

УДК 519.6:677.03

DOI 10.17513/snt.40143

**АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ
МНОГОМЕРНЫХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ
РАДИУСОВ ЭЛЛИПСОВ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ
ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА**

Емельянов В.М., Добровольская Т.А., Емельянов В.В.

*ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет», Курск,
e-mail: dobtatiana74@mail.ru*

Статья посвящена поиску оптимального решения задачи повышения точности распознавания наночастиц металлов при исследовании высокомолекулярных соединений, в частности синтетических волокон. В рамках данной публикации представлены результаты оценки наличия наночастиц серебра при концентрации 17 % на полиэфирных волокнах. Для достижения поставленной цели для исследуемых объектов были получены многомерные системы аналитических уравнений плотностей вероятностей p_0 и p_1 и эквивалентных радиусов R_0 и R_1 с учетом преобразования взаимозависимых данных рамановских поляризационных спектров в независимый вид с применением методов многомерного корреляционного анализа. Для осуществления решения была разработана программная реализация с использованием функционала программы Mathcad. Полученные в ходе решения идентичные значения p_0 и p_1 , а также R_0 и R_1 говорят о достаточно высокой достоверности идентификации наночастиц, а также о том, что в ходе проведения исследования предложен математический инструментарий, дающий возможность для взаимного перерасчета $p_0 \leftrightarrow R_0$ и $p_1 \leftrightarrow R_1$. Таким образом, разработан новый подход к эффективной оценке достоверности идентификации наночастиц серебра при исследовании наномодифицированных химических волокон, который позволяет достичь сходимости баз уравнений как по p , так и по R , в 15-м десятичном знаке, что обеспечивает увеличение точности в 1,2 раза. Практическая значимость исследования выражается в возможности использования полученных результатов для наночастиц других металлов, например золота.

Ключевые слова: наномодификация полимеров, многомерные методы, аналитическое решение, система уравнений, достоверность, эквивалентные радиусы

**ANALYTICAL TRANSFORMATION
OF MULTIDIMENSIONAL SYSTEMS OF EQUATIONS
FOR THE RADII OF ELLIPSES OF RAMAN SPECTR
OF TEXTILE MATERIALS FOR THE DETERMINATION
OF SILVER NANOPARTICLES**

Emelyanov V.M., Dobrovolskaya T.A., Emelyanov V.V.

Southwest State University, Kursk, e-mail: dobtatiana74@mail.ru

The article is devoted to the search for an optimal solution to the problem of increasing the accuracy of recognition of metal nanoparticles in the study of high-molecular compounds, in particular synthetic fibers. This publication presents the results of an assessment of the presence of silver nanoparticles at a concentration of 17% on polyester fibers. To achieve this goal, multidimensional systems of analytical equations of probability densities p_0 and p_1 and equivalent radii R_0 and R_1 were obtained for the studied objects, taking into account the transformation of interdependent data of Raman polarization spectra into an independent form using methods of multidimensional correlation analysis. To implement the solution, a software implementation was developed using the functionality of the Mathcad program. The identical values of p_0 and p_1 , as well as R_0 and R_1 obtained during the solution, indicate a sufficiently high reliability of the identification of nanoparticles, as well as that during the study a mathematical toolkit was proposed that makes it possible for mutual recalculation of $p_0 \leftrightarrow R_0$ and $p_1 \leftrightarrow R_1$. Thus, a new approach has been developed to effectively assess the reliability of the identification of silver nanoparticles in the study of nanomodified chemical fibers, which makes it possible to achieve convergence of the bases of equations in both p and R , in the 15th decimal place, which provides an increase in accuracy by 1.2 times. The practical significance of the study is expressed in the possibility of using the results obtained for nanoparticles of other metals, for example gold.

Keywords: nanomodification of polymers, multidimensional methods, analytical solution, system of equations, reliability, equivalent radii

Введение

Развитие наукоемких производств и инновационных технологий приводит к необходимости постоянного усовершенствования технологических процессов внедрения новейших разработок, позволяющих в целом повысить конкурентоспособность и востребованность продукции предприятий, в том числе в области текстильной промышленности [1]. Так, развивается создание наномодифицированных текстильных материалов различного назначения, что, в свою очередь, приводит к необходимости к постоянному поиску, разработке и внедрению все новых методов, позволяющих выявлять наночастицы с высокой точностью [2, 3].

Для обеспечения высокой разрешающей способности (до 10^{-16}) при идентификации наночастиц металлов применяются методы рамановской спектроскопии с разработкой и внедрением различных способов усиления сигнала [4]. Одним из эффективных методов повышения разрешающей способности является использование корреляционных многомерных взаимозависимостей, а также гипотезы Байеса [5]. Однако следует учитывать, что математическая обработка большого количества исследуемых параметров крайне затрудняет определение взаимозависимых вероятностей и приводит к необходимости преобразования корреляционных параметров в некоррелированный вид. При этом получены математические решения вышеупомянутой задачи в работах [6, 7], однако их недостатком является то, что в них многомерные системы уравнений решаются отдельно для плотностей вероятностей и отдельно для эквивалент-

ных радиусов эллипсов распределений рамановских спектров. Это приводит к необходимости проводить анализ полученных результатов и выбирать исходя из этого оптимальный вариант с учетом лучшей достоверности для оценки наличия наночастиц. Поэтому актуальной является задача разработки математического инструментария для идентификации наночастиц, который позволит одновременно учитывать и плотности вероятностей, и эквивалентные радиусы.

Цель исследования – поиск оптимального решения задачи повышения точности определения наночастиц серебра на текстильных волокнах на основе многомерного аналитического анализа.

Материалы и методы исследования

В качестве основного материала использовались наномодифицированные полиэфирные волокна, обработанные 17 %-ным раствором коллоидного серебра. В работе применялись методы многомерного математического анализа для обработки данных рамановских спектров исследуемых материалов и технология компьютерного моделирования в программе Mathcad.

Для достижения поставленной цели проводимого исследования необходимо выполнить аналитическое преобразование многомерных систем уравнений с учетом перевода данных в независимый вид. Разработана аналитическая форма уравнений вероятности пересечения эллипсов интенсивностей одного пика рамановского спектра волокон с наночастицами и без наночастиц серебра:

$$f(x, y) := \left[\left[\ln \left[\frac{1}{(2 \cdot \pi) \cdot (|Kr1|)^{0.5}} \right] + \frac{-1}{2} \cdot \left[\left(\frac{x - \bar{X}1_i}{\sigma X1_i} \quad \frac{y - \bar{Y}1_j}{\sigma Y1_j} \right) \cdot Kr1^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \frac{x - \bar{X}0_i}{\sigma X0_i} \\ \frac{y - \bar{Y}1_j}{\sigma Y0_j} \end{pmatrix} \right] \right] \right] \cdot 1$$

$$\left[\left[\ln \left[\frac{1}{(2 \cdot \pi) \cdot (|Kr0|)^{0.5}} \right] + \frac{-1}{2} \cdot \left[\left(\frac{x - \bar{X}0_i}{\sigma X0_i} \quad \frac{y - \bar{Y}0_j}{\sigma Y0_j} \right) \cdot Kr0^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \frac{x - \bar{X}0_i}{\sigma X0_i} \\ \frac{y - \bar{Y}1_j}{\sigma Y0_j} \end{pmatrix} \right] \right] \right] \cdot 1$$

), (1)

$$g(x, y) := \left[\begin{array}{l} \left[\frac{(x - \bar{X}0_i)}{(1 - rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma X0_i)^2} \right] \left[\frac{(y - \bar{Y}0_i)}{(1 - rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma Y0_i)^2} \right] \\ \left[\frac{(x - \bar{X}1_i)}{(1 - rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma X1_i)^2} \right] \left[\frac{(y - \bar{Y}1_i)}{(1 - rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma Y1_i)^2} \right] \end{array} \right]. \quad (4)$$

Преобразование уравнений (3), (4) в аналитическую форму позволяет получить систему аналитических уравнений (5), (6):

$$f(x, y) := \left[\frac{(x - \bar{X}1_i)^2}{(1 - rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma X1_i)^2} + \frac{(y - \bar{Y}1_j)^2}{(1 + rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma Y1_j)^2} \right] - \left[\frac{(x - \bar{X}0_i)^2}{(1 - rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma X0_i)^2} + \frac{(y - \bar{Y}0_j)^2}{(1 + rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma Y0_j)^2} \right], \quad (5)$$

$$g(x, y) := \left[\frac{(x - \bar{X}0_i)}{(1 - rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma X0_i)^2} \right] \cdot \left[\frac{(y - \bar{Y}1_j)}{(1 + rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma Y1_j)^2} \right] - \left[\frac{(x - \bar{X}1_i)}{(1 - rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma X1_i)^2} \right] \cdot \left[\frac{(y - \bar{Y}0_j)}{(1 + rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma Y0_j)^2} \right]. \quad (6)$$

Результаты исследования и их обсуждение

На основании системы аналитических уравнений (5) и (6) в математической программе Mathcad в работе было получено их решение относительно $p1$ и $p0$:

$$i: = 3 \quad j: = 4$$

Given

$$f(x,y) = 0 \quad g(x,y) = 0$$

$$v2: = \text{Find}(x,y)$$

$$v2 = \begin{pmatrix} 573.769592 \\ 3296.83997 \end{pmatrix}$$

$$f(v2_0, v2_1) = 2.8421709430404007 \times 10^{-14}$$

$$g(v2_0, v2_1) = 3.2526065174565133 \times 10^{-19}$$

$$R1 := \left[\frac{(v2_0 - \bar{X}1_i)^2}{(1 - rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma X1_i)^2} + \frac{(v2_1 - \bar{Y}1_j)^2}{(1 + rXY1_{i,j}) \cdot (\sigma Y1_j)^2} \right]^{0.5}, \quad (7)$$

$$R0 := \left[\frac{(v2_0 - \bar{X}0_i)^2}{(1 - rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma X0_i)^2} + \frac{(v2_1 - \bar{Y}0_j)^2}{(1 + rXY0_{i,j}) \cdot (\sigma Y0_j)^2} \right]^{0.5}, \quad (8)$$

$$p1 := \frac{1}{(2 \cdot \pi) \cdot [(1)^{0.5}]} \cdot e^{\frac{-1}{2} \cdot R1^2}; \quad p0 := \frac{1}{(2 \cdot \pi) \cdot [(1)^{0.5}]} \cdot e^{\frac{-1}{2} \cdot R0^2}, \quad (9)$$

$$p1 = 5.040679571258114 \times 10^{-28} \quad p0 = 5.040679571258114 \times 10^{-28} \quad (10)$$

$$R1 := 2^{0.5} \cdot (-\ln(p1) - \ln(2 \cdot \pi))^{0.5} \quad (11)$$

$$R0 := 2^{0.5} \cdot (-\ln(p0) - \ln(2 \cdot \pi))^{0.5} \quad (12)$$

При оценке $R1$ и $R0$ по аналитическому выражению (7) и (8) получаем

$$R0 = 11.046896815745413 \text{ и}$$

$$R1 = 11.046896815745413$$

очень близкие значения.

По аналитическому выражению (9) получаем для

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28}$$

практически одинаковые значения.

С использованием аналитических выражений (11) и (12) были определены

$$R0 = 11.046896815745413,$$

$$R1 = 11.046896815745413$$

такие же и равные по значению.

Отсюда можно сделать вывод: взаимное применение выражений $p1$ (9) и $R1$ (11),

а также $R0$ (1), $p0$ (9), $p1$ (10) и $R0$ (12) дает возможность их использовать для взаимного перерасчета $p0 \leftrightarrow R0$ и $p1 \leftrightarrow R1$.

Соответственно, можно констатировать, что уравнения (1)–(6) составлены без ошибок, а решение их проверено и показало высокую достоверность по (10)

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28}.$$

Проверка по (11) и (12) показала также высокую достоверность составления и решения системы уравнений (1)–(12).

Для проверки и подтверждения составления и решения системы уравнений (1)–(12) построено графическое изображение пересечения эллипсов рамановских спектров в точке

$$v2_0 = 573.769592 \text{ и } v2_1 = 3296.83997,$$

которое представлено на рис. 1.

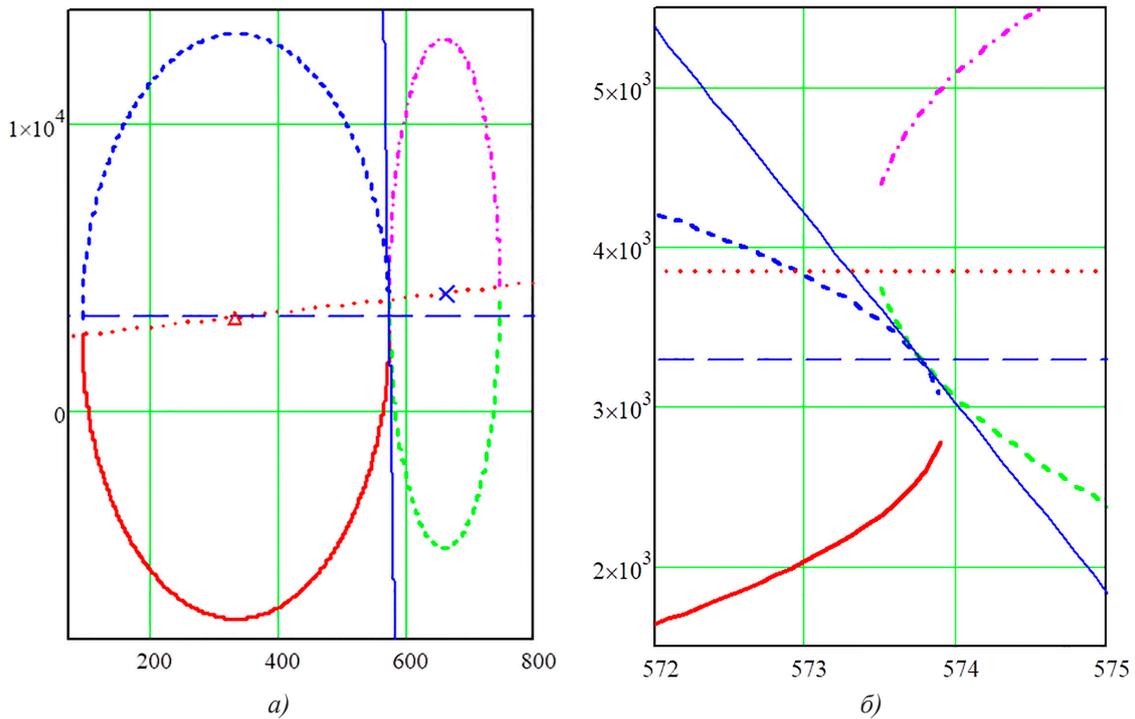


Рис. 1. Эллипсы распределения рамановских спектров полиэфирных волокон с наночастицами серебра и без наночастиц с преобразованием двумерных параметров в независимый вид: а) общий вид пересечения; б) увеличенный фрагмент

При этом изображение выполнено при привязке распределения данных к оси $MENY0_j - - MENY1_j$ для

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$R0 = 11.046896815745413,$$

$$R1 = 11.046896815745413.$$

Аналитическое и графическое решение системы дифференциальных уравнений показало высокую достоверность:

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28} \text{ и}$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28}.$$

И следует подчеркнуть, что нет необходимости составлять и решать систему уравнений для преобразованных не корреляционных уравнений отдельно для R0, R1 и отдельно для p0, p1. Решение возможно по R0, R1 для p0, p1 с перерасчетом по аналитическим выражениям (11) и (12). Это значительно упрощает сложные составления и решения систем дифференциальных нелинейных корреляционных уравнений. Это видно по уравнениям (5) и (6), где нет члена $\ln[1/2\pi \cdot (1)^{0.5}]$, когда уравнение (3) превращается в уравнение (5).

Для проверки точности вычисленных значений R0 и R1 при составлении и решении системы некорреляционных уравнений по p0 и p1 покажем матрицу значений p0 и p1 для десятизначных обратных значений (13) и матрицу столбцов с максимальными десятизначными после запятой значениями строк R0 и p0. Это необходимо для более удобной формы оценки эффекта от преобразования системы уравнений в некорреляционный вид (1)–(12), при этом используем термин достоверность вместо плотностей вероятностей:

$$QL00 = \log(1/p0). \quad (13)$$

Так как использовать приходится степенные выражения с очень большими значениями для достоверности и плотностей вероятностей, то удобнее применять их логарифмические значения с использованием выражения (13).

Эквивалентные радиусы эллипсов распределений рамановских спектров волокон с наночастицами серебра и без наночастиц, полученные в ходе проведения исследования, приведены на рис. 2 для удобства в отдельных матрицах столбцов R01–R09 из-за очень большого объема 17-разрядных десятичных значений в каждом члене матрицы столбца.

R01 :=	5.707734728170749 5.396565962471926 6.0029994230462895 5.886590062577979 8.44605477837288 5.789292923361316 8.504230864224802 3.55823703131522 4.215504172969118	R02 :=	2.2744052370939056 2.1952110532084523 2.3592771242231327 2.2941379579279233 2.68917219029442 2.2899680753173453 2.739357515150814 1.8378339285900358 2.019733153319345	R03 :=	5.221467218659843 4.985323679584551 5.091331345991233 5.354349629054898 6.943639179889043 5.270681499574881 6.587038766637885 3.583988471702071 4.281163173274227
R04 :=	7.706900989307935 7.49195409683786 7.483662104227207 7.996285256373946 11.046896815745413 7.793774212974175 9.940087277790411 4.846171662436274 6.056166010283804	R05 :=	4.302190169726401 4.475977089416408 4.313013736970004 4.393927656498255 5.107358951016776 4.362520851507088 4.839141679725009 3.3388987571647917 3.9377601301441807	R06 :=	6.73367602519356 6.342088577424662 6.657355327608405 6.937647044607666 8.857705834994617 6.791551371671851 8.634599969067969 4.260366769528937 5.164376103430487
R07 :=	4.104508505425384 4.079993279053314 4.0560032292131085 4.208174075407704 5.032709754491025 4.14044698375341 4.707769873704058 2.978549298397569 3.4758202979927058	R08 :=	4.0141834292000524 4.006948748752083 3.946126385343495 4.022813073371037 4.496147406534418 4.057890639306979 4.408457078623115 4.41209357829349 4.642836499702436	R09 :=	4.133681873276066 4.1589914953954965 4.120338378107388 4.207446778497587 5.007797033227559 4.188551674764319 4.8461543391581285 3.9325468433883257 4.358947441827054

Рис. 2. Значения эквивалентных радиусов для девяти пиков рамановского спектра

Так как здесь приведены радиусы эллипсов распределения только для данных пиков рамановского спектра для диэлектрика волокон без наночастиц R0 при решении систем уравнений, а для волокон с наночастицами значения радиусов R1 практически равны R1~ R0, то в этом исследовании нет пока необходимости приводить значения матриц R1.

В дальнейших исследованиях точностей решения системы уравнений (1)–(12) будет необходимость использовать совместно и R0 и R1.

Вычисление значений p01–p09, представленных на рис. 3, проводилось по выражениям (9)–(10).

По рис. 3 видно, что приведены только значения p0 для девяти пиков рамановско-

го спектра волокон без наночастиц p0. Поскольку для волокон с наночастицами значения плотности вероятностей p1 практически равны p1~ p0, то в этом исследовании нет пока необходимости приводить значения матриц p1.

В дальнейших исследованиях точностей решения системы уравнений (1)–(12) будет необходимость использовать совместно и p0 и p1.

Матрица, представленная выражением (16), приведена здесь с уменьшенным количеством десятичных разрядов в каждом 81 члене из-за удобства представления достоверности. Вычисления были осуществлены с использованием компьютерных технологий в программе Mathcad по 16 разрядов после запятой с максимальным разрешением.

$$\text{QL00} = \begin{pmatrix} 7.872454 & 1.921465 & 6.718421 & 13.695927 & 4.817323 & 10.644155 & 4.456457 & 4.297219 & 4.508646 \\ 7.122143 & 1.844602 & 6.195038 & 12.986519 & 5.148588 & 9.532295 & 4.412888 & 4.284617 & 4.554221 \\ 8.623298 & 2.006862 & 6.426996 & 12.959554 & 4.837572 & 10.422228 & 4.370504 & 4.179578 & 4.484729 \\ 8.322754 & 1.941041 & 7.023587 & 14.6827 & 4.990555 & 11.249682 & 4.643582 & 4.312279 & 4.642252 \\ 16.288561 & 2.368512 & 11.267744 & 27.297511 & 6.462491 & 17.835325 & 6.298122 & 5.187886 & 6.243805 \\ 8.076068 & 1.93689 & 6.830548 & 13.988337 & 4.930837 & 10.814133 & 4.5208 & 4.37383 & 4.607803 \\ 16.50269 & 2.42767 & 10.219999 & 22.253486 & 5.88318 & 16.987878 & 5.610835 & 5.018327 & 5.897929 \\ 3.547492 & 1.531624 & 3.58743 & 5.897965 & 3.21899 & 4.73956 & 2.724657 & 5.025292 & 4.156346 \\ 4.65699 & 1.683993 & 4.778132 & 8.762521 & 4.165255 & 6.589666 & 3.421607 & 5.478991 & 4.924069 \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$\begin{matrix}
 \text{p01} = \begin{pmatrix} 1.3413624001142253 \times 10^{-8} \\ 7.548445015885278 \times 10^{-8} \\ 2.3806837444066358 \times 10^{-9} \\ 4.756049982434571 \times 10^{-9} \\ 5.145635372464626 \times 10^{-17} \\ 8.393289304945293 \times 10^{-9} \\ 3.142750017787239 \times 10^{-17} \\ 2.8347051267886605 \times 10^{-4} \\ 2.202979324018202 \times 10^{-5} \end{pmatrix} &
 \text{p02} = \begin{pmatrix} 1.1982156937081627 \times 10^{-2} \\ 1.430204349076487 \times 10^{-2} \\ 9.84323028444704 \times 10^{-3} \\ 1.1454053989681887 \times 10^{-2} \\ 4.280435163098114 \times 10^{-3} \\ 1.1564051985296875 \times 10^{-2} \\ 3.7353383916922414 \times 10^{-3} \\ 2.9401962918005604 \times 10^{-2} \\ 2.070172866692817 \times 10^{-2} \end{pmatrix} &
 \text{p03} = \begin{pmatrix} 1.9123992905178737 \times 10^{-7} \\ 6.382069957185082 \times 10^{-7} \\ 3.7411428784261886 \times 10^{-7} \\ 9.471371310435568 \times 10^{-8} \\ 5.398286126836426 \times 10^{-12} \\ 1.4772420203969676 \times 10^{-7} \\ 6.025612294943752 \times 10^{-11} \\ 2.585649213681234 \times 10^{-4} \\ 1.6667395294179272 \times 10^{-5} \end{pmatrix}
 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix}
 \text{p04} = \begin{pmatrix} 2.014060444497219 \times 10^{-14} \\ 1.0315278451213838 \times 10^{-13} \\ 1.097604301942496 \times 10^{-13} \\ 2.0763475775391558 \times 10^{-15} \\ 5.040679571258114 \times 10^{-28} \\ 1.0272198663871268 \times 10^{-14} \\ 5.5784587435592785 \times 10^{-23} \\ 1.2648374307182624 \times 10^{-6} \\ 1.727742077402006 \times 10^{-9} \end{pmatrix} &
 \text{p05} = \begin{pmatrix} 1.5229180593255571 \times 10^{-5} \\ 7.102508553676823 \times 10^{-6} \\ 1.4535439107501706 \times 10^{-5} \\ 1.021986490791739 \times 10^{-5} \\ 3.4475397381758457 \times 10^{-7} \\ 1.1726361202664894 \times 10^{-5} \\ 1.3086386433656891 \times 10^{-6} \\ 6.039618515511513 \times 10^{-4} \\ 6.835099156805243 \times 10^{-5} \end{pmatrix} &
 \text{p06} = \begin{pmatrix} 2.2690529695024693 \times 10^{-11} \\ 2.935653545515735 \times 10^{-10} \\ 3.782438764947959 \times 10^{-11} \\ 5.627530939763296 \times 10^{-12} \\ 1.461083491327074 \times 10^{-18} \\ 1.5341460998264462 \times 10^{-11} \\ 1.0283043685589353 \times 10^{-17} \\ 1.8215465501952288 \times 10^{-5} \\ 2.5723717048578236 \times 10^{-7} \end{pmatrix}
 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix}
 \text{p07} = \begin{pmatrix} 3.4957689402604224 \times 10^{-5} \\ 3.864668157467322 \times 10^{-5} \\ 4.260844162525125 \times 10^{-5} \\ 2.272053104611071 \times 10^{-5} \\ 5.033597051280723 \times 10^{-7} \\ 3.0143908981071577 \times 10^{-5} \\ 2.449992344057263 \times 10^{-6} \\ 1.885136535834826 \times 10^{-3} \\ 3.787855143111549 \times 10^{-4} \end{pmatrix} &
 \text{p08} = \begin{pmatrix} 5.044074040542075 \times 10^{-5} \\ 5.192572613621018 \times 10^{-5} \\ 6.613358866273594 \times 10^{-5} \\ 4.872152771315901 \times 10^{-5} \\ 6.488054655782769 \times 10^{-6} \\ 4.228342948109759 \times 10^{-5} \\ 9.58679455690356 \times 10^{-6} \\ 9.434268258505183 \times 10^{-6} \\ 3.3190151922013675 \times 10^{-6} \end{pmatrix} &
 \text{p09} = \begin{pmatrix} 3.0999484546956237 \times 10^{-5} \\ 2.7911208937244876 \times 10^{-5} \\ 3.275446591176592 \times 10^{-5} \\ 2.279016981695555 \times 10^{-5} \\ 5.70420157399834 \times 10^{-7} \\ 2.467155413382874 \times 10^{-5} \\ 1.264943620086095 \times 10^{-6} \\ 6.976770013139683 \times 10^{-5} \\ 1.1910520572256011 \times 10^{-5} \end{pmatrix}
 \end{matrix}$$

Рис. 3. Значения плотностей вероятности для девяти пиков рамановского спектра

При умножении независимых вероятностей $P_0 = \prod P_i$ с использованием их логарифмических выражений (13) были получены суммы логарифмов достоверностей SQL00 (17) из (16)

$$SQL00 := \sum_{j=0}^8 \sum_{i=0}^8 (QL00_{i,j}), \quad SQL00 = 564.1545106983666. \quad (17)$$

А для одного пика в среднем получены следующие результаты:

$$SQL01 := \frac{SQL00}{81}, \quad SQL01 = 6.964870502448971. \quad (18)$$

При этом плотности вероятностей будут иметь следующие значения:

$$\text{для общей системы } p00 = 10^{-564.1545106983666}, \quad (19)$$

для одного пика рамановского спектра средняя плотность вероятностей составляет

$$p001 = 10^{-6.964870502448971}. \quad (20)$$

Если рассмотреть составление и решение системы уравнений при привязке данных к оси $MENY0_j = 0$ – $MENY1_j = 0$ по сравнению с системой уравнений с привязкой данных к оси $MENY0_j$ – $MENY1_j$ (19) и (20), то получим матрицу достоверностей $QL00\phi$ (21):

$$QL00\phi = \begin{pmatrix} 7.839428 & 1.867104 & 6.680198 & 13.658752 & 4.789307 & 10.597958 & 4.439486 & 4.263427 & 4.486176 \\ 7.086816 & 1.790387 & 6.155564 & 12.949033 & 5.126121 & 9.485955 & 4.395011 & 4.254133 & 4.533578 \\ 8.594931 & 1.959775 & 6.389787 & 12.923 & 4.811417 & 10.379806 & 4.352175 & 4.146386 & 4.462273 \\ 8.288637 & 1.883804 & 6.984534 & 14.64483 & 4.962471 & 11.200934 & 4.627727 & 4.277672 & 4.619708 \\ 16.21072 & 2.260309 & 11.183677 & 27.219174 & 6.400759 & 17.741135 & 6.278102 & 5.102222 & 6.191271 \\ 8.040943 & 1.881017 & 6.790421 & 13.949028 & 4.901791 & 10.766108 & 4.502303 & 4.339564 & 4.584438 \\ 16.44729 & 2.350188 & 10.155445 & 22.189571 & 5.829053 & 16.919797 & 5.579132 & 4.953489 & 5.853229 \\ 3.481052 & 1.444172 & 3.511767 & 5.828915 & 3.131421 & 4.676961 & 2.634245 & 4.973109 & 4.090588 \\ 4.545381 & 1.540393 & 4.641202 & 8.640078 & 3.992502 & 6.487543 & 3.240394 & 5.375471 & 4.796605 \end{pmatrix} \quad (21)$$

На следующем этапе выполнения исследования при умножении независимых вероятностей $P_0 = \prod P_i$ при использовании их логарифмических выражений (13) получены суммы логарифмов достоверностей $SQL00\phi$ (22) из (21):

$$SQL00\phi := \sum_{j=0}^8 \sum_{i=0}^8 (QL00\phi), \quad SQL00\phi = 559.5602718672014. \quad (22)$$

А для одного пика в среднем получены результаты:

$$SQL01\phi = SQL00\phi/81, \quad SQL01\phi = 6.908151504533351. \quad (23)$$

При этом плотности вероятностей будут иметь следующие значения:

$$\text{для общей системы } - p0\phi = 10^{-559.5602718672014}, \quad (24)$$

для одного пика рамановского спектра средняя плотность вероятностей составляет

$$p01\phi = 10^{-6.908151504533351}. \quad (25)$$

Таким образом, при составлении и решении системы уравнений при привязке данных к оси $MENY0_j$ – $MENY1_j$ достоверность $SQL00$ дает более высокое значение, чем $SQL00\phi$, полученная при привязке данных к оси $MENY0_j = 0$ – $MENY1_j$.

Заключение

В работе предложен метод аналитического представления преобразованной системы

корреляционных уравнений плотностей вероятностей в некорреляционные уравнения эквивалентных радиусов эллипсов разброса рамановских спектров полиэфирных материалов как с наночастицами серебра, так и без них.

При решении по аналитическому выражению системы уравнений эквивалентных радиусов получены очень близкие значения максимального пика

$$R0 = 11.046896815745413 \text{ и}$$

$$R1 = 11.046896815745413.$$

По аналитическому выражению для системы уравнений плотностей вероятностей получены

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28}$$

практически также одинаковые значения.

С использованием аналитических выражений

$$R0 = f(p0) \text{ и } R1 = f(p1)$$

вычислены такие же и равные значения

$$R0 = 11.046896815745413,$$

$$R1 = 11.046896815745413.$$

Таким образом, обеспечивается сходимость баз уравнений $p0$ и $p1$, $R0$ и $R1$ в 15-м десятичном знаке.

Отсюда следует, что взаимное применение выражений $p1$ и $R1$, а также $R0$, $p0$ дает возможность их использовать для взаимного перерасчета $p0 \leftrightarrow R0$ и $p1 \leftrightarrow R1$. Это позволяет для оценки наличия наночастиц использовать только систему для эквивалентных радиусов.

Соответственно, можно сделать вывод, что уравнения системы составлены без ошибок, а решение их проверено и показало высокую достоверность по

$$p0 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28},$$

$$p1 = 5.040679571258114 \cdot 10^{-28}.$$

Для проверки и подтверждения достоверности составления и решения системы уравнений построено графическое изображение пересечения эллипсов рамановских спектров в точке

$$v_{2_0} = 573.769592 \text{ и } v_{2_1} = 3296.83997$$

решения системы уравнений.

Получена при умножении независимых вероятностей $P_0 = \prod P_i$ с использованием их логарифмических выражений сумма логарифмов достоверностей

$$SQL00 = 564.1545106983666,$$

а для одного пика в среднем получено значение

$$SQL01 = 6.964870502448971.$$

При таких значениях логарифмических выражений плотности вероятностей будут иметь следующие значения:

$$\text{для общей системы } p00 = 10^{-564.1545106983666},$$

а для одного пика рамановского спектра средняя плотность вероятностей следующая:

$$p001 = 10^{-6.964870502448971}.$$

Дополнительно рассмотрено составление и решение системы уравнений при различных привязках данных к осям. В результате было установлено, что при привязке данных к оси $MENY0$ – – $MENY1$ достоверность $SQL00$ по сравнению с системой уравнений с привязкой данных к оси $MENY0 = 0$ – – $MENY1 = 0$ с достоверностью $SQL00ф$ дает более высокое значение достоверности $SQL00$, чем значение $SQL00ф$.

На основании полученных результатов для идентификации наночастиц различных концентраций коллоидного серебра возникает необходимость в дополнительном проведении исследований для повышения достоверности и эффективности распознавания наночастиц золота на диэлектрических и полупроводниковых волокнах.

Список литературы

1. Есиркепова А.М., Ахметова Г.Ж., Садыков А.С., Абилкасым А.Б., Аширбаева С.Б. Влияние инновационных технологий и материалов на развитие текстильной промышленности // Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности. 2020. № 3 (387). С. 52–60.
2. Хамматова В.В., Гайнутдинов Р.Ф. Методы наномодифицирования коллоидным раствором наночастиц серебра текстильных материалов для специальной одежды // Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности. 2022. № 1 (397). С. 201–205. DOI: 10.47367/0021-3497_2022_1_201.
3. Кудрявцева Е.В., Бурина А.А., Ильина П.А., Аким Э.Л., Таразанов А.А. Модификация натуральных текстильных материалов биметаллическими наночастицами и их практическое применение // Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности. 2023. № 5 (407). С. 201–205. DOI: 10.47367/0021-3497_2023_5_132.
4. Кукушкин В.И., Гришина Я.В., Соловьев В.В., Кукушкин И.В. Размерный плазмон-поляритонный резонанс и его вклад в гигантское усиление рамановского рассеяния света // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. № 9–10. С. 637–642. DOI: 10.7868/S0370274X17100125.
5. Hadi Rouhbakhsh, Nahid Farkhari, Sohrab Ahmadi-kandjani, Saeed Karima, Habib Tajalli, Mohammad Rashidi. A Low-Cost Stable SERS Substrate Based on Modified Silicon Nanowires // Plasmonics. 2019. Vol. 14. P. 869–874. DOI: 10.1007/s11468-018-0868-2.
6. Emelyanov V.M., Dobrovolskaya T.A., Emelyanov V.V. Automatic Solution of the System of Equations of the Equivalent Radius of the Distribution Ellipses of Dielectric Materials for the Recognition of Gold Nanoparticles // IEEE Xplore: 2021 International Seminar on Electron Devices Design and Production (SED) (Prague, Czech Republic, 27–28 April 2021). DOI: 10.1109/SED51197.2021.9444524.
7. Емельянов В.М., Добровольская Т.А., Емельянов В.В. Математическое преобразование многомерных коррелированных данных в некоррелированные рамановские спектры для увеличения чувствительности определения наночастиц серебра на поверхности текстильных материалов // Современные наукоемкие технологии. 2024. № 4. С. 21–27. DOI: 10.17513/snt.39968.