

ЛИТЕРАТУРА

1. *Девятисильный А.С., Дорожко В.М., Числов К.А.* Разработка и исследование моделей и технологий гравиметрии на подвижном основании // Информатика и системы управления – 2009. – №2. – С. 106-111.
2. *Ишлинский А.Ю.* Классическая механика и силы инерции. – М.: Наука, 1987.
3. *Андреев В.Д.* Теория инерциальной навигации. Корректируемые системы. – М.: Наука, 1967.
4. *Калман Р., Фалб П., Арбиб М.* Очерки по математической теории систем. – М.: Мир, 1971.
5. *Осипов Ю.С., Кряжимский А.В.* Задачи динамического обращения // Вестник РАН. – 2006. – Т.76. – С.615-624.
6. *Mallat S.G.* A theory for multiresolution signal decomposition: the wavelet representation ~// IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence. – 1989. – Vol.11, No.7. – P. 674-693.
7. *Daubechies I.* Ten lectures on wavelets, CBMS-NFS conference series in applied mathematics. – SIAMED, 1992.
8. *Девятисильный А., Прудкогляд Н.А.* Моделирование астроинерциальной системы в условиях стохастической неопределенности // Авиакосмическое приборостроение. – 2007. – №11. – С. 39-44.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Ю.Н. Кульчиным.

E-mail:

Девятисильный А.С. – devyatis@iacp.dvo.ru;

Числов К.А. – kirillche@rambler.ru.

УДК 004.421 + 53.072

© 2011 г. **В.Г. Моисеенко**, академик РАН

(Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск),

В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук,

Д.А. Уляхина

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МЕТОД ГЕНЕРАЦИИ ВИЗУАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ МНОГОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ ВОДЫ

Рассматривается подход, позволяющий реализовывать имитационное моделирование электронно-атомного строения как общего вида сложных пространственных образований молекул H_2O , так и совместной детализации внутреннего устройства их составных элементов.

Ключевые слова: атомный каркас, оптическая электронная оболочка, молекулярная плоскость, молекулярные оси, собственный дипольный момент.

Введение

Как известно [1], при реальном, т.е. натурном или физическом моделировании, наиболее полно воплощается объективная возможность адекватного синтеза и эффективного анализа необходимых характеристик реального объекта, реализованного целиком или же в его наиболее важной части. В свою очередь мысленное моделирование, которое может быть наглядным, символическим и математическим, чаще всего оказывается единственным способом изучения свойств объектов, практически не реализуемых в заданном интервале времени либо существующих вне условий, возможных для их физического воссоздания. При этом одним из перспективных подходов к созданию наглядных образов означенных систем является их макетирование на ЭВМ.

Актуальность описываемого в настоящей работе исследования обусловлена тем, что даже самая обыкновенная вода обладает весьма сложной внутренней структурой, а многие ее физико-химические особенности до сих пор не имеют четкого научного толкования. При этом теоретические модели, существующие в рамках соответствующей области знаний с одной стороны, более или менее удовлетворительно объясняют только некоторую часть наблюдаемых явлений, часто вступая в неразрешимые противоречия одна с другой. Кроме того, имеющихся экспериментальных данных также оказывается явно недостаточно, поскольку они не позволяют детализировать реальную исследуемую структуру за счет: во-первых, крайне малого времени существования ее многомолекулярных образований, составляющего порядка $10^{-10} - 10^{-9}$ с; во-вторых, практической невозможности использования технических средств современной микроскопии.

Базовые теоретические модели и алгоритмы

В работах [2, 3] было показано, что в рамках представления процессов релаксационной поляризации воды с помощью математического описания характеристик соответствующей линейной динамической системы управления каждая их разновидность может быть представлена уравнением:

$$\frac{d^2 \mathbf{m}_r(t)}{dt^2} + 2b_r \frac{d\mathbf{m}_r(t)}{dt} + w_{0r}^2 \mathbf{m}_r(t) = \frac{\sum_{i=1}^n m_{0i}^2}{I_\Sigma} E(t), \quad (1)$$

где b_r и w_{0r} – коэффициент затухания и частота собственных колебаний молекулярного образования воды определенного вида; m_{0i} – проекции на направление линий внешнего электрического поля, образованные собственными дипольными моментами n -го числа молекул, образующих молекулярную связку; I_Σ – ее суммарный момент инерции; $E(t)$ – функция напряженности эффективного поля.

Отметим, что численные значения динамических коэффициентов b_r и w_{0r} могут быть заданы на основании эмпирических данных о физических измерениях поляризационных спектров воды. В свою очередь, вопросы определения пространственных параметров конкретного многомолекулярного образования вида $(\text{H}_2\text{O})_n$ требует использования его визуальной модели, которая позволяет, учиты-

вая расположение узлов атомного каркаса, а также его основные стереометрические характеристики, свести нахождение величин m_i и I_{Σ} к решению соответствующих задач общей механики.

С одной стороны, современные научные теории связывают уникальность физико-химических свойств воды с геометрическими аспектами строения ее молекулы, а также основываются на величине валентного угла НОН, составляющего $104,523^\circ$, т.е. непосредственно близкого к значениям плоских углов, образуемых в точках пересечения высот правильного тетраэдра или диагоналей правильного гексаэдра ($109,471^\circ$). Таким образом, величина валентного угла НОН дает возможность с достаточно высокой степенью приближения рассматривать атомный каркас молекулы воды в виде тетраэдра или гексаэдра, позволяющего наиболее плотно упаковывать окружающее пространство. Кроме того, данный угол хорошо согласуется и со значениями плоских углов, образуемых в вершинах других правильных многогранников – додекаэдра и икосаэдра [4].

С другой стороны, у каждой отдельно взятой молекулы воды имеет место уникальное свойство, а именно – способность образовывать водородные мостики между атомами кислорода двух оказавшихся рядом молекул H_2O , называемая водородной связью $O-H\dots O$, которая допускает возможность образования различных относительно устойчивых связок молекул воды друг с другом. При этом в работе [5] было показано, что длина $O-H\dots O$ может быть достоверно рассчитана на базе использования системного описания процесса упругой электронной поляризации воды, также позволяющей определить теоретические значения орбитальных радиусов ее оптических оболочек [6], необходимые для генерации разбираемых визуальных моделей.

Общая характеристика программного продукта

Описываемый программный продукт реализован с помощью программной среды MS Visual C++, являющейся основой разработки пакета создания MFC-приложений с использованием библиотеки OpenGL. В свою очередь, пакет Microsoft Foundation Classes (MFC) представляет собой библиотеку, разработанную на языке C++ и призванную облегчить разработку GUI-приложений для Windows путем создания каркаса приложения по заданному макету интерфейса с использованием богатого набора библиотечных классов. Кроме того, MFC предоставляет собой объектно-ориентированный слой оберток (wrappers), создаваемых над множеством функций Windows API, делающий более удобной работу с ними. Этот слой представляет некоторое множество встроенных в систему объектов (окна, виджеты, файлы и т. п.), представленных в виде определенных классов, а также полностью исключает рутинные действия – такие как закрытие дескрипторов и выделение или освобождение памяти.

Отметим, что решающим фактором при выборе спецификации программного интерфейса описываемого приложения (рис. 1) была не столько его независимость от языка программирования, сколько реализация многообразия функций для графического вывода сложных пространственных сцен. С подобной точки зрения стандарт OpenGL является одним из самых популярных на данный момент

прикладных программных интерфейсов для разработки приложений в области компьютерной графики. При этом современная версия OpenGL включает в себя несколько базовых библиотек (GLU, GLUT, GLAUX и др.), с учетом возможности использования их дополнительных разновидностей, предназначенных для упрощения конечного программного кода.

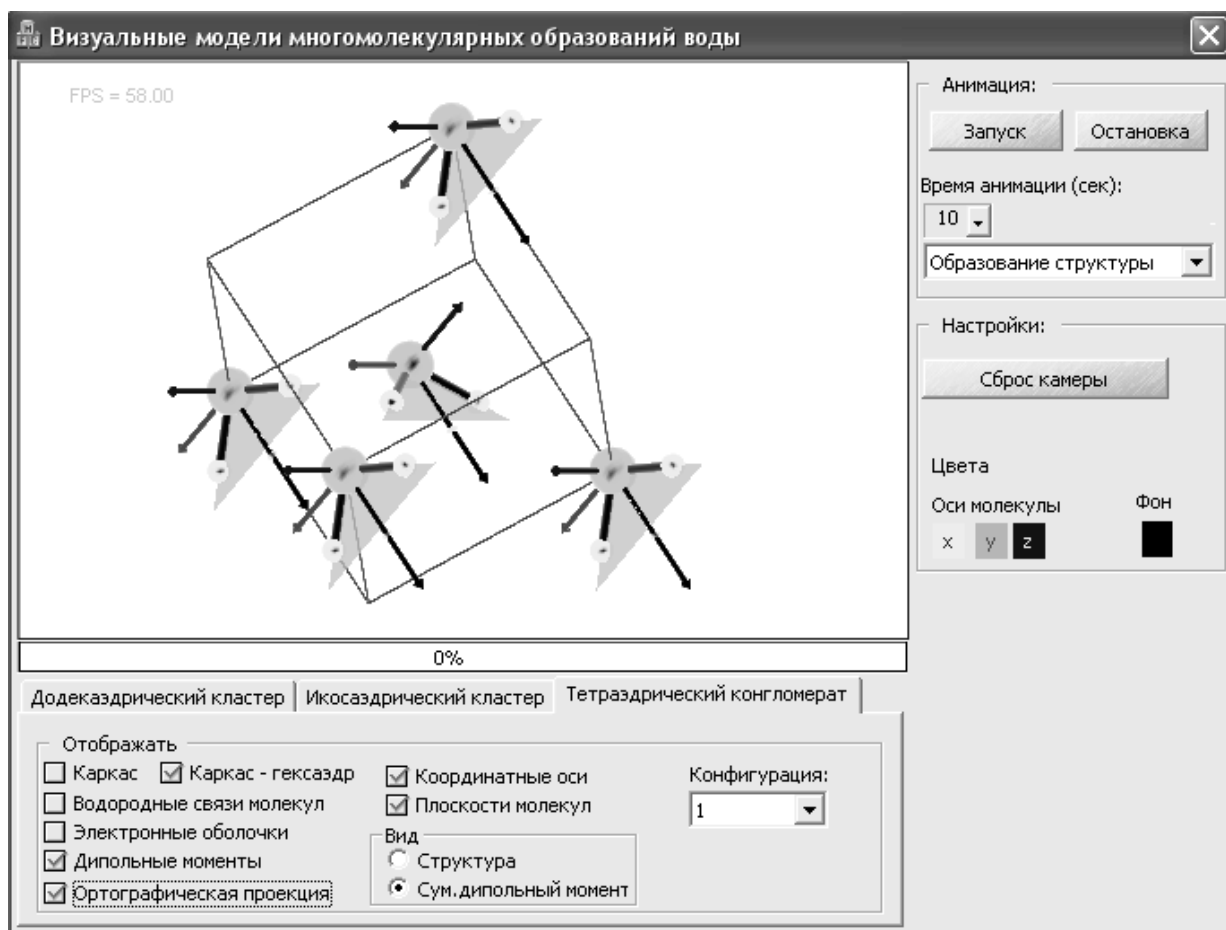


Рис. 1. Экранный интерфейс описываемой программы.

Представленные опции диалогового управления внешним видом формируемых программой визуальных моделей многомoleкулярных связок воды позволяют генерировать тот или иной дидактический материал, позволяющий эффективно анализировать их адекватность существующим научным положениям и предпосылкам. При этом пользователь имеет возможность просматривать структуры заложенных в программу каркасных моделей, внешние границы их оптических электронных оболочек, выводить общепринятые в физике элементы всех молекул, образующих связку (молекулярные плоскости, молекулярные оси, дипольные моменты, направления водородных связей).

Кроме того, программой реализована имитационная анимация механизма образования каждой изучаемой молекулярной связки, а также генерация суммы дипольных моментов их молекул, что позволяет более полно вникнуть в сущность исследуемых явлений. Отметим, что описываемый программный продукт дает возможность моделировать следующие многомoleкулярные связи воды типа $(\text{H}_2\text{O})_n$.

Во-первых, додекаэдрический кластер, образованный двадцатью молекулами H_2O , размещенными в вершинах правильного додекаэдра, двух его наиболее естественных (природных) разновидностей [4, 7].

Во-вторых, полностью замкнутый (абсолютно естественный) икосаэдрический кластер, организованный двенадцатью молекулами H_2O , расположенными в вершинах правильного икосаэдра [7].

В-третьих, тетраэдрический конгломерат, сформированный пятью молекулами H_2O , помещенными в вершинах правильного тетраэдра, двух его предельных разновидностей – высокоэнергетического и низкоэнергетического [8].

Практические результаты использования программы

Для иллюстрации практических возможностей анализируемой программы, а также ее ценности для проведения соответствующих теоретических изысканий рассмотрим пример ее использования при обосновании наиболее приемлемых разновидностей многомолекулярные связи воды типа $(H_2O)_n$ с точки зрения обеспечения их максимальной анизотропии. Формы атомных каркасов и суммарные дипольные моменты всех заложенных в пакет моделей, необходимые для решения поставленной задачи, приведены на рис. 2 – 6.

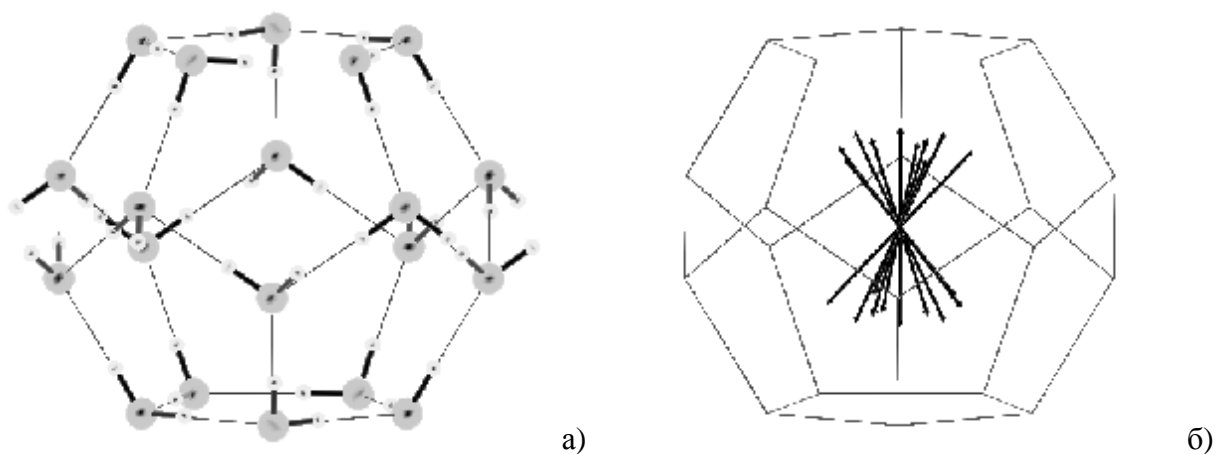


Рис. 2. Имитационные модели додекаэдрического кластера $(H_2O)_{20}$ первого типа: а) – атомный каркас; б) – сумма дипольных моментов образующих его молекул.

Анализ представленных результатов позволяет констатировать следующее.

Из двух рассмотренных разновидностей додекаэдрического кластера более естественной и наиболее приемлемой с теоретической точки зрения является вторая, учитывая большую равномерность размещения векторов собственных дипольных моментов молекул, образующих данный кластер.

Рассмотренная модель икосаэдрического кластера является полностью приемлемой за счет его высокой анизотропии, что также подтверждается равномерностью направлений собственных дипольных моментов его молекул.

Из двух рассмотренных разновидностей тетраэдрического конгломерата наиболее приемлемой является вторая, принимая во внимание большую равномерность распределения собственных дипольных моментов его молекул, а также наименьшую собственную энергию данного конгломерата, [см. 8].

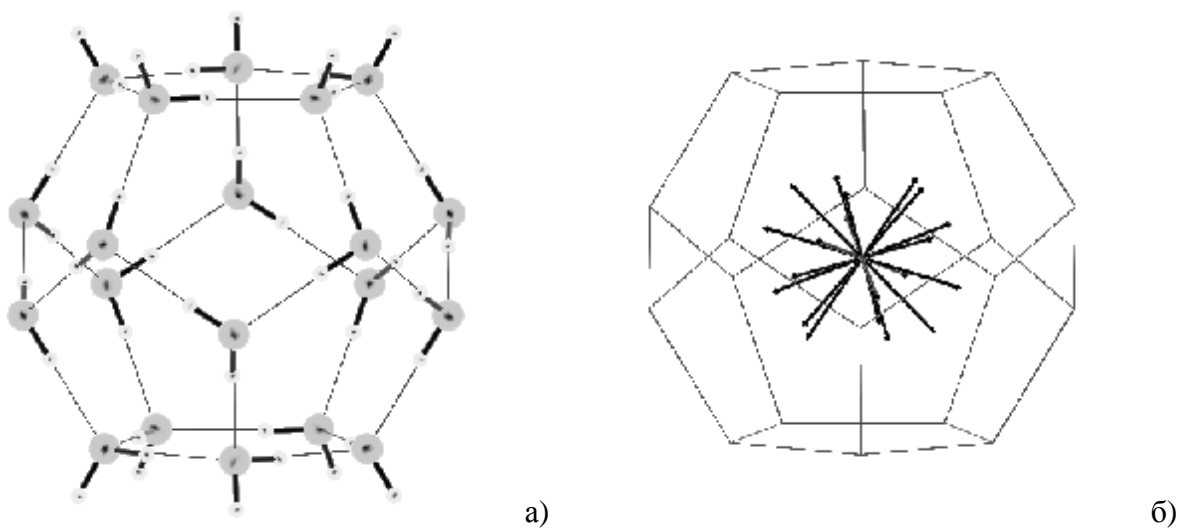


Рис. 3. Имитационные модели додекаэдрического кластера $(\text{H}_2\text{O})_{20}$ второго типа: а) – атомный каркас; б) – сумма дипольных моментов образующих его молекул.

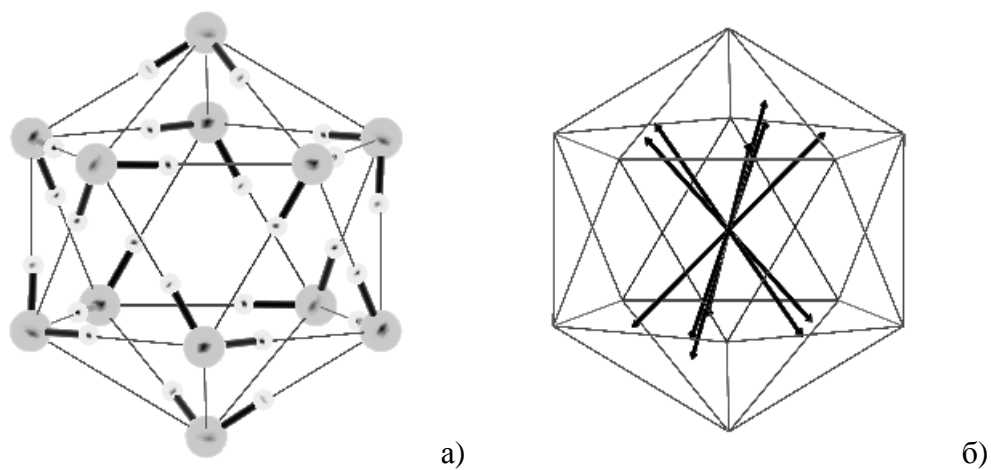


Рис. 4. Имитационные модели икосаэдрического кластера $(\text{H}_2\text{O})_{12}$: а) – атомный каркас; б) – суммарный дипольный момент молекул.

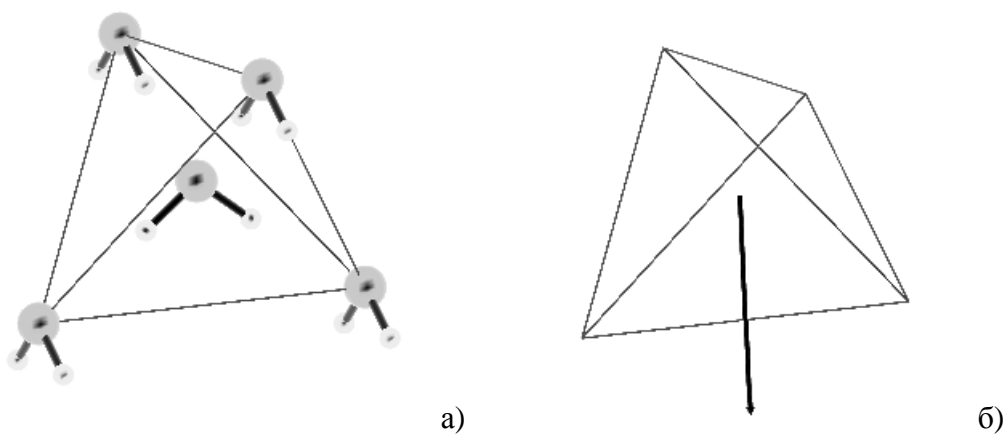


Рис. 5. Имитационные модели конгломерата $(\text{H}_2\text{O})_5$ первого типа: а) – атомный каркас; б) – суммарный дипольный момент молекул.

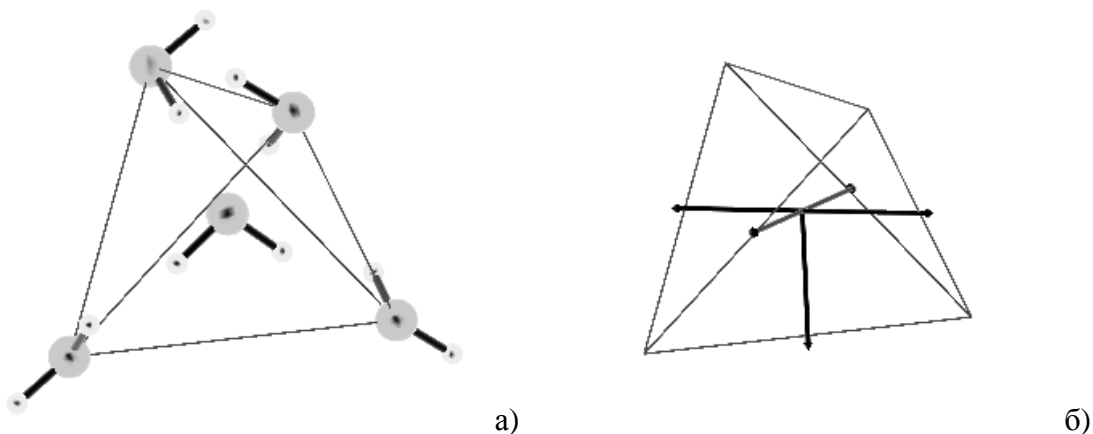


Рис. 6. Имитационные модели конгломерата $(\text{H}_2\text{O})_5$ второго типа: а) – атомный каркас; б) – суммарный дипольный момент молекул.

Заключение

Как известно, всякая теоретическая концепция становится результативным инструментом познания окружающего нас мира только тогда, когда установлены законы или выявлены закономерности, связывающие конкретное физическое явление и его внутреннюю сущность, а также определены взаимосвязи между свойствами изучаемого объекта и его строением. С подобной точки зрения предлагаемый подход к построению визуальных моделей многомолекулярных связей воды может оказаться полезным для формирования общей теории поляризации жидких диэлектриков, совершенствования системы знаний по физике конденсированного состояния, а также развития теоретической базы современных нанотехнологий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. – М.: Высшая школа, 2001.
2. Еремина В.В. Имитационные модели релаксационной поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2008. – № 1(15). – С. 38-45.
3. Еремина В.В. Имитационные модели релаксационной поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2008. – № 3(17). – С. 34-39.
4. Еремина В.В., Еремин И.Е., Квашигин В.И. Компьютерное моделирование поляризации додекаэдрического кластера воды // Вестник Амурского государственного университета. – 2007. – Вып. 37. Сер. «Естественные и экономические науки». – С. 45-48.
5. Еремин И.Е., Еремина В.В. Кибернетическая модель моментов инерции закрепленных молекул воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 1(23). – С. 50-58.
6. Упругая электронная поляризация конденсированных диэлектриков / И.Е. Еремин, В.В. Еремина, Н.С. Костюков, В.Г. Моисеенко // Доклады Академии наук. – 2010. – Т. 432, №5. – С.612-615.
7. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
8. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.

E-mail:

Моисеенко В.Г. – kaunamka@mail.ru

Еремина В.В. – banysheva@mail.ru;

Уляхина Д.А. – andreyasha@ya.ru.