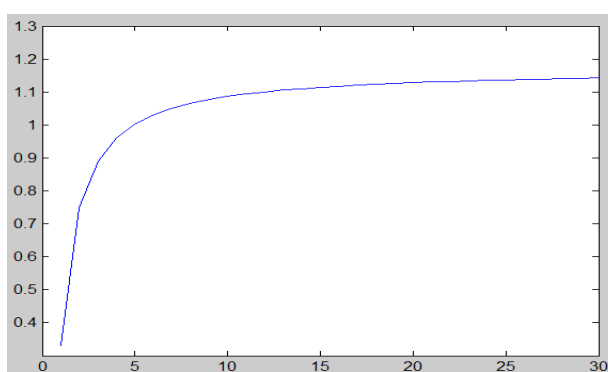


Рисунок 30 – График функции надежности ПО

Из графика видно, что надежность программы с течением времени стремится к значению предельной надежности –  $R(\infty)$ . Это говорит о том, что с течением времени надежность программы увеличивается.

При учете человеческого фактора следует отметить, что влияние его на снижение уровня надежности невозможно спрогнозировать в рамках исследуемой модели. Однако если учитывать тот факт, что количество работы обычного пользователя в данном программном продукте невелико, влияние на снижение уровня надежности остается незначительным. Исходя из изложенных выше положений, можно сделать вывод, что разработанное программное обеспечение является весьма надежным и обеспечит безотказную работу в длительный промежуток времени.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		70

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы был разработан программный продукт, моделирующий поляризационные спектры воды в широком диапазоне с учетом значений различных параметров воды. Следовательно, была разработана имитационная модель широкодиапазонных спектров воды как полярной жидкости.

В ходе его разработки были изучены существующие математические модели процессов поляризации воды. Был осуществлен их математический синтез в рамках наиболее общего подхода, предполагающего аналогичность вывода моделей каждой разновидности поляризации воды, и алгебраических преобразований. Адекватность предлагаемых систематизированных моделей упругих видов поляризации молекулы  $H_2O$ : ионной, дипольной, и неупругой релаксационной, подтверждена высокой степенью эффективности результатов вычислительного эксперимента. Графики макроскопических показателей поляризации в диапазоне установления рассматриваемых видов поляризации хорошо согласуются с данными физических экспериментов. Однако это не подразумевает прекращение работ по поиску новой модели или доработки существующей, так как возможно получение лучших в плане адекватности и эффективности моделей.

Работа программного продукта основана на предложенном численном алгоритме определения параметров модели. Данная расчетная методика, описанная в настоящей работе, в первую очередь предназначена для реализации математического моделирования частотных характеристик поляризационных процессов, динамические параметры которых определяются на основании данных экспериментальных измерений. По сравнению с перечисленными в работе существующими подходами определения параметров, данный подход является более эффективным за счет обработки меньшего количества данных и повышенной точности.

В рамках работы была рассчитана надежность программного средства. Из полученной функции надежности можно сделать вывод, что программное средство обладает высоким показателем надежности.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		71

Необходимо отметить, что предлагаемая модель и численный метод и основанный на их использовании программный продукт, могут оказаться полезными для анализа поляризационных процессов, протекающих в живых системах, каждая из которых в большей части своего веса обычно состоит из воды.

В свою очередь, разработанное программное средство в дальнейшем может применяться к исследованию других полярных веществ, имеющих схожую с водой структуру, например, двухосновных бескислородных кислот.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		72



## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- 1 Бесекерский, В.А. Теория систем автоматического управления / В.А. Бесекерский, Е.М. Попов. – СПб.:Профессия, 2007. – 742 с.
- 2 Гнеденко Б.В. Надежность программного изделия / Б.В. Гнеденко, И.Н. Коваленко. – М.: Мир, 2006. – 320 с.
- 3 Егорова С.И. Колебания и волны. Учебное пособие // С.И. Егорова [и др.]. – Ростов: Издательский центр ДГТУ, 2009. – 55 с.
- 4 Еремина В.В. Имитационные модели релаксационной поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2008. – № 1(15). – с. 38-45.
- 5 Еремина В.В. Имитационные модели релаксационной поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2008. – № 3(17). – с. 34-40.
- 6 Еремина В.В. Имитационные модели релаксационной поляризации воды. III // Информатика и системы управления. – 2008. – № 4(18). – с. 36-48.
- 7 Еремина В.В. Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2007. – № 1(13). – с.12-21.
- 8 Еремина В.В. Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – с. 78-89.
- 9 Еремина В.В., Еремин И.Е., Уляхина Д.А. Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – №3(29). – с. 60-69.
- 10 Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю. Модификация математической модели ионной поляризации молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2006. – №1(11). – с. 42-52.
- 11 Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю. Моделирование оптического спектра воды в области упругих видов поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – №2(6). – с. 9-14.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		73

12 Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.

13 Еремина В.В., Уляхина Д.А. Кибернетическое моделирование релаксационной поляризации воды // Информатика и системы управления. – 2011. – № 4(30). – С. 89-98.

14 Мануйлов А.В., Родионов В.И., Основы химии. Интернет учебник [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.hemi.nsu.ru/index.htm>. – 10.04.2016.

15 Мосин, О.В. Метод молекулярных орбиталей в анализе строения молекулы воды [Электронный ресурс] – Режим доступа: [http://www.o8ode.ru/article/water/ctroenie\\_molekuly\\_vody.htm](http://www.o8ode.ru/article/water/ctroenie_molekuly_vody.htm). – 10.04.2016.

16 Поплавко Ю.М. Физика активных диэлектриков/ Ю.М. Поплавко [и др.]. – Ростов н/Д.: Изд-во ЮФУ, 2009. – 480 с.

17 Потемкин, В.Г. Вычисления в среде MatLab / В.Г. Потемкин. – М.: Диалог-Мифи, 2009. – 714 с.

18 Потемкин, В.Г. Инструментальные средства MatLab / В.Г. Потемкин. – М.: ДиалогМифи, 2009. – 332 с.

19 Потемкин, В.Г. MatLab. Среда проектирования инженерных приложений / В.Г. Потемкин. – М.: ДиалогМифи, 2009. – 444 с.

20 Трофимова Т.И. Курс физики: Учеб. пособие для вузов. – 6-е изд., стер. / Т.И. Трофимова. – 11-е изд., перераб. и доп. – М.: Издательский центр «Академия», 2006. – 560 с.

21 Фомичев, Н.И. Автоматизированные системы научных исследований [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://a-podkidyshev.ru/MR/TEO/190100.pdf>. – 10.04.2016.

22 Эйзенберг Д. Структура и свойства воды // Д. Эйзенберг, В. Кауцман. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – 280 с.

23 Яворский Б.М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б.М. Яворский, А.А. Детлаф. – 8-е изд., исп. – М.: Оникс, 2007. – 1056 с.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		74

ПРИЛОЖЕНИЕ А  
Техническое задание

## 1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

### 1.1 Введение

Строение молекулы воды ( $H_2O$ ) всецело определяет свойства воды и описывает классическое поведение молекул в жидкости. Эта точка зрения была известной очень долгое время, однако к настоящему времени стали появляться различные точки зрения, основанные на теоретических и экспериментальных данных, которые свидетельствуют о том, что общепринятый взгляд не отражает полной картины.

В рамках данного проекта свойства воды исследуются в условиях следующих видов поляризации: упругих ионной, упругой дипольной, релаксационной.

В работе данный процесс представляется в виде системной последовательности: «вход-реакция-выход». Такие исследования являются довольно известными в науке. Здесь речь идет о строении молекулы, а расчет характеристик с помощью стандартных методов исследований на молекулярном уровне является трудоемким из-за большого числа совершаемых операций, а также из-за невозможности (или ограниченной возможности) визуализации этих явлений. Перенесение стандартных трактовок изучения данного процесса на рассмотрение его с точки зрения систем управления встречается в работах Еремина И.Е., Ереминой В.В., Ланиной С.Ю. и Уляхиной Д.А. В пределах работ названных авторов предложенные ими трактовки являются качественными верными, но количественно не удовлетворяют ряду ситуаций. Одним из таких

условий остается то, что существующие модели не удовлетворяют попаданию теоретических кривых в экспериментальные данные в некоторых областях частотного диапазона. Поэтому целью проектирования является предложение еще одной трактовки на основании систематизации известных, уже существующих.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		75

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

### 1.2 Полное наименование работы

«Разработка имитационной модели широкодиапазонных спектров полярной жидкости»

Разработка ведется на основании утвержденного учебного плана.

### 1.3 Плановые сроки начала и окончания работы

Примерные плановые сроки начала и окончания работ: 01.10.2015 – 01.06.2015

### 1.4 Наименования разработчика и заказчика

*Разработчик:* студент 253 группы факультета математики и информатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования Амурского государственного университета (ФГБОУ ВПО «АмГУ») Тарасенко Ольга Игоревна.

*Заказчик:* ФГБОУ ВПО «АмГУ».

### 1.5 Основания для разработки

Документы, на основании которых ведется проектирование: учебный план, научно-исследовательские статьи преподавателей кафедры информационных и управляющих систем.

## 2 НАЗНАЧЕНИЕ РАЗРАБОТКИ

### 2.1 Функциональное и эксплуатационное назначение изделия

#### 2.1.1 Назначение

Назначение разработки – создать автоматизированную систему, которая в зависимости от исходных наборов данных определит оптимальные параметры поляризационных процессов и позволит получить графическое представление исследуемых процессов, адекватных по отношению к экспериментальным данным.

#### 2.1.2 Функции, выполняемые системой

Функции, которые система должна выполнять:

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		76

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

- 1) расчет резонансных частот поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 2) расчет динамических параметров поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 3) вывод графиков широкодиапазонных спектров макроскопических показателей экспериментальных данных и полученных теоретических данных в зависимости от длины волны в области рассматриваемых видов поляризации;

### **2.2 Перечень требований пользователя к программному изделию**

- загрузка исходных данных из предварительно сформированного файла;
- вывод графиков зависимости показателей преломления и поглощения от длины волны, комплексной диэлектрической проницаемости от длины волны;
- возможность управления графическими окнами.

Система должна обладать понятным интерфейсом пользователя.

Программное изделие должно обеспечивать правильность и наглядность результатов моделирования. Продукт должен обеспечивать получение результатов, которые были бы с достаточной достоверностью близки к экспериментальным результатам. Продолжительность имитационного моделирования при этом не должна быть очень большой.

### **2.3 Эргономические характеристики**

Программное изделие должно использоваться одним человеком, имеющим основные навыки работы с ЭВМ в операционной среде «Windows».

Для удобного взаимодействия пользователя с ЭВМ необходимо предусмотреть диалоговый режим, удобное меню, подсказки, справку, наглядный графический интерфейс. Интерфейс должен иметь параметры, которые позволят конкретному пользователю выбрать наиболее подходящий вид программы.

### **3 ОПИСАНИЕ ФУНКЦИЙ, ИЗ КОТОРЫХ БУДЕТ СОСТОЯТЬ СИСТЕМА**

Программный продукт должен иметь следующий набор функций:

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		77

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

- 1) расчет резонансных частот поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 2) расчет динамических параметров поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 3) вывод графиков широкодиапазонных спектров макроскопических показателей экспериментальных данных и полученных теоретических данных в зависимости от длины волны в области рассматриваемых видов поляризации;
- 4) управление графической подсистемой вывода;

### 4 ТРЕБОВАНИЯ К СИСТЕМЕ

#### 4.1 Требования к функциональным подсистемам

Функциональными подсистемами разрабатываемой системы являются:

- линейная динамическая модель процессов поляризации воды;
- макроскопические характеристики полярной жидкости;
- данные эксперимента.

##### 4.1.1 Линейная динамическая модель процессов поляризации воды

Характеризует линейную динамическую систему следующих видов поляризации воды: ионной, представленной валентными и деформационными колебаниями, дипольной, релаксационной. Обеспечивает формирование дифференциальных уравнений этой системы. С помощью математических преобразований формирует частотную передаточную функцию и частотные характеристики.

##### 4.1.2 Макроскопические характеристики полярной жидкости

Характеризуют взаимодействие воды как диэлектрика с внешним электромагнитным полем. Используются для построения данных эксперимента и теоретических кривых, основываясь на положениях линейной динамической модели. К ним относятся:

- комплексная диэлектрическая проницаемость;
- показатель преломления;

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

– показатель поглощения.

### 4.1.3 Данные эксперимента

Характеризует данные, получаемые экспериментально на основе известных табличных и математических выкладок, поляризации воды в широком диапазоне. На них основываются все исследуемых частотные характеристики. Отображаются на графике в виде экспериментальных точек.

## 4.2 Требования к обеспечивающим подсистемам

Обеспечивающими подсистемами разрабатываемой системы являются:

- математическое обеспечение;
- программное обеспечение;
- техническое обеспечение;
- алгоритмическое обеспечение.

### 4.2.1 Математическое обеспечение

К математическому обеспечению относятся теория вынужденных колебаний и аппарат передаточных функций и их частотных аналогов. Все данные, обрабатываемые системой, опираются на положения данного теоретического материала.

### 4.2.2 Программное обеспечение

В качестве программного обеспечения должны использовать Операционная система Windows версий от XP/7/8 и программная среда MATLAB версии R2013b и более.

### 4.2.3 Техническое обеспечение

Данный вид обеспечения основывается на требованиях к аппаратуре, которые перечислены в пункте 8 технического задания.

### 4.2.4 Алгоритмическое обеспечение

Алгоритмическое обеспечение характеризует алгоритмы, используемые для характеристики каждой из моделей.

В общем случае алгоритм расчета будет выглядеть следующим образом:

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		79

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

- 1) задание массивов исходных данных исследуемых видов поляризации, параметров молекулы;
- 2) вычисление резонансных частот для соответствующих видов поляризации воды, исходя из массива контрольных данных;
- 3) вычисление в итерационном цикле оптимальных значений динамических параметров: частот собственных колебаний и коэффициентов затухания для каждого вида поляризационного процесса;
- 4) вывод полученных значений резонансных частот, частот собственных колебаний и коэффициентов затухания для каждого вида поляризационного процесса;
- 4) вывод графика данных физического эксперимента;
- 5) вывод графика данных теоретической модели.

### 5 ИНФОРМАЦИОННАЯ СОВМЕСТИМОСТЬ

Программа, предназначенная для построения имитационной модели поляризации воды, разрабатывалась с использованием версии системы MatLAB R2013b, построенной, как и любая версия MatLAB, на расширенном представлении и применении матричных операций. Программа разрабатывалась в среде Guide, которая является достаточно удобной средой для разработки пользовательских интерфейсов приложений.

Интерфейс пользователя должен соответствовать стандартам, используемым фирмой Microsoft для собственных программных продуктов, прежде всего для обеспечения удобства пользования продуктом.

### 6 ПРОГРАММНЫЕ ОГРАНИЧЕНИЯ, СОВМЕСТИМОСТЬ

Программное обеспечение для адекватности модели должно обладать точностью вычислений, простотой модернизации.

Сложность математических моделей поляризационных процессов воды делает автоматизацию вычислительных процедур необходимым условием качественного исследования ее свойств. Для этих целей могут использоваться ин-

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		80



## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

тегрированные системы и пакеты прикладных программ для выполнения расчетов.

Также одним из требований к программному обеспечению является наличие операционной системы Windows XP/7/8.

### 7 ТРЕБОВАНИЯ К СОСТАВУ И ПАРАМЕТРАМ ТЕХНИЧЕСКИХ СРЕДСТВ (АППАРАТНЫЕ ОГРАНИЧЕНИЯ)

Рекомендованы следующие требования к аппаратному обеспечению:

- 1) любой Intel или AMD x86 процессор.
- 2) объем ОЗУ – 1 Гбайт (2 Гбайт рекомендуется).
- 3) объем ПЗУ – не менее 10 Гбайт.
- 4) видеоадаптер, поддерживающий разрешение 800x600 и имеющий объем видеопамати не менее 16 Мбайт, с аппаратной поддержкой OpenGL.
- 5) монитор разрешения 800x600. частоты не менее 75 Гц.
- 6) клавиатура, мышь.
- 7) ОС – Windows XP/7/8.

### 8 ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входными данными разрабатываемого программного изделия являются массивы экспериментальных данных показателей преломления и поглощения, а также физико-химические константы и структурные параметры молекулы.

### 9 ПРОЦЕССЫ ОБРАБОТКИ

В соответствии с входными данными система должна:

- 1) определять экстремальные значения контрольных данных;
- 2) по полученным резонансным частотам в соответствии с описанным численным алгоритмом определять наиболее оптимальные динамические параметры;
- 3) строить диэлектрические спектры воды исследуемой модели в виде графиков показателя преломления, показателя поглощения и комплексных ха-

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		81

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

рактических: мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости, вычисляемой в процессе работы программы.

### 10 ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

После обработки все данные должны быть представлены в удобном для пользователя виде. Они будут отражены в ряде графиков. Кроме того предусмотрены специальные элементы управления, на которых в соответствии с входными данными будут отображены те или иные параметры исследуемых моделей.

### 11 РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЕ КОМПОНЕНТЫ ИЗДЕЛИЯ

Программное изделие должно содержать текст программы (листинг), представляющий собой комплект распечаток, полученных при трансляции программного изделия, а также текст программы в виде исходного модуля, представляющий собой совокупность операторов, которые должны быть откомпилированы для получения готовой программы. Необходимо также наличие руководства пользователя.

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		82

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

### Алгоритм расчета динамических параметров

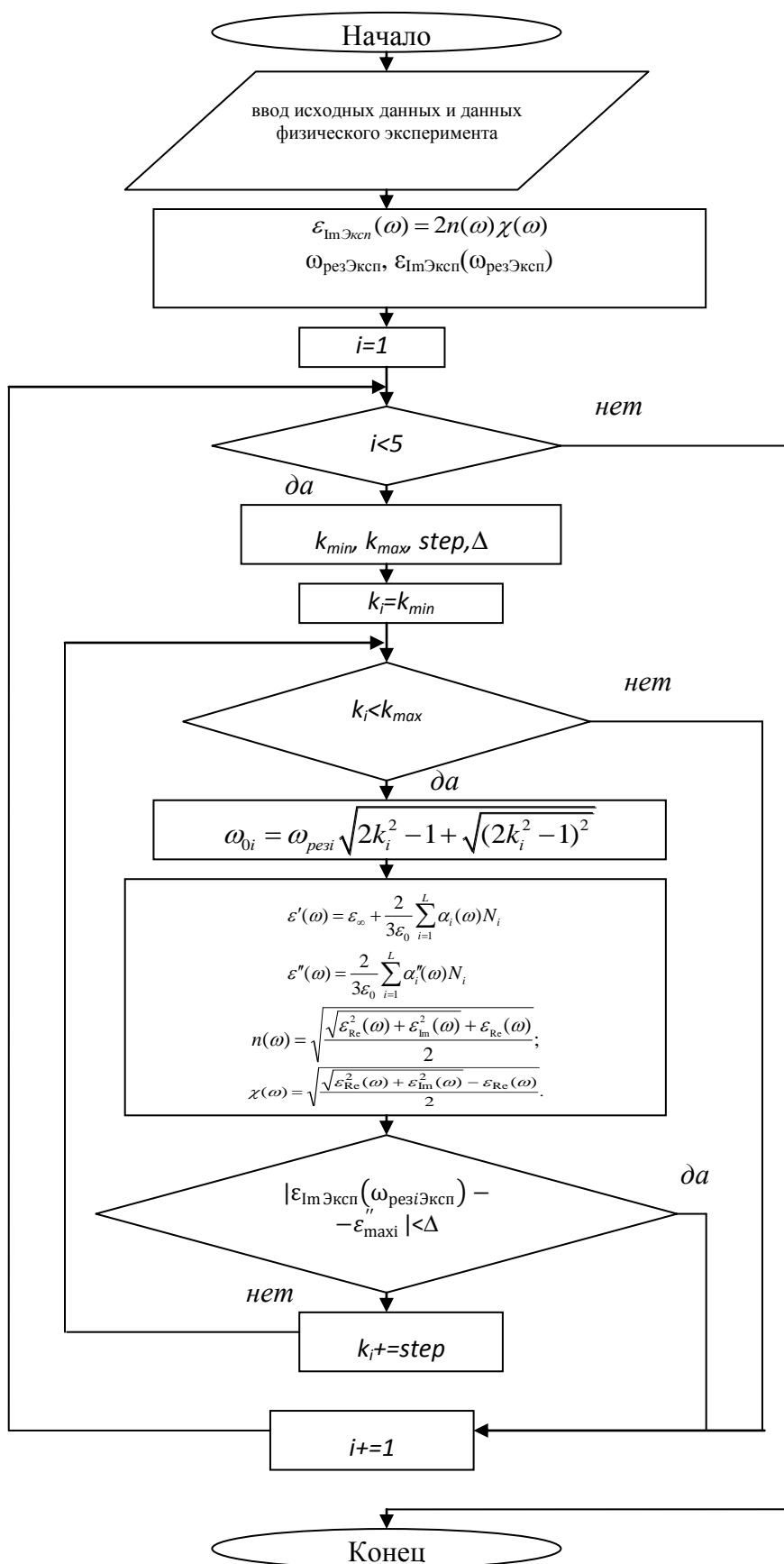


Рисунок Б.1 – Блок-схема алгоритма расчета динамических параметров

Изм.	Лист	№ докум.	Подп. Дата

ВКР.125011.09.03.01.ПЗ

Лист

83

# ПРИЛОЖЕНИЕ В

## Описание программы

### 1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

Наименование: Программа для имитационного моделирования широкодиапазонных спектров полярной жидкости.

Обозначение: «PolarizationModel».

Разработчик: студент 253 группы факультета математики и информатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования Амурского государственного университета (ФГБОУ ВПО «АмГУ»), Тарасенко Ольга Игоревна.

Программа имитационного моделирования широкодиапазонных спектров полярной жидкости, "PolarizationModel" (далее ПО PolarizationModel) является кросс-платформенной. И основным необходимым требованием для функционирования изделия является наличие математической среды MATLAB версии 2013b и выше. Функционирование ПО тестировалось под операционными системами (ОС): Windows 7.

ПО PolarizationModel реализовано на языке MATLAB.

### 2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

ПО PolarizationModel предназначено для решения следующих задач:

- 1) автоматизация алгоритма расчета оптимальных динамических параметров;
- 2) имитационное моделирование широкодиапазонных спектров макроскопических показателей поляризации диэлектрика.

ПО PolarizationModel реализует следующие функции:

- 1) расчет резонансных частот поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 2) расчет динамических параметров поляризационных процессов, предусмотренных моделью;
- 3) вывод графиков широкодиапазонных спектров макроскопических по-

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		84

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

казателей экспериментальных данных и полученных теоретических данных в зависимости от длины волны в области рассматриваемых видов поляризации;

4) управление графической подсистемой вывода;

### 3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

ПО PolarizationModel состоит из следующих модулей:

1) пользовательский интерфейс, включающий блоки:

а) блок ввода экспериментальных данных;

б) подсистему вывода результатов;

в) блок управления графической подсистемой;

2) модуль обработки входных данных;

3) модуль расчета оптимальных динамических параметров;

4) модуль, реализующий математическую модель широкодиапазонных спектров – основной модуль, включающий модули реализации математической модели и расчета макроскопических характеристик.

Данные модули описаны в соответствующих файлах среды MATLAB.

Список файлов представлен на рисунке В.1.

Имя	Дата изменения	Тип	Размер
book1.xlsx	13.05.2016 12:29	Лист Microsoft Off...	14 КБ
Model.m	14.05.2016 12:21	MATLAB Code	3 КБ
Parameters.m	13.05.2016 12:31	MATLAB Code	1 КБ
PolarizationModel.fig	14.05.2016 12:26	MATLAB Figure	14 КБ
PolarizationModel.m	17.05.2016 10:14	MATLAB Code	7 КБ

Рисунок В.1 – Файловая структура ПО PolarizationModel

В файле PolarizationModel.m описана основная часть работы программы: пользовательский интерфейс, загрузка входных исходных данных, обработка части входных данных, а именно экспериментальных массивов, включающая поиск локальных максимумов с помощью встроенной функции MATLAB `find-peaks()`. Также описан главный алгоритм программ, представленный в пункте 4.2, блок-схема алгоритма показана на рисунке Б.1.

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

В файле Model.m содержится модуль, реализующий расчет теоретических макроскопических показателей: вещественной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости, показателей преломления и поглощения с помощью предоставляемых MATLAB функций parallel() и nyquist(), на основании уравнений (63-65), (7), (12).

В файле Parameters.m содержится обработка основных структурных параметров, необходимых для построения модели.

Связи программы с другими программами: Входные данные для программы формируются и хранятся в электронных таблицах программы Excel, пакета программ Microsoft Office.

### 4 ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Рекомендованы следующие требования к аппаратному обеспечению:

- 1) любой Intel или AMD x86 процессор.
- 2) объем ОЗУ – 1 Гбайт (2 Гбайт рекомендуется).
- 3) объем ПЗУ – не менее 10 Гбайт.
- 4) видеоадаптер, поддерживающий разрешение 800x600 и имеющий объем видеопамати не менее 16 Мбайт, с аппаратной поддержкой OpenGL.
- 5) монитор разрешения 800x600. частоты не менее 75 Гц.
- 6) клавиатура, мышь.
- 7) ОС – Windows XP/7/8.

### 5 ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

Для запуска системы с помощью среды MATLAB предусмотрены следующие варианты.

Скопировать из папки «Поляризация» файлы PolarizationModel.m, PolarizationModel.fig, Model.m, Parameters.m и поместить их в основную директорию MATLAB. открыть систему MATLAB и в панели CurrentFolder выбрать файл PolarizationModel.m и нажав клавишу F9 или, кликнув по выбранному файлу правой кнопкой мыши, выбрать пункт «Run».

					<b>ВКР.125011.09.03.01.ПЗ</b>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		86

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

Загрузка системы непосредственно из директории «Поляризация». После открытия файла PolarizationModel.m запустится система MATLAB и откроется окно Editor с указанным файлом. Запуск осуществляется с вкладки EDITOR нажатием кнопки Run или нажатием клавиши F5 и подтверждением о смене текущей директории.

### 6 ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входными данными для ПО PolarizationModel являются наборы экспериментальных данных и структурные параметры для молекулы полярной жидкости. Указанные данные записываются перед запуском ПО в электронную таблицу Excel с расширением .xlsx. Для программы важен порядок записи данных, который осуществляется в соответствии с шаблоном, показанным на рисунке В.2.

D15			E111			
№	А	В	№	А	В	С
1	угол Н-О-Н [рад], hoh	1,823869068	103	700,0000000000	2,2700000000	0,8310000000
2	межъядерное расстояние О-Н [м], r	9,57E-11	104	900,0000000000	2,3640000000	0,9840000000
3	плотность [кг/м <sup>3</sup> ], ro	997,1	105	2000,0000000000	2,8820000000	1,6700000000
4	химическая формула ni1	2	106	2100,0000000000	2,9340000000	1,7180000000
5	ni2	1	107	3000,0000000000	3,3750000000	2,0790000000
6	собственный дипольный момент молекулы H2O, mu0	6,10E-30	108	4000,0000000000	3,8290000000	2,3600000000
7	порядковый номер атома Н q1	1	109	5000,0000000000	4,2480000000	2,5510000000
8	порядковый номер атома О q2	8	110	7000,0000000000	4,9800000000	2,7660000000
9	главное квантовое число атома Н nk1	1	111	9500,0000000000	5,7470000000	2,8350000000
10	главное квантовое число атома О nk2	2	112	15000,0000000000	6,8670000000	2,6300000000
11	момент инерции Iy	1,02E-47	113	18000,0000000000	7,2520000000	2,4610000000
12	момент инерции Ix	2,94E-47	114	30000,0000000000	8,0740000000	1,8240000000
13	момент инерции крнгломерата isum	8,06E-45	115	42000,0000000000	8,3890000000	1,4050000000

а)

б)

Рисунок В.2 – Входные данные: а) Структурные параметры молекулы б) Набор экспериментальных точек

### 7 ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

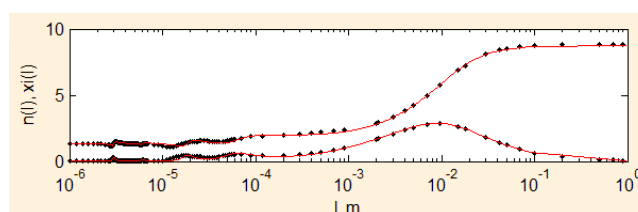
В результате работы программы высчитываются резонансные частоты для экспериментальных данных и определяются динамические параметры: частоты собственных колебаний, коэффициенты затухания и связывающие их коэффициенты, в результате моделирования (рисунок В.3).

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

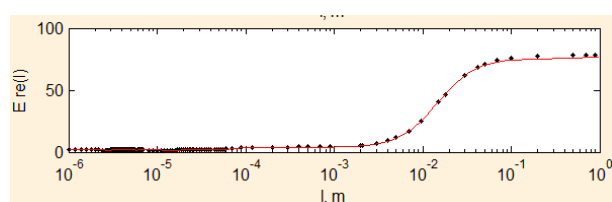
	wrez	k	w0	b
1	6.2788e+14	0.0400	6.2839e+14	2.5135e+13
2	3.0880e+14	0.0500	3.0918e+14	1.5459e+13
3	9.9140e+13	0.1800	1.0077e+14	1.8139e+13
4	2.6909e+13	0.4900	3.0546e+13	1.4968e+13
5	1.2558e+11	8	2.0014e+12	1.6011e+13

Рисунок В.3 – Выходные данные: резонансные частоты, динамические параметры для каждого вида поляризации

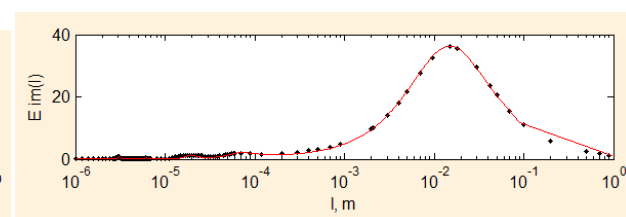
Также строятся экспериментальные теоретические графики широкодиапазонных спектров полярной жидкости следующих показателей: показатели преломления и поглощения, вещественная часть комплексной диэлектрической проницаемости, мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости, показанные на рисунке В.4.



а)



б)



в)

Рисунок В.4 – Выходные данные: спектры макроскопических показателей: а) Показатели преломления и поглощения; б) вещественная и в) мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости



ПРИЛОЖЕНИЕ Г  
Текст программы

1 Файл PolarizationModel.m

```
% Функция инициализации приложения
function varargout = PolarizationModel(varargin)
gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
                  'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
                  'gui_OpeningFcn', @PolarizationModel_OpeningFcn, ...
                  'gui_OutputFcn', @PolarizationModel_OutputFcn, ...
                  'gui_LayoutFcn', [] , ...
                  'gui_Callback', []);
if nargin && ischar(varargin{1})
    gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end

if nargout
    [varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
    gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end

% Функция, выполняемая сразу перед тем, как окно приложения станет види-
% МЫМ
function PolarizationModel_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
handles.output = hObject;

% Объявление основных переменных, используемых в приложении
guidata(hObject, handles);
global experHandles Model dpc_re dpc_im n_ci x_ci;
experHandles=[]; Model=[];
global data; data=[];
dpc_re=[]; dpc_im=[]; n_ci=[]; x_ci=[];
global e me e0 m0 s aem tm;
global k w0;
w0(1:5)=1;
k(1:5)=1;
e=1.6021892*10^(-19);           % заряд электрона [Кл]
me=9.109543*10^(-31);          % масса электрона [кг]
e0=8.85418782*10^(-12);        % постоянная электрическая [Ф/м]
m0=12.5663706144*10^(-7);      % постоянная магнитная [Гн/м]
s=2.99792458*10^(8);           % скорость света в вакууме [м/с]
```

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР.125011.09.03.01.ПЗ

Лист

89

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```

aem=1.6605655*10^(-27);           % атомная единица массы [кг]
tm=10^(-15);                       % масштаб по времени
global l_min l_max w;
l_min=10^(-6);
l_max=(9.5e+05)*10^(-6);
w=2*pi*s./l_max*tm:2*pi*s*10*tm:2*pi*s./l_min*tm;

a1=handles.axes1;
axis(a1, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -0.1 9.5]);
xlabel(a1,'l, m');
ylabel(a1,'n(l), xi(l)');

a2=handles.axes2;
axis(a2, [0.9*10^(-6) 10^(-1) -5 85]);
xlabel(a2,'l, m');
ylabel(a2,'E re(l)');

a3=handles.axes3;
axis(a3, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -5 40]);
xlabel(a3,'l, m');
ylabel(a3,'E im(l)');

% Выходные данные из этой функции возвращаются в командную строку.
function varargout = PolarizationModel_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)
varargout{1} = handles.output;

% Функция создания диалогового окна с сообщением об ошибке
function mydialog
    d = dialog('Position',[300 300 250 150],'Name','');

    txt = uicontrol('Parent',d,...
        'Style','text',...
        'Position',[20 80 210 70],...
        'String','Файл с данными должен быть заполнен по шаблону! См. файл
Data.xlsx. ');

    btn = uicontrol('Parent',d,...
        'Position',[85 20 70 25],...
        'String','Закреть',...
        'Callback','delete(gcf)');

```

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```
% Обработчик события кнопки «Загрузить параметры экспериментальные
данные»
function pushbutton19_Callback(hObject, eventdata, handles)
[FileName,PathName] = uigetfile('*.xlsx','Выбрать файл с исходными данными');
if FileName == 0
    return;
end
global fullFileName;
fullFileName = fullfile(PathName, FileName);
global aem s;
global m1 hoh mu0 r n_conc Iy Ix isum;

try
[m1,hoh,mu0,r,n_conc,Iy,Ix,isum] = Parameters(fullFileName,aem);
catch
    mydialog();
    return;
end;

global l n x E_im E_de;
B=xlsread(fullfile(PathName, FileName),1);
try
l=B(:,1)*10^(-6); l=l';
n=B(:,2); n=n';
x=B(:,3); x=x';
catch
    mydialog();
    return;
end;
E_im=2*n.*x;
E_de=n.^2-x.^2;
%Обработка экспериментальных данных, поиск резонансных частот
global pks;
[pks,locs]=findpeaks(E_im,'minpeakdistance',15);
global wrez;
wrez=2*pi*s./l(locs);
global data;
data(5:4)=[];
data(:,1)=wrez';
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```
set(handles.uitable1,'Data',data);
```

```
global experHandles;
global peaks;
if (length(experHandles)>0)
    delete(experHandles);
    experHandles=[];
end;
```

```
% Вывод графиков экспериментальных данных
```

```
a1=handles.axes1;
subplot(a1),
hTemp1(1)=semilogx(1, n, '.k'); hold on;
hTemp1(2)=semilogx(1, x, '.k');
xlabel(a1,'l, m');
ylabel(a1,'n(l), xi(1)');
axis (a1, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -0.1 9.5]);
```

```
a2=handles.axes2;
subplot(a2),
hTemp1(3)=semilogx(1, E_de, '.k'); hold on ;
xlabel(a2,'l, m');
ylabel(a2,'E re(1)');
axis(a2, [0.9*10^(-6) 10^(-1) -5 85]);
```

```
a3=handles.axes3;
subplot(a3),
hTemp1(4)=semilogx(1, E_im, '.k'); hold on ;
%peaks=semilogx(1(locs),pks+0.05,'k^','markerfacecolor',[1 0 0]);
xlabel(a3,'l, m');
ylabel(a3,'E im(1)');
axis(a3, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -5 40]);
experHandles=hTemp1;
set(handles.pushbutton20,'enable','on');
set(handles.pushbutton21,'enable','on');
set(handles.pushbutton22,'enable','on');
```

```
% Обработчик кнопки «Запустить моделирование». Реализация алгоритма рас-
чета динамических параметров
```

```
function pushbutton20_Callback(hObject, eventdata, handles)
global Model;
if (length(Model)>0)
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```

delete(Model);
Model=[];
end;
m=4;
global s tm;
global dpc_re dpc_im n_ci x_ci;
global w data k w0;
for i=1:m
    FindDynamicParams (i,0, 1, 0.01, 0.1);
end;
FindDynamicParams (5,5, 10, 1, 0.9);
data(:,2)=k; data(:,3)=w0; data(:,4)=k.*w0;
set(handles.uitable1,'Data',data);
a1=handles.axes1;
subplot(a1),
hTemp1(1)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), n_ci, 'r'); hold on;
hTemp1(2)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), x_ci, 'r');
xlabel(a1,'l, m');
ylabel(a1,'n(1), xi(1)');
axis (a1, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -0.1 9.5]);
a2=handles.axes2;
subplot(a2),
hTemp1(3)=semilogx(2*pi*s./(w/tm),dpc_re, 'r'); hold on ;
xlabel(a2,'l, m');
ylabel(a2,'E re(1)');
axis(a2, [0.9*10^(-6) 10^(-1) -5 85]);
a3=handles.axes3;
subplot(a3),
hTemp1(4)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), dpc_im, 'r'); hold on ;
xlabel(a3,'l, m');
ylabel(a3,'E im(1)');
axis(a3, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -5 40]);
Model=hTemp1;
set(handles.pushbutton23,'enable','on');
set(handles.pushbutton24,'enable','on');

```

% Функция, обеспечивающая поиск оптимальных динамических параметров для каждого вида поляризационных процессов

```

function FindDynamicParams (m, k_min, k_max, step, delta)
global dpc_re dpc_im n_ci x_ci;
global m1 hoh mu0 r n_conc Iy Ix isum;

```

## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```

global wrez pks data;
global k w0;
global l_min l_max;
for ki=k_min:step:k_max
    k(m)=ki;
    w0(m)=wrez(m)*(2*k(m)^2-1+((2*k(m)^2-1).^2+3).^0.5).^0.5;
    [dpc_re, dpc_im, n_ci, x_ci]=Model(k,w0, l_min, l_max,
    m1,hoh,mu0,r,n_conc,Iy,Ix,isum);
    t=findpeaks(dpc_im);
    T2=t(end:-1:1);
    [n1,m23]=size(T2);
    if n1==m
        if abs(pks(m)-T2(m))<delta

            break;
        end;
    end;
end;
end;

```

```

%Обработчик кнопки «Скрыть экспериментальные данные»
function pushbutton21_Callback(hObject, eventdata, handles)
global experHandles;

```

```

if (length(experHandles)>0)
    delete(experHandles);
    experHandles=[];
end;

```

```

% Обработчик кнопки «Показать экспериментальные данные»
function pushbutton22_Callback(hObject, eventdata, handles)
global experHandles;

```

```

if (length(experHandles)>0)
    delete(experHandles);
    experHandles=[];
end;
global l n x E_im E_de;
a1=handles.axes1;
subplot(a1),
hTemp1(1)=semilogx(l, n, '.k'); hold on;
hTemp1(2)=semilogx(l, x, '.k');

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```
xlabel(a1,'l, m');
ylabel(a1,'n(l), xi(l)');
axis (a1, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -0.1 9.5]);
```

```
a2=handles.axes2;
subplot(a2),
hTemp1(3)=semilogx(l, E_de, '.k'); hold on ;
xlabel(a2,'l, m');
ylabel(a2,'E re(l)');
axis(a2, [0.9*10^(-6) 10^(-1) -5 85]);
```

```
a3=handles.axes3;
subplot(a3),
hTemp1(4)=semilogx(l, E_im, '.k'); hold on ;
xlabel(a3,'l, m');
ylabel(a3,'E im(l)');
axis(a3, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -5 40]);
experHandles=hTemp1;
```

```
% Обработчик кнопки «Скрыть теоретические данные»
function pushbutton23_Callback(hObject, eventdata, handles)
global Model;
if (length(Model)>0)
    delete(Model);
    Model=[];
end;
```

```
%Обработчик кнопки «Показать теоретические данные»
function pushbutton24_Callback(hObject, eventdata, handles)
global Model;
if (length(Model)>0)
    delete(Model);
    Model=[];
end;
```

```
global s tm;
global dpc_re dpc_im n_ci x_ci;
global w;
a1=handles.axes1;
subplot(a1),
hTemp1(1)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), n_ci, 'r'); hold on;
hTemp1(2)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), x_ci, 'r');
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```
xlabel(a1,'l, m');
ylabel(a1,'n(l), xi(l)');
axis (a1, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -0.1 9.5]);
```

```
a2=handles.axes2;
subplot(a2),
hTemp1(3)=semilogx(2*pi*s./(w/tm),dpc_re, 'r'); hold on ;
xlabel(a2,'l, m');
ylabel(a2,'E re(l)');
axis(a2, [0.9*10^(-6) 10^(-1) -5 85]);
```

```
a3=handles.axes3;
subplot(a3),
hTemp1(4)=semilogx(2*pi*s./(w/tm), dpc_im, 'r'); hold on ;
xlabel(a3,'l, m');
ylabel(a3,'E im(l)');
axis(a3, [0.87*10^(-6) 10^(-1) -5 40]);
Model=hTemp1;
```

2. М-функция Model.m

```
function [ dpc_re, dpc_im, n_ci, x_ci] = Model( k, w0, l_min, l_max,
m1,hoh,mu0,r,n,Iy,Ix,isum)
% Табличные данные
e=1.6021892*10^(-19); % заряд электрона [Кл]
e0=8.85418782*10^(-12); % постоянная электрическая [Ф/м]
s=2.99792458*10^8; % скорость света в вакууме [м/с]
aem=1.6605655*10^(-27); % атомная единица массы [кг]

tm=10^(-15); % масштаб по времени
w=2*pi*s./l_max*tm:2*pi*s*10*tm:2*pi*s./l_min*tm;
% ионная
% при интегрировании среднего значения cos(beta) и cos(alpha-beta) от 0 до
% pi
num_v1=0*tm^2; % валентные колебани
num_v2=e^2/m1*(2*sin(hoh)/pi)*tm^2;
mu=mu0/(2*cos(hoh/2)); % дипольный момент связи О-Н
I=m1*r^2; % момент инерции связи О-Н
% при интегрировании среднего значения sin(beta)^2 и sin(alpha-beta)^2 от 0 до
% pi
num_d1=mu^2/I*(1/2)*tm^2;
den_v1=[1 2*w0(1)*k(1)*tm w0(1)^2*tm^2];
```



## Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

```

den_v2=[1 2*w0(1)*k(1)*tm w0(1)^2*tm^2];
den_d1=[1 2*w0(2)*k(2)*tm w0(2)^2*tm^2];
[num,den]=parallel(num_v1,den_v1,num_v2,den_v2);
[num,den]=parallel(num,den,2*num_d1,den_d1);

% Область упругой дипольной поляризации
num_di1=mu0^2/(2*Iy)*tm^2; % передаточные функции дипольных колебаний
num_di2=mu0^2/(2*Ix)*tm^2;
den_di1=[1 2*k(3)*w0(3)*tm (w0(3))^2*tm^2];
den_di2=[1 2*k(4)*w0(4)*tm (w0(4))^2*tm^2];
[num, den]=parallel(num, den, num_di1, den_di1);
[num, den]=parallel(num, den, num_di2, den_di2);

%релаксационная
musum=5*mu0;
num_r=musum^2/(isum)*tm^2;
den_r=[1 2*w0(5)*k(5)*tm w0(5)^2*tm^2];
[num, den]=parallel(num, den, num_r, den_r);
[re,im]=nyquist(num,den,w); % частотные характеристики суммарной поляри-
зюемости
dpc_re=1.8+2/(3*e0)*n.*re;
dpc_im=-2/(3*e0)*n.*im;
n_ci=(((dpc_re)+(dpc_re.^2+dpc_im.^2).^0.5)/2).^0.5;
x_ci=(((dpc_re.^2+dpc_im.^2).^0.5)-dpc_re)/2).^0.5;
end

```

### 3. М-функция Parameters.m

```
function [ m1,hoh,mu0,r,n,Iy,Ix,isum] = Parameters( filename,aem )
```

```
B=xlsread(filename,2,'B:B');
```

```

hoh=B(1,1);
r=B(2,1);
ro=B(3,1);
ni1=B(4,1);
ni2=B(5,1);
mu0=B(6,1);
q1=B(7,1);
q2=B(8,1);
nk1=B(9,1);
nk2=B(10,1);

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Г

Iy=B(11,1);

Ix=B(12,1);

m1=1.00794\*aem;      %атомная масса Н

m2=15.9994\*aem;      %атомная масса О

n=ro/(ni1\*m1+ni2\*m2);      % концентрация молекул

isum=B(13,1);      % момент инерции когломерата (H2O)5

end

ПРИЛОЖЕНИЕ Д  
Список публикаций

Публикации в сборниках:

1 Тарасенко О.И., Онищенко Е.Ю. Разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости // Молодежь XXI века: шаг в будущее: материалы XVII региональной научно-практической конференции (24 мая 2016 года): в 4 т. – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2016 –Т. 3: – С. 258.

2 Еремина В.В., Онищенко Е.Ю., Тарасенко О.И. Разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости // Современные тенденции развития науки и технологий: Периодический научный сборник: материалы XVIII Международной научно-практической конференции (г. Белгород 30 апреля 2016 г). – Белгород: ИП Ткачева, 2016 – №4-4. – С.141.

Тезисы к конференциям:

1 Разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости. XXV научная конференция АмГУ «День науки - 2016», дата проведения: 14.04.2016 г.

2 Разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости. XVII региональная научно-практическая конференция «Молодежь XXI века: шаг в будущее», дата проведения: 24.05.2016 г.

3 Разработка имитационной модели широкодиапазонного спектра полярной жидкости. XIII Международная заочная научно-практическая конференция «Современные тенденции развития науки и технологий», дата проведения: 30.04.2016.