ИДЕНТИФИКАЦИЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ РАЗМЕРОВ НАНО– И МИКРОПОРОШКОВ

И.С. Бондарчук¹, С.С. Титов², С.С. Бондарчук^{2,3}

¹ Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Национальный исследовательский Томский государственный университет", г. Томск

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических
технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), г. Бийск

³ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Томский
государственный педагогический университет", г. Томск

В работе предлагаются два новых эффективных алгоритма, реализованных коротким программным кодом в MS Excel, предназначенных для идентификации и характеристики размеров нано– и микропорошков частиц в виде обобщенного гамма или логнормального распределений по данным опытных гистограмм. Предлагаемый метод представляет собой новый и достаточно общий подход к решению обратных задач идентификации параметров дифференциальных функций распределения по экспериментальным данным на основе минимизации функционала, представляющего собой коэффициент детерминации.

Алгоритм реализован формулами (менее 10) наиболее распространенного инструментария (электронных таблиц MS Excel без использования макросов), позволяющего исследователям, не обладающим навыками профессиональных программистов, простоту проверки и воспроизведения представленного материала, а также возможность модификации кода для решения более широкого круга задач. Текст статьи и комментарии на рабочих листах скриншотов представляют собой готовые инструкции по решению задач идентификации функций распределения и характеристики размеров нано– и микропорошков.

Ключевые слова: частицы, порошки, функция распределения, обобщенное гамма-распределение, логнормальное распределение, момент функции распределения, идентификация функции распределения, характеристика размеров частиц, электронные таблицы, программный код.

ВВЕДЕНИЕ

В связи с интенсивным развитием порошковых микро- и нанотехнологий [1], моделирования в механике многофазных потоков [2-5], оптимизации процессов производства частиц [6-10], исследования механизмов твердофазных химических реакций [11], разработки методов диагностики и характеристики свойств порошковых субстанций [12-14], актуальными являются задачи адекватного описания спектра размеров полидисперсных систем, идентификации экспериментально полученных распределений частиц по размерам (как правило, в виде опытных гистограмм), а также их аппроксимации подходящей функцией плотности вероятности.

Содержание частиц различных размеров в полидисперсной системе полностью определяется заданием ее функции распределения от диаметра d , характеризующего размер индивидуальной частицы [15]. Диаметр d рассматривается как переменная распределения одномерной случайной величины $f(d)$ – суть дифференциальной функции счетного (либо массового) распределения (в зависимости от исходных данных). При этом $df = f(d)dd$ – доля количества (либо массы) частиц, размеры которых

лежат в диапазоне $(d, d + dd)$; функция имеет смысл плотности распределения вероятности, и, соответственно, $\int_0^{\infty} f(x)dx = 1$.

ТЕОРИЯ И МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЙ

При практическом определении характеристик порошков первичные результаты обычно представляются в виде гистограммы [16], где каждый из N столбцов (характеризуемых координатами центра столбца d_k) задает абсолютную или относительную (процентную) частоту числа (или массы) частиц y_k .

Функция плотности вероятности распределения частиц (счетного, массового или иного) по размерам $f(d)$ определяет вероятность количества (или массы) частиц, имеющих размер от $d_1 < d < d_2$ значением $\int_{d_1}^{d_2} f(x)dx$, а суммарное количество (или масса) частиц в данном диапазоне размеров рассчитывается по соотношению [15]

$$Y_{\Sigma} \int_{d_1}^{d_2} f(x)dx, \quad Y_{\Sigma} = \sum y_i.$$

В этом случае значение $\hat{y}_k$ в приближении непрерывности функции распределения $f(d)$ определяется уравнением

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^N y_i \cdot \int_{d_k - \Delta d/2}^{d_k + \Delta d/2} f(x) dx, \quad (1)$$

где Δd – ширина столбца гистограммы.

По известной функции распределения для характеристики дисперсных сред используются их осредненные характеристики, определяемые следующим выражением [15]:

$$d_{mn} = \left[\int_0^\infty x^m f(x) dx / \int_0^\infty x^n f(x) dx \right]^{\frac{1}{m-n}} \quad (2)$$

где m, n – целые числа, означающие порядок момента функции распределения.

Наиболее распространенными из них являются следующие средние размеры:

d_{10} – среднеарифметический (среднесчетный, средневероятный);

d_{20} – среднеквадратичный; средняя поверхность частицы равна $\bar{S} = \pi d_{20}^2$;

d_{30} – среднеобъемный; средний объем частицы равен $\bar{V} = \pi d_{30}^3/6$;

d_{32} – средний объемно-поверхностный;

d_{43} – среднemasсовый.

Анализ литературных данных по гранулометрическому составу различных полидисперсных систем показывает, что практически все порошки металлов с унимодальной (одновершинной) функцией распределения могут быть описаны с помощью либо обобщенного гамма-распределения (ОГР, GGD) [15], либо логарифмически нормального распределения (ЛНР, LND) [17].

Формула для ОГР с параметрами $\alpha, \beta, b > 0$ имеет вид

$$f(d) = ad^\alpha \exp(-bd^\beta), \quad a = \beta b^{\frac{\alpha+1}{\beta}} / \Gamma\left(\frac{\alpha+1}{\beta}\right), \quad d > 0, \quad (3)$$

где $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция Эйлера.

Исходя из зависимости (3) для моментов d_{mn} из (2) можно получить

$$d_{mn} = b^{-\frac{1}{\beta}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{\alpha+1+m}{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{\alpha+1+n}{\beta}\right)} \right]^{\frac{1}{m-n}}. \quad (4)$$

Координата максимума функции распределения d_0 из соотношения (2) определяется как

$$d_0 = \left(\frac{\alpha}{b\beta}\right)^{1/\beta} \quad (5)$$

а для ширины δ и эксцентриситета ε распределения авторами ранее в работе [15] были получены следующие оценки

$$\delta \cong \frac{2.34}{\sqrt{\alpha\beta}} d_0, \quad \varepsilon = 0.304 \sqrt[8]{\alpha}. \quad (6)$$

Из ОГР (3) можно получить большинство

встречающихся в литературе распределений, которые выражаются через параметры α, β, b – распределения Смолуховского-Шумана, Маршалла-Пальмера, Максвелла-Больцмана, Наукиямы-Танасавы, Розина-Раммлера, Вейнинга и др. [15].

Логарифмически нормальное распределение, для которого логарифмы размеров частиц распределены по нормальному закону, определяется параметрами μ и σ и имеет вид

$$f(d) = \frac{1}{d} \cdot \frac{\exp\left[-\frac{(\ln d - \ln \mu)^2}{2 \ln^2 \sigma}\right]}{\ln \sigma \sqrt{2\pi}}, \quad d > 0. \quad (7)$$

Непосредственно из зависимости (7) для характерных размеров d_0, δ, d_{mn} и ε из уравнения (2) можно получить

$$d_{mn} = \exp\left(\mu + \frac{m+n}{2} \sigma^2\right), \quad d_0 = \exp(\mu - \sigma^2), \quad \delta = 2 \operatorname{sh}(\sqrt{\ln 4} \sigma), \quad \varepsilon = [1 + \exp(\sqrt{\ln 4} \sigma)]^{-1}. \quad (8)$$

Для того, чтобы определить осредненные характеристики порошка через моменты (2) функции распределения, необходимо идентифицировать эту функцию по гистограмме – результату предварительного анализа исследуемых частиц.

Параметры функции $f(d)$ по таблице исходных данных $\{y_k, d_k\}$ можно определить фиттинг-методом через максимизацию функционала, представляющим собой коэффициент детерминации R^2 , равному единице минус отношение доли необъяснённой дисперсии (дисперсии случайной ошибки модели) к величине дисперсии зависимой переменной [16]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \rightarrow \max \quad (9)$$

Достигнутые значения для формулы (3) $\max_{\alpha, \beta, b} R^2$ или $\max_{\sigma, \mu} R^2$ при использовании формулы (7) позволят определить наилучшую аппроксимацию функции распределения плотности вероятности $f(d)$.

ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Наиболее простым и доступным для исследователей непрофессиональных программистов инструментом вычислений являются электронные таблицы, в частности MS Excel с его достаточно развитым аппаратом вычислительных и статистических функций. Об этом свидетельствуют монографии и публикации по решению задач средствами инструментария MS Excel [18-20] без использования макросов.

Реализация вычислений базируется на двух ключевых составляющих – алгоритмов вычисления интегралов для функций распределения видов (3) или (7) с поиском максимума функционала (9).

Для расчета интегралов по точности и простоте реализации наиболее соответствует численная схема средних прямоугольников [21].

Согласно данному правилу значение интеграла $I = \int_a^b f(x) dx$ определяется суммой m площадей прямоугольников одинаковой ширины $h = (b - a)/m$ – субинтервала отрезка $[a, b]$ пределов интегрирования. Высота каждого прямоугольника определяется значением функции $f(x)$ для среднего x в каждом субинтервале

$$I \cong h \sum_{i=1}^m f(a + (i - 0.5)h). \quad (10)$$

Ошибка аппроксимации уравнения (10) пропорциональна h^2 .

В качестве примера приводятся алгоритм и скриншот листа Excel (рис. 1) вычислений интеграла от функции (3) для заданных параметров α , β , b по интервалу диаметров от $d_1=20$ до $d_2=40$ нм (розовый фон на рис. 1).

A	B	C	D	E	F	G	H	I
3	$d_1 =$	20	$\alpha =$	3,720				
4	$d_2 =$	40	$b =$	0,057				
5	$\Delta x =$	0,002	$\beta =$	0,900				
6		$=(C4-C3)/10000$	$z =$	5,244	$=(F3+1)/F5$			
7			$a =$	8,56E-09				
8		$I(d_1, d_2) = 0,0168$			$=F4*F6/\text{ГAMMA}(F6)$			
9								
10								
11								
12								

Рис. 1. Скриншот листа Excel для расчета интеграла от функции распределения

В ячейке F7 вычисляется нормирующий коэффициент ОГР. В соответствии с формулой (10) средних прямоугольников текущее для 10000 узлов

значение x_i в каждом узле (середине субинтервала) при пределах интегрирования от d_1 до d_2 определяется соотношением $x_i = d_1 + (i - 0.5)\Delta x$, $i = 1, 2, \dots, 10000$, $\Delta x = (d_2 - d_1)/10000$.

Значение интеграла определится суммой (ячейка C8)

$$I(d_1, d_2) = a \cdot \Delta x \sum_{i=1}^{10000} x_i^\alpha \exp(-bx_i^\beta). \quad (11)$$

Для генерации последовательного ряда чисел 1, 2, ..., 10000 применяется Excel-функция СТРОКА(A1:A10000). Введенная в C8 формула используется в форме CSE (Ctrl+Shift+Enter) как формула массива [22].

Ниже приводятся иллюстрация решения задач идентификации функции распределения и характеристики размеров нано- и микропорошков по данным гистограмм для процентно-массового распределения частиц алюминия размеров, соответствующих порошку ALEXTM, и вычислению параметров функции счетного распределения дисперсионного состава биметаллических Pd-Sn частиц [23-24].

В обоих случаях набор исходных данных относительно короткий, поэтому решения в Excel могут быть представлены в полном объеме.

Алгоритм построения решения достаточно простой и представлен коротким программным кодом. Пример реализации алгоритма вычислений для порошка алюминия приводится на рис. 2.

1. В ячейки диапазона B5:C18 заносятся исходные данные – массово-процентное содержание частиц (y_k) для диаметров, указывающих центры столбцов гистограммы (d_k), отмеченных розовым фоном (рис. 2).

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1														
2														
3														
4		d_k	y_k	$\hat{y}_k$										
5		10	0,98	0,945										
6		30	9,78	9,543										
7		50	18,77	20,039										
8		70	23,75	22,577										
9		90	17,60	18,537										
10		110	12,71	12,599										
11		130	6,35	7,558										
12		150	4,89	4,150										
13		170	1,47	2,134										
14		190	1,17	1,043										
15		210	0,78	0,490										
16		230	0,78	0,223										
17		250	0,10	0,099										
18		270	0,88	0,043										
19														
20		$\hat{y}_\Sigma$	100,0											

Рис. 2. Скриншот листа Excel для расчета ОГР-функции распределения частиц алюминия

2. В ячейки варьируемых переменных H5-H7 (для решения" (Solver) это параметры, именуемые запускаемой в дальнейшем надстройки "Поиск "Изменяя значения переменных" (by changing variable

cells)) заносятся начальные, в некотором смысле произвольные, значения параметров α, b и β . В данном примере это были величины 1, 1 и 1.

3. В ячейки H17 и H18 вводятся формулы расчета шагов интегрирования и полуширины столбца гистограммы (голубой фон на рис. 2). В ячейке H13 вычисляется параметр $(\alpha + 1)/\beta$ для расчета в ячейке H14 нормирующего множителя распределения a (см. уравнение (3)).

4. В ячейку E5 заносится CSE-формула расчета определенного интеграла от функции распределения в соответствии с соотношением (11). Формула ячейки E5 копируются вниз до 18-ой строки посредством протягивания маркера заполнения (показано жирной стрелкой на рис. 2).

5. В ячейку H11 (для запускаемой далее надстройки Solver эта ячейка является целевой функцией) вводится формула расчета функционала (коэффициента детерминации R^2) по соотношению (9) с помощью Excel-функций СУММКВРАЗН(...), ДИСП.Г(...) и СЧЁТ(...).

6. Вызывается (запускается) надстройка "Поиск решения" (SOLVER) в режиме поиска максимума целевой функции (радиокнопка "До Максимум" (Max)) методом "Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ" (GRG NonLinear); устанавливается флаг "Сделать переменные без ограничений неотрицательными" (Make Unconstrained Variables Non-Negative).

После выполнения оптимизации в ячейках H5-H7 устанавливаются значения α, b и β , обеспечивающие максимум коэффициенту детерминации R^2 (ячейка H11). Непосредственно функция распределения частиц алюминия определяется формулой

$$f(d) = \frac{6.742 \cdot 10^{-8} \cdot d^{3.762}}{\exp(0.0516 d^{1.021})}, \quad [d] = \text{нм}. \quad (12)$$

Наиболее интересные для практики вычислений характерные размеры вычисляются в ячейках N4:N7 по соотношениям (4) для ряда значений m и n (ячейки L4:M7). По среднеквадратичному и среднеобъемному диаметрам d_{20} и d_{30} рассчитываются средние значения поверхности $\bar{S}$ и объема $\bar{V}$ частицы в ячейках N9 и N10 по соотношениям (2). По формуле (5) рассчитываются координата d_0 максимума функции распределения (ячейка N12) и по приближенным зависимостям (6) – эксцентриситет ϵ и ширина δ (ячейки N13 и N14).

В случае, если есть необходимость более точного вычисления эксцентриситета ϵ и ширины δ , то для известных параметров распределения (ячейки C3:C6 на скриншоте рис. 3) можно использовать надстройку "Поиск решения", где варьируемыми переменными будут диаметры $d_1 < d_0$ и $d_2 > d_0$ такие, что $f(d_1) = f(d_2) = f(d_0)/2$, а целевая функция для минимизации определяется как

$$F = |f(d_1) - f(d_0)/2| + |f(d_2) - f(d_0)/2|.$$

	A	B	C	D	E	F	G	H
3		$\alpha =$	3,844		$d_1 =$	33,20		
4		$b =$	0,068		$d_2 =$	113,55		$=C\$6*F3^{\wedge}C\3
5		$\beta =$	0,972	$f(d_1) - f(d_0)/2 =$	-2,49E-08			/ EXP(C\$4*F3^{\wedge}C\$5)
6		$a =$	6,36E-08	$f(d_2) - f(d_0)/2 =$	3,51E-10			-C\$10
7		$=(C3/C4/C5)^{(1/C5)}$		$F =$	2,52E-08			$=ABS(F5)+ABS(F6)$
9		$d_0 =$	65,2		$\delta =$	80,35		$=F4-F3$
10		$f(d_0)/2 =$	0,0058		$\epsilon =$	0,399		$=(C9-F3)/F9$
11		$=C6*C9^{\wedge}C3/EXP(C4*C9^{\wedge}C5)/2$						

Рис. 3. Скриншот листа Excel вычисления эксцентриситета и ширины ОГР

Начальные значения варьируемых переменных (ячейки F3 и F4) определяются из вышеприведенных ограничений после расчета d_0 (ячейка C9). После запуска надстройки в ячейках F9 и F10 определяются искомые значения ϵ и δ .

Для ЛНР алгоритм идентификации аналогичен вышеприведенному. На рис. 4 приведен скриншот вычисления параметров μ и σ функции распределения (7) по тем же исходным данным. Для расчета формы, характерных размеров, ширины и эксцентриситета распределения использовались соотношения (7) и (8).

В результате ЛНР-функция распределения частиц алюминия определяется в виде

$$f(d) = \frac{0.82}{d} \exp \left[-\frac{(\ln d - 4.363)^2}{0.4733} \right], \quad ([d] = \text{нм}) \quad (13)$$

На рис. 5 приведена исходная гистограмма и восстановленные для ОГР и ЛНР зависимости дисперсного состава частиц.

Отмечается, что положение вершины распределения ($d_0 \approx 62-65$ нм) для обеих кривых практически совпадает, а значимое различие реализуются в области размеров $d > 150$ нм.

Сравнение характерных размеров отражает "растянутость" ЛНР по сравнению с ОГР (табл.), хотя параметры распределения в окрестности максимума (δ и ϵ) хорошо совпадают.

Табл. Характерные размеры частиц и параметры распределений

распределение	зависимость	м	м	м	м ²	м ³	м	ε	R ²
О	(	18	36	5.2	.02622	.00052	0.4	.399	.991
Л	(	42	80	1.9	.03104	.00073	4.9	.361	.984

Если гистограмма исходных данных y_k определяется счетным количеством частиц, то по сути представленные выше алгоритмы не изменяются. На рис. 6 и 7 представлен скриншот рабочего листа Excel, исходная гистограмма и результат идентификации функции ОГР-распределения для наноразмерных Pd-Sn частиц [23-24], имеющей вид

$$f(d) = \frac{2.353 \cdot 10^{-15} \cdot d^{53.95}}{\exp(11 d^{0.985})}, \quad [d] = \text{нм}.$$

Поскольку диапазон размеров $d < 7$ нм, то показатели a и b для функции ОГР имеют на порядки большие значения по сравнению с рассмотренным выше случаем алюминиевого порошка. Тем не менее, вычисления, выполняемые в Excel, устойчивы, а коэффициент детерминации достигает приемлемо-высокое значение 0.92. На рис. 7а приведена исходная гистограмма; на рис. 7б – восстановленная ОГР-функция распределения частиц по размерам – графики дифференциальной $f(d)$ и интегральной $\int_0^d f(x) dx$ форм функции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой статье предлагаются два новых эффективных алгоритма (быстрый и короткий программный код в Excel), предназначенных для идентификации функции распределения и характеристики размеров нано- и микропорошков по данным опытных гистограмм.

Первый алгоритм позволяет вычислять (в одной ячейке Excel) с высокой точностью значения

"неберущихся" интегралов по параметрам функции распределения. Алгоритм легко обобщается на другие типы подинтегральных функций.

Второй алгоритм представляет собой новый и

достаточно общий подход к решению обратных задач идентификации параметров дифференциальных функций распределения по экспериментальным данным.

Рис. 6 Скриншот листа Excel для расчета ОГР-функции распределения частиц биметалла

Рис. 7 Исходная гистограмма (a) и восстановленная функция распределения (b) в виде дифференциальной и интегральной форм

Алгоритм основан на минимизации функционала, представляющего собой коэффициент детерминации, средствами входящей в стандартную комплектацию MS Excel надстройки "Поиск решения" (Solver). Алгоритм программируется весьма ограниченным числом формул MS Excel и возвращает все искомые параметры ОГР и ЛНР.

Оба алгоритма имеют интуитивно понятный короткий программный код и соответствуют разработке простых и эффективных методов вычислений для широко распространенного программного обеспечения (электронных таблиц) персональных компьютеров. При реализации

предлагаемых алгоритмов инструментарием MS Excel не требуется навыков программирования на языках высокого уровня и использования каких-либо вспомогательных макросов; алгоритмы легки для понимания.

Результаты работы алгоритмов с программным кодом и всеми расчетными формулами проиллюстрированы скриншотами рабочих листов в электронных таблицах MS Excel — наиболее распространенного компьютерного инструментария анализа числовых данных. Текст статьи и комментарии на рабочих листах скриншотов представляют собой готовые инструкции по решению задач идентификации

параметров наиболее используемых функций распределения и характеристики размеров нано- и микропорошков.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Исследование процессов горения ВЭМ с нанопорошками алюминия [Текст] / Г.В. Сакович [и др.] // Российские нанотехнологии. – 2010. – Т. 5. – № 1-2. – С. 89–101.

2. Жуков И.А. Теоретические исследования процесса плазмохимического синтеза порошковых материалов [Текст] / Жуков И.А., Бондарчук С.С., Титов С.С. // Ползуновский вестник. – 2016. – № 4-1. – С. 73–75.

3. Аналитическая оценка параметров формообразования частиц в плазмохимическом реакторе [Текст] // Жуков И.А. [и др.] // Фундаментальные исследования. – 2016. – № 12(3). – С. 486–490.

4. Bondarchuk I. Modeling the evolution of the aerosol cloud of toxicants in the atmosphere [Text] / I. Bondarchuk, S. Bondarchuk, B. Borisov // MATEC Web of Conferences. – 2017. – V. 141. – P. 01013(1)–01013(6).

5. Analytical estimation of particle shape formation parameters in a plasma-chemical reactor [Text] / I.A. Zhukov [и др.] // MATEC Web of Conferences. – 2017. – V. 92. – P. 01039(1)–01039(6).

6. Пат. 2441218 С1 Российская Федерация, МПК G 01 N 15/02. Способ определения дисперсности и концентрации частиц в аэрозольном облаке [Текст] / Архипов В.А., Павленко А.А., Титов С.С., Кудряшова О.Б., Бондарчук С.С.; Заявитель и патентообладатель ИПХЭТ СО РАН; заявл. № 2010143653/28 от 25.10.2010; опубл. 27.01.2012, Бюл. № 3. – 12 с.: ил.

7. Бондарчук, И.С. Критерий формообразования частиц в процессе плазмохимического синтеза порошков [Текст] / И.С. Бондарчук, А.С. Жуков // Химическая физика и актуальные проблемы энергетики: сборник тезисов и статей Всероссийской молодежной конференции – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2012. – С. 34–38.

8. Energetic borides: combustion synthesis and properties [Text] / A. Zhukov [и др.] // Energetic Materials: Performance, Safety and System Applications: Proceedings of the 46th International Annual Conference of the Fraunhofer ICT, Karlsruhe – 2015 – P. 75(1)–75(5).

9. Повышение эффективности производства наноразмерных порошков плазмохимическим методом [Текст] / И.А. Жуков [и др.] // Труды Томского государственного университета: Серия физико-математическая, Томск – 2016. – Т. 298. – С. 51–55.

10. Plasma-chemical method for producing metal oxide powders and their application [Text] / I. Zhukov [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – V. 652. – P. 012027(1)–012027(6).

11. Бондарчук, И.С. Кинетика гомогенных химических реакций: методы решения в Excel: монография [Текст] / И.С. Бондарчук, С.С. Бондарчук. – Томск: Изд-во Томского гос. пед. ун-та, 2018. – 263 с.

12. Bondarchuk, I.S. Analysis of the influence of modes of plasmachemical synthesis and precursor evaporation on geometric characteristics of ceramic powders produced [Text] / I.S. Bondarchuk, I.A. Zhukov, B.V. Borisov // MATEC Web of Conferences. – 2015. – V. 23. – P. 01046(1)–01046(4).

13. Ballistic characteristics of solid propellants containing dual oxidizer [Text] / A. Vorozhtsov [и др.] // Proc. 1st European Conf. for Aerospace Sciences. – Moscow. – 2005. – P. 1–8.

14. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2018660938 Российская Федерация. Программа Nanom расчета температуры плавления и минимального для коалесценции диаметра наночастиц металлов [Текст]: № 2018618930: заявл. 23.08.2018; опубл. 30.08.2018 / С. С. Бондарчук, И. С. Бондарчук, А. С. Жуков, В. В. Промахов, Ю. Н. Рыжих: Заявитель и правообладатель: НИ ТГУ.

15. Идентификация унимодальных распределений частиц по размерам [Текст] / В.А. Архипов [и др.] // Оптика атмосферы и океана. – 2004. – Т. 17. – № 5–6. – С. 513–516.

16. Бондарчук С.С. Статобработка экспериментальных данных в MS Excel: учебное пособие [Текст] / С.С. Бондарчук, И.С. Бондарчук. – Томск: Издательство Томского государственного педагогического университета, 2018. – 433 с.

17. Колмогоров, А.Н. О логарифмически нормальном законе распределения размеров частиц при дроблении [Текст] // ДАН СССР. – 1941. – Т. 31. – № 2. – С. 99–101.

18. Liengme, B.V. A guide to Microsoft Excel 2013 for scientists and engineers [Text] / B.V. Liengme. – San Diego, United States: Elsevier Science Publishing Co Inc, 2016. – 382 p.

19. Бондарчук, И.С. Методология решения задач физической химии инструментом Solver MS Excel [Текст] / И.С. Бондарчук, И.А. Курзина, С.С. Бондарчук // Высшее образование сегодня. – 2014. – № 9. – С. 22–24.

20. Bondarchuk, I.S., Bondarchuk, S.S. Integration in Excel without macros on the example of Arrhenius integral [Text] / I.S. Bondarchuk, S.S. Bondarchuk // International Research Journal. – 2021. – № 10 (112). – С. 121–126.

21. Burden, R.L. Numerical Analysis [Text] / R.L. Burden, J.D. Faires. – 9th ed. – Boston, United States: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2011. – 888 p.

22. Excel 2013 training. Array formulas. [Электронный ресурс] // Служба поддержки Майкрософт. – 2021. – Режим доступа: <https://support.microsoft.com/en-us/office/video-array-formulas-8ff8257a-b28e-4e81-b4f8-30f793412dfa>

23. Бондарчук, И.С., Курзина, И.А., Кадет Сантос Айрес, Ф.Ж. Природа биметаллических наночастиц, образующихся при взаимодействии ацетилацетонатных предшественников, нанесенных на поверхность Al_2O_3 [Текст] // Перспективы развития фундаментальных наук: сборник трудов XV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Т. 2: Химия. – Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2018. – С. 42–44.

24. Preparation and investigation of Pd and bimetallic Pd-Sn nanocrystals on $\gamma-Al_2O_3$ [Text] / I.S. Bondarchuk [и др.] // Crystals. – 2021. – V. 11. – № 4. – P. 1–28.

Бондарчук Иван Сергеевич – научный сотрудник, ФГАОУ ВО Национальный Исследовательский Томский государственный университет, тел. (3822) 43-19-35, ivanich_91@mail.ru.

Титов Сергей Сергеевич – кандидат химических наук, заместитель директора по научной работе, ФГБУН Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), тел. (3854)30-18-81, titov@ipcet.ru.

Бондарчук Сергей Сергеевич – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ФГБОУ ВО "Томский государственный педагогический университет", главный научный сотрудник ФГБУН ИПХЭТ СО РАН, тел. (3822) 43-19-35, isbs@mail.ru

IDENTIFICATION OF THE DISTRIBUTION FUNCTION AND CHARACTERIZATION OF THE NANO- AND MICROPOWDERS SIZES

I.S. Bondarchuk¹, S.S. Titov², S.S. Bondarchuk^{2,3}

¹ National Research Tomsk State University, Tomsk

² Research, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Biysk

³ Tomsk State Pedagogical University, Tomsk

The paper proposes two new efficient algorithms, implemented by a short program code in MS Excel, designed to identify and characterize the sizes of nano- and micropowders of particles in the form of generalized gamma or lognormal distributions according to experimental histograms. The proposed method is a new general approach to solving inverse problems of identifying the parameters of differential distribution functions from experimental data based on minimizing the functional that is the coefficient of determination.

The algorithm is implemented with formulas (less than 10) of the most common tools (MS Excel spreadsheets without the use of macros), which allow researchers without the skills of professional programmers to easily check and reproduce the presented material, as well as the ability to modify the code to solve a wider range of problems. The text of the article and comments on the worksheets of screenshots represent ready-made instructions for solving problems of identification of distribution functions and characterization of the sizes of nano- and micropowders.

Index terms: particles, powders, distribution function, generalized gamma distribution, lognormal distribution, moment of distribution function, identification of distribution function, characterization of particle sizes, spreadsheets, program code.

REFERENCES

1. Sakovich, G.V., Arkhipov, V.A., Vorozhtsov, A.B., Bondarchuk, S.S., Pevchenko, B.V., "Investigation of combustion processes of HEM with aluminum nanopowders," *Russian nanotechnology*, vol. 5, no. (1-2), pp. 89–101, 2010.
2. Zhukov, I.A., Bondarchuk, S.S., Titov, S.S., "Theoretical studies of the process of plasma-chemical synthesis of powder materials," *Polzunovskii Vestnik*, no. (4-1), pp. 73–75, 2016.
3. Zhukov, I.A., Bondarchuk, S.S., Zhukov, A.S., Bondarchuk, I.S., Titov, S.S., "Analytical estimation of the parameters of particles shape in a plasma-chemical reactor," *Fundamental research*, no. 12(3), pp. 486–490, 2016.
4. Bondarchuk, I., Bondarchuk, S., Borisov, B., "Modeling the evolution of the aerosol cloud of toxicants in the atmosphere," *MATEC Web of Conferences*, vol. 141, pp. 01013(1)–01013(6), 2017.
5. Zhukov, I.A., Bondarchuk, S.S., Zhukov, A.S., Bondarchuk, I.S., Borisov, B.V., Ayeshina, T.N., "Analytical estimation of particle shape formation parameters in a plasma-chemical reactor," *MATEC Web of Conferences*, vol. 92, pp. 01039(1)–01039(6), 2017.
6. Arkhipov, V.A., Pavlenko, A.A., Titov, S.S., Kudryashova, O.B., Bondarchuk, S.S., "A method for determination of the dispersion and concentration of particles in an aerosol cloud," RU Pat. 2441218 C1, January 27, 2012.
7. Bondarchuk, I.S., Zhukov, A.S., "The criterion for the formation of particles in the process of plasma-chemical synthesis of powders," *All-Russian Youth Conference "Chemical physics and current problems of energetics"*, Tomsk, Russia, pp. 34–38, Sept. 2012.
8. Zhukov, A., Ziatdinov, M., Vorozhtsov, A., Vorozhtsov, S., Bondarchuk, I., Zhukov, I., Promakhov, V., "Energetic borides: combustion synthesis and properties," *Energetic materials: performance, safety and system applications: 46th International annual conference of the Fraunhofer ICT*, Karlsruhe, Germany, pp. 75(1)–75(5), Jun. 2015.
9. Zhukov, I.A., Bondarchuk, I.S., Bondarchuk, S.S., Promakhov, V.V., "Efficiency improvement of the nanosized powders production by the plasma-chemical method," *Proceedings of Tomsk State University: Physics and Mathematics*, Tomsk, vol. 298, pp. 51–55, Nov. 2015.
10. Zhukov, I., Vorozhtsov, S., Promakhov, V., Bondarchuk, I., Zhukov, A., Vorozhtsov, A., "Plasma-chemical method for producing metal oxide powders and their application," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 652, pp. 012027(1)–012027(6), 2015.
11. Bondarchuk, I.S. and Bondarchuk, S.S., *Kinetics of Homogeneous Chemical Reactions: Solution Methods in Excel*. Tomsk: TSPU publishing house, 2018.
12. Bondarchuk, I.S., Zhukov, I.A., Borisov, B.V., "Analysis of the Influence of Modes of Plasmachemical Synthesis and Precursor Evaporation on Geometric Characteristics of Ceramic Powders Produced," *MATEC Web of Conferences*, vol. 23, pp. 01046(1)–01046(4), 2015.
13. Vorozhtsov, A., Arkhipov, V., Bondarchuk, S., Popok, N., Klyakin, G., Kuznetsov, V., Sinogina, E., De Luca, L.T., Galfetti, L., "Ballistic characteristics of solid propellants containing dual oxidizer," *1st European Conf. for Aerospace Sciences*, Moscow, Russia, pp. 1–8, Sept. 2005.
14. Bondarchuk, S.S., Bondarchuk, I.S., Zhukov, A.S., Promakhov, V.V., Ryzhikh, Yu.N., "The program Nanom for calculation of the melting temperature and the minimum diameter of the coalescing metal nanoparticles," RU Software Pat. 2018660938, August 30, 2018.
15. Arkhipov, V.A., Bondarchuk, S.S., Kvesko, N.G., Roslyak, A.T., Trofimov, V.F., "Identification of unimodal particle size distributions," *Optics of the atmosphere and ocean*, vol. 17, no. 5-6, pp. 513–516, 2004.
16. Bondarchuk, S.S. and Bondarchuk, I.S., *Statistical processing of experimental data in MS Excel*. Tomsk: TSPU publishing house, 2018.
17. Kolmogorov A.N., "On the log-normal law of particle size distribution during crushing," *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, vol. 31, pp. 99–101, 1941.
18. Liengme, B.V. *A guide to Microsoft Excel 2013 for scientists and engineers*. San Diego, CA: Elsevier Science Publishing Co Inc, 2016.
19. Bondarchuk, I.S., Kurzina, I.A., Bondarchuk, S.S., "Methodology for solving problems of physical chemistry with the use of the Solver MS Excel tool," *Higher education today*, no. 9, pp. 22–24, 2014.
20. Bondarchuk, I.S., Bondarchuk, S.S., "Integration in Excel without macros on the example of Arrhenius integral," *International Research Journal*, no. 10(112), pp. 121–126, 2021.
21. Burden, R.L. and Faires, J.D., *Numerical Analysis*, 9th ed. Boston, MA: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2011.

22. Excel 2013 training. Array formulas, accessed October 31, 2021, <https://support.microsoft.com/en-us/office/video-array-formulas-8ff8257a-b28e-4e81-b4f8-30f793412dfa>.

23. Bondarchuk, I.S., Kurzina, I.A., Cadet Santos Aires F. J., “The nature of bimetallic nanoparticles, obtained by interaction of acetylacetonates precursors, supported on the surface Al_2O_3 ,” *XV International Conference of students, postgraduate students and young scientists “Prospects of Fundamental Sciences Development”*, Tomsk, Russia, vol. 2: Chemistry, pp. 42-44, Apr. 2018.

24. Bondarchuk, I., Cadete Santos Aires, F.J., Mamontov, G., Kurzina I., “Preparation and Investigation of Pd and Bimetallic Pd-Sn Nanocrystals on $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$,” *Crystals*, vol. 11(4), pp. 444(1)–444(28), 2021.

Bondarchuk Ivan Sergeevich – researcher, Tomsk State University, (3822) 43-19-35, ivanich_91@mail.ru.

Titov Sergey Sergeevich – PhD in Engineering, Deputy Director for Research, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, (3854)30-18-81, titov@ipcet.ru.

Bondarchuk Sergey Sergeevich – doctor of phis.-math. sciences, Chief scientist, Tomsk State Pedagogical University, Chief scientist, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, (3822) 43-19-35, isbs@mail.ru.