

Математические методы анализа результатов исследования диэлектриков

Н. В. Егоров, А. Г. Карпов, С. П. Соболев

Санкт-Петербургский государственный университет, Российская Федерация,
199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Для цитирования: *Егоров Н. В., Карпов А. Г., Соболев С. П.* Математические методы анализа результатов исследования диэлектриков // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2023. Т. 19. Вып. 2. С. 212–217. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2023.207>

К наиболее информативным методам изучения диэлектрических материалов относится анализ процессов их поляризации и деполяризации. Наиболее подходящим представлением является диэлектрическая диаграмма в комплексной плоскости (диаграмма Арганда). Часто диэлектрическую диаграмму рассматривают как совокупность пересекающихся частей окружностей, по крайней мере, для предварительной обработки. В работе предложены средства моделирования диэлектрической диаграммы путем совокупности частей окружностей.

Ключевые слова: диэлектрическая диаграмма, часть окружности.

1. Введение. Одним из наиболее информативных методов изучения диэлектрических материалов является анализ процессов их поляризации и деполяризации [1–3]. Получаемая при этом информация содержит сведения как о структуре и внутренних связях материала, так и о его функциональных свойствах.

Следует отметить, что даже простое эмпирическое выявление отличий данного образца от некоторого эталона также представляет собой существенный шаг вперед для производства композитных материалов и изделий на их основе, поскольку появляется возможность объективного контроля стабильности технологических процессов.

К характеристикам динамических свойств диэлектрического материала относится комплексная диэлектрическая проницаемость:

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega),$$

где $\epsilon'(\omega)$ и $\epsilon''(\omega)$ — соответственно действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости.

Представление $\epsilon'(\omega)$ и $\epsilon''(\omega)$ в виде частотных зависимостей не позволяет легко проанализировать данные и оценить значение отклонения от ожидаемой зависимости. Более подходящей является диэлектрическая диаграмма в комплексной плоскости (диаграмма Арганда), когда строится зависимость мнимой части комплексной части диэлектрической проницаемости от ее действительной части, причем каждая точка характеризует отдельное значение частоты (рис. 1, *a*, *b*).

При наличии нескольких механизмов поляризации или одного механизма поляризации с набором различных времен релаксации, например, для образцов, изготовленных из разных веществ, диаграмма в координатах $\epsilon'(\omega)$ и $\epsilon''(\omega)$ в комплексной

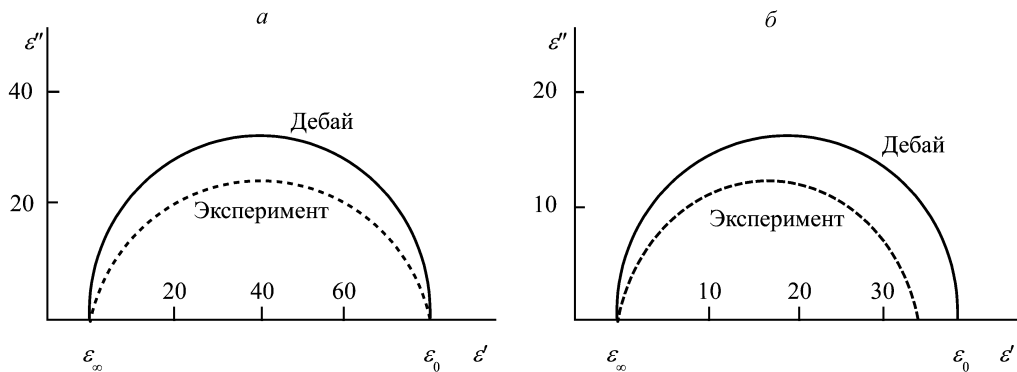


Рис. 1. Диэлектрические диаграммы различных материалов
 а — вода; б — метиловый спирт.

плоскости — удобное представление для описания составной диэлектрической проницаемости, определяемой перекрывающимися аддитивными дисперсиями (рис. 2).

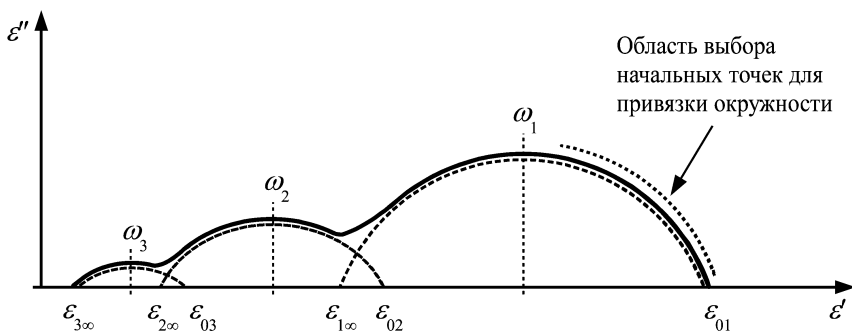


Рис. 2. Диэлектрическая диаграмма для материала со составной поляризацией

В работе [4] предложено рассматривать диэлектрическую диаграмму как совокупность пересекающихся частей окружностей (см. рис. 2). Очевидно, что для практического применения данного способа необходимо на каждом шаге выполнять привязку данных к дуге окружности.

2. Алгоритмы привязки данных диэлектрической спектроскопии к частям дуги окружности. Задача нахождения «наилучшей окружности» по набору точек данных (x_i, y_i) на плоскости, где $i = 1, \dots, N$, не совсем тривиальное упражнение, как может показаться на первый взгляд. В качестве необходимых элементов для такого анализа методом наименьших квадратов нужны начальные оценки радиуса R^0 и координат центра окружности (P_x^0, P_y^0) . Для этого надо произвольно указать любые три точки (для привязки точек к окружности, конечно, нужно иметь $N \geq 3$) и получить следующие оценки:

$$\begin{bmatrix} P_x^0 \\ P_y^0 \end{bmatrix} = 0.5 \times \begin{bmatrix} (y_3 - y_2)[(x_2^2 + y_2^2) - (x_1^2 + y_1^2)] - (y_2 - y_1)[(x_3^2 + y_3^2) - (x_2^2 + y_2^2)] \\ (x_2 - x_1)[(x_3^2 + y_3^2) - (x_2^2 + y_2^2)] - (x_3 - x_2)[(x_2^2 + y_2^2) - (x_1^2 + y_1^2)] \end{bmatrix} \times \quad (1)$$

$$\times [(x_2 - x_1)(y_3 - y_2) - (x_3 - x_2)(y_2 - y_1)]^{-1},$$

$$R^0 = [(x_1 - P_x^0)^2 + (y_1 - P_y^0)^2]^{1/2}. \quad (2)$$

В формулах (1) и (2) точки для простоты отмечены индексами 1, 2 и 3.

Проблема этой процедуры состоит в том, что она не берет в рассмотрение все N точек. Следовательно, надежность результата вычислений сильно зависит от начального выбора трех точек, тем более что в изучаемом случае он предопределен. Необходимо выбирать указанные точки в низкочастотной части каждой области дисперсии: в области нарастания значений диэлектрической диаграммы при увеличении ω (см. рис. 2). Можно, конечно, рассмотреть $N!/3!(N-3)!$ триплетов и усреднить результаты, что может потребовать временных затрат и будет подвержено влиянию эффекта точек с большими отклонениями от «лучшей окружности». В проводимых нами исследованиях с использованием метода наименьших квадратов слегка модифицировали итерационный алгоритм работы [5].

В качестве альтернативы может быть использовано обобщенное обратное решение или решение по методу наименьших квадратов [6, с. 39–43, 142–145] переопределенной системы уравнений

$$\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{B}. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{A} — $N \times 3$ — матрица, i -тая строка которой имеет форму $\mathbf{A}_i(x_i, y_i, 1)$; $\mathbf{W}^{1/2}$ — весовая матрица $N \times N$, $w_{ij}^{1/2} = (w_i)^{1/2} \delta_{ij}$, где w_i — вес, связанный с точкой (x_i, y_i) ; \mathbf{B} — вектор-столбец размерности $N \times 1$ с $b_i = -(x_i^2 + y_i^2)$, в то время как \mathbf{P} является вектором-столбцом размерности 3×1 : $\mathbf{P} = \begin{bmatrix} -2P_x \\ -2P_y \\ C \end{bmatrix}$. Параметр C связан с другими параметрами выражением $C = (P_x)^2 + (P_y)^2 - (R)^2$.

Для более чем трех точек, не лежащих на одной окружности, уравнение (3) не имеет решения. Однако, по крайней мере, три точки из набора являются неколлинеарными (не лежат на одной линии), отсюда матрица \mathbf{A} обладает полным набором столбцов (full column rank). Тогда обобщенное решение уравнения (3), которое определяется как уникальный минимум функции $f_1(P_x, P_y, R) = (\mathbf{A} \mathbf{P} - \mathbf{B})^T \mathbf{W} (\mathbf{A} \mathbf{P} - \mathbf{B})$, дается выражением

$$\mathbf{P}^0 = (\mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{B}, \quad (4)$$

где $\mathbf{W} = \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{W}^{1/2}$ и \mathbf{A}^T — транспонированная матрица \mathbf{A} .

Данный метод обладает слабостью: предполагается наличие априорного веса w_i в каждой точке (x_i, y_i) , который измеряется так хорошо, что точка лежит на окружности. Эти веса не просто связаны с присущими неопределенностям при измерении координат x_i и y_i . В частности, здесь нет никакого учета для случая, когда ошибка в измерении x заметно отличается от ошибки в измерении y . Однако такие присущие x и y веса должны использоваться в реальном вычислении по методу наименьших квадратов P_x, P_y и R , для которых P_x^0, P_y^0, R^0 служат только хорошими начальными оценками. При отсутствии какой-либо информации, вероятно, будет достаточным $w_i = 1$. Если определить среднюю величину a как

$$\langle a \rangle = \left[\sum_{j=1}^N a_j w_j \right] / \left[\sum_{j=1}^N w_j \right],$$

то уравнение (4) примет вид

$$P^0 = - \begin{bmatrix} \langle x^2 \rangle \langle xy \rangle \langle x \rangle \\ \langle xy \rangle \langle y^2 \rangle \langle y \rangle \\ \langle x \rangle \langle xy \rangle 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \langle x(x^2 + y^2) \rangle \\ \langle y(x^2 + y^2) \rangle \\ \langle x^2 + y^2 \rangle \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Следовательно, получим следующие результаты:

$$P_x^0 = [\text{cov}(y, x^2 + y^2) \times \text{cov}(x, y) - \text{cov}(x, x^2 + y^2) \times \sigma^2(y)]/D, \quad (6)$$

$$P_y^0 = [\text{cov}(x, x^2 + y^2) \times \text{cov}(x, y) - \text{cov}(y, x^2 + y^2) \times \sigma^2(x)]/D, \quad (7)$$

$$R^0 = [(P_x^0)^2 + (P_y^0)^2 \langle x^2 + y^2 \rangle - 2P_x^0 \langle x \rangle - 2P_y^0 \langle y \rangle]^{1/2}. \quad (8)$$

Здесь ковариация величин a и b (согласно Брандту) задается таким образом:

$$\text{cov}(a, b) = \langle (a - \langle a \rangle)(b - \langle b \rangle) \rangle = \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle,$$

в то время как вариация a определяется как

$$\sigma^2(a) = \text{cov}(a, b).$$

Знаменатель в уравнениях (6) и (7) задается выражением

$$D = 2[\text{cov}(x, y)]^2 - \sigma^2(x)\sigma^2(y).$$

Подчеркнем опять, что уравнения (6)–(8) не являются решением по методу наименьших квадратов задачи привязки точек к окружности. Эта задача является существенно нелинейной в противоположность линейному результату уравнения (5). Фактически нетрудно показать, что P_x^0, P_y^0, R^0 минимизируют сумму:

$$f_1(P_x, P_y, R) = \sum_{i=1}^N w_i [(x_i - P_x)^2 + (y_i - P_y)^2 - R^2].$$

В противоположность единичному взвешиванию, назначенному и для x , и для y , анализ по методу наименьших квадратов дает значения P_x, P_y, R , которые минимизируют сумму:

$$f_2(P_x, P_y, R) = \sum_{i=1}^N \left\{ [(x_i - P_x)^2 + (y_i - P_y)^2]^{1/2} - R \right\}.$$

Если интересна менее общая задача, где одна из координат центра окружности, скажем P_y , известна и равна нулю, то параметры P_x^0 и R^0 , которые минимизируют функцию $f_1(P_x, P_y = 0, R)$, задаются выражениями

$$P_x^0 = 0,5 [\text{cov}(x, x^2 + y^2)]/\sigma^2(x), \quad (9)$$

$$R^0 = [\langle x^2 + y^2 \rangle + (P_x^0)^2 - 2P_x^0 \langle x \rangle]^{1/2}. \quad (10)$$

Если поменять местами x и y , то уравнения (9) и (10) дадут результат для случая, когда $P_x = 0$.

3. Заключение. Разработан и рассмотрен комплекс средств предварительной оценочной обработки диэлектromетрической информации. Полученные результаты могут быть использованы в качестве начальных приближений в более точных (и сложных, и времязатратных) итерационных алгоритмах модельной подгонки.

Тщательный и точный анализ различия между пакетами экспериментальных и модельных данных можно провести с помощью метода остаточных разностей или метода последовательных векторных сумм.

Литература

1. Hyde P. J. Wide-frequency-range dielectric spectrometer // *Proceedings of IEE*. 1970. Vol. 117. N 9. P. 1891–1901.
 2. Алмазов А. А., Егоров Н. В., Резников М. А. Микропроцессорная система релаксационной хронометрии диэлектриков // *Методы и средства диагностики несущей способности изделий из композитов: Практика создания и применения* / отв. ред. В. А. Латипенко. Рига: Зинатне, 1991. Т. 2. С. 125–131.
 3. Карпов А. Г., Егоров Н. В. Automated dielectrometer // *Приборы и техника эксперимента*. 1999. № 6. С. 63–67.
 4. Карпов А. Г., Клемешев В. А. Диагностика диэлектрических материалов с несколькими группами времен релаксации // *Журн. технич. физики*. 2018. Т. 88. № 4. С. 634–637.
 5. Macdonald J. R., Schoonman J., Lehnen A. P. The applicability and power of complex nonlinear least squares for analysis of impedance and admittance data // *J. Electroanal. Chem.* 1982. Vol. 131. P. 77–83.
 6. Noble B. *Applied linear algebra*. Prentice-Hall: Englewood Cliffs, 1969. 186 p.
- Статья поступила в редакцию 24 февраля 2023 г.
Статья принята к печати 25 апреля 2023 г.

Контактная информация:

Егоров Николай Васильевич — д-р физ.-мат. наук, проф.; n.egorov@spbu.ru

Карпов Андрей Геннадьевич — д-р техн. наук, проф.; a.g.karpov@spbu.ru

Соболев Сергей Павлович — канд. физ.-мат. наук, доц.; s.sobolev@spbu.ru

Mathematical methods for analyzing the results of investigation of dielectric

N. V. Egorov, A. G. Karpov, S. P. Sobolev

St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Egorov N. V., Karpov A. G., Sobolev S. P. Mathematical methods for analyzing the results of investigation of dielectric. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*, 2023, vol. 19, iss. 2, pp. 212–217. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2023.207> (In Russian)

One of the most informative methods for studying dielectric materials is the analysis of their polarization and depolarization processes. The most suitable representation is the dielectric diagram in the complex plane (Argand diagram). Often, the dielectric diagram is represented as a collection of intersecting parts of circles, at least for preprocessing. The paper proposes means of modeling the dielectric diagram by means of a set of parts of circles.

Keywords: dielectric diagram, part of a circle.

References

1. Hyde P. J. Wide-frequency-range dielectric spectrometer. *Proceedings IEE*, 1970, vol. 117, no. 9, pp. 1891–1901.
2. Almazov A. A., Egorov N. V., Reznikov M. A. Mikroprotsessornaia sistema relaksatsionnoi

khronometrii dielektrikov [The microprocessor system chronometry dielectric relaxation]. *Metody i sredstva diagnostiki nesushchei sposobnosti izdelii iz kompozitov: Praktika sozdaniia i primeneniia* [Methods and means of diagnosis of bearing capacity of composite products: Creating and using practice]. Riga, Zinatne Publ., 1991, vol. 2, pp. 125–131. (In Russian)

3. Karpov A. G., Egorov N. V. Automated dielectrometer. *Pribory i tekhnika eksperimenta* [Instruments and technology of experiments], 1999, no. 6, pp. 63–67.

4. Karpov A. G., Klemeshev V. A. Diagnostika dielektricheskikh materialov s neskol'kimi gruppami vremen relaksatsii [The diagnosis of dielectric materials with number of relaxation times]. *Journal of Technical Physics*, 2018, vol. 88, no. 4, pp. 634–637. (In Russian)

5. Macdonald J. R., Schoonman J., Lehen A. P. The applicability and power of complex nonlinear least squares for analysis of impedance and admittance data. *J. Electroanal. Chem.*, 1982, vol. 131, pp. 77–83.

6. Noble B. *Applied linear algebra*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs Publ., 1969, 186 p.

Received: February 24, 2023.

Accepted: April 25, 2023.

Authors' information:

Nikolay V. Egorov — Dr. Sci. in Physics and Mathematics, Professor; n.egorov@spbu.ru

Andrey G. Karpov — Dr. Sci. in Technics, Professor; a.g.karpov@spbu.ru

Sergey P. Sobolev — PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor; s.sobolev@spbu.ru