

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ РАДИОФИЗИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
Кафедра системного анализа и компьютерного моделирования

КАЛАШНИКОВА
Полина Ольгердовна

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
ЗАТУХАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Аннотация к дипломной работе

Научный руководитель:
доктор физико-математических
наук, профессор В.В. Апанасович

Минск, 2023

РЕФЕРАТ

Дипломная работа: 60 с., 31 рис., 10 источников, 1 прил.

ТАРГЕТНЫЙ АНАЛИЗ, КРИВЫЕ ЗАТУХАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ, СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ, КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ ПЕРЕХОДА, ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Объект исследования – кинетические процессы затухания флуоресценции.

Цель исследования – моделирование кинетики затухания флуоресценции на основе матрицы констант скоростей перехода и выполнение целевого анализа экспериментальных данных.

Флуоресцентные методы используются почти во всех областях науки. Существует аппаратура, которая позволяет измерять флуоресценцию как по большому количеству точек, так и на различных длинах волн. В результате таких опытов исследователь получает кривые затухания флуоресценции, анализ которых приводит к оценкам не физических параметров, а математических, заложенных в модель, которая представляет собой сумму экспонент. Но наиболее важными параметрами являются именно физические, к которым относятся спектры флуоресценции и кинетические скорости переходов атомов из одного состояния в другое. Именно для их определения и производится измерение кривых затухания флуоресценции. Правильный метод анализа существует. Это метод таргетного (целевого) анализа. При его использовании извлекается только минимально необходимый набор параметров, которые представляют реальный интерес для понимания функционирования системы, а также происходит реальное тестирование физических или химических моделей.

Для проведения таргетного анализа кривых затухания флуоресценции было сделано моделирование кинетики затухания флуоресценции на разных длинах волн и разработан алгоритм глобального анализа данных, реализующий рассмотренный метод. Алгоритм был запрограммирован на языке `m` в среде программирования MATLAB, для чего были задействованы функции, работающие по нелинейному методу наименьших квадратов с использованием метода оптимизации Левенберга-Марквардта.

Рекомендации по практическому использованию результатов: разработанный программный алгоритм моделирования и методов целевого анализа, обладая высокой степенью общности, обеспечивает возможность моделирования широкого круга систем и позволяет получить более достоверные оценки физических параметров исследуемых веществ.

РЭФЕРАТ

Дыпломная праца: 60 с., 31 мал., 10 крыніц, 1 прыкл.

ТАРГЕТНЫ АНАЛІЗ, КРЫВЫЯ ЗГАСАННЯ ФЛУАРЭСЦЭНЦЫІ, СПЕКТРЫ ВЫМЯНЕННЯ, КАНСТАНТЫ ХУТКАСЦІ ПЕРАХОДУ, ІМІТАЦЫЙНАЕ МАДЭЛЯВАННЕ.

Аб'ект даследавання - кінетычныя працэсы згасання флуарэсцэнцыі.

Цэль даследавання - мадэляванне кінетыкі згасання флуарэсцэнцыі на аснове матрыцы канстант хуткасцяў пераходаў і выкананне мэтавага аналізу эксперыментальных дадзеных.

Флуарэсцэнтныя метады выкарыстоўваюцца амаль ва ўсіх абласцях навукі. Існуе апаратура, якая дазваляе вымяраць флуарэсцэнцыю як па вялікай колькасці кропак, так і на розных даўжынях хваль. У выніку такіх доследаў даследчык атрымлівае крывыя згасання флуарэсцэнцыі, аналіз якіх прыводзіць да ацэнак не фізічных параметраў, а матэматычных, закладзеных у мадэль, якая ўяўляе сабой суму экспанент. Але найбольш важнымі параметрамі з'яўляюцца менавіта фізічныя, да якіх адносяцца спектры флуарэсцэнцыі і кінетычныя хуткасці пераходаў атамаў з аднаго стану ў іншы. Менавіта для іх вызначэння і вырабляецца вымярэнне крывых згасання флуарэсцэнцыі. Правільны метада аналізу існуе. Гэта метада таргетнага (мэтавага) аналізу. Пры яго выкарыстанні здабываецца толькі мінімальна неабходны набор параметраў, якія ўяўляюць рэальную цікавасць для разумення функцыянавання сістэмы, а таксама адбываецца рэальнае тэставанне фізічных ці хімічных мадэляў.

Для правядзення таргетнага аналізу крывых згасання флуарэсцэнцыі было зроблена мадэляванне кінетыкі згасання флуарэсцэнцыі на розных даўжынях хваль і распрацаваны алгарытм глабальнага аналізу дадзеных, які рэалізуе разгледжаны метада. Алгарытм быў праграмаваны на мове m у асяроддзі праграмавання MATLAB, для чаго былі задзейнічаны функцыі, якія працуюць па нелінейным метадазе найменшых квадратаў з выкарыстаннем метада аптымізацыі Левенберга-Марквардта.

Рэкамендацыі па практычным выкарыстанні вынікаў: распрацаваны праграмы алгарытм мадэлявання і метадаў мэтавага аналізу, валодаючы высокай ступенню агульнасці, забяспечвае магчымасць мадэлявання шырокага круга сістэм і дазваляе атрымаць больш дакладныя адзнакі фізічных параметраў доследных рэчываў.

ANNOTATION

Degree paper: 60 p., 31 ill., 10 sources, 1 app.

TARGET ANALYSIS, FLUORESCENCE DECAY CURVES, EMISSION SPECTRA, TRANSITION RATE CONSTANTS, SIMULATION MODELING.

Object of research - fluorescence decay kinetic processes.

Purpose of research - modeling the kinetics of fluorescence decay based on the matrix of transition rate constants and performing targeted analysis of experimental data.

Fluorescent methods are used in almost all areas of science. There is equipment that makes it possible to measure fluorescence both at a large number of points and at various wavelengths. As a result of such experiments, the researcher obtains fluorescence decay curves, the analysis of which leads to estimates not of physical parameters, but of mathematical ones embedded in the model, which is the sum of the exponents. But the most important parameters are precisely the physical ones, which include fluorescence spectra and kinetic rates of transitions of atoms from one state to another. It is for their determination that the fluorescence decay curves are measured. The correct method of analysis exists. This is a method of targeted (target) analysis. When using it, only the minimum necessary set of parameters that are of real interest for understanding the functioning of the system is extracted, and physical or chemical models are actually tested.

To perform a targeted analysis of fluorescence decay curves, I modeled the kinetics of fluorescence decay at different wavelengths and developed an algorithm for global data analysis that implements the considered method. The algorithm was programmed in the m language in the MATLAB programming environment, for which functions were used that work according to the nonlinear least squares method using the Levenberg-Marquardt optimization method.

Recommendations for the practical use of the results: the developed software algorithm for modeling and methods of targeted analysis, having a high degree of generality, provides the possibility of modeling a wide range of systems and makes it possible to obtain more reliable estimates of the physical parameters of the substances under study.