

УДК 681.518.3: 535.243.2

В. Г. ПЕТРУК^а, С. М. КВАТЕРНЮК^а, А. П. ІВАНОВ^б, В. В. БАРУН^б

МОДЕЛЮВАННЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО СПЕКТРОПОЛЯРИЗАЦІЙНИХ ЗОБРАЖЕНЬ ОПТИЧНО М'ЯКИХ ЧАСТИНОК ПОЛІДИСПЕРСНИХ БІОЛОГІЧНИХ СЕРЕДОВИЩ

^а *Вінницький національний технічний університет,
21010, Хмельницьке шосе, 95, м.Вінниця, Україна,
тел.: +380 (432) 59-84-43, E-mail: petrukvg@gmail.com*

^б *Інститут фізики НАН Білорусі,
220072, пр. Ф. Скоріни, 70, м.Мінськ, Білорусь,
тел.: +375 (17)284 -07-91, E-mail: ivanovap@dragon.bas-net.by*

Анотація. Здійснено математичне моделювання спектрополяризаційних зображень оптично м'яких частинок полідисперсних біологічних середовищ методом Монте-Карло з використанням поєднання різних наближених підходів до світлорозсіювання частинок та їх внутрішніх включень.

Ключові слова: метод Монте-Карло, оптично м'які частинки, полідисперсні біологічні середовища.

ВСТУП

Морфологічні характеристики різноманітних частинок полідисперсних біологічних середовищ відрізняються досить широкою варіабельністю розмірів та форм. З погляду оптики ці частинки є тривимірним розподілом речовини зі змінною оптичною щільністю. У видимій області світла можливо як мале поглинання, так і досить велике на характеристичних довжинах хвиль різноманітних біохімічних сполук та пігментів. Для випадку однорідних оптично м'яких частинок відбувається рефракція і мікрофокусування світла відповідно до форми їх поверхні. Для випадку частинок зі складною внутрішньою структурою окремо визначається вплив на світлорозсіювання всіх видів неоднорідних включень. Крім того, при проходженні поляризованого випромінювання через оптично активну речовину здійснюється обертання вектора поляризації на кут пропорційний концентрації цієї речовини. Аналіз поширення і розсіювання випромінювання у полідисперсному біологічному середовищі зводиться до розгляду характеристик розсіювання і поглинання окремих частинок з подальшим врахуванням концентраційних ефектів і полідисперсності суспензії [1].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Метою дослідження є розроблення математичних моделей формування спектрополяризаційних зображень оптично м'яких частинок полідисперсних біологічних середовищ для забезпечення можливості створення нових засобів контролю та діагностики [7], що дозволять підвищити достовірність контролю форми та розмірів цих частинок у порівнянні з традиційними методами, наприклад, проточною скануючою цитометрією [2]. Теоретичні ж результати, одержані при цьому, доповнять деякі не вивчені раніше аспекти оптики світлорозсіювання, зокрема, теорії переносу зображення у полідисперсних біологічних середовищах.

МЕТОДИКА МОДЕЛЮВАННЯ СВІТЛОРозСІЮВАННЯ ОПТИЧНО М'ЯКИХ ЧАСТИНОК ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ НАБЛИЖЕННЯ ГЕОМЕТРИЧНОЇ ОПТИКИ

При виконанні умови $\rho \gg 1$ для моделювання світлорозсіювання частинками можна використати наближення геометричної оптики, при якому падаючу плоску хвилю можна представити у вигляді великої кількості променів, поведінка яких на границі поділу двох середовищ відповідає

формулам Френеля та закону Снеліуса [3]. Схема поширення світлових променів у частинці за методом геометричної оптики (ГО) наведена на рис.1.а.

Будемо розділяти промені з площиною поляризації, що лежить у площині падіння (p) та перпендикулярні площині падіння (s). Промені, отримані при відбиванні і заломленні початкового променя називають похідними, так, у точці A_i утворюються промені першої похідної. Промені мають такі властивості: падаючий L_{pi} , відбитий L_{ri} і заломлений L_{ti} промені лежать у одній площині, утвореній падаючим променем L_{pi} та нормаллю до поверхні частинки L_{ni} ; всі похідні p -променя – p -промені, а s -променя – s -промені; інтенсивність падаючого променя рівна сумі інтенсивностей його похідних.

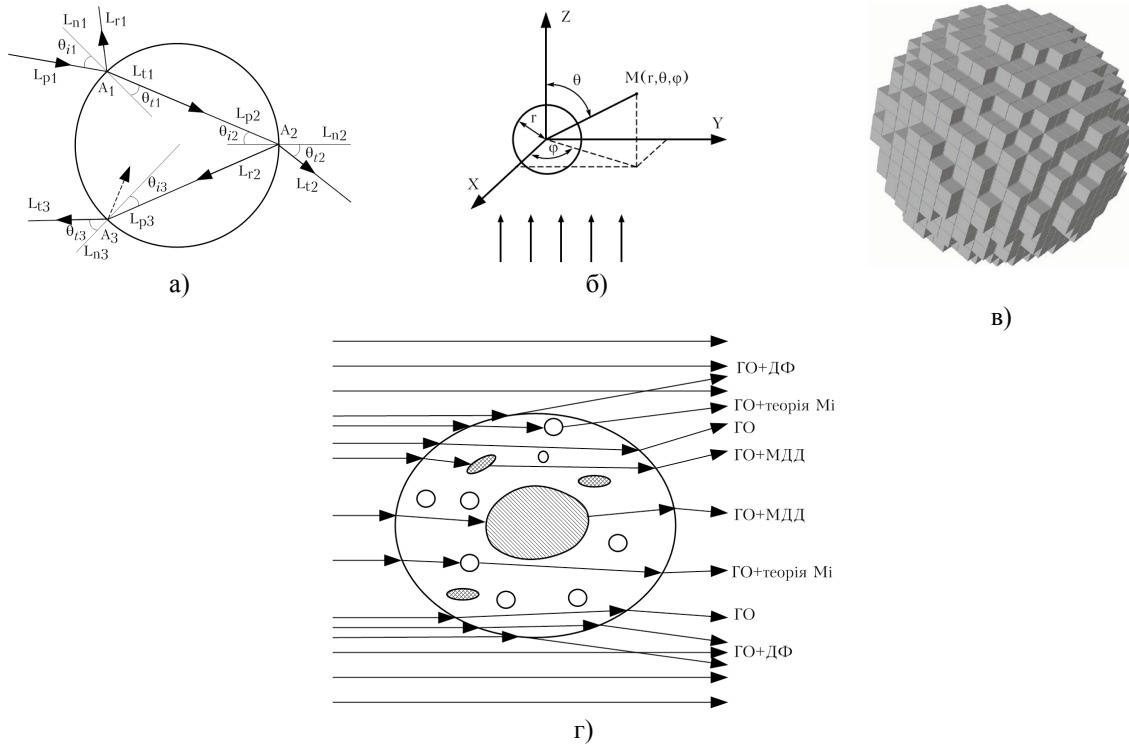


Рис. 1. Моделі світлорозсіювання оптично м'яких частинок полідисперсних біологічних середовищ:
 а) наближення геометричної оптики; б) теорія Мі;
 в) метод дискретних диполів; г) метод Монте-Карло, гібридна апроксимація

На початку розрахунку тривимірне рівняння поверхні частинки задане у сферичній системі координат $\rho(\varphi, \theta)$ перетворюється до декартової системи. Падаючий промінь задаємо параметричною прямою $L_{p1}(t)$, що визначається вектором колінеарним падаючому променю та початковою точкою A_0 . Шукаємо точку перетину A_1 падаючого променя $L_{p1}(t)$ та поверхні частинки $\rho(\varphi, \theta)$ вирішуючи чисельним методом систему рівнянь та розпочавши ітерації з точки A_0 :

$$\begin{cases} m_{p1_0} \cdot t + x_{A_0} = \sin(\varphi) \cos(\theta) \rho(\varphi, \theta), \\ m_{p1_1} \cdot t + y_{A_0} = \sin(\varphi) \sin(\theta) \rho(\varphi, \theta), \\ m_{p1_2} \cdot t + z_{A_0} = \cos(\theta) \rho(\varphi, \theta). \end{cases} \quad (1)$$

Далі будемо нормаль до поверхні у точці перетину A_1 . Використовуємо полігональне наближення поверхні частинки, тобто представимо її сукупністю маленьких трикутників. Обчислимо координати допоміжного трикутника, одна з вершин якого точка A_1 , а дві інші A_1' та A_1'' лежать у її

околі, при цьому нормаль до поверхні $m_{n1} = m_{A_1A_1'} \times m_{A_1A_1''}$. Нормаль утворена до площини цього трикутника буде тим точніше збігатись з нормаллю до поверхні чим менші розміри допоміжного трикутника будуть використані. Оскільки поверхні досліджуваних частинок не мають різких вигинів такий підхід є прийнятним.

Далі знайдемо векторний добуток вектора m_{p1} колінеарного падаючому променю та вектора m_{n1} нормалі до поверхні, отримавши, таким чином, вісь обертання необхідну для обчислення відбитого і заломленого променів та обчислюємо його нормоване значення: $m_{axic1} = m_{p1} \times m_{n1}$, $m_{axic1_n} = m_{axic1} / |m_{axic1}|$. Обчислимо кут падіння θ_{i1} , як кут між векторами m_{p1} та m_{n1} . Для того, щоб знайти відбитий промінь L_{r1} у точці A_1 знайдемо кут повороту $\theta_{rot1_1} = 2 \cdot \theta_{i1}$. Використавши матрицю повороту M_{rot1_1} на кут θ_{rot1_1} навколо осі заданої одиничним вектором m_{axic1_n} знайдемо вектор m_{r1} колінеарний відбитому променю в точці A_1 : $m_{r1} = M_{rot1_1} \cdot m_{p1}$. На основі цього вектора та координат точки A_1 знаходимо відбитий промінь заданий параметрично $L_{r1}(t)$.

Використавши закон Снелліуса обчислимо кут заломлення $\theta_{t1} = \arcsin(n_{plazma} \theta_{i1} / n_{cell})$, де n_{cell} , n_{plazma} – показники заломлення клітини і плазми. Для того, щоб знайти заломлений промінь L_{t1} у точці A_1 знайдемо кут повороту $\theta_{rot1_2} = \pi + \theta_{i1} - \theta_{t1}$. Використавши матрицю повороту M_{rot1_2} на кут θ_{rot1_2} навколо осі заданої одиничним вектором m_{axic1_n} знайдемо вектор m_{t1} колінеарний заломленому променю A_1 $m_{t1} = M_{rot1_2} \cdot m_{p1}$. Відповідний заломлений промінь у точці A_1 заданий параметрично $L_{t1}(t)$. Заломлений промінь L_{t1} є падаючий променем для точки A_2 $L_{p2} = L_{t1}$. Процедура пошуку відбитого і заломленого променя у точці A_2 повторюється. Однак слід врахувати, що у даному випадку промінь поширюється з більш оптично щільного середовища клітини у менш оптично щільне середовища плазми, а тому може виникнути явище повного внутрішнього відбиття. Кут повного внутрішнього відбиття $\theta_{pvv} = \arcsin(n_{plazma} / n_{cell})$ при значенні відносного показника заломлення клітини від 1,037..1,055 буде $74,6^\circ \dots 71,4^\circ$. Коефіцієнти відбивання та пропускання обчислюються за формулами Френеля. Результати моделювання у Mathcad 13.0 коефіцієнтів відбивання та пропускання на границі двох середовищ плазми та клітини наведено на рис. 2.

Далі повторимо процес знаходження похідних падаючого променя для наступних точок A_2 , $A_3 \dots A_{max}$, процес можливо зупинити коли внесок наступної похідної променя стане меншим встановленої похибки моделювання.

Після трасування всіх похідних променів визначаються точки їх перетину з площиною вихідного екрану. Розраховуються довжини відрізків $A_0 A_1$, $A_1 A_2$, $A_2 A_{e1}$ і т.д., які проходить кожний промінь та фаза коливання у вихідній точці з врахуванням різних відносних коефіцієнтів заломлення на кожному відрізку:

$$\varphi_{s_Ae} = \frac{2 \cdot \pi \cdot n \left(m_{plazma} L_{A0A1} + m_{cell} L_{A1A2} + m_{plazma} L_{A2Ae} \right)}{\lambda}, \quad (2)$$

де n – абсолютний коефіцієнт заломлення навколишнього середовища,
 m_{plazma} , m_{cell} – відносні коефіцієнт заломлення на кожному з відрізків,
 L_{A0A1} , L_{A1A2} , L_{A2Ae} – довжини відповідних відрізків,
 λ – довжина хвилі падаючого випромінювання у вакуумі.

У кожній точці, у якій відбувається відбивання і заломлення, тобто утворення похідних променів, обчислюється коефіцієнти відбивання і пропускання для s- і p- компонент падаючого випромінювання. Перемноживши відповідні складові коефіцієнтів відбивання і пропускання на всіх відрізках можна знайти амплітуду коливання у точці A_{e1} . За умови одиничної амплітуди з джерела випромінювання:

$$k_{t_s_Ae_2} = k_{t_s_A1} k_{t_s_A2}, \quad (3)$$

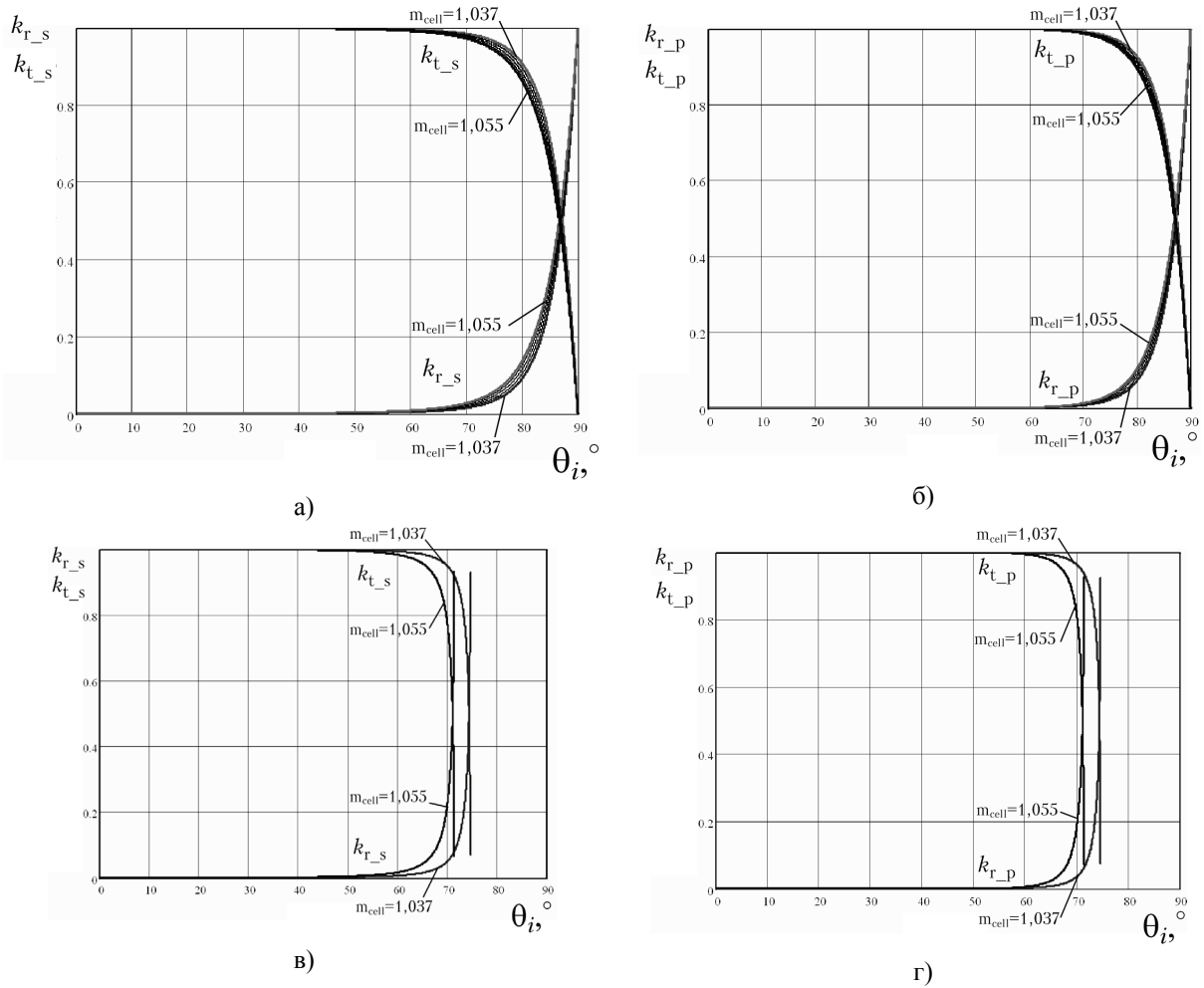


Рис. 2. Моделювання коефіцієнтів відбивання та пропускання на границі плазми та клітини для випадку входження променя із плазми у клітину (а, б) і навпаки (в, г) для s-поляризації (а, в) та р-поляризації (б, г) для відносного показника заломлення клітини від 1,037 до 1,055

$$k_{t_s_Ae_4} = k_{t_s_A1} k_{p_s_A2} k_{p_s_A3} k_{t_s_A4}, \quad (4)$$

$$k_{t_s_Ae_6} = k_{t_s_A1} k_{p_s_A2} k_{p_s_A3} k_{p_s_A4} k_{p_s_A5} k_{t_s_A6} \dots \quad (5)$$

Для кутів падіння до 60° коефіцієнт пропускання для досліджуваних оптично м'яких частинок близький до одиниці, а коефіцієнт відбивання близький до нуля. Відповідно амплітуда сигналу для променів другої похідної (3) перевищує амплітуду сигналів для променів четвертої (4) та шостої (5) похідної більш ніж на три-чотири порядки. Тобто, якщо відкинути ці похідні методична похибка моделювання світлорозсіювання для таких оптично м'яких частинок буде не більше 0,1%.

Відповідно, представивши коливання у комплексному виді, можливо обчислити їх дійсну та уявну складову:

$$k_{Re_t_s_Ae} = k_{t_s_Ae} \cos(\varphi_{s_Ae}), \quad k_{Im_t_s_Ae} = k_{t_s_Ae} \sin(\varphi_{s_Ae}), \quad (6)$$

$$k_{Re_t_p_Ae} = k_{t_p_Ae} \cos(\varphi_{p_Ae}), \quad k_{Im_t_p_Ae} = k_{t_p_Ae} \sin(\varphi_{p_Ae}). \quad (7)$$

Знайшовши відповідні значення за формулами (6-7) для великої кількості променів здійснюється їх усереднення за допомогою багатовимірної регресії. Після усереднення можливо розрахувати амплітуди та фази s- і p- компонент випромінювання:

$$\langle k_{s_Ae} \rangle = \sqrt{\langle k_{Re_t_s_Ae} \rangle^2 + \langle k_{Im_t_s_Ae} \rangle^2}, \quad \langle \varphi_{s_Ae} \rangle = \arctg \left(\frac{\langle k_{Re_t_s_Ae} \rangle}{\langle k_{Im_t_s_Ae} \rangle} \right). \quad (8)$$

$$\langle k_{p_Ae} \rangle = \sqrt{\langle k_{Re_t_p_Ae} \rangle^2 + \langle k_{Im_t_p_Ae} \rangle^2}, \quad \langle \varphi_{p_Ae} \rangle = \arctg \left(\frac{\langle k_{Re_t_p_Ae} \rangle}{\langle k_{Im_t_p_Ae} \rangle} \right). \quad (9)$$

При формуванні спектрополяризаційного зображення на екрані окрім променів, які проходять через частинку і розсіюються слід врахувати також промені що огинають частинку. В результаті відбувається між світлом, що розсіюється частинкою і світлом, що проходить повз частинку відбувається дифракція Фраунгофера в площині екрану.

МОДЕЛЮВАННЯ МЮЛЛЕР-МАТРИЧНИХ ЗОБРАЖЕНЬ ОПТИЧНО М'ЯКИХ ЧАСТИНОК ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО ТА ГІБРИДНОЇ АПРОКСИМАЦІЇ

Зменшення похибки моделювання вимагає збільшення кількості променів, що та приводить до пропорційного збільшення часу моделювання. Для підвищення точності моделювання доцільно розпаралелити процес моделювання, що можна здійснити за рахунок використання методу Монте-Карло, оскільки це дозволить незалежно розраховувати траєкторії фотонів. Програму можна виконувати незалежно на великій кількості комп'ютерів M_c з різною працездатністю та різним часом моделювання $t_{i\bar{a}_i}$ кожний з яких обчислить N_i траєкторій. Далі результати моделювання об'єднують та здійснюється їх усереднення за допомогою багатовимірної регресії.

Моделювання світлорозсіювання за допомогою методу Монте-Карло враховує поглинання та розсіювання на всьому оптичному шляху фотона через середовище. Відстань між двома зіткненнями вибирається з логарифмічного розподілу. Для врахування поглинання кожному фотону присвоюється вага, що зменшується при поширенні через середовище. При розсіюванні на гранулі вибирається новий напрям поширення у відповідності з випадковим числом згенерованим за розподілом відповідним до фазової функції Хен'ї-Грінштайна чи індикатриси розсіювання для хаотично орієнтованих частинок різної форми. Метод Монте-Карло включає в себе такі етапи: генерація джерела фотонів, розрахунок траєкторії, розсіювання та поглинання, реєстрація. Для генерації джерела фотонів їх просторовий розподіл задаємо таким:

$$x_{A0i} = X_0 + rnd(Lx); \quad y_{A0i} = Y_0 + rnd(Ly); \quad z_{A0i} = 0, \quad (10)$$

де $rnd(Lx)$ та $rnd(Ly)$ – функція, що генерує випадкові числа від 0 до Lx та Ly згідно з обраним законом розподілу.

Кутовий розподіл визначається одиничним вектором, направленим у напрямку осі z . Реальному джерелу випромінювання (наприклад, променю He-Ne лазера) більше відповідає просторовий та кутовий Гаусів розподіл випромінювання.

Існує ряд схем розрахунку за методом Монте-Карло – моделювання траєкторій руху фотонів у розсіюючому середовищі; використанням «ваги» фотону, що відповідає моделюванню для пакетів, які складаються з великої кількості фотонів, де «вага» пропорційна їх кількості та інші [5]. Використаємо останню. Для частинок з однорідним вмістом, наприклад, еритроцитів, при моделюванні траєкторій фотонів використаємо наближення геометричної оптики та дифракції Фраунгофера. Тобто траєкторія фотона буде починатись від джерела випромінювання до поверхні частинки, далі напрям фотона буде визначатись ймовірностями руху по траєкторії відбиття чи проходження пропорційними коефіцієнту відбиття чи проходження відповідно. Аналогічна ситуація буде на зворотній стороні частинки. Тобто, фактично, якщо кожний фотон має свою умовну «вагу», вона перерозподіляється між похідними траєкторіями його руху, то чисельно результат моделювання буде аналогічним наближенню

геометричної оптики та дифракції Фраунгофера, за виключенням того, що кожне обчислення є незалежним і процес моделювання може бути багатократно розпаралелений. Похибка обчислень при застосуванні методу Монте-Карло обернено пропорційна їх квадратному кореню: $1/\delta \sim \sqrt{N_{iE}}$. Для частинок, що мають ядро і гранули, наприклад, лімфоцитів, необхідно використати гібридну апроксимацію, тобто частинка загалом моделюється за допомогою геометричної оптики та дифракції Фраунгофера, світлорозсіювання ядра та гранул визначається індикатрисами, розрахованими за теорією Мі (для сферичних включень) [3] (рис.1.б) та методом дискретних диполів (для включень складної форми) [4] (рис.1.в). При розсіюванні на гранулі вибирається новий напрям поширення у відповідності з випадковим числом згенерованим за розподілом відповідним до індикатрис розсіювання для хаотично орієнтованих частинок різної форми розрахованої одним з вказаних методів. Схема розрахунку траєкторій для оптично м'яких частинок складної структури для методу Монте-Карло та гібридної апроксимації наведена на рис.1.г.

При проходженні фотона через зовнішнє середовище (плазму чи фізрозчин), цитоплазму клітини, ядро чи гранули він може поглинутись з ймовірністю, що визначається коефіцієнтом поглинання середовища та довжиною шляху: $p = 1 - \exp(-\mu_a L)$, де μ_a – питомий коефіцієнт поглинання, L – довжина траєкторії фотону. Для оптично м'яких частинок характерний дуже малий коефіцієнт поглинання, тому при моделюванні, як правило, нехтують поглинанням у частинці, а більше враховують заломлення випромінювання та зміну його фази при проходженні через більш оптично щільне середовище.

Після повторення процедури моделювання для досить великої кількості пакетів фотонів розраховується карта розсіяного випромінювання. Таким чином реєструється статистичний відгук розсіювання та поглинання падаючих фотонів середовищем, а також їх кутовий та просторовий розподіл. Результати моделювання у Mathcad 13.0 еритроцитів за допомогою методу Монте-Карло наведено на рис.3.

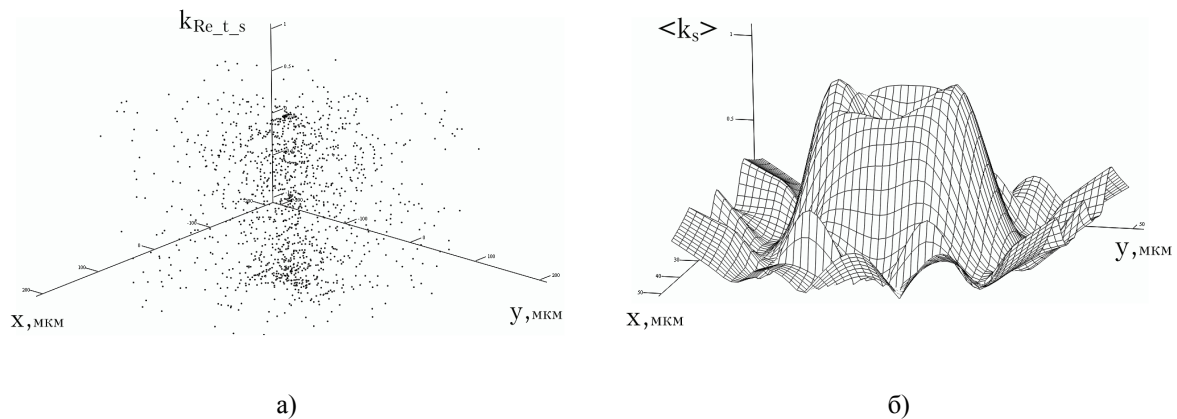


Рис. 3. Результати моделювання світлорозсіювання еритроцитів за допомогою методу Монте-Карло:
 а) множина точок для амплітуда s-компоненти випромінювання,
 б) амплітуда сигналу після багатовимірної регресії

Параметри Стокса на виході оптичної системи пов'язана з параметрами джерела випромінювання за допомогою матриці Мюллера [6]:

$$S_{a\bar{a}\bar{o}} = MS_{\bar{a}\bar{o}} \quad (12)$$

Обчисливши комплексні елементи матриці Джонса \mathbf{T} у кожній точці зображення визначимо обчислимо елементи матриці Мюллера, за формулами, що їх пов'язують [6]. У такому випадку при виведенні зображення можливе обмеження по яскравості. Для цього отримання зображень вищої якості здійснимо їх обробку, масштабувавши значення сигналу на весь діапазон яскравості зображення. Результати моделювання Mathcad 13.0 спектрополяриметричних зображень для параметрів Стокса на виході системи та елементів матриці Мюллера наведено на рис.4. Аналогічні дослідження проводимо на інших довжинах хвиль, отримавши, таким чином масив зображень матриць Мюллера для всього спектрального діапазону. Отримані

зображення порівнюються з даними, отриманими експериментально [7].

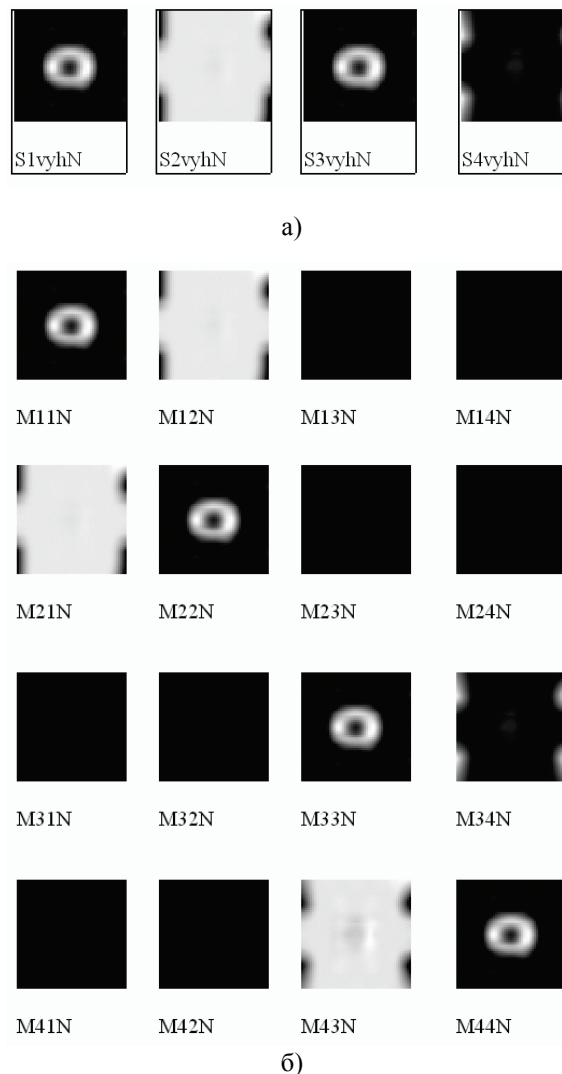


Рис. 4. Результати моделювання спектрополяриметричних зображень: еритроцита для параметрів Стокса на виході системи (а) та елементів матриці Мюллера (б)

ВИСНОВКИ

Запропоновано математичну модель формування спектрополяриметричних зображень оптично м'яких частинок полідисперсних біологічних середовищ за допомогою методу Монте-Карло та гібридної апроксимації, що дозволила врахувати як особливості параметрів світлорозсіювання, що визначаються тривимірною формою їх поверхні, так і складною внутрішньою будовою.

Дослідження виконувались у рамках міжнародних україно-білоруських проектів кафедри екології та екологічної безпеки Вінницького національного технічного університету та лабораторії оптики світлорозсіювальних середовищ Інституту фізики ім. Степанова Національної Академії Наук Білорусі за підтримки Управління міжнародного науково-технічного співробітництва Міністерства освіти і науки України та Державного комітету з науки і технологій Республіки Білорусь.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Лопатин В. Н. Введение в оптику взвесей клеток / В.Н. Лопатин, Ф.Я. Сидько. – Новосибирск: Наука, 1988. – 240 с.
2. Мальцев В.П. Сканирующая проточная цитометрия: автореф. дис. на соискание учен. степ. д-ра физ.-мат. наук : спец. 01.04.05 “Оптика” / Мальцев Валерий Павлович; Институт химической

- кинетики и горения СО РАН. – Новосибирск, 2000. – 30 с.
3. Борен К. Поглощение и рассеяние света малыми частицами // К. Борен, Д. Хафмен. – М. : Мир, 1986. – 664 с.
 4. Оптические свойства гранулярных клеток крови: нейтрофилы / Орлова Д.Ю., Юркин М.А., Семьянов К.А., Мальцев В.П. // Вестник НГУ. Серия: Физика – 2007. – Т.2. - № 4. – С. 83-87.
 5. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. – М.: Наука, 1968. – 64 с.
 6. Аззам Р. Эллипсометрия и поляризованный свет // Р. Аззам, Н. Башара. – М.: Мир, 1981.- 583 с.
 7. Спектрополяриметричні методи та засоби дослідження параметрів гуморальних середовищ / Петрук В.Г., Васильківський І.В., Іванов А.П., Барун В.В. // Оптико-електронні інформаційно-енергетичні технології, 2009, №1 (17).-С.128-131.

Надійшла до редакції 22.05.2009р.

ПЕТРУК В. Г. – д.т.н., професор, директор Інституту екології та екологічної кібернетики, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, Україна.

КВАТЕРНЮК С. М. – науковий співробітник кафедри екології та екологічної безпеки, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, Україна.

ІВАНОВ А. П. – головний науковий співробітник лабораторії оптики розсіювальних середовищ, Інститут фізики ім. Степанова НАН Білорусі, м. Мінськ, Білорусь.

БАРУН В. В. – науковий співробітник лабораторії оптики розсіювальних середовищ, Інститут фізики ім.Степанова НАН Білорусі, м. Мінськ, Білорусь.