

Modelovanje i određivanje funkcija raspodele različitim metodama i graničnim uslovima

1. Stanko Ostojić

Odsek Zemun

Akademija strukovnih studija Politehnika

Beograd, Srbija

sostojic@politehnika.edu.rsstankoostojic22@gmail.com

2. Mileša Srećković

Elektrotehnički fakultet Univerziteta u

Beogradu

Beograd, Srbija

esreckov@etf.bg.ac.rs

3. Željka Tomić

Odsek Zemun

Akademija strukovnih studija Politehnika

Beograd, Srbija

ztomic@politehnika.edu.rsztomic@atssb.edu.rs

Apstrakt—U radu je dat analitički pristup određivanju funkcija raspodele, ako je poznat kernel, njihovo normiranje koristeći osobine specijalnih funkcija i metode kompleksne analize. Određivanje nepoznatih parametara pretpostavljene funkcije raspodele, numeričkom metodom se vrši razvijanjem funkcije na pojedinim segmentima u Taylorov red uz poznavanje transformacionog odnosa tražene raspodele i odgovarajućih eksperimentalnih podataka. Veza između eksperimentalnih podataka i tražene funkcije raspodele, odražava se preko kernela čiji matematički oblik zavisi od vrste funkcije raspodele, samog eksperimenta i metode primenjenog fizičkog procesa u eksperimentu. U integralu eksperimentalnih podataka, jedan činilac podintegralne funkcije je tražena funkcija, a druga funkcija je kernel, funkcija sa dve promenljive, koja može biti veoma kompleksna, tako da se funkcija raspodele može odrediti jedino numeričkom metodom uz pretpostavku njenog oblika. Analitičke metode su uspešnije kada se u eksperimentu koristi rasejani fluks snopa iz kvantnog generatora. Pri tome se kod pojedinih tipova rasejanja može koristiti ortogonalnost specijalnih funkcija, kao i kad se traži raspodela čestica, čiji pretpostavljeni oblik ima neku od pogodnih matematičkih oblika, kao što su različite logaritamske i druge raspodele, koje su već prepoznate kao specifične za datu teorijsku disciplinu ili odgovaraju rezultatima merenja pojedinog procesa

Ključne reči—funkcija raspodele, čestice, kernel, inverzna metoda

I. UVOD

Modelovanje i izbor funkcija raspodele je danas u mnogim disciplinama i primene, a i u matematičkim formalizmima vezano za razna rešenja. Ipak, paralelno posmatranje je vezano za nekoliko načina opisa *linija* u mnogo spektroskopija. Često se polazi od Voigtove linije i traže limesi ka Lorenziju i Gaussiju. U oblasti primene koherentne svetlosti jedna strana se radi i o mnogo užim raspodelama frekvencija, ali i o drugim mernim zahtevima, koji uključuju prenos homodina i heterodina na više noseće frekvencije. Posle prvih zapisa Forrestera (izbijanje fotona), usledila je masovna primena razvijenih šema u čisto teorijske svrhe za proveru razvijenih formula, a sa druge strane medicina, biologija, veterina su dobili kvantitativne opise kroz deskripcije scena vezanih za biološke protoke krvi, limfe, pokretljivosti bakterija, ali i u industriji lekova i kućne hemije (deterdženata). U izboru veoma široke literature [1-28] su davani tehnički prilazi rasejanju fotona u generalnom smislu sa *spuštanjem* do nanodimenzija i

veze sa kritičnim fenomenima u najširem smislu. Sa druge strane, problemima rasejanja se prilazi kroz odnose fluktuacija u datoj sredini i obezbeđivanje uslova kada mogu da se kvantifikuju merenjima pojedine kategorije fluktuacija. Prema tome je i biran formalizam. Za prevazilaženje mehaničkih fluktuacija u merenjima, razvijani su specijalni stolovi za držanje celog sistema i potrebnim prigušenjima oslobađanja mehaničkih fluktuacija dobijani su uslovi da se prate šeme detektora sa procesima izbijanja fotona. Drugi pravac (merna tehnika) je išao ka ultrakratkim impulsima kvantnih generatora koji su premestili klase mehaničkih oscilacija sistema merenja i oslonaca (mermer, mermerni stolovi, savremeni sistemi prigušenja mehaničkih fluktuacija tla. Te tehnike su pratile i razvoj holografije. Napominjemo da smo u eksperimentima sa snimanjem scena imali beležene i pojedinačne čestice prašine kao *parazitne* rezultate. (Iako parazitni, dimenzija čestica je bila u kategoriji njenih pravih linearnih veličina.)

Merenje širina „spektra“ kvantnih generatora je posebna problematika i profesionalni rad iskustveno za razvijene laboratorijske sisteme (ili kalibrisane komercijalne) a priori imaju svoje *etalonske prilaze*. Sistemi za rasejanje se često dimenzioniraju za razne zadatke, ali zbog prirode osetljivosti podešavanja, poređenje raznih supstanci je pogodno raditi za istu geometriju i ćelije i rastojanja komponenti izabranih u svrhe definisanih merenja: intenzitet rasejanja, praćenje polarizacije: vertikalne i horizontalne sa odabranim ulazom: nepolarisan slučaj, ulaz vertikalna polarizacija, ulaz horizontalna polarizacija. Uvođenje matičnih formalizama, Stokesovi vektori, Muellerove matrice, Johnstonove matrice [29], širi oblasti primene procesa rasejanja i u oblastima integrisane elektronike, gde i dalje postoji trend minijaturizacije, pa je potrebno pratiti rasejanje o grubu površinu. Iako se je tehnika teorijski već „srela“ sa granicama minijaturizacije, rasejanje svetlosti sa izvorima kvantnih generatora uz hiperbrze lasere i nelinearnu optiku ulazi i u mogućnost praćenja transformacije energije od fotona u električne tove [30].

Za kontrolu i procene merne nesigurnosti, bilo bi potrebno znati mnogo detalja o komponentama, kvantnom generatoru, njegovu širini linije, karakteristike detektora i optičke osobine uključenih komponenata: polarizatora, talasnih pločica, razdelnika snopova. Komercijalni sistemi dolaze sa nekim karakteristikama, ali je za probleme profesionalnijih prilaza

nesigurnostima, verovatno potrebno i samostalno uraditi dodatna pomoćna merenja [31], [32], gde eksperimentalno iskustvo dolazi do izražaja. U modelovanju raznih dinamika, koje su predstavljene raznim dimenzionalnostima, potreban je prilaz sa specijalnim funkcijama različitog tipa i stepena. Besselove funkcije su imale svoje posebno mesto u vezi sa generalnim prilazom u vezi sa dosta disciplina.

Ne spominje se tako često, ali se mnoge formule koje se koriste uzimaju bez strogih kriterijuma konvergencije. Za neke slučajeve je u [8],[12],[13] analizirano pitanje konvergencije uopšte, a posebno uopštene konvergencije redova, koji nisu konvergentni u Cauchy-evom smislu reči. Birani su prilazi vezani za nedorečenosti definicija pojedinog tipa, a na primerima od interesa za probleme vezane za čestice, optička vlakana i njihove geometrijske dimenzije i slojevitost. U teorijama rasejanja klasičan prilaz je igrao oblik centra rasejanja (sfera, štapić, Gausovo klupko) je elegantno bio preslikan na biomikroorganizme, a nažalost pre neku godinu i na situacije na svetskom nivou. Nažalost, tehnike stare skoro pola veka su se skoro *zaboravile za delove globa* pogođene pandemijom sa jedne strane, a postojale su mogućnosti za merenje i prepoznavanje virusa i dr. i u našim uslovima.

II. EKSPERIMENT I TEORIJA SA NEPOZNANICAMA

Ovaj opšti prilaz traži korektnim profesionalnim merenjima korektnu interpretaciju i za potrebe primene softvera za obradu podataka, interfejsa i novih softvera u koje se ubacuju potebni atributi za skupove čestica o kojima nije bilo preciznih ulaznih podataka. Postoji više načina u opštim statistikama ili posebno razvijenim medicinskim, *friendly use* slučajeva u građevini, metrologiji, aerometrologiji i drugo.

Ovde će se izabrati više prilaza zasnovana na principima inverzije. Neki od njih će biti samo konstatovani, a neki će biti skicirani sa potrebnim formalizmima, koji se danas mogu koristiti kao rešenje za interpretacije

U slučaju postojanja eksperimentalnih podataka sa odabranim atributima, postoji potreba da se poveže sa nekim drugim zahtevima za odabrane objekte. Objekti se mogu kategorisati i sa drugim atributima, ako se upotrebe razvijeni mehanizmi sa formalizmima koji uključuju termine *kernel* i *funkcije raspodele*.

U jednom od načina, Besselove funkcije su specijalno pogodno za aproksimacije do danas i imaju stalnu upotrebu u raznim disciplinama fizike tehničkih rešavanja i obrade signala. Poslednjih godina se specijalno fokusira pažnja na povišavanje tačnosti, ali i pojednostavljivanja aproksimacija posebno za modifikovane Besselove funkcije. Specijalno je pogodno i za primenu u tretiranju procesa rasejanja zato što su prilazi putem teorije magnetizma, termodinamike (provođenje toplote, odnosno termalni modeli). Mieovo rasejanje samo po sebi sa većim rasponom mogućih prostora dimenzija kako samog centra rasejanja, tako i okoline. U tačnim definicijama i razdvajanjima zadatka: Rayleigh, Brillouina, Ramana i Mie, pored dimenzija centra rasejanja, funkcija odziva sistema od značaja i uglove rasejanja. Kako smo već govorili da je izbor veza sa rasejanjem (light scattering :dinamički i statički), SEM(scanning elektronska i optička mikroskopija) za analize

čestica/prahova u sasvim drugoj oblasti, odnosno u obradi slike.

A. Prvi primer određivanja dimenzije čestica inverzijom eksperimentalnih podataka

Prvi primer se odnosi na slučajeve, kada se traži raspodela dimenzija čestica sa pretpostavljenim oblikom Rosin-Rammlerove raspodele, [33].

Rosin-Rammler raspodela i njena uloga. U posmatranju praktičnih oblasti u kojima je neophodna polazna hipoteza izbor funkcije, koja se koristi za fitovanje eksperimentalnih podataka se vezuje za mnoga imena.

Matematički oblik Rosin-Rammlerove kumulativne funkcije koja je poznata i kao Rosin-Rammler-Sperling-Bennett ili Weibullova ima oblik:

$$R(x) = 1 - e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^n} \quad (1)$$

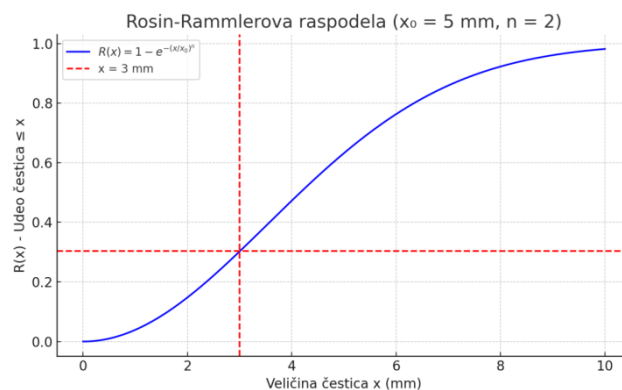
Ako je n veće, raspodela je uža, ako je n manje, raspodela je šira. (Mogla bi da se sprovede diskusija da li se radi o identičnim funkcijama spomenutih imena, ali to se neće razmatrati ovom prilikom.) Od interesa bi bila ocena za opseg x i vrednost x_0 , kao i moguće vrednosti za n kao meru disperzije. Na prvi pogled i relativno jednostavno kvantitativno razmatranje $R(x_0)$, traži se za određivanje približavanja pravim vrednostima. To u stvari predstavlja meru za populaciju.

$$R(x_0) \quad (2)$$

U log-log koordinatama je ova raspodela prava linija.

$$(1 - R(x)) = n \ln x - n \ln x_0 \quad (3)$$

Na slici 1 je predstavljen grafički oblik Rosin-Rammlerove raspodele za parametre $x_0=5\text{mm}$, $n=2$.



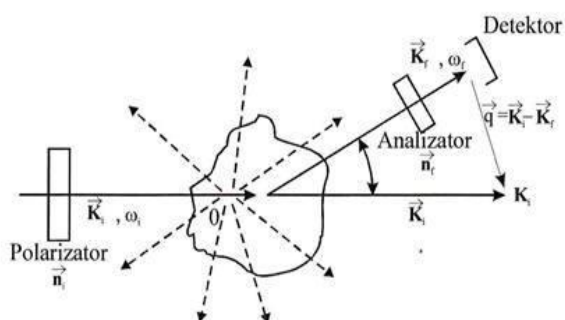
Slika 1 Grafički prikaz Rosin-Rammlerove raspodele sa parametrima $x_0=5\text{mm}$ i $n=2$.

Za slučaj da je detektor na velikoj udaljenosti od centra zapremine rasejanja **R-r** se razvija u red. Eksperimenti sa rasejanjem bi mogli da se izvrše sa raznim geometrijama, jedna od njih je na slici 2, da bismo imali osećaj o kojim se rastojanjima govori, [4],[5].

Svetlost definisane polarizacije $\vec{n}_i$ i talasnog vektora $\vec{k}_i$ je rasejana u svim pravcima za izotropnu okolinu. Samo rasejana svetlost definisanog talasnog vektora $\vec{k}_f$ i polarizacije $\vec{n}_f$ stiže u fotodetektor. Vektor rasejanja $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ se definiše geometrijski. Pošto rasejani talas ima isti talasnu dužinu kao incidentni talas (u aproksimaciji elastičnog rasejanja), $|\vec{k}| \cong |\vec{k}_i|$, sledi iz kosinusne teoreme:

$$(1 - \cos \theta) = (s - \cos \theta)^2, \quad (4)$$

$$\text{da je} \quad \vec{q} = 2\vec{k} \sin \frac{\theta}{2} \quad (5)$$



Slika 2 Geometrija rasejanja sa praćenjem polarizacije i intenziteta rasejanja.

B. Drugi primer određivanja dimenzije čestica inverzijom eksperimentalnih podataka

U slučaju razređenih rasejivača u anomalnoj difrakcionoj aproksimaciji, raspodela dimenzija sfernih čestica je u jednačini Fredholmovog integrala prve vrste:

$$g(k) = \int K(kr)f(r)dr \quad (6)$$

Meri se koeficijent $g(k)$ za različite vrednosti talasnog broja k incidentnog koherentnog izvora zračenja. Preciznije, k reprezentuje talasni broj koji uzima u obzir indeks prelamanja suspenzije.

Merena funkcija $g(k)$ je data sa:

$$g(k) = (\tau(k))/k \quad (7)$$

$f(r)$ je raspodela zapremine

$$f(r) = \left(\frac{4}{3}\right) \pi N(r), \quad (8)$$

$N(r)$ je gustina čestica radijusa r za različite vrednosti talasnog broja.

Smenom $\rho = kr$ kernel u integralu je dat sa:

$$K(\rho) = \frac{3(2\rho - \rho^3)}{2}, \quad (9)$$

odnosno

$$K(\rho) = 3 \left(-\frac{1}{2} \right)^{-1} - \frac{3}{2} \rho^2. \quad (10)$$

Gde je $H_\nu(\rho)$ Struve funkcija reda ν .

Mellinovom transformacijom se dobija $f(r)$, [1].

C. Treći primer. Određivanje dimenzija čestica inverzijom optički transformisanih karakteristika,

Koristeći rasejanje koherentne svetlosti, Mie-ove formule i ortogonalnost Besselovih funkcija, polazi se od dobijenih eksperimentalnih podataka uz operacije sa kernelom, [13], [16], [18]:

$$f(x) = \int K(x, y)g(y)dy \quad \varepsilon(x), \quad (11)$$

gde su

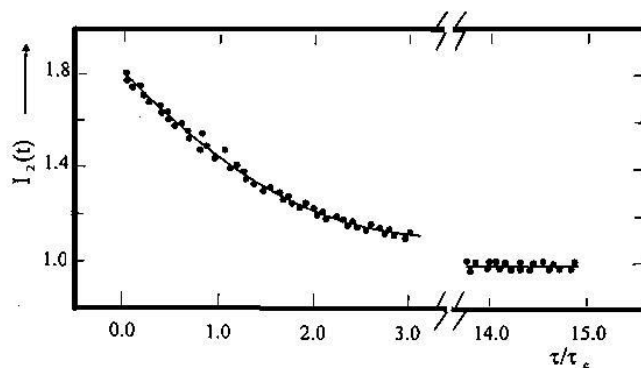
$f(x)$ (θ), izmerena funkcija fotodetektorom pod uglom rasejanja θ ,

$K(x, y) = \left| \frac{(ka\theta)}{2} \right|$, kernel,

J_1 Besselova funkcija prve vrste reda 1,

$g(y) = n(a)$ funkcija koja se određuje,

$\varepsilon(x)$ je posledica greške merenja i šuma



Slika 3. Funkcija korelacije homodina $I_2(t)$ dobijena pri uglu rasejanja od 60° za rastvor koji sadrži $0,17 \text{ mg/cm}^3$ DNA u $(0,15 \text{ M NaCl, pH=8})$ kao funkcija od τ/τ_c gde je $\tau_c = (q^2 D)^{-1}$ vreme korelacije [5].

Na slici 3 je jedan oblik eksperimentalne krive uz procese izbijanja fotona. Ona bi bila tipičan primer da se sa ovim prilazom dobije grafički prilaz sa tačnom matematičkom formulacijom baziranom na propisanoj proceduri [5].

Setimo se da se rasejanje pripisuje fluktuacijama gustine i anizotropije a da se u rastvorima pojavljuje i doprinos i fluktuacija koncentracije. Teorija mora da se upotpuni sa kinetičkim jednačinama (Bolcmanova) koja linearizovana glasi:

ZAKLJUČAK

Rasejanje svetlosti kao proces koji se modeluje sa vekovnom istorijom, prožet je raznim formalizmima matematičkih disciplina u skladu sa razvojem preplitanja teoretskih predviđanja i eksperimentalnih potvrda, ili novih eksperimentalnih činjenica za koje je potrebno naći interpretaciju koja mora da se modeluje sa novim prilazom ili dopunom. I danas postoje predviđene linije u Raman, Rayleigh, Mandelstamm-Brilouin, Mie - podelama koje traže svoje prilaze u vezi sa uključenjem hiperkratkih impulsa i prateće razvijene nelinearne procese. U radu su analizirani korektni matematički prilazi koji mogu biti od interesa za obradu

mnoštva eksperimentalnih merenja, pogotovo za samostalno dizajnirane sisteme merenja i odgovarajuću softversku podršku u kojoj operacija kernela i Rosin-Rammlerove raspodele igraju presudnu ulogu za interpretaciju i povezivanje sa drugim vrstama kvantitativne deskripcije pri koncipiranom eksperimentu sa definisanim tipom rasejanja.

LITERATURA

- [1] Optical Particle Sizing, Ed. G. Gouesbet and G. Grehan, Plenum Press, New York and London, 1988. i 2013.
- [2] A. T. Forrester, R. A. Gudmundsen, P. O. Johnson, "Photoelectric Mixing of Incoherent Light", Phys. Rev. 99, 1691, Published 15 Sept., 1955
- [3] Z. Ch. Duan, Yu-H. Deng et al. "Quantum beat between sunlight and single photons", Nano Lett. 2020 Jan. 8; Epub 2019 Dec. 19.
- [4] B. J. Berne, R. Pecora, Dynamic Light Scattering, J. Chem. Phys. 40, 1604, 1964.
- [5] B. J. Berne, R. Pecora, Dynamic Light Scattering, Courier Corporation, Dover: Mineola, New Yourk, Don Mills, 2000.
- [6] C. Delbert, Scientists Are Pretty Sure They Found a Portal to the Fifth Dimension, may 21, 2025.
- [7] G Zhang, Y. Fan, R. Yang, "Application of the Rosin-Rammler function to describe quartz sandstone particle size distribution produced by high pressure gas rapid unloading at different infiltration pressure", Powder Technology, Vol. 412(2): 117982, Nov. 2022.
- [8] S. Ostojić, Doktorska teza, ETF, Univerzitet u Beogradu, 2000.
- [9] M. Srećković, Doktorska teza, ETF, Univerzitet u Beogradu, 1979.
- [10] Ž. Tomić, Magistarska teza, ETF, Univerzitet u Beogradu, 1995.
- [11] Ž. Tomić, Doktorska teza, ETF, Univerzitet u Beogradu, 2007.
- [12] M. Srećković, S. Jevtić, Z. Fidanovski, Ž. Tomić, N. Slavković, V. Sajfert, Đ. Milanović, S. Ostojić, N. Mitrović, "Laser Applications in Some Ecological Purposes (Laser Cleaning and Isotope Separation) with Linear and Nonlinear Phenomena and Lidar Methods", III International Conference ECOLOGY OF URBAN AREAS, 11th October 2013, Zrenjanin, Serbia, pp. 79-89.
- [13] S. Ostojić, N. Bundaleski, M. Srećković, "On the Convergence of Series in the Calculation of the Laser Beam Intensity Scattered by Cylinder", Balkan Physics Letters, Vol. 10, no. 1, 2002, pp. 17-24.
- [14] M. Srećković et al., Balkan Physics Letters, Vol. 7, no. 2, 1999, pp. 93-102
- [15] M. Srećković, Ž. Tomić, S. Ostojić, "Čestica viđena putem raznih formalizama, aplikacije, nekad i sad u EEE", LXIX Konferencija ETRAN, Čačak, 2025. in press
- [16] S. Ostojić, S. Ristić, Lj. Vulićević, Ž. Tomić, J. Mirčevski, S. Arandelović, Z. Stojiljković, P. Pavlović, D. Nikolić, "Dimenzionisanje čestica od interesa u biomedicine i tehnike dijagnostičiranja", Zbornik radova XLIII ETRAN, Zlatibor, 1999., pp. 187-190.
- [17] M. Srećković, S. Arandelović, S. Ostojić, P. Jovanić, V. Babić, S. Kostić, "Primena lasera u dijagnostičke svrhe u biomedicini i ekologiji", Zbornik radova XLIII ETRAN, Zlatibor, 1999., pp. 183-186.
- [18] S. Ostojić, Ž. Tomić, N. Slavković, M. Davidović, N. Bundaleski, "Generalizacija u prilazu raspodele čestica od interesa u biologiji i ekologiji", Zbornik radova XLV ETRAN, Bukovička banja, 2001., pp. 256-259.
- [19] S. Ostojić, J. Mirčevski, S. Arandelović, Ž. Tomić, N. Cvetković, A. Ilin, "Neke primene rasejanja svetlosti u biomedicini i ekologiji", Zbornik radova XLII ETRAN, Vrnjačka banja, 1998., pp. 188-192.
- [20] J. C. Russ, The image processing handbook, CRC Press, Boca Raton 1994.
- [21] P. W. Barber, S. C. Hill, Light Scattering by Particles: Computational Methods World Scientific, Singapore, 1990.
- [22] M. Srećković, S. Arandelović, D. Nikolić, S. Arandelović, D. Nikolić, B. Đuričić i dr., "Primena terapijskih i dijagnostičkih laserskih tehnika u biomedicini, veterini i farmaciji", Zbornik Etran, Vrnjačka banja, 1998., pp. 177-180.
- [23] Dynamic Light Scattering DLS, microtrack.com/products/particle-size-shape-analysis, <https://www.microtrack.com/products/particle-size-shape-analysis>, 2025
- [24] R. Xu, Particle, Characterisation: Light scattering Methods, Springer Dordrecht, eBook ISBN 978-0-306-47124-7, 11 April 2006.
- [25] Optical fiber characterization, NBS Spec Publ. 637 Vol. 2 US Departement of commerce/ National bureau of standards, 1983.
- [26] A. Chakrabarti, Elements of ordinary Differential Equations and special functions. Wiley Eastern Ltd., New Delhi; 1990
- [27] S. Ostojić, S. Ostojić, Ž. Tomić, P. Jovanić, A. Milosavljević, S. Ristić, J. Ilić, R. Radovanović, M. Živković, "Generalizacija analize prahova od interesa u biomedicine i ekologiji", Zbornik radova XLVIII ETRAN 2004, Čačak, 2004., vol. III, pp. 187-190.
- [28] S. Ostojić, M. Pećanac, B. Kasalica, A. Kovačević, Z. Nešić, "Luminiscencija kroz karakteristične krive i analitičke funkcije", Zbornik radova LXVIII Konferencija ETRAN, Niš, 2024., PS-DIG1.4 - Page 1 of 5
- [29] M. Srećković, S. Ostojić, B. Iričanin, S. Jevtić, Application Of LASER Techniques in Chosen Medicine Discipline and Industrial Fields, unpublished.
- [30] M. Srećković, S. Ostojić, New and less known types of quantum generators of interest for cultural heritage, Hommage à Léonard de Vinci (1519 – 2019), Thematic Proc. of Selected Papers and Abstracts, Beograd 2024., ISBN 978-86-905638-3-8, COBISS.SR-ID 159659017, pp. 58-69 in press
- [31] V. Zarubica, M. Srećković, Realizacija metoda etaloniranja i proračun budžeta merne nesigurnosti merenih instrumenata (merila) u laboratorijama različitih nasmjena, Velarta Beograd, 2012.
- [32] A. Kovačević, Doktorska teza, ETF, Univerzitet u Beogradu, 2007.
- [33] T. Itoh, Y. Wanibe, "Derivation of Number Based Size Distribution from Modified Mass Based Rosin-Rammler Distribution and Estimation of the Various Mean Particle Diameters of Powder" Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol. 29, No. 8, 1988, str. 671-684.

ABSTRACT

The paper presents an analytical approach to determining the distribution functions if the kernel is known. Their normalization using the properties of special functions and methods of complex analysis. The determination of the unknown parameters of the assumed function of the distribution by the numerical methods is performed by developing the function on individual segments in the Taylor series with knowledge of the transformation ratio of the required distribution and corresponding experimental data. The connection between the experimental data and the required distribution function is reflected through a kernel whose mathematical form depends on the type of distribution function, the experiment itself and the method of physical process applied in the experiment. In the integral of the experimental data, one factor of the subintegral function is the required function, and the other function is the kernel, a function with two variables, which can be very complex, so that the distribution function can only be determined by a numerical method assuming its shape. Analytical methods are more successful when scattered laser beam (i. e. coherent beam) is used in the experiment, where the orthogonality of special functions can be used for certain types of scattering, as well as when the distribution of particles whose assumed shape has one of the suitable mathematical forms, such as different logarithmic distributions and others, is required.

MODELING AND DETERMINATION OF DISTRIBUTION FUNCTIONS USING DIFFERENT METHODS AND BOUNDARY CONDITIONS

Stanko Ostojić, Mileša Srećković, Željka Tomić,