

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 535.4;551.501

© Я. А. Фофанов, В. В. Манойлов, 2025

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТЕЙ
ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ И АНАЛИТИЧЕСКОЙ АППРОКСИМАЦИЙ
ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ
МАГНИТНЫХ НАНОЖИДКОСТЕЙ**

Проведено количественное сравнение возможностей полиномиальной и аналитической аппроксимаций слабых поляризационно-оптических откликов разбавленных магнитных наножидкостей (НЖ). В качестве критериев сравнения различных методов аппроксимации использованы оценки коэффициентов детерминации. Количественно показано, что для всех исследованных значений магнитного поля зависимости величин слабых поляризационно-оптических откликов магнитных НЖ от концентрации обладают подобием в диапазоне концентраций, составляющем более трех порядков. Рассмотрены возможности использования коэффициентов аппроксимации для оценки параметров исследуемых НЖ. Методы аппроксимации экспериментальных данных поляризационно-оптических откликов НЖ, рассмотренные в работе, равноправны, так как коэффициенты детерминации для этих методов близки друг к другу. Преимущество метода аппроксимации с помощью аналитической функции заключается в том, что один из коэффициентов аппроксимации напрямую связан с концентрацией анализируемой НЖ и для оценки концентрации не нужно использовать калибровочные кривые и проводить интерполяцию, как это необходимо делать при аппроксимации с помощью полиномов. Аналитическая аппроксимация откликов исследованных НЖ с помощью зависимостей, использующих гиперболические функции, более чувствительна к наличию выбросов в экспериментальных данных, чем метод аппроксимации на основе полиномов. Метод оценки концентраций с помощью калибровочных кривых может быть успешно использован даже при наличии заметных выбросов в экспериментальных данных, если применять полиномиальную модель откликов.

Ключевые слова: количественный поляризационно-оптический анализ, магнитные наножидкости, аппроксимация экспериментальных данных

ВВЕДЕНИЕ

Знание особенностей распространения лазерного излучения через измерительную систему с находящимися в ней исследуемыми объектами позволяет регистрировать их структурные изменения, важные для многих приложений [1–13]. Аппроксимация магнитных зависимостей слабых поляризационных откликов является важным элементом методики количественного анализа воздействия магнитного поля на магнитные наножидкости (НЖ). В работах [14, 15] описаны методики полиномиальной оценки коэффициентов аппроксимации этих зависимостей для магнитных НЖ на основе магнетита в керосине, а в работах [16, 17] описаны методы их аппроксимации аналитическими функциями, рассмотренными в [18, 19]. Как показано в работе [17], значения коэффициентов аналитической аппроксимации могут существенно отличаться от прогнозируемых из-за наличия технологических погрешностей синтеза проб с исследуемыми НЖ разных концентраций. Кроме

этого, для решения систем нормальных уравнений методом оптимизации требуется предварительная программа определения начальных условий [16, 17]. Целью настоящей работы является сравнение двух алгоритмов аппроксимации исследуемых магнитных зависимостей: 1) аппроксимации с помощью полиномов разных степеней, 2) аппроксимации с помощью аналитической функции. В качестве критериев сравнений, или, иначе, метрик сравнений, использованы оценки коэффициентов детерминации.

**АППРОКСИМАЦИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ
ОТКЛИКОВ С ПОМОЩЬЮ ПОЛИНОМОВ
РАЗЛИЧНЫХ СТЕПЕНЕЙ**

Аппроксимация исследуемых зависимостей сигналов поляризационно-оптических откликов НЖ от магнитного поля с помощью полиномов степеней от второй до четвертой производится следующим образом [14]. Учитываем, что сигналы откликов y_i зависят от величины магнитного поля

H_i , где i меняется от 1 до n . Данные зависимости аппроксимируются с помощью функции $\Psi_m^{(app)}(k_{jm}, H_i)$:

$$\Psi_m^{(app)}(k_{jm}, H_i) = \sum_{j=0}^m k_{jm} (H_i)^j, \quad (1)$$

где H_i — напряженность магнитного поля; $i = 1, 2, \dots, n$ — число точек; $m = 2, 3, 4$ — степень полинома.

Суммирование по индексу m в правой части уравнения (1) не производится, т.к. этот индекс при каждой операции суммирования принимает одно определенное значение, соответствующее степени используемого для аппроксимации полинома. Коэффициенты k_{jm} для членов со степенями $(H_i)^j$ вычисляются путем минимизации суммы квадратов отклонений $S_m(k_{jm})$ экспериментальных данных от аппроксимирующей функции (1):

$$S_m(k_{jm}) = \sum_{i=1}^n [y_i - \Psi_m^{(app)}(k_{jm}, H_i)]^2 \rightarrow \min, \quad (2)$$

где в левой части уравнения через k_{jm} обозначен набор коэффициентов аппроксимации, соответствующих данному значению m (степени используемого полинома).

Статистическими мерами, которые используются в регрессионном анализе для оценки того, насколько хорошо выбранная модель соответствует экспериментальным данным, являются коэффициенты детерминации. Коэффициент детерминации вычисляется по следующей формуле:

$$R = 1 - \text{SSE} / \text{SST}, \quad (3)$$

где SSE — сумма квадратов отклонений экспериментальных данных от аппроксимирующей кривой, SST — обобщенная дисперсия экспериментальных данных в измеряемом диапазоне,

т.е. дисперсия значений измеряемых величин сигналов поляризационно-оптических откликов, умноженная на $N - 1$. Здесь N — количество экспериментальных данных.

Проведем теперь количественное сравнение коэффициентов детерминации аппроксимирующих полиномов для результатов экспериментов с НЖ, которые описаны в работе [9]. В табл. 1 представлены значения концентрации НЖ для экспериментов 1–8, а также коэффициенты детерминации для аппроксимирующих функций. Анализ данных, приведенных в табл. 1, показывает, что даже самые низкие значения коэффициентов детерминации превышают уровень 0.9, что говорит о соответствии выбранных для аппроксимации полиномов характеру экспериментальных данных для различных концентраций. На рис. 1 представлены зависимости результатов аппроксимации откликов НЖ различных концентраций с помощью полиномов 4-й степени от значений напряженности магнитного поля.

Как видно из рис. 1, полиномиальные модели зависимостей величин откликов от концентраций НЖ для всех значений напряженности магнитного поля обладают подобием. Представленные на рис. 1 зависимости можно использовать как калибровочные кривые для оценки концентраций магнитных НЖ. Модельная кривая для магнитной НЖ с неизвестной концентрацией попадает между двумя зависимостями с известными концентрациями. Например, представленная на рис. 1 кривая, показанная штриховой линией, представляет собой значения откликов магнитной НЖ с концентрацией 0.0002. Видно, что такая кривая находится между кривыми 6 и 7 для концентраций 0.001 и 0.0001%. Более точное значение концентрации можно найти путем линейной интерполяции с использованием значений откликов магнитных НЖ с известными концентрациями.

Табл. 1. Концентрация магнитных НЖ для экспериментов 1–8 и коэффициенты детерминации для полиномов различных степеней, аппроксимирующих отклики магнитных НЖ с разными концентрациями

Характеристика	Номер эксперимента							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Концентрация магнитной НЖ, %	1	0.2	0.04	0.01	0.003	0.001	0.0001	0.0001
R для полиномов 2-й степени	0.998	0.998	0.984	0.998	0.996	0.978	0.916	0.932
R для полиномов 3-й степени	1.000	0.999	0.984	0.999	0.999	0.974	0.914	0.924
R для полиномов 4-й степени	1.000	0.999	0.983	0.999	0.998	0.970	0.907	0.907

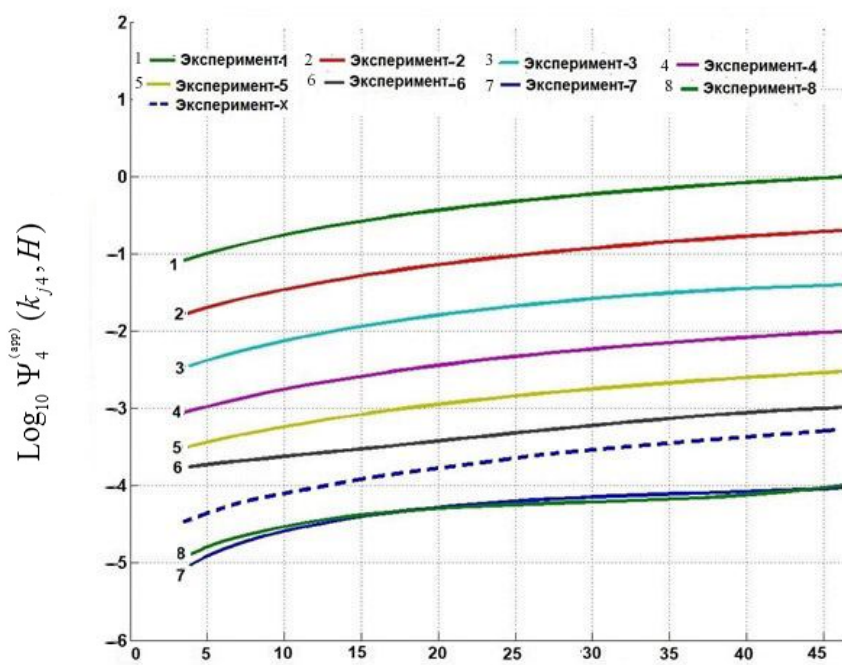


Рис. 1. Зависимости логарифмов функций аппроксимации магнитных НЖ различных концентраций от значений напряженности магнитного поля для полиномов 4-й степени.

АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ

Аналитическая аппроксимация выполнена нами с помощью функции $F(p)$, представленной в работе [19]:

$$\varphi^{(app)}(\alpha, \beta, x) = F(p), \quad (4)$$

где $F(p) = 1 - 3/p \coth(p) + 3/p^2$, $p = \mu H / kT$, μ — магнитный момент частиц, H — напряженность магнитного поля, k — постоянная Больцмана, T — температура, коэффициент α определяется магнитооптическими параметрами магнитных частиц, пропорционален их объемной концентрации и не зависит от поля. В процессе аппроксимации значения параметра p определяются формулой $p = \beta x$. Здесь α и β являются варьируемыми безразмерными коэффициентами, а x — вспомогательная независимая и безразмерная переменная.

При выполнении аналитической аппроксимации в правую часть формулы (2) вместо функции $\Psi_m^{(app)}(k_{jm}, H_i)$ подставлялась функция $\varphi^{(app)}(\alpha, \beta, x)$, определяемая формулой (4). Далее путем varia-

ции коэффициентов α и β находился минимум функции $S(\alpha, \beta)$ в соответствии с правой частью уравнения (2). Более подробное описание способа нахождения минимизирующих значений коэффициентов α и β дано в работах [16, 17]. При этом были использованы численные алгоритмы оптимизации [20, 21].

В табл. 2 приведены значения концентрации НЖ для экспериментов 1–8, коэффициенты детерминации для аппроксимирующих аналитических функций, использующих коэффициенты α и β .

Для наглядности сравнения методов аппроксимации с помощью полиномов и с помощью аналитических функций на рис. 2 представлены зависимости коэффициентов детерминации для аппроксимации с помощью полинома 4-й степени и с помощью аналитической функции.

Значения коэффициентов детерминации, приведенные в таблицах 1 и 2 для полиномиальной аппроксимации и аппроксимации с помощью аналитической функции, близки друг к другу. Это обстоятельство позволяет утверждать, что оба метода аппроксимации равноправны. Преимущество метода аппроксимации с помощью аналитической функции заключается в том, что коэффициент α

Табл. 2. Концентрация магнитных НЖ для экспериментов 1–8 и коэффициенты детерминации для аппроксимирующих аналитических функций, использующих коэффициенты α и β

Характеристика	Номер эксперимента							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Концентрация магнитной НЖ, %	1	0.2	0.04	0.01	0.003	0.001	0.0001	0.0001
R для аналитических функций	1	1	0.999	1	0.999	0.977	0.917	0.882

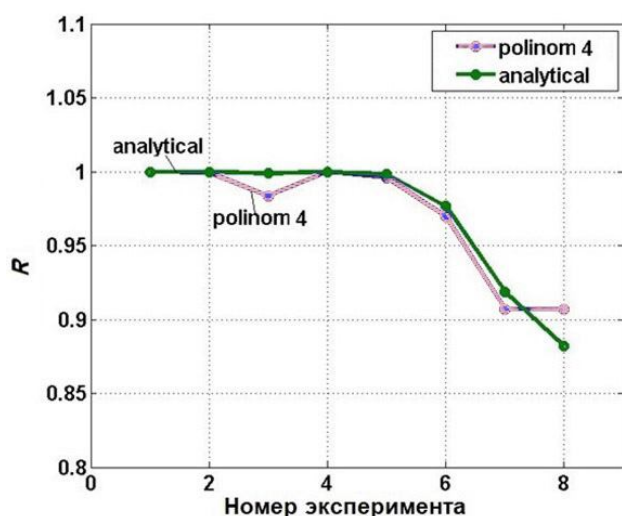


Рис. 2. Зависимости коэффициентов детерминации для аппроксимации экспериментальных данных магнито-оптических откликов магнитных НЖ от концентрации.

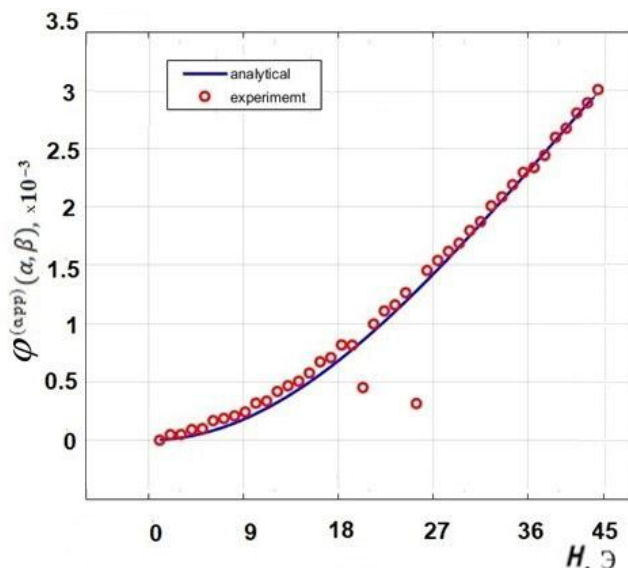


Рис. 3. Зависимость аналитической аппроксимирующей функции откликов магнитной НЖ с концентрацией 0.001% от значений напряженности магнитного поля с двумя выбросами в экспериментальных данных.

напрямую связан с концентрацией анализируемой НЖ и для оценки концентрации не нужно использовать калибровочные кривые и проводить интерполяцию, как в случае использования аппроксимации с помощью полиномов.

Метод поиска коэффициентов α и β , описанный в работе [17], не позволяет находить точные значения указанных коэффициентов при наличии случайных выбросов в экспериментальных данных. Даже небольшое количество выбросов может существенно исказить значения коэффициентов α и β , которые характеризуют параметры изучаемых магнитных НЖ. На рис. 3 для примера представлена зависимость значений откликов магнитных НЖ с концентрацией 0.001 от магнитного поля.

В экспериментальных данных, представленных на рис. 3, значения измеренных откликов заменены на выбросы. Действительно, в результате вычислений для экспериментальных данных, показанных на рис. 3, значения коэффициентов оказались равными $\alpha = 0.0157$ и $\beta = 0.0449$. При отсутствии выбросов — $\alpha = 0.0121$ и $\beta = 0.0537$. Прогнозируемые значения для данной концентрации — $\alpha = 0.0125$ и $\beta = 0.0513$. Для данных с выбросами коэффициент детерминации оказался равным 0.965 вместо 0.999.

Наличие в экспериментальных данных небольшого количества выбросов при использовании метода полиномиальной аппроксимации и калибровочных кривых, представленных на рис. 1, мало

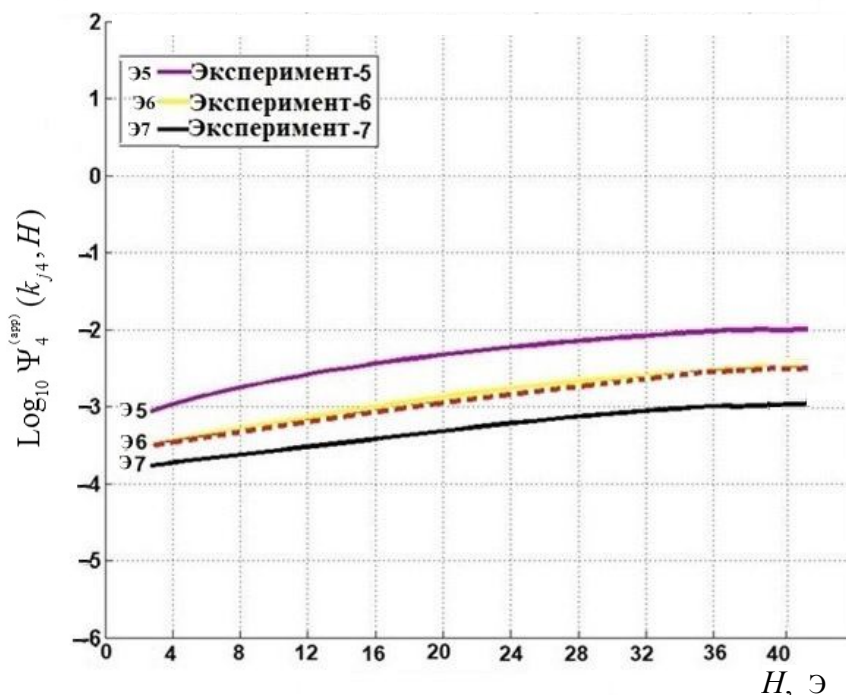


Рис. 4. Зависимости логарифмов полиномиальных моделей откликов от значений напряженности магнитного поля НЖ для разных концентраций.

Э5 — 0.003%, Э6 — 0.001%, Э7 — 0.0001 %; пунктирная линия — функция, соответствующая аппроксимирующему полиному для искаженных выбросами данных при концентрации НЖ 0.001%

меняет характер калибровочных кривых, и метод оценки концентраций с помощью калибровочных кривых может быть успешно использован. Если применить аппроксимацию полиномом 4-й степени для данных с выбросами, то коэффициент детерминации уменьшится только до 0.996 вместо 0.998 для данных без выбросов. На рис. 4 представлен фрагмент зависимостей логарифмов полиномиальных моделей откликов магнитных НЖ трех концентраций: Э5 — 0.003, Э6 — 0.001 и Э7 — 0.0001% от значений напряженности магнитного поля, показанных на рис. 1.

Данные для НЖ с концентрацией 0.001 (Э6) были искажены выбросами. На рис. 4 пунктирной линией в логарифмическом масштабе показана функция, соответствующая аппроксимирующему полиному для искаженных выбросами данных. Как видно из рис. 4, наличие выбросов не сильно изменили форму аппроксимирующей функции. О несильном изменении аппроксимирующей функции для данных, искаженных выбросами,

свидетельствует небольшое изменение коэффициента детерминации, показанного выше.

ОБСУЖДЕНИЕ

С помощью рассмотренных алгоритмов аппроксимации экспериментальных данных можно производить оценку параметров исследуемых магнитных НЖ. Например, полиномиальная аппроксимация позволяет сделать оценку концентрации изучаемых НЖ с помощью калибровочных кривых. При использовании аналитической функции оценку концентрации изучаемых НЖ можно выполнить с помощью полученного в результате аппроксимации значения безразмерного коэффициента α . Это демонстрирует возможность определения с помощью развиваемых алгоритмов и методов одних (неизвестных) физических параметров по зарегистрированным поляризационным откликам и значениям других (известных) пара-

метров. Знание численных значений параметров НЖ позволяет также сравнивать их поляризационные магнитооптические характеристики с характеристиками других систем различной природы и состава. Это, в свою очередь, открывает перспективы более широкого, информационного подхода к дальнейшему развитию и применению высокочувствительных лазерных методов сравнительных исследований магнитных НЖ и других упорядоченных веществ, материалов и систем [5, 10, 22].

ВЫВОДЫ

1. Аппроксимации экспериментальных данных поляризационно-оптических откликов НЖ рассмотренными выше методами равноправны, так как коэффициенты детерминации для этих методов близки друг к другу. Преимущество метода аппроксимации с помощью аналитической функции заключается в том, что коэффициент α напрямую связан с концентрацией анализируемой НЖ и для оценки концентрации не нужно использовать калибровочные кривые и проводить интерполяции, как это необходимо делать при аппроксимации с помощью полиномов.

2. Аналитическая аппроксимация откликов исследованных НЖ с помощью зависимостей, использующих гиперболические функции, более чувствительна к наличию выбросов в экспериментальных данных, чем метод аппроксимации на основе полиномов.

3. Метод оценки концентраций с помощью калибровочных кривых может быть успешно использован даже при наличии заметных выбросов в экспериментальных данных, если применять полиномиальную модель откликов.

Финансирование

Работа выполнена в ИАП РАН в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования № 075-00444-25-00 (от 26.12.2024).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Fofanov Ya.A. Threshold sensitivity in optical measurements with phase modulation // Proc. SPIE 1811, Tenth All-Union Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy, p. 413–414 (1 July 1992). DOI: 10.1117/12.131190
2. Sokolov I.M., Fofanov Ya.A. Investigations of the small birefringence of transparent objects by strong phase modulation of probing laser radiation // J. Opt. Soc. Am. A. 1995. Vol. 12, no. 7. P. 1579–1588. DOI: 10.1364/JOSAA.12.001579
3. Фофанов Я.А. Методы и приборы для количественного анализа структурного двулучепреломления материалов и веществ // Научное приборостроение. 1999. Т. 9, № 3. С. 104–110. URL: <https://iairas.ru/mag/1999/full3/Art11.pdf>
4. Фофанов Я.А., Афанасьев И.И., Бороздин С.Н. Структурное двупреломление в кристаллах оптического флюорита // Оптический журнал. 1998. Т. 65, № 9. С. 22–25.
5. Фофанов Я.А., Плешаков И.В., Кузьмин Ю.И. Лазерное поляризационно-оптическое детектирование процесса намагничивания магнитоупорядоченного кристалла // Оптический журнал. 2013. Т. 80, № 1. С. 88–93. URL: <https://opticjourn.ru/index.php/ru/abstract/2013-80-1-88-93>
6. Fofanov Ya. On the analogy in evolution processes and the behavior of a magnetically ordered systems // Natural Science. 2013. Vol. 5, no. 4A. P. 14–17. DOI: 10.4236/ns.2013.54A003
7. Фофанов Я.А., Бардин Б.В. О поляризационных откликах объектов с малой оптической анизотропией // Научное приборостроение. 2016. Т. 26, № 1. С. 58–61. URL: <http://iairas.ru/mag/2016/abst1.php#abst8>
8. Kuraptsev A.S., Sokolov I.M., Fofanov Ya.A. Coherent specular reflection of resonant light from a dense ensemble of motionless point-like scatters in a slab geometry // Int. J. Mod. Phys. Conf. Ser. 2016. Vol. 41. Id. 1660141. P. 1–9. DOI: 10.1142/S2010194516601411
9. Фофанов Я.А., Плешаков И.В., Прокофьев А.В. Исследование поляризационных магнитооптических откликов слабоконцентрированной феррожидкости // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42, вып. 20. С. 66–72. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/43804>
10. Fofanov Ya., Vetrov V., Ignatenkov B. Laser Polarization-Optical Sounding of Optical Crystals and Ceramics // IEEE Xplore Digital Library. ICLO. 2018. P. 406–406. DOI: 10.1109/LO.2018.8435268
11. Scherer C., Figueiredo Neto A.M. Ferrofluids: Properties and applications // Braz. J. Phys. 2005. Vol. 35, no. 3A, P. 718–727. URL: https://www.sbfisica.org.br/bjp/files/v35_718.pdf
12. Nepomnyashchaya E.K., Prokofiev A.V., Velichko E.N. et al. Investigation of magneto-optical properties of ferrofluids by laser light scattering techniques // J. Magn. Magn. Mater. 2017. Vol. 431. Proc. of ICMF-14. P. 24–26. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.10.002
13. Davis H.W., Llewellyn J.P. Magnetic birefringence of ferrofluids: I. Estimation of particle size // J. Phys. D: Appl. Phys. 1979. Vol. 12, no. 2. P. 311–319. DOI: 10.1088/0022-3727/12/2/018
14. Фофанов Я.А., Манойлов В.В., Заруцкий И.В., Бардин Б.В. О подобии поляризационно-оптических откликов магнитных наноожидкостей. Ч.1 Аппроксимация для слабых полей // Научное приборостроение. 2018. Т. 28, № 1. С.45–52. URL: <http://iairas.ru/mag/2018/abst1.php#abst6>
15. Фофанов Я.А., Манойлов В.В., Заруцкий И.В., Бардин Б.В. О подобии поляризационно-оптических откликов магнитных наноожидкостей. Ч. II. Оценка статистической значимости коэффициентов регрессии // Научное приборостроение. 2018. Т. 28, № 2. С. 54–62. URL: <http://iairas.ru/mag/2018/abst2.php#abst8>

16. *Фофанов Я.А., Манойлов В.В., Заруцкий И.В., Курапцев А.С.* Статистический анализ данных высокочувствительного лазерного поляризационно-оптического зондирования магнитных наножидкостей // *Оптический журнал*. 2020. Т. 87, № 2. С. 36–43. DOI:10.17586/1023-5086-2020-87-02-36-43
17. *Фофанов Я.А., Манойлов В.В., Заруцкий И.В., Курапцев А.С.* Лазерная поляризационно-оптическая диагностика упорядоченных объектов и структур // *Известия РАН, серия физическая*. 2020. Т. 84, № 3. С. 341–344. DOI: 10.31857/S0367676520030114
18. *Скибин Ю.Н., Чеканов В.В., Райхер Ю.Л.* Двойное лучепреломление в магнитной жидкости // *ЖЭТФ*. 1977. Т. 72, вып. 3. С. 949–955.
URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=19083100>
19. *Scholten P.C.* The origin of magnetic birefringence and dichroism in magnetic field // *IEEE Trans. Magn.* 1980. Vol. 16, no 2. P. 221–225.
DOI: 10.1109/TMAG.1980.1060595
20. *Coleman T.F., Li Y.* An Interior, Trust Region Approach for Nonlinear Minimization Subject to Bounds // *SIAM Journal on Optimization*. 1996. Vol. 6. P. 418–445. DOI: 10.1137/0806023
21. *Dennis J.E., Jr.* Nonlinear Least-Squares // *The State of the Art in Numerical Analysis* / Ed. D. Jacobs. N.-Y., London: Academic Press, 1977. P. 269–312.
22. *Фофанов Я.А., Манойлов В.В.* Высокочувствительное лазерное зондирование и структурная диагностика упорядоченных веществ, материалов, микро- и наносистем. Обзор // *Оптический журнал*. 2024. Т. 91, № 4. С. 26–39. DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-04-26-39

***Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург***

Контакты: *Манойлов Владимир Владимирович,*
manoilov_vv@mail.ru

Материал поступил в редакцию 20.06.2025

COMPARATIVE ANALYSIS OF THE POSSIBILITIES OF POLYNOMIAL AND ANALYTICAL APPROXIMATIONS OF POLARIZATION-OPTICAL RESPONSES OF MAGNETIC NANOFLUIDS

Ya. A. Fofanov, V. V. Manoilov

Institute for Analytical Instrumentation, RAS, St. Petersburg, Russia

A quantitative comparison of the possibilities of polynomial and analytical approximation of weak polarization-optical responses of dilute magnetic nanofluids (NF) is carried out. Estimates of the coefficients of determination are used as criteria for comparing different approximation methods. It is shown quantitatively that for all studied values of the magnetic field, the dependences of the values of weak polarization-optical responses of magnetic NF on concentration are similar in the concentration range of more than three orders of magnitude. The possibilities of using the approximation coefficients for estimating the parameters of the NF under study are considered. The considered methods for approximating experimental data of NF polarization-optical responses are equivalent, since the coefficients of determination for these methods are close to each other. The advantage of the approximation method using an analytical function is that one of the approximation coefficients is directly related to the concentration of the analyzed NF. As a result, there is no need to use calibration curves and perform interpolation in order to estimate the concentration, in contrast to approximation with polynomials. Analytical approximation of the responses of the studied NF by means of dependencies using hyperbolic functions is more sensitive to the outliers in the experimental data than the approximation method based on polynomials. If a polynomial response model is used, the method of estimating concentrations through calibration curves can be successfully applied even when there are noticeable outliers in the experimental data.

Keywords: quantitative polarization-optical analysis, magnetic nanofluids, approximation of experimental data

REFERENCES

1. Fofanov Ya.A. Threshold sensitivity in optical measurements with phase modulation. *Proc. SPIE 1811, The Report of tenth Union Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy*, 1992, pp. 413–414. DOI: 10.1117/12.131190
2. Sokolov I.M., Fofanov Ya.A. Investigations of the small birefringence of transparent objects by strong phase modulation of probing laser radiation. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1995, vol. 12, no. 7, pp. 1579–1588. DOI: 10.1364/JOSAA.12.001579
3. Fofanov Ya.A. [Methods and devices for quantitative analysis of structural birefringence of materials and substances. Overview]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 1999, vol. 9, no. 3, pp. 104–110. (In Russ.). URL: <https://iairas.ru/mag/1999/full3/Art11.pdf>
4. Fofanov Ya.A., Afanas'ev I.I., Borozdin S.N. [Structural birefringence in crystals of optical fluorite]. *Opticheskiy zhurnal* [Journal of Optical Technology], 1998, vol. 65, no. 9, pp. 22–25. (In Russ.).
5. Fofanov Ya.A., Pleshakov I.V., Kuz'min Y.I. Laser polarization-optical detection of the magnetization process of a magnetically ordered crystal. *J. Opt. Technol.*, 2013, vol. 80, no. 1, pp. 64–67. DOI: 10.1364/JOT.80.000064
6. Fofanov Ya. On the analogy in evolution processes and the behavior of a magnetically ordered systems. *Natural Science*, 2013, vol. 5, no. 4A, pp. 14–17. DOI: 10.4236/ns.2013.54A003
7. Fofanov Ya.A., Bardin B.V. [On the polarization responses of the objects with a small optical anisotropy]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2016, vol. 26, no. 1, pp. 58–61. DOI: 10.18358/np-26-1-i5861 (In Russ.).
8. Kuraptsev A.S., Sokolov I.M., Fofanov Ya.A. Coherent specular reflection of resonant light from a dense ensemble of motionless point-like scatters in a slab geometry. *Int. J. Mod. Phys. Conf. Ser.*, 2016, vol. 41, id. 1660141, pp. 1–9. DOI: 10.1142/S2010194516601411
9. Fofanov Ya.A., Pleshakov I.V., Prokof'ev A.V., Bibik E.E. Investigation of polarization magnetooptic responses of a low-concentration ferrofluid. *Tech. Phys. Lett.*, 2016, vol. 42, pp. 1054–1056. DOI: 10.1134/S1063785016100205
10. Fofanov Ya., Vetrov V., Ignatenkov B. Laser polarization-optical sounding of optical crystals and ceramics. *2018 International Conference Laser Optics (ICLO)*. IEEE, 2018, pp. 406–406. DOI: 10.1109/LO.2018.8435268
11. Scherer C., Figueiredo Neto A.M. Ferrofluids: Properties and applications. *Brazilian Journal of Physics*, 2005, vol. 35, no. 3A, pp. 718–727. DOI: 10.1590/S0103-97332005000400018
12. Nepomnyashchaya E.K., Prokofiev A.V., Velichko E.N. et al. Investigation of magneto-optical properties of ferrofluids by laser light scattering techniques.

- J. Magn. Magn. Mater.*, 2017, vol. 431, Proc. of ICMF-14, pp. 24–26. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.10.002
13. Davis H.W., Llewellyn J.P. Magnetic birefringence of ferrofluids: I. Estimation of particle size. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1979, vol. 12, no. 2, pp. 311–319. DOI: 10.1088/0022-3727/12/2/018
 14. Fofanov Ya.A., Manoilov V.V., Zarutskiy I.V., Bardin B.V. [On the similarity of the polarization-optical responses of magnetic nanofluids. Part I. Approximation for weak fields]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2018, vol. 28, no. 1, pp. 45–52. DOI: 10.18358/np-28-1-i4552 (In Russ.).
 15. Fofanov Ya.A., Manoilov V.V., Zarutskiy I.V., Bardin B.V. [On the similarity of the polarization-optical responses of magnetic nanofluids. Part II. Assessment of the statistical significance of regression coefficients]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2018, vol. 28, no. 2, pp. 54–62. DOI: 10.18358/np-28-2-i5461 (In Russ.).
 16. Fofanov Ya.A., Manoilov V.V., Zarutskiy I.V., Kuraptsev A.S. Statistical analysis of the data of highly sensitive laser polarization-optical probing of magnetic nanofluids. *J. Opt. Technol.*, 2020, vol. 87, no. 2, pp. 94–99. DOI: 10.1364/JOT.87.000094
 17. Fofanov Ya.A., Manoilov V.V., Zarutskiy I.V., Kuraptsev A.S. [Laser polarization-optical diagnostics of ordered objects and structures]. *Izvestiya RAN. Seriya physicheskaya* [Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.], 2020, vol. 84, no. 3, pp. 341–344. DOI: 10.31857/S0367676520030114 (In Russ.).
 18. Skibin Yu.N., Chekanov V.V., Raikher Yu.L. [Birefringence in a ferromagnetic liquid]. *ZhETF* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 1977, vol. 72, iss. 3, pp. 949–955. (In Russ.).
URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=19083100>
 19. Scholten P.C. The origin of magnetic birefringence and dichroism in magnetic field. *IEEE Trans. Magn.*, 1980, vol. 16, no 2, pp. 221–225. DOI: 10.1109/TMAG.1980.1060595
 20. Coleman T.F., Li Y. An Interior, Trust Region Approach for Nonlinear Minimization Subject to Bounds. *SIAM Journal on Optimization*, 1996, vol. 6, no. 2, pp. 418–445. DOI: 10.1137/0806023
 21. Dennis J.E., Jr. Nonlinear Least-Squares. *The State of the Art in Numerical Analysis*, D. Jacobs (ed.). Academic Press, New York, 1977, pp. 269–312.
 22. Fofanov Ya.A., Manoilov V.V. Highly sensitive laser probing and structural diagnostics of ordered substances, materials, and micro- and nano-systems [Review]. *J. Opt. Technol.*, 2024, vol. 91, no. 4, pp. 228–235. DOI: 10.1364/JOT.91.000228

Contacts: *Manoilov Vladimir Vladimirovich*,
manoilov_vv@mail.ru

Article received by the editorial office on 20.06.2025

INTRODUCTION

Knowledge of the features of laser radiation propagation through the measuring system with the objects under study located in it allows us to record their structural changes, which are important for many applications [1–13]. Approximation of magnetic dependences of weak polarization responses is an important element of the technique of quantitative analysis of the effect of a magnetic field on magnetic nanofluids (NF). The works [14, 15] describe the techniques of polynomial estimation of the approximation coefficients of these dependences for magnetic NF based on magnetite in kerosene, and the works [16, 17] describe the methods of their approximation by analytical functions considered in [18, 19]. As shown in the work [17], the values of the coefficients of analytical approximation can differ significantly from the predicted ones due to the technological errors in the synthesis of NF samples of different concentrations under study. In addition, to solve systems of normal equations by the optimization method, a preliminary program for determining the initial conditions is required [16, 17]. The purpose of this work is to compare two algorithms for approximating the magnetic dependences under study: 1) approximation using polynomials of different degrees, 2) approximation using an analytical function. Estimates of the coefficients of determination are used as comparison criteria, or, in other words, comparison metrics.

APPROXIMATION OF POLARIZATION RESPONSES USING POLYNOMIALS OF VARIOUS DEGREES

Approximation of the studied dependences of the polarization-optical responses of the NF on the magnetic field using polynomials of degrees from the second to the fourth is performed as follows [14]. We take into account that the response signals y_i depend on the magnetic field strength H_i , where i varies from 1 to n . These dependencies are approximated using the function $\Psi_m^{(\text{app})}(k_{jm}, H_i)$:

$$\Psi_m^{(\text{app})}(k_{jm}, H_i) = \sum_{j=0}^m k_{jm} (H_i)^j, \quad (1)$$

where H_i is the magnetic field strength; $i = 1, 2, \dots, n$ is the number of points; $m = 2, 3, 4$ is the degree of the polynomial.

Summation over the index m on the right-hand side of equation (1) is not performed, since this index takes one specific value at each summation operation, corresponding to the degree of the polynomial used for approximation. The coefficients k_{jm} for terms with degrees (H_i) are calculated by minimizing the sum of

the squares of the deviations $S_m(k_{jm})$ of the experimental data from the approximating function (1):

$$S_m(k_{jm}) = \sum_{i=1}^n [y_i - \Psi_m^{(\text{app})}(k_{jm}, H_i)]^2 \rightarrow \min, \quad (2)$$

where on the left-hand side of the equation, k_{jm} denotes the set of approximation coefficients corresponding to a given value of m (the degree of the polynomial used).

The statistical indicators used in regression analysis to assess how well the selected model fits the experimental data are the coefficients of determination. The determination coefficient is calculated using the following formula:

$$R = 1 - \text{SSE} / \text{SST}, \quad (3)$$

where SSE is the sum of the squares of the deviations of the experimental data from the approximating curve, SST is the generalized dispersion of the experimental data in the measured range, i.e. the dispersion of the values of the measured quantities of the polarization-optical response signals, multiplied by $N - 1$. Here N is the number of experimental data.

Let us now perform a quantitative comparison of the determination coefficients of the approximating polynomials for the results of experiments with NF, which are described in [9]. Table 1 presents the values of the NF concentration for experiments 1–8, as well as the determination coefficients for the approximating functions.

Tab. 1. Concentration of magnetic NFs for experiments 1–8 and coefficients of determination for polynomials of different degrees approximating the responses of magnetic NFs of various concentrations

Analysis of the data presented in Tab. 1, shows that even the lowest values of the coefficients of determination exceed the level of 0.9, which indicates the correspondence of the polynomials selected for approximation to the nature of the experimental data for different concentrations. Figure 1 shows the dependencies of the results of approximating the responses of NFs of different concentrations using 4th degree polynomials on the values of the magnetic field strength.

Fig. 1. Dependencies of logarithms of approximation functions of responses of magnetic NFs of various concentrations on values of magnetic field strength for polynomials of the 4th degree.

As can be seen from Fig. 1, the polynomial models of the dependences of the response values on the NF concentrations for all values of the magnetic field strength are similar. The dependences shown in Fig. 1 can be used as calibration curves for estimating the concentrations of magnetic NFs. The model curve for a magnetic NF with an unknown concentration falls between two dependences with known concentrations. For example, the curve shown in Fig. 1 by the dashed line represents the response values of a magnetic NF of a concentration of 0.0002. It is evident that such a curve is located between curves 6 and 7 for concentrations of 0.001 and 0.0001%. A more accurate concentration value can be found by linear interpolation using the response values of magnetic NFs with known concentrations.

APPROXIMATION OF EXPERIMENTAL DATA OF POLARIZATION-OPTICAL RESPONSES USING AN ANALYTICAL FUNCTION

We performed the analytical approximation using the function $F(p)$, presented in [19]:

$$\varphi^{(\text{app})}(\alpha, \beta, x) = F(p), \quad (4)$$

where $F(p) = 1 - 3/p \coth(p) + 3/p^2$, $p = \mu H / kT$, μ is the magnetic moment of the particles, H is the magnetic field strength, k is the Boltzmann constant, T is the temperature, the coefficient α is determined by the magneto-optical parameters of the magnetic particles and is proportional to their volume concentration and does not depend on the field. In the process of approximation, the values of the parameter p are determined by the formula $p = \beta x$. Here α and β are variable dimensionless coefficients, and x is an auxiliary independent and dimensionless variable.

When performing the analytical approximation, the function $\varphi^{(\text{app})}(\alpha, \beta, x)$ defined by formula (4) was substituted into the right-hand side of formula (2) instead of the function $\Psi_m^{(\text{app})}(k_{jm}, H_i)$. Then, by varying the coefficients α and β , the minimum of the function $S(\alpha, \beta)$ was determined in accordance with the right-hand side of equation (2). A more detailed description of the method for finding the minimizing values of the coefficients α and β is given in [16, 17]. In this case, numerical optimization algorithms were used [20, 21].

Tab. 2. Concentration of magnetic NFs for experiments 1–8 and coefficients of determination for approximating analytical functions using coefficients α and β

Table 2 shows the NF concentration values for experiments 1–8, the determination coefficients for the approximating analytical functions using the coefficients α and β .

For clarity of comparison of the approximation methods using polynomials and analytical functions, Fig. 2 shows the dependences of the coefficients of determination for approximation by means of a 4th degree polynomial and an analytical function.

Fig. 2. Dependencies of the determination coefficients for approximating experimental data of magneto-optical responses of magnetic NFs on concentration.

The values of the coefficients of determination given in Tabs. 1 and 2 for polynomial approximation and approximation using an analytical function are close to each other. This circumstance allows us to assert that both approximation methods are equivalent. The advantage of the approximation method using an analytical function is that the coefficient α is directly related to the concentration of the analyzed NF, and to estimate the concentration, there is no need to use calibration curves and perform interpolation, as in the case of using approximation with polynomials.

The method of finding the coefficients α and β described in [17] does not allow finding the exact values of the specified coefficients due to the random outliers in the experimental data. Even a small number of outliers can significantly distort the values of the coefficients α and β , which characterize the parameters of the studied magnetic NF. As an example, Fig. 3 shows the dependence of the response values of magnetic NF with a concentration of 0.001 on the magnetic field.

Fig. 3. Dependency of the analytical approximating function of the responses of magnetic NF of a concentration of 0.001% on the values of the magnetic field strength with two outliers in the experimental data.

In the experimental data presented in Fig. 3, the values of the measured responses are replaced by outliers. Indeed, as a result of calculations for the experimental data shown in Fig. 3, the values of the coefficients were equal to $\alpha = 0.0157$ and $\beta = 0.0449$. In the absence of outliers: $\alpha = 0.0121$ and $\beta = 0.0537$. The predicted values for this concentration are $\alpha = 0.0125$ and $\beta = 0.0513$. For data with outliers, the determination coefficient was equal to 0.965 instead of 0.999.

A small number of outliers in the experimental data when using the polynomial approximation method and the calibration curves shown in Fig. 1 changes the nature of the calibration curves little, and the method

of estimating concentrations with calibration curves can be successfully used. If we apply the approximation by a 4th-degree polynomial to data with outliers, the determination coefficient decreases only to 0.996 instead of 0.998 for data without outliers. Figure 4 shows a fragment of the dependencies of the logarithms of the polynomial models of the responses of magnetic NFs of three concentrations: $\mathfrak{D}5$ — 0.003%, $\mathfrak{D}6$ — 0.001% and $\mathfrak{D}7$ — 0.0001% of the magnetic field strength values shown in Fig. 1.

Fig. 4. Dependencies of the logarithms of the polynomial response models on the values of the magnetic field strength for various NF concentrations. $\mathfrak{D}5$ — 0.003%, $\mathfrak{D}6$ — 0.001%, $\mathfrak{D}7$ — 0.0001%; the dotted line is the function corresponding to the approximating polynomial for data distorted by outliers at an NF concentration of 0.001%

The data for NFs with a concentration of 0.001 ($\mathfrak{D}6$) were distorted by outliers. In Figure 4, the dotted line on a logarithmic scale shows the function corresponding to the approximating polynomial for data distorted by outliers. As can be seen in Fig. 4, the presence of outliers did not greatly change the shape of the approximating function. A slight change in the approximating function for data distorted by outliers is evidenced by a small change in the determination coefficient shown above.

DISCUSSION

Using the considered algorithms of approximation of experimental data, it is possible to estimate the parameters of the studied magnetic NF. For example, polynomial approximation allows us to estimate the concentration of the studied NF by means of calibration curves. When using the analytical function, the concentration of the studied NF can be estimated by

applying the value of the dimensionless coefficient α obtained as a result of approximation. This demonstrates the possibility of determining, using the developed algorithms and methods, some (unknown) physical parameters from the recorded polarization responses and the values of other (known) parameters. Knowledge of the numerical values of the NF parameters also allows us to compare their polarization magneto-optical characteristics with the characteristics of other systems of different nature and composition. This, in turn, opens up prospects for a broader, informational approach to the further development and application of highly sensitive laser methods for comparative studies of magnetic nanofluids and other ordered substances, materials, and systems [5, 10, 22].

CONCLUSIONS

1. The methods of approximation of experimental data of polarization-optical responses of NFs by the methods considered above are equivalent, since the coefficients of determination for these methods are close to each other. The advantage of the approximation method using an analytical function is that the coefficient α is directly related to the concentration of the analyzed NF, and to estimate the concentration there is no need to use calibration curves and carry out interpolation, as is necessary when approximating using polynomials.

2. Analytical approximation of the responses of the studied NFs using dependencies with hyperbolic functions is more sensitive with outliers in the experimental data than the approximation method based on polynomials.

3. If a polynomial response model is used, the calibration curves method of estimating concentrations can be successfully applied even when there are noticeable outliers in the experimental data.