

Разработка программы определения размера частиц методом динамического рассеяния света

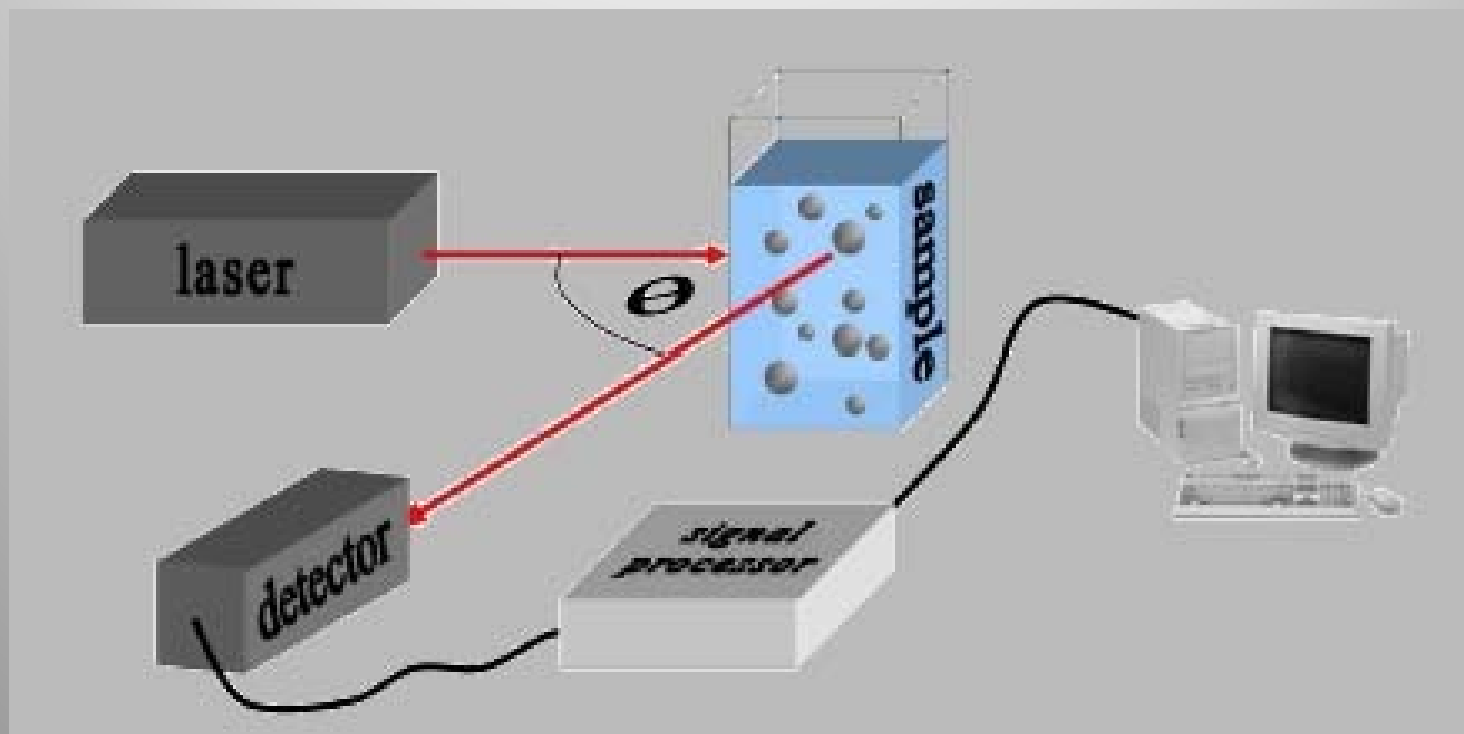
Руководитель: Белова И.М.

Студент: Роганова Л.Е.

Постановка задачи

- Проанализировать возможные способы обработки данных для определения размера сферических частиц по значениям корреляционной функции;
- Разработать методику и программу определения размера частиц по данным эксперимента динамического рассеяния света;
- Исследовать отклонение полученной зависимости корреляционной функции от экспериментальных данных.

Метод динамического рассеяния света

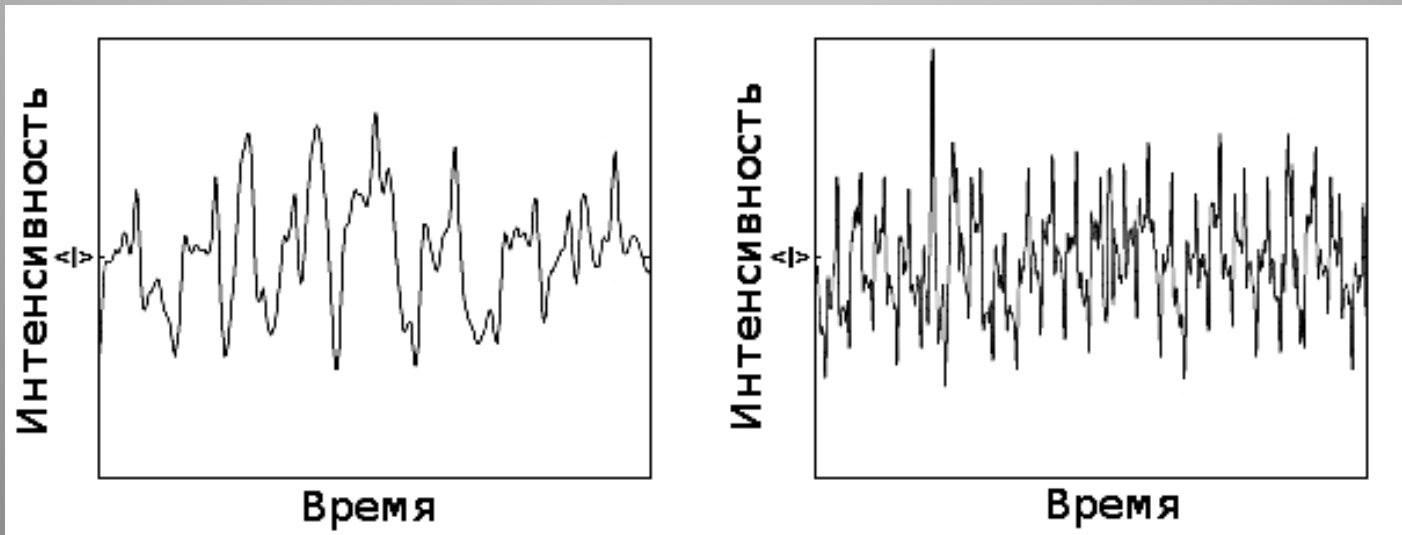


Динамическое рассеяние света

Автокорреляционная функция:

$$G_2(\tau) = \langle I(t)I(t + \tau) \rangle = \lim_{t_{meas} \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{t_{meas}} \int_0^{t_{meas}} I(t)I(t + \tau) dt \right)$$

Где τ – время задержки между двумя точками, t_{meas} – продолжительность эксперимента.



От рассеянного света к коэффициенту диффузии и размеру частиц

Автокорреляционная функция: $g_1(t) = \sum_i A_i e^{-\Gamma_i t}$

Где A_i – амплитуда, Γ_i – обратная величина времени корреляции:

$$\Gamma_i = q^2 D = \frac{q^2 kT}{6\pi\eta_0 R}$$

Где q^2 – величина рассеивающего вектора, D – коэффициент диффузии, R – гидродинамический радиус.

Алгоритмы обработки данных эксперимента

- *Метод моментов*: алгоритм, не требующий первоначальной информации. Очень большая ошибка вычислений.
- *Алгоритм обратного распределения Лапласа*: не предполагает определенного типа распределения. Даже малые шумы вызывают большие погрешности.
- *Алгоритм Левенберга-Маркуарта*: тип распределения предполагается известным. Параметры определяются при помощи нелинейной оптимизации.

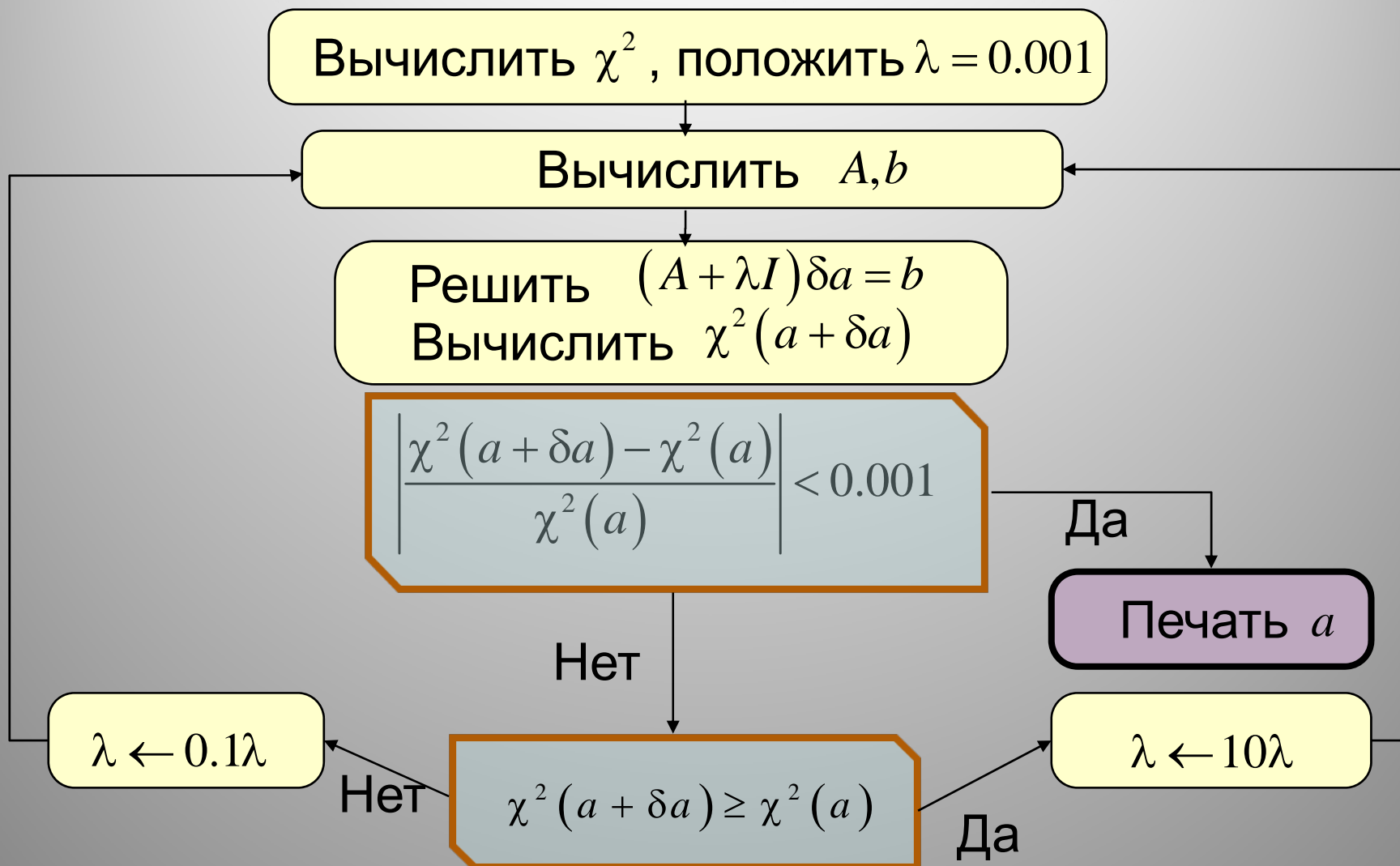
Алгоритм Левенберга-Маркуарта

- Входные данные: точки эксперимента, их веса;
- Предположение о начальных параметрах A_i и Γ_i ;
- Параметр χ^2 используется для наблюдения за прогрессом процесса оптимизации:

$$\chi^2 = \frac{1}{\nu} \sum_{i=1}^N w_i (y_i - y_{fit,i})^2$$

Где y_{fit} – подгоняемая функция, y_i – экспериментальные значения, ν – число степеней свободы, N – количество точек данных, w_i – статистические веса.

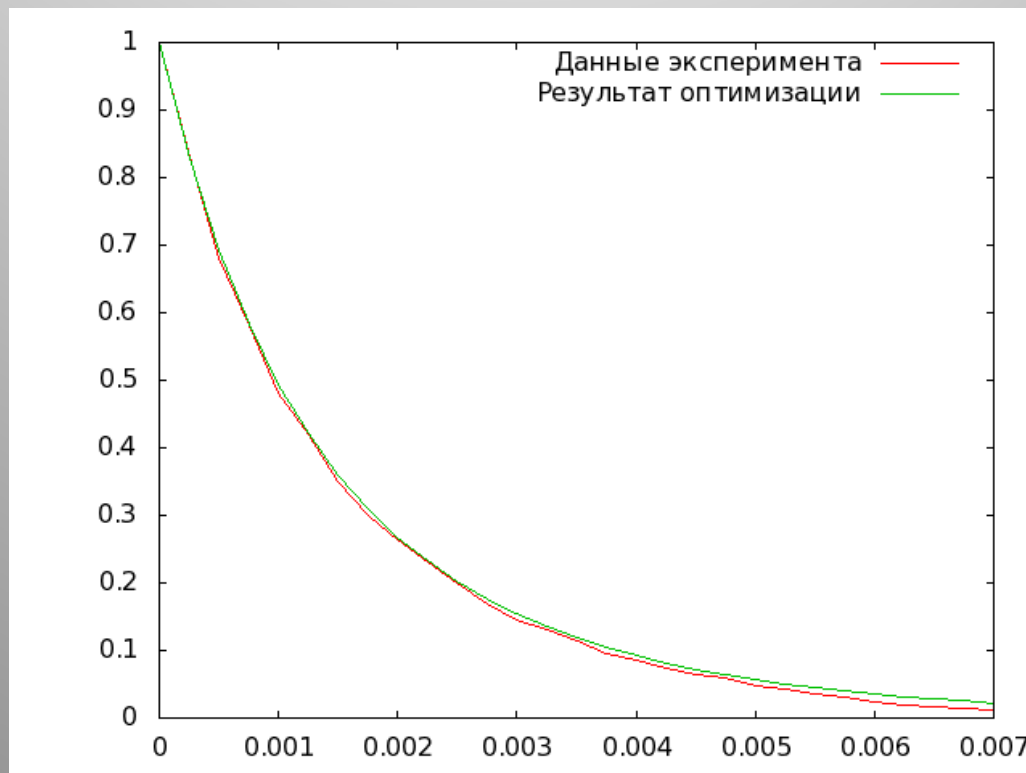
Алгоритм Левенберга-Маркуарта



Результаты вычислений

Для распределения вида $y = \sum_{k=1}^3 A_k e^{-2B_k x}$

Экспериментальный размер частицы (нм)	Вычисленный размер частицы (нм)	Относительная ошибка (%)
300, 500, 1000	303, 491, 1017	1.03, 1.8, 1.71



Результаты

- В настоящей работе выбрана методика определения коэффициентов диффузии и размеров частиц по результатам динамического рассеяния света при помощи нелинейной оптимизации;
- Разработана программа нелинейной оптимизации при помощи метода Левенберга-Маркуарта;
- При использовании данной методики можно находить параметры различного вида распределения плотности вероятности коэффициентов диффузии.