

УДК 539.2+537.226

© Калытка В. А., 2018

РАЗРАБОТКА СХЕМЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИИ СРАВНЕНИЯКалытка В. А.^{a,1}^a РГП на ПХВ «Карагандинский государственный технический университет», г. Караганда, 100000, Республика Казахстан

Изложены теоретические основы обобщенной математической модели и численного расчета параметров релаксационных физических процессов (поляризация, деполяризация, ионная проводимость) в разнородных системах (телах), возмущенных полевыми и температурными воздействиями. В качестве объекта исследования, в данной работе рассматривается алгоритм численного расчета параметров протонно-релаксационной поляризации в протонных полупроводниках и диэлектриках (ППД), методом минимизации функции сравнения (МФС-методом) результатов теории и эксперимента. Определены основные направления практического применения (в перспективе) построенного на основе данной модели программно-аппаратного обеспечения.

Ключевые слова: Математическая модель нелинейных процессов; протонные полупроводники и диэлектрики (ППД); метод минимизации функции сравнения (МФС-метод).

INVESTIGATING THE SCHEME OF NUMERICAL CALCULATION THE PARAMETERS OF NON-LINEAR ELECTROPHYSICAL PROCESSES BY MINIMIZING COMPARISON FUNCTION METHODKalytka V. A.^{a,1}^a Karaganda State Technical University, Karaganda, 100000, The Republic of Kazakhstan

Describing the conceptual basis of universal mathematical model of the nonlinear physical processes in heterogeneous systems (bodies) perturbed by field and temperature influences. Determined the main directions of practical application (in the future) constructed upon based this model method for software and hardware. As an example, describing the algorithm of numerical calculation and optimization of the parameters of the relaxation processes during the polarization in compound dielectric lattice structure (in particular in proton semiconductors and dielectrics (PSCD)) with the help of minimizing comparison function method (MCF) of theoretical and experimental results.

Keywords: Mathematical model of non-linear processes; proton semiconductors and dielectrics (PSCD); minimizing comparison function method (MCF-method).

DOI: 10.17238/issn2226-8812.2018.3.68-77

Введение

В последнее десятилетие интенсивные темпы развития вычислительной, цифровой техники и программно-аппаратного обеспечения способствовали существенному усовершенствованию чис-

¹E-mail: kalytka@mail.ru

ленных методов решения уравнений математической и теоретической физики, методов статистической обработки результатов лабораторных экспериментов, методов сравнительного численного анализа степени точности теории по отношению к эксперименту и методов компьютерного прогнозирования результатов экспериментов [1-6].

Эффективным, с точки зрения оптимизации вычислительного процесса, инструментом сопоставления результатов экспериментальных и теоретических исследований является *метод минимизации функции сравнения* (МФС-метод), применяемый при математическом моделировании различных физических процессов, протекающих в неоднородных физических системах, эволюционирующих во времени под действием различных полевых факторов и температуры. МФС-метод получил достаточно широкое распространение в различных областях науки и техники и остается актуальным при численной оптимизации параметров работы технологических схем различных информационно-коммуникационных систем и промышленных установок, что подтверждается рядом работ последнего времени [7-12].

В [1] рассмотрен метод минимизации времени простоя пользовательских процессов при их миграции в «облачном хостинге». Реализация данного метода осуществляется путем: прогнозирования времени останова процессов; сокращения объема оперативной памяти, затрачиваемой при миграции [1].

В [2] исследован вопрос по использованию метода модифицированных функций Лагранжа (МФЛ) при численной оптимизации процессов, с учетом голономных связей в механических системах. Развитие методов учета дополнительных геометрических и кинематических связей, позволяет существенно расширить методы численной оптимизации процессов в механических системах со структурой типа «дерева» на структуры с кинематическими связями [2]. Метод МФЛ, применяемый при компьютерной оптимизации [3-6] технологий изготовления различных деталей и при сборке машин и механизмов, находит применение в различных областях современной электротехнической промышленности и в машиностроении [7-9].

В [10] выполнена модификация методов расчета поля скоростей потока, на примере решения задач, связанных с кавитацией. В ходе исследований усовершенствованы существующие и разработаны новые методы численного расчета и обнаружения пузырей воздуха в жидкостях по изображениям [11].

Разработанные алгоритмы расчета параметров потока [11, 12] актуальны при численной оптимизации технологических схем гидроустановок и электроустановок, при проектировании в области турбостроения, кораблестроения, ракетостроения и др.

1. Постановка задачи исследования

Центральная идея данной работы состоит в изложении теоретических основ обобщенной *математической модели*, позволяющей, на основе алгоритма компьютерной программы (или комплекта программ) проводить эффективные, с высокой степенью точности, численные расчеты *параметров* эволюционирующих во времени *нелинейных подсистем*, входящих в систему, находящуюся под действием различных силовых полей (внешних, локальных) и тепловых потоков. Такого типа модельные системы, по свойствам и структуре, приближены к *функциональным элементам*, входящим в состав технологических схем различных силовых установок и систем, работающих в условиях реального производства.

Цель работы состоит в описании *обобщенной схемы математического моделирования* и численного расчета параметров *релаксационных физических процессов* (*поляризация, проводимость*), протекающих в разнородных функциональных элементах (ионные проводники, тонкопленочные изоляторы, регуляторы параметров излучения, элементы памяти ЭВМ, топливные элементы водородной энергетики) электротехнических схем оборудования, работающего при изменяющихся условиях (переменные силовые поля, температура).

Методология исследования строится на МФС-методе, устанавливаемом, в комплексе с чис-

ленными методами исследования свойств функций многих переменных [13], оптимальное математическое соответствие между теоретическими (расчетными) и измеренными в эксперименте значениями характеристических параметров *физической модели*.

В данной статье, в качестве *предмета исследования* выступает частный случай *обобщенной математической модели поляризационных процессов* релаксационного типа [14], протекающих (в достаточно широком диапазоне полей и температур) в слоистых диэлектрических структурах (*объект* исследования), на примере кристаллов с водородными связями (КВС), классифицируемых, по электрофизическим свойствам, как *протонные полупроводники и диэлектрики* (ППД) [14-18]. В качестве *параметров (характеристик)* релаксационных процессов в ППД принимаются [15, 16]: U_0 – энергия активации (высота потенциального барьера) наиболее подвижных (в данной физической модели) частиц (протонов),двигающихся по водородным связям (за счет термической активации, или туннелирования); ν_0 – линейная частота собственных колебаний релаксаторов (протонов) в потенциальной яме; n_0 – равновесная концентрация протонов; δ_0 – ширина потенциального барьера.

Теоретические исследования *нелинейных эффектов* при *квантовой поляризации* в ППД в области низких (70-100 К) и сверхнизких (1-10 К) температур выполнены в [15, 16]. Математическая модель *нелинейной объемно-зарядовой поляризации* в области высоких (250-550 К) и сверхвысоких (550-1500 К) температур строится в [17, 18]. При этом в [15-18], теоретические основы методов численного исследования *нелинейных поляризационных процессов* не рассматриваются.

В [19-21] алгоритм численного расчета параметров U_0 , ν_0 , n_0 , δ_0 , на основе МФС-метода, не раскрывается детально.

2. Построение и анализ функции сравнения теории и эксперимента

Физико-математическая модель *протонно-релаксационной поляризации* в материалах класса ППД (в частности, КВС) [15-19] позволяет строить теоретические температурные спектры плотности токов термостимулированной деполяризации (ТСТД) – $J_{TCDP}(T)$ [14] и частотно-температурные спектры тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg } \delta(\omega; T)$ [21], обусловленные вкладом только одного типа релаксаторов – протонов [14]. Методы *кинетической теории* [14-18, 20, 21] эффективны, с точки зрения точности численных расчетов спектров $J_{TCDP}(T)$ и $\text{tg } \delta(\omega; T)$, только в окрестности (на множестве точек меры континуума) экспериментально наблюдаемого максимума.

Положение теоретического максимума функции $J_{TCDP}(T)$ определяется точкой $(T_{\max}; J_{TCDP, \max})$ в пространстве характеристик монорелаксационного процесса $\{\vec{\zeta}; T_{\max}\}$, где $\vec{\zeta} = \{U_{0,th}; \nu_{0,th}; n_{0,th}; \delta_{0,th}\}$ – многомерный радиус-вектор, построенный на множестве теоретических значений параметров $\vec{\zeta}_0 = \{U_0; \nu_0; n_0; \delta_0\}$ [21]. Положение теоретического максимума функции $\text{tg } \delta^{(\omega_{pol})}(T)$, при постоянной частоте ω_{pol} , определяется точкой $(T_{\max}; \text{tg } \delta_{\max}^{(\omega_{pol})})$, в пространстве характеристик $\{\vec{\zeta}; T_{\max}\}$. Аналогично, положение максимума функции $\text{tg } \delta^{(T_{pol})}(\omega)$, при постоянной температуре поляризации T_{pol} , определяется точкой $(\omega_{\max}; \text{tg } \delta_{\max}^{(T_{pol})})$ в пространстве $\{\vec{\zeta}; \omega_{\max}\}$.

Движение изображающих точек $\{\vec{\zeta}; T_{\max}\}$, $\{\vec{\zeta}; \omega_{\max}\}$ в пространстве характеристик процесса $\vec{\zeta}$ приводит к изменению теоретического значения времени релаксации, а значит и к смещению точек максимумов $(T_{\max}; \text{tg } \delta_{\max}^{(\omega_{pol})})$, $(\omega_{\max}; \text{tg } \delta_{\max}^{(T_{pol})})$, $(T_{\max}; J_{TCDP, \max})$ по осям абсцисс, а также к изменению амплитуд максимумов [21].

Достаточно высокая степень точности численного расчета точек максимумов функций $J_{TCDP}(T)$, $\text{tg } \delta_{\max}^{(\omega_{pol})}(T)$, $\text{tg } \delta_{\max}^{(T_{pol})}(\omega)$, в сравнении с результатами [20, 21] будет обеспечиваться

численной оптимизацией функциональных зависимостей компонент радиус-вектора $\vec{\zeta}$ от значения T_{\max} и ω_{\max} . С этой целью вводится функция сравнения теории и эксперимента [14]

$$\Psi(\vec{\zeta}) = \left[\Theta_{th}(\vec{\zeta}) - \Theta_{exp} \right]^2, \quad (1)$$

Здесь $\Theta_{th}(\vec{\zeta})$ – абсцисса, соответствующая положению теоретического максимума на графике, которая устанавливается расчетным путем; Θ_{exp} – абсцисса, соответствующая положению экспериментального максимума на графике, который строится по результатам прецизионных измерений.

Согласно (1) функция сравнения $\Psi(\vec{\zeta})$ не может быть отрицательна.

Абсцисса Θ_{exp} моделируется либо в качестве температуры материала $T_{\max,exp}$, либо в качестве частоты возмущающего переменного внешнего поля $\omega_{\max,exp}$, соответствующей измеренному в эксперименте монорелаксационному максимуму *физической характеристики* процесса (плотности тока, поляризации).

Абсцисса $\Theta_{th}(\vec{\zeta})$ устанавливается в результате исследования на максимум математического выражения, описывающего теоретический монорелаксационный спектр. Данное выражение является результатом аналитического решения системы дифференциальных уравнений [15-19, 21] и в, общем случае, исследуется на экстремум как функция от переменных $\{\vec{\zeta}; T\}$, или $\{\vec{\zeta}; \omega\}$ и, в конечном счете, сводится к установлению функциональных зависимостей вида:

$$\Lambda^{(\omega_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max}) \equiv T_{\max,th}^{\left[\text{tg } \delta_{th}^{(\omega_{pol})}(T; \vec{\zeta}) \right]}(U_{0,th,\max}; \nu_{0,th,\max}; n_{0,th,\max}; \delta_{0,th,\max}); \quad (2.1)$$

$$\Lambda^{(T_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max}) \equiv \omega_{\max,th}^{\left[\text{tg } \delta_{th}^{(T_{pol})}(\omega; \vec{\zeta}) \right]}(U_{0,th,\max}; \nu_{0,th,\max}; n_{0,th,\max}; \delta_{0,th,\max}); \quad (2.2)$$

$$\Omega(\vec{\zeta}_{\max}) \equiv T_{\max,th}^{[J_{TCDP,th}(T; \vec{\zeta})]}(U_{0,th,\max}; \nu_{0,th,\max}; n_{0,th,\max}; \delta_{0,th,\max}). \quad (2.3)$$

В (2.1)–(2.3) $\Lambda^{(\omega_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max})$ – вычисленное в пространстве критических значений параметров $\vec{\zeta}_{\max} = \{U_{0,th,\max}; \nu_{0,th,\max}; n_{0,th,\max}; \delta_{0,th,\max}\}$ при постоянной частоте поля ω_{pol} значение температуры $T_{\max,th}^{\left[\text{tg } \delta_{th}^{(\omega_{pol})}(T; \vec{\zeta}) \right]}$ теоретического максимума функции $\Phi_1(T; \vec{\zeta}) = \text{tg } \delta_{th}^{(\omega_{pol})}(T; \vec{\zeta})$; $\Lambda^{(T_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max})$ – вычисленное в пространстве критических значений $\vec{\zeta}_{\max}$ при постоянной температуре T_{pol} значение частоты $\omega_{\max,th}^{\left[\text{tg } \delta_{th}^{(T_{pol})}(\omega; \vec{\zeta}) \right]}$ теоретического максимума функции $\Phi_2(\omega; \vec{\zeta}) = \text{tg } \delta_{th}^{(T_{pol})}(\omega; \vec{\zeta})$; $\Omega(\vec{\zeta}_{\max})$ – вычисленное в пространстве $\vec{\zeta}_{\max}$ значение температуры теоретического максимума функции $\Phi_3(T; \vec{\zeta}) = J_{TCDP,th}(T; \vec{\zeta})$.

Громоздкость функций $\Phi_1(T; \vec{\zeta})$, $\Phi_2(\omega; \vec{\zeta})$, $\Phi_3(T; \vec{\zeta})$ не даёт возможности детально исследовать аналитические выражения $\Lambda^{(\omega_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max})$, $\Lambda^{(T_{pol})}(\vec{\zeta}_{\max})$, $\Omega(\vec{\zeta}_{\max})$. Тогда, пренебрегая температурной (или частотной) зависимостью характеристик $\vec{\zeta}$ в окрестности точки экспериментального максимума [21] упрощаем процедуру минимизации функции сравнения (1). Из системы уравнений $\frac{\partial \Phi_1(T; \vec{\zeta})}{\partial \vec{\zeta}_i} = 0$, $\frac{\partial \Phi_2(\omega; \vec{\zeta})}{\partial \vec{\zeta}_j} = 0$, $\frac{\partial \Phi_3(T; \vec{\zeta})}{\partial \vec{\zeta}_k} = 0$, где $\vec{\zeta}_i = \{\vec{\zeta}_i; T\}$, $\vec{\zeta}_j = \{\vec{\zeta}_j; \omega\}$, $\vec{\zeta}_k = \{\vec{\zeta}_k; T\}$, переходим к выражениям $\varphi_{1i}(T_{\max,th}; \vec{\zeta}_{\max}) = 0$, $\varphi_{2j}(\omega_{\max,th}; \vec{\zeta}_{\max}) = 0$, $\varphi_{3k}(T_{\max,th}; \vec{\zeta}_{\max}) = 0$, позволяющим построить функции, выражающие каждый из параметров из множества критических значений $\vec{\zeta}_{\max}$, включая T и ω , через все остальные параметры множества $\vec{\zeta}_{\max}$ (включая T и ω) в точках теоретических максимумов соответствующих функций $\Phi_1(T; \vec{\zeta})$, $\Phi_2(\omega; \vec{\zeta})$, $\Phi_3(T; \vec{\zeta})$. Тогда

$$T_{\max,th}^{[\Phi_1(T; \vec{\zeta})]} = g_{11}(\vec{\zeta}_{\max}), \quad \omega_{\max,th}^{[\Phi_2(\omega; \vec{\zeta})]} = g_{22}(\vec{\zeta}_{\max}), \quad T_{\max,th}^{[\Phi_3(T; \vec{\zeta})]} = g_{33}(\vec{\zeta}_{\max}). \quad (3)$$

Выражения (3) позволяют перейти к расчету функций сравнения

$$\Psi_1(\vec{\zeta}_{\max}) = \left[T_{\max,th}^{[\Phi_1(T;\vec{\zeta})]} - T_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(\omega_{pol})}(T;\vec{\zeta}_0) \right]} \right]^2, \quad \Psi_2(\vec{\zeta}_{\max}) = \left[\omega_{\max,th}^{[\Phi_2(\omega;\vec{\zeta})]} - \omega_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(T_{pol})}(\omega;\vec{\zeta}_0) \right]} \right]^2,$$

$$\Psi_3(\vec{\zeta}_{\max}) = \left[T_{\max,th}^{[\Phi_3(T;\vec{\zeta})]} - T_{\max,exp}^{[J_{TCDDP,exp}(T;\vec{\zeta}_0)]} \right]^2. \quad (4)$$

В (4) компоненты вектора $\vec{\zeta}_0 = \{U_{0,exp}; \nu_{0,exp}; n_{0,exp}; \delta_{0,exp}\}$ вычисляются в окрестности соответствующих экспериментально измеренных максимумов тангенса угла потерь $\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(\omega_{pol})}(T; \vec{\zeta}_0)$, $\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(T_{pol})}(\omega; \vec{\zeta}_0)$ и плотности термостимулированного тока $J_{TCDDP,exp}(T; \vec{\zeta}_0)$, с помощью методов, описанных в [14].

Процедура минимизации функций (4), с помощью формул

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_1(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} &= \frac{\partial}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} \left[g_{11}(\vec{\zeta}_{\max}) - T_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(\omega_{pol})}(T;\vec{\zeta}_0) \right]} \right]^2 = \\ &= 2 \left[g_{11}(\vec{\zeta}_{\max}) - T_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(\omega_{pol})}(T;\vec{\zeta}_0) \right]} \right] \cdot \frac{\partial g_{11}(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0, \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_2(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} &= \frac{\partial}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} \left[g_{22}(\vec{\zeta}_{\max}) - \omega_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(T_{pol})}(\omega;\vec{\zeta}_0) \right]} \right]^2 = \\ &= 2 \left[g_{22}(\vec{\zeta}_{\max}) - \omega_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(T_{pol})}(\omega;\vec{\zeta}_0) \right]} \right] \cdot \frac{\partial g_{22}(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0, \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_3(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} &= \frac{\partial}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} \left[g_{33}(\vec{\zeta}_{\max}) - T_{\max,exp}^{[J_{TCDDP,exp}(T;\vec{\zeta}_0)]} \right]^2 = \\ &= 2 \left[g_{33}(\vec{\zeta}_{\max}) - T_{\max,exp}^{[J_{TCDDP,exp}(T;\vec{\zeta}_0)]} \right] \cdot \frac{\partial g_{33}(\vec{\zeta}_{\max})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0, \end{aligned} \quad (5.3)$$

позволяет записать минимизированные значения параметров (3), каждому из которых ставятся в соответствие некоторые множества l, m, n векторов $(\vec{\zeta}_{\max;opt,l}), (\vec{\zeta}_{\max;opt,m}), (\vec{\zeta}_{\max;opt,n})$, где вектор $\vec{\zeta}_{\max;opt,1} = \{U_{0,th,\max;opt,1}; \nu_{0,th,\max;opt,1}; n_{0,th,\max;opt,1}; \delta_{0,th,\max;opt,1}\}$ отвечает точкам экспериментальных максимумов $T_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(\omega_{pol})}(T;\vec{\zeta}_0) \right]}$, $\omega_{\max,exp}^{\left[\text{tg } \delta_{\text{exp}}^{(T_{pol})}(\omega;\vec{\zeta}_0) \right]}$, $T_{\max,exp}^{[J_{TCDDP,exp}(T;\vec{\zeta}_0)]}$, а все остальные вектора отвечают всем возможным, распределенным вблизи экспериментальных значений минимизированным теоретическим значениям параметров $T_{(\max,th);opt,l}^{[\Phi_1(T;\vec{\zeta})]} = g_{11}(\vec{\zeta}_{\max;opt,l})$, $\omega_{(\max,th);opt,m}^{[\Phi_2(\omega;\vec{\zeta})]} = g_{22}(\vec{\zeta}_{\max;opt,m})$, $T_{(\max,th);opt,n}^{[\Phi_3(T;\vec{\zeta})]} = g_{33}(\vec{\zeta}_{\max;opt,n})$. Эти значения вычисляются из уравнений $\frac{\partial g_{11}(\vec{\zeta}_{\max;opt,l})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0$, $\frac{\partial g_{22}(\vec{\zeta}_{\max;opt,m})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0$, $\frac{\partial g_{33}(\vec{\zeta}_{\max;opt,n})}{\partial (\vec{\zeta}_{i,\max})} = 0$.

По результатам численных исследований, функции сравнения (4) имеют в пространстве характеристик $\vec{\zeta}_{\max}$ сложный рельеф. Некоторые характеристики меняются в небольших пределах,

так например энергия активации выбирается из интервала (0,05; 0,7) эВ, в то время как равновесная концентрация релаксаторов при движении теоретического максимума по оси температур может изменяться на несколько порядков. Это приводит к тому, что рельефом функции сравнения оказывается многомерный сложный извилистый и очень узкий овраг, содержащий большое количество минимумов. В вычислительной математике разработаны простые в техническом отношении методы, позволяющие пройти вдоль оврага и выйти в котловину минимума, однако эти методы расчёта капризны, и алгоритм прохождения по оврагу содержит ряд не формализуемых поправок, которые должны вноситься в программу прямо по ходу вычислений [13, 22, 23]. Скорость движения вдоль оврага очень небольшая. Результативность поиска минимума функции сравнения при таком ее рельефе очень сильно зависит от того, насколько удачно удалось подобрать нулевое приближение для характеристик. Удобным является изменение масштаба с помощью двойного логарифмирования по разным основаниям. Удачный выбор оснований логарифмов сокращает время вычислений. На выбор оснований влияет подбор нулевого приближения. Большую помощь оказывает точный эксперимент.

Приближенный способ минимизации функций сравнения (4) вдоль одного из направлений из множества $\vec{\zeta}_{\max}$, включая T , или ω , осуществлялся методом парабол, при котором соответствующие приближения $l + 1, m + 1, n + 1$ связаны с приближениями l, m, n одномерных i -ых минимумов

$$\vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,l+1)} = \vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,l)} - \frac{\chi_{i;l}}{2} \frac{\Psi_1(\vec{\zeta}_{(i,\max);l} + \chi_{i;l}) - \Psi_1(\vec{\zeta}_{(i,\max);l} - \chi_{i;l})}{\Psi_1(\vec{\zeta}_{(i,\max);l} + \chi_{i;l}) - 2\Psi_1(\vec{\zeta}_{(i,\max);l}) + \Psi_1(\vec{\zeta}_{(i,\max);l} - \chi_{i;l})}, \quad (6.1)$$

$$\vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,m+1)} = \vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,m)} - \frac{\chi_{i;m}}{2} \frac{\Psi_2(\vec{\zeta}_{(i,\max);m} + \chi_{i;m}) - \Psi_2(\vec{\zeta}_{(i,\max);m} - \chi_{i;m})}{\Psi_2(\vec{\zeta}_{(i,\max);m} + \chi_{i;m}) - 2\Psi_2(\vec{\zeta}_{(i,\max);m}) + \Psi_2(\vec{\zeta}_{(i,\max);m} - \chi_{i;m})}, \quad (6.2)$$

$$\vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,n+1)} = \vec{\zeta}_{(i,\max);(opt,n)} - \frac{\chi_{i;n}}{2} \frac{\Psi_3(\vec{\zeta}_{(i,\max);n} + \chi_{i;n}) - \Psi_3(\vec{\zeta}_{(i,\max);n} - \chi_{i;n})}{\Psi_3(\vec{\zeta}_{(i,\max);n} + \chi_{i;n}) - 2\Psi_3(\vec{\zeta}_{(i,\max);n}) + \Psi_3(\vec{\zeta}_{(i,\max);n} - \chi_{i;n})}. \quad (6.3)$$

В (6.1)–(6.3) $\vec{\zeta}_{(i,\max);l}$, $\vec{\zeta}_{(i,\max);m}$, $\vec{\zeta}_{(i,\max);n}$ – соответствующие функциям сравнения (4) оси координат, вдоль которых производится очередной спуск. Вспомогательный шаг, в этих случаях, $\chi_{i;l} = \chi_{i;m} = \chi_{i;n} = 0,0001$. Такая аппроксимация эквивалентна замене сечений рельефов функций сравнения интерполяционными параболой, построенными по трём точкам $\vec{\zeta}_{(i,\max);s} - \chi_{i;s}$, $\vec{\zeta}_{(i,\max);s}$, $\vec{\zeta}_{(i,\max);s} + \chi_{i;s}$, где $s = \{l, m, n\}$.

3. Особенности программы минимизации функции сравнения

В программе *минимизации функции сравнения* (1) предусматривается возможность формирования пространства характеристик. После запуска программы в диалоговом режиме задаются все необходимые для расчёта параметры. Задаются также и критерии, позволяющие выяснить, перебором каких именно параметров следует минимизировать функцию сравнения. Эти критерии могут принимать два значения – нуль и единица. Так, например, если критерий необходимости минимизации функции сравнения путём перебора значений энергии активации равен единице, то ЭВМ включает энергию активации в список параметров сравнения. Задание числовых значений всех критериев необходимости минимизации формирует пространство характеристик. В процессе задания нулевого приближения значения характеристик предполагается деформация рельефа функции сравнения, который поначалу представляет собой узкий извилистый овраг. С этой целью путём двойного логарифмирования характеристик формируется область котловинного типа,

размеры которой сравнимы с единицей.

Программа перегружена операторами условия, что связано с необходимостью различия значимых и не значимых параметров расчёта в процедуре перебора.

После того, как сформировано пространство характеристик, выбирается область, в которой будет минимизироваться функция сравнения, задается нулевое приближение координат изображающей точки и выполняется процедура спуска по координатам. При реализации спуска существенную роль играет порядок следования осей координат. Наибольший вклад в смещение теоретического монорелаксационного максимума вносит изменение экспоненциально входящих характеристик (энергия активации, ширина потенциального барьера). Именно по этим направлениям спуск производится в первую очередь. Каждый цикл спусков завершается сверкой полученного значения функции сравнения с минимально допустимым значением. Поиск минимума при изменении одной координаты в пространстве характеристик и расчёт значений функции сравнения выносятся в блок подпрограмм, располагающихся после головной программы.

Подпрограмма, построенная для численного расчета по формулам (6.1)–(6.3), осуществляет поиск минимумов функций сравнения (4) при спуске по одной из координат. Итерационный процесс одномерного спуска должен приводить к убыванию функций сравнения. В случае же увеличения значений функций сравнения управление передаётся подпрограмме, которая корректирует полученное в итерационном процессе значение изменяющейся координаты.

Назначение заключительной подпрограммы состоит в расчете значений функций $\Phi_1(T; \vec{\zeta}) = \text{tg } \delta_{th}^{(\omega_{pol})}(T; \vec{\zeta})$, $\Phi_2(\omega; \vec{\zeta}) = \text{tg } \delta_{th}^{(T_{pol})}(\omega; \vec{\zeta})$, $\Phi_3(T; \vec{\zeta}) = J_{TCDP,th}(T; \vec{\zeta})$ при текущих значениях параметров релаксационного процесса. Выполнение расчёта зависит от возможности появления экспонент от больших чисел, что и определяет необходимость передачи управления подпрограммам, которые рассчитывают функции $\Phi_1(T; \vec{\zeta})$, $\Phi_2(\omega; \vec{\zeta})$, $\Phi_3(T; \vec{\zeta})$ в зависимости от определённых в различных вычислительных ситуациях [22, 23].

Заключение

В данной статье не ставилось целью разработать какие-либо принципиально новые методы математического моделирования и численного расчета характеристических параметров систем. В этой области уже исследованы и используются на практике достаточно эффективные методы [1–13], в том числе и *МФС-метод*.

Основная задача данной работы состояла в описании процедуры адаптации МФС-метода, его основных положений, применительно к численному расчету параметров разработанной в [15–19, 21] физико-математической модели релаксационной поляризации в материалах класса ППД. МФС-метод использован с целью повышения точности численных расчетов теоретических значений параметров $\vec{\zeta} = \{U_{0,th}; \nu_{0,th}; n_{0,th}; \delta_{0,th}\}$, путем ряда физических интерпретаций элементов функции сравнения (1), с учетом экспериментально и теоретически установленных закономерностей поведения частотных и температурных спектров функций $J_{TCDP}(T)$ [14] и $\text{tg } \delta(\omega; T)$ [21]. С этой целью построены более конкретизированные, по физическому смыслу, функции сравнения (4), исследовано их поведение на множестве характеристик $\vec{\zeta}$.

Описаны особенности работы программы компьютерного расчета, где с помощью выражений (6.1)–(6.3) выявлены влияния формы рельефа поверхностей $\{\vec{\zeta}; T\}$, $\{\vec{\zeta}; \omega\}$ на технологию поиска минимизированных согласно (5.1)–(5.3) числовых значений искомых *параметров сравнения* (2.1)–(2.3).

Применения данного метода численного расчета дает хорошо согласующиеся с экспериментом результаты [21].

При этом, характеристики языка программирования, практически не сказываются на точности (порядка 0,00001) результатов численного расчета параметров сравнения (2.1)–(2.3), по формулам описанной модели.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. Сформулированы теоретические основы обобщенной математической модели, предназначенной для численного расчета параметров релаксационных процессов при поляризации разнородных электротехнических материалов, в широком диапазоне варьирования полей и температур.
2. В качестве примера, описан алгоритм минимизации функции сравнения (МФС-метод) результатов теории и эксперимента при исследовании протонно-релаксационной поляризации в протонных полупроводниках и диэлектриках (ППД) и, на этой основе, разработана схема численной минимизации параметров релаксационного процесса (включая частоту переменного электрического поля и температуру).
3. Выявлены особенности работы программы численного расчета, построенного на алгоритме МФС-метода применительно к расчету и анализу параметров спектров токов и диэлектрических потерь в КВС. Установлены возможности расширения диапазона варьирования переменных параметров (частота и амплитуда поля; температура) процесса при применении метода МФС для численного исследования более широкого круга релаксационных процессов (магнитных, оптических, механических, тепловых и т.д.) в разнородных функциональных элементах технологических установок и систем.

Список литературы

1. Минимизация времени простоя процессов при их миграции в облачном хостинге / П.О. Тихомиров, П.В. Емельянов, Н.С. Плотник, А.В. Зырянов // Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии. 2014. Т. 12. № 4. С. 112-120.
2. Иванов В.Н. Численные методы исследования механических систем с дополнительными связями // Вестник Пермского университета. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2015. Т. 31. № 4. С. 16-27.
3. Shabana A.A. Computational Dynamics. New-York: Wiley, 2001.
4. Wittenburg J. Dynamics of Multibody Systems. Berlin: Springer-Verlag, 2008.
5. Nocedal J., Wright S.J. Numerical Optimization. Berlin: Springer, 2006.
6. Солодушкин А.И., Кибиткин В.В., Плешанов В.С. Модифицированный алгоритм расчета поля векторов смещений для оценки деформации // Известия Томского политехнического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. 2011. Т. 318. № 5. С. 48-51.
7. Хуснулина А.Л., Воскобойникова О.Б. Автоматизированная система сбора и визуализации технологических данных в производстве полупроводниковых приборов // Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии. 2017. Т. 15. № 3. С. 100-110. doi: 10.25205/1818-7900-2017-15-3-100-110.
8. Кротов К.В. Градиентный метод формирования динамических расписаний обработки данных в конвейерной системе при различных моментах времени их поступления // Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии. 2016. Т. 14. № 1. С. 39-60.
9. Аймагамбетова Р.Ж., Стукач О.В. Оценка качества процессов напыления слоев полупроводниковых материалов в производстве электронных изделий с помощью кластеризации методом k-средних // Современные методы оценки и оборудование в металловедении: Труды Международной научно-практической конференции. Караганда: Издательство КарГТУ, 2015. С. 50-51.
10. Карчевский М.Н., Полетаев И.Е., Сухоруков Г.С. Алгоритмы распознавания и слежения за пузырями для измерения параметров кавитации на гидрокрыле // Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии. 2016. Т. 14. № 1. С. 23-38.
11. Панин М.П. Моделирование переноса излучения. М.: МИФИ, 2008. 212 с.
12. Скарано Ф. Обзор PIV в сверхзвуковых потоках. PIV. Берлин: Гейтельберг: Спрингер, 2008.
13. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.
14. Калытка В.А., Коровкин М.В. Протонная проводимость. Германия: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2015. 180 с.

15. Калытка В.А., Коровкин М.В. Квантовые эффекты при протонной релаксации в области низких температур // Известия Высших учебных заведений. Физика. 2016. Т. 59. № 7. С.74-79.
16. Зонная структура энергетического спектра и волновые функции протона в диэлектриках с протонной проводимостью / В.А. Калытка, А.И. Алиферов, З.К. Баймуханов, А.Д. Мехтиев // Доклады академии наук высшей школы Российской Федерации. 2017. № 2 (35). С.18-31. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31.
17. Калытка В.А., Коровкин М.В. Дисперсионные соотношения для протонной релаксации в твердых диэлектриках // Известия Высших учебных заведений. Физика. 2016. Т.59. № 12. С. 150-159.
18. Калытка В.А., Баймуханов З.К., Мехтиев А.Д. Нелинейные эффекты при поляризации диэлектриков со сложной кристаллической структурой // Доклады академии наук высшей школы Российской Федерации. 2016. № 3 (32). С. 7-21. doi: 10.17212/1727-2769-2016-3-7-21.
19. Калытка В.А., Никонова Т.Ю. Нелинейные электрофизические свойства протонных полупроводников и диэлектриков // Труды XIII Международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы электронного приборостроения». 2016. Т. 2. С. 57-65.
20. Тонконогов М.П., Исмаилов Ж.Т., Фазылов К.К. Термодеполяризационный способ определения параметров и концентрации дефектов структуры в кристаллах с водородными связями // Предпатент № 36703. 7 G01N 27/00. Промышленная собственность. Официальный бюллетень: Минюст РК. 2003. № 6. С. 87.
21. Анненков Ю.М., Калытка В.А., Коровкин М.В. Квантовые эффекты при миграционной поляризации в нанометровых слоях протонных полупроводников и диэлектриков при сверхнизких температурах // Известия Высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 1. С. 31-37.
22. Сырямкин В.И., Чесноков А.В., Коваль Д.В. Автоматическое программное обеспечение для автоматизации расчёта микротвёрдости материалов // Известия Высших учебных заведений. Физика. 2001. № 11. С. 78-82.
23. Метод измерения рельефа поверхности для исследования процессов деформации и оценки состояния нагруженных материалов / В.И. Сырямкин, С.В. Панин, Н.А. Зуев, А.В. Чесноков // Известия Высших учебных заведений. Физика. 2001. № 11. С. 83-88.

References

1. Tikhomirov P.O., Emelyanov P.V., Plotnik N.S., Zyryanov A.V. Minimizatsiya vremeni prostoya processov pri ih migratsii v oblachnom hosting. *Vestnik NGU*, 2014, vol. 12, no. 4, pp. 112-120. (in Russian)
2. Ivanov V.N. Chislennye metody issledovaniya mechanicheskikh system s dopolnitelnymi svyazyami. *Vestnik Permskogo Universiteta*, 2015, vol. 31, no. 4, pp. 16-27. (in Russian)
3. Shabana A.A. *Computational Dynamics*. New-York, Wiley. 2001.
4. Wittenburg J. *Dynamics of Multibody Systems*. Berlin, Springer-Verlag. 2008.
5. Nocedal J., Wright S.J. *Numerical Optimization*. Berlin, Springer. 2006.
6. Solodushkin A.I., Kibitkin V.V., V.S. Pleshanov. Modifitsirovannyi algoritm rascheta polya vektorov smeshenij dlya otsenki deformatsij. *Izvestiia Tomskogo Politekhnicheskogo Universiteta*, 2016, vol. 318, no. 5, pp. 48-51. (in Russian)
7. Khusnulina A.L., O.B. Voskoboynikova. Avtomatizirovannaya sistema sbora i vizualizatsij technologicheskikh dannykh v proizvodstve poluprovodnikovyykh priborov. *Vestnik NGU*, 2017, vol. 15, no. 3, pp. 100-110. (in Russian)
8. Krotov K.V. Gradientnyi metod formirovaniya dinamicheskikh raspisaniy obrabotki dannykh v konveiernoi sisteme pri razlichnykh momentakh vremeni ih postupleniya. *Vestnik NGU*, 2016, vol. 14, no. 1, pp. 39-60. (in Russian)
9. Aimagambetova R. Zh., Stukach O.V. Otsenka kachestva processov napyleniia sloyev poluprovodnikovyykh materialov v proizvodstve elektronnykh izdeliy s pomoshiiu klasterizatsii metodom k-srednikh. *Sovremennye metody otsenki i oborudovanie v metallovedenii: Materialy Mezhdunarodnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii*. Karaganda, Publishing house of KSTU, 2015. pp. 50-51. (in Russian)
10. Karchevsky M.N., Poletaev I.E., G.S. Sukhorukov. Algoritmy raspoznavaniya i slezheniya za puzыryami dlia izmereniya parametrov kavitatsii na gidrokryle. *Vestnik NGU*, 2016, vol. 14, pp. 23-38. (in Russian)
11. Panin M.P. *Modelirovanie perenosa izlucheniya*. Moscow, MIFI Publ., 2008. 212 p. (in Russian)
12. Scarano F. *Overview of PIV in supersonic flow*. Berlin: Heyelberg: Springer, 2008.

13. Kalitkin N.N. *Chislennyye metody*. Moscow, Science, 1978. 512 p. (in Russian)
14. Kalytka, V.A., M.V. Korovkin. *Protonnaya provodimost*. Germany, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2015, 180 p. Available at: <http://www.lap-publishing.com>. (in Russian)
15. Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects at a proton relaxation at low temperatures. *Russian Physics Journal*. 2016, vol. 59, no. 7, pp. 994-1001. doi: 10.1007/s11182-016-0865-x.
16. Kalytka V.A., Aliferov A.I., Baimukhanov Z. K., A.D. Mekhtiev. Zonnaya struktura energeticheskogo spectra i volnovye funktsii protona v dielektrikakh s protonnoi provodimostiyyu. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoy Fereratsii*, 2017, vol. 2, no. 35, pp. 18-31. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31. (In Russian)
17. Kalytka V.A., Korovkin M.V. Dispersion relations for proton relaxation in solid dielectrics. *Russian Physics Journal*, 2017, vol. 59, no. 12, pp. 2151-2161. doi: 10.1007/s11182-017-1027-5.
18. Kalytka V.A., Baimukhanov Z. K., A.D. Mekhtiev. Nelineinye efekty pri polarizatsii dielektrikov so slozhnoi kristallicheskoj strukturoi. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoy Fereratsii*, 2016, vol. 3, no. 32, pp. 7-21. doi: 10.17212/1727-2769-2016-3-7-21. (In Russian)
19. Kalytka V.A., T.Yu. Nikonova. Nelineinye elektrofizicheskie svoystva protonnykh poluprovodnikov i dielektrikov. *Materialy XIII Mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii "Actualnye problemy elektronnoy priborostroeniya."* Novosibirsk, 2016, vol. 2, pp. 57-65. (In Russian)
20. Tonkonogov M.P., Ismailov Zh.T., K.K. Fazylov. *Termodepolarizatsionnyy sposob opredeleniya parametrov i kontsentratsii defektov struktury v kristallakh s vodorodnymi svyazami*. Pre-patent no. 36703. 7 G01N 27/00. Promyshlennaya sobstvennost. Ofitsialnyi byulleten: Minyust Respubliki Kazakhstan. 2003, no. 6, p. 87. (In Russian)
21. Annenkov Yu. M., Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects under migratory polarization in nanometer layers of proton semiconductors and dielectrics at ultralow temperatures. *Russian Physics Journal*, 2015, vol. 58, no. 1, pp. 35-41. doi: 10.1007/s11182-015-0459-z.
22. Syryamkin V.I., Chesnokov A.V., D.V. Koval. Avtomaticheskoe programmnoe obespechenie dlia avtomatizatsii rascheta mikrotverdosti materialov. *Izvestiia Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy*, 2001, no. 11, pp. 78-82. (In Russian)
23. Syryamkin V.I., Panin S.V., Zuev N.A., A.V. Chesnokov. Metod izmereniya reliefa poverkhnosti dlia issledovaniya protsessov deformatsii i otsenki sostoyaniya nagruzhennykh materialov. *Izvestiia Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy*, 2001, no. 11, pp. 83-88. (In Russian)

Авторы

Калытка Валерий Александрович, доцент, к.ф.-м.н., кафедра «Энергетические системы», РГП на ПХВ «Карагандинский государственный технический университет», ул. Бульвар Мира, 56, г. Караганда, 100000, Республика Казахстан.
E-mail: kalytka@mail.ru

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Калытка В. А. Разработка схемы численного расчета параметров нелинейных электрофизических процессов методом минимизации функции сравнения // *Пространство, время и фундаментальные взаимодействия*. 2018. № 3. С. 68–77.

Authors

Kalytka Valeriy Aleksandrovich, Associate professor in Physics, PhD in Physical and Mathematical Sciences, Department of Power Engineering Systems, Karaganda State Technical University, «Bulvar Mira» Street, 56, Karaganda, 100000, The Republic of Kazakhstan.
E-mail: kalytka@mail.ru

Please cite this article in English as:

Kalytka V. A. Investigating the scheme of numerical calculation the parameters of non-linear electrophysical processes by minimizing comparison function method. *Space, Time and Fundamental Interactions*, 2018, no. 3, pp. 68–77.