БІОМЕДИЧНІ ВИМІРЮВАННЯ І ТЕХНОЛОГІЇ

УДК 621

М.Ф. БОГОМОЛОВ
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДІАГНОСТИКИ СПОТВОРЕНЬ НОРМАЛЬНОГО СТАНУ ФОРМЕНИХ ЕЛЕМЕНТІВ КРОВІ

В роботі розглянутий метод комп'ютерного обчислення властивостей розсіювання світла несферичними частинками на основі Т-матричного методу, який базується на лінійності рівнянь Максвела. Фундаментальною особливістю Т-матричного методу є те, що матриця Т залежить лише від форми, розміру, складу і орієнтації об'єкту розсіювання і абсолютно не залежить від напрямку поширення і поляризації падаючого та розсіяного полів.

Ключові слова: Т-матричний метод обчислення, комп'ютерне моделювання.

M. F. BOGOMOLOV
National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute"

COMPUTER SIMULATION PROCESS DIAGNOSTICS DISTORTED NORMAL STATE OF BLOOD CELLS

Abstract - The paper presents a method of computer calculation of the properties of light scattering by no spherical particles based on the T-matrix method, which is based on the linearity of Maxwell's equations. The fundamental feature of the T-matrix method is that the matrix T depends only on the shape, size, composition and orientation of the object scatter and does not depend on the direction of propagation and polarization of the incident and the scattered fields.

Keywords: T-matrix method of calculation, computer simulation.

Для визначення глибини патологічного процесу в людині має велике значення діагностика. Тому дуже актуальним є створення нових методів і пристроїв, які дозволять провести обстеження пацієнта для попередження захворювань.

На сьогоднішній день є актуальною проблемою розробка строгого підходу до вирішення задач розсіювання світла окремими частинками і великими групами частинок на основі прямих чисельно точних розв'язків макроскопічних рівнянь Максвела. Також є важливою задачею є застосування строгих і надійно обґрунтованих наближених методик розрахунку електромагнітного розсіювання для розробки точних і інформативних методів дистанційного зондування і лабораторної діагностики частинок, які дозволяють відновити фізичні параметри складних і максимально реалістичних моделей середовищ розсіювання.

Актуальним є також розвиток унікального мікрофізичного підходу до задачі електромагнітного розсіювання частинками, який оснований на прямому розв'язку рівнянь Максвела аналітичним і чисельно-точним комп'ютерним методом.

Т-матричний метод, який базується на лінійності рівнянь Максвела, є широко використовуваним методом для обчислення властивостей розсіювання світла несферичними частинками [1].

Розрахунок Т матриць здійснюється двома методами. Перший – це метод розширеної граничної умови, другий – метод суперпозиції, який витікає з рівнянь Фолді-Лакса.

Т-матричний метод був запропонований більше сорока років тому. В 1974 Петерсон та Стрем показали як Т-матриці можуть бути узагальнені для багатошарових об'єктів. Проте активне застосування методу почалося лише в 1990-их роках. Це пояснюється стрімким розвитком ЕОМ.

Приймемо, що падаюче у вигляді плоскої хвилі випромінювання є неполяризованим. Тоді величина електричного вектора може бути виражена через суму двох взаємно перпендикулярних і незалежних синусоїдальних коливань, що мають одиничну амплітуду в площині xy й поширюються в напрямку z. Кожне із цих коливань звичайно зображується у вигляді :

$$E_{пад} = e^{[-i(k \cdot z - \omega \cdot t)]}, \qquad (1)$$

де $\omega = c \cdot k$ - кругова частота.

Нехай це поле взаємодіє з будь-якою однорідною ізольованою сферичною частинкою Тоді в результаті взаємодії з'являється поле випромінювання, що розсіюється в інших напрямках, ніж поле падаючого випромінювання. До поля випромінювання, що розсіюється необхідно додати поле падаючого випромінювання, потік якого послаблюється за рахунок розсіювання й поглинання випромінювання сферичною частинкою. Але ми будемо вважати, що це випромінювання не перевипромінюється знову сферичною частинкою на даній або якій-небудь іншій частоті. Розглядаючи ці допущення поле випромінювання, що розсіюється можна виразити через два скалярні складові A_1 і A_2 амплітуди вектора електричного поля $A_{роз}$, що не має складових у напрямку свого розповсюдження. Компоненти A_1 і A_2 відповідно перпендикулярні й паралельні площині розсіювання, у якій виміряється кут розсіювання θ.

Рішення часткового випадку методу Т-матриці дає комплексні вираження для амплітуд A_1 і A_2 у вигляді рядів, записаних у такий спосіб:

$$k \cdot A_1 \equiv S_1(m,x,\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \cdot n + 1}{n \cdot (n+1)} \cdot (a_n \cdot \pi_n + b_n \cdot \tau_n), \tag{2}$$

$$k \cdot A_2 \equiv S_2(m,x,\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \cdot n + 1}{n \cdot (n+1)} \cdot (b_n \cdot \pi_n + a_n \cdot \tau_n), \tag{3}$$

де S_1 і S_2 – безрозмірні комплексні амплітуди, n - додатні цілі числа.

Коефіцієнт розсіювання, віднесений до геометричного поперечного перерізу частинки, що розсіює, визначається безрозмірним параметром:

$$K_{роз} = \frac{\sigma_{роз}(m,x)}{\pi \cdot r^2}, \tag{4}$$

де

$$\sigma_{роз}(m,x) = \frac{1}{2} \cdot \int_{\Omega} (A_1 A_1^* + A_2 A_2^*) d\omega, \tag{5}$$

де $\Omega = 4\pi$.

Зробивши інтегрування, отримаємо остаточну формулу для коефіцієнта розсіювання:

$$K_{роз}(m,x) = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2 \cdot n + 1) \cdot (|a_n|^2 + |b_n|^2), \tag{6}$$

Подібним же чином визначаються коефіцієнт ослаблення й відповідний фактор ефективності $K_{пог}$, що враховує внесок поглинання падаючого випромінювання:

$$K_{пог}(m,x) = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2 \cdot n + 1) \cdot \mathrm{Re}(a_n + b_n), \tag{7}$$

Формули (2)-(7) визначають основні параметри теорії розсіювання Мі. З них можна вивести всі інші величини, необхідні для опису інтенсивності й поляризації випромінювання, що розсіюється окремою частинкою.

Значення основних функцій розсіювання повністю визначаються точністю обчислення коефіцієнтів Мі a_n і b_n. Ці коефіцієнти залежать тільки від величин m та x, а також кутових коефіцієнтів π_n і τ_n (які є функціями тільки від $\mu = \cos\theta$). Розрахунок коефіцієнтів π_n і τ_n не представляє труднощів, оскільки вони можуть бути виражені через поліноми Лежандра і їхні похідні:

$$\begin{aligned}
&\pi_n(\mu) = \frac{d}{d\mu} P_n(\mu), \\
&\tau_n(\mu) = \mu \cdot \pi_n(\mu) - (1 - \mu^2) \cdot \frac{d}{d\mu} \pi_n(\mu), \\
&-1 \le \mu \le 1, \\
&P_n(\mu) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{d\mu^n} (\mu^2 - 1)^n,
\end{aligned} \tag{8}$$

де $P_n(\mu)$ - поліноми Лежандра цілого порядку n від дійсного аргументу.

Використовуючи добре відомі рекурентні співвідношення між цими поліномами і їхніми похідними, легко показати, що коефіцієнти (8) також задовольняють деяким рекурентним співвідношенням. Ця обставина дозволяє знаходити коефіцієнти $\pi_n(\theta)$ і $\tau_n(\theta)$ без використання рекурентних формул для поліномів Лежандра $P_n(\mu)$ і їхніх похідних $\frac{dP_n(\mu)}{d\mu}$. Таким чином, маємо :

$$\begin{aligned}
&\pi_n(\theta) = \cos\theta \cdot \frac{2 \cdot n - 1}{n - 1} \cdot \pi_{n-1}(\theta) - \frac{n}{n-1} \cdot \pi_{n-2}(\theta), \\
&\tau_n(\theta) = \cos\theta \cdot [\pi_n(\theta) - \pi_{n-2}(\theta)] - (2n - 1) \cdot \sin^2\theta \cdot \pi_{n-1}(\theta) + \tau_{n-2}(\theta), \\
&0 \le \theta \le \pi,
\end{aligned} \tag{9}$$

де

$$\pi_0(\theta) = 0, \qquad \tau_0(\theta) = 0,$$

$$\pi_1(\theta) = 1, \qquad \tau_1(\theta) = \cos\theta,$$

$$\pi_2(\theta) = 3\cos\theta. \qquad \tau_2(\theta) = 3\cos 2\theta.$$

Розглянувши розсіювання плоскої електромагнітної хвилі довільним кінцевим об’єктом і розклавши падаюче та розсіяне поля в ряди по так званим векторним сферичним хвильовим функціям, можна записати коефіцієнти розкладання плоскої електромагнітної хвилі:

$$a_{mn} = 4\pi(-1)^m i^n d_n E_0^{inc} \cdot C_{mn}^*(\theta^{inc}) \exp(-im\phi^{inc}),$$

$$b_{mn} = 4\pi(-1)^m i^{n-1} d_n E_0^{inc} \cdot B_{mn}^*(\theta^{inc}) \exp(-im\phi^{inc}),$$

де

$$B_{mn}(\theta) = \hat{\theta} \cdot \frac{d}{d\theta} d_{om}^n(\theta) + \hat{\phi} \frac{im}{\sin\theta} d_{om}^n(\theta),$$

$$C_{mn}(\theta) = \hat{\theta} \cdot \frac{im}{\sin\theta} d_{om}^n(\theta) - \hat{\phi} \frac{d}{d\theta} d_{om}^n(\theta),$$

$$d_n = \left[\frac{2n+1}{4\pi n(n+1)}\right]^{1/2},$$

де $d_{om}^n(\theta)$ - d функції Вігнера

В зв’язку з лінійністю рівнянь Максвела коефіцієнти розкладання розсіяного поля p_{mn} і q_{mn} мають лінійно виражатися через коефіцієнти розкладання падаючої плоскої хвилі a_{mn} і b_{mn}. Це лінійне співвідношення записується в термінах матриці переходу або Т-матриці.

$$p_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \left(T_{mnm'n'}^{11} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{12} b_{m'n'} \right),$$

$$q_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \left(T_{mnm'n'}^{21} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{22} b_{m'n'} \right)$$

Або використовуючи компактні матричні позначення

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^{11} & T^{12} \\ T^{21} & T^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{10}$$

Перетворимо тепер вираження для коефіцієнтів Мі a_n і b_n до виду, зручного для проведення обчислень. Напишемо для них вираз:

$$a_n(m,x) = \frac{[\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}] \cdot \mathrm{Re}\{\omega_n(x)\} - \mathrm{Re}\{\omega_{n-1}(x)\}}{[\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}] \cdot \omega_n(x) - \omega_{n-1}(x)},$$

$$b_n(m,x) = \frac{[m \cdot A_n(y) + \frac{n}{x}] \cdot \mathrm{Re}\{\omega_n(x)\} - \mathrm{Re}\{\omega_{n-1}(x)\}}{[m \cdot A_n(y) + \frac{n}{x}] \cdot \omega_n(x) - \omega_{n-1}(x)}, \tag{11}$$

де $y = mx$, ω_n - кругові функції , які визначаються за допомогою наступного рекурентного співвідношення:

$$\omega_n(x) = \frac{2n-1}{x} \cdot \omega_{n-1}(x) - \omega_{n-2}(x) \tag{12}$$

Звідки отримаємо такі співвідношення:

$$\omega_0(x) = \sin(x) - i\cos(x),$$
$$\omega_{-1}(x) = \cos(x) - i\sin(x),$$
$$\omega_1(x) = \frac{\omega_0(x)}{x} - \omega_{-1}(x), \tag{13}$$
$$\omega_2(x) = \frac{3}{x}\cdot\omega_1(x) - \omega_0(x).$$

Фундаментальною особливістю Т-матричного методу є те, що матриця Т залежить лише від форми, розміру, складу і орієнтації об'єкту розсіювання і абсолютно не залежить від напрямку поширення і поляризації падаючого та розсіяного полів. Це означає, що одна і та ж Т-матриця може бути використана при розрахунках для будь-якого напрямку поширення і поляризації падаючої плоскої хвилі [2].

Теоретично розмір Т-матриці в (10) нескінченний, тому в практичних розрахунках його доводиться обмежувати [1]. Тому важливою складовою будь-якого комп'ютерного розрахунку, який оснований на Т-матричному методі, є перевірка чисельної збіжності результату з покроковим збільшенням розміру Т-матриці. Відомо також, що число членів необхідних для точного обчислення матриць, як правило більше, ніж те, яке необхідно для розрахунку параметрів розсіювання світла.

Т-матричний метод є безпосереднім узагальненням теорії Мі на випадок несферичних частинок. Дійсно, якщо розсіювач сферично симетричний, то Т-матриця стає діагональною, при чому елементи даються, з точністю до знака, відповідними коефіцієнтами Мі a_n і b_n [3]:

$$T^{12}_{mnm'n'}(P) = 0,\ T^{21}_{mnm'n'}(P) = 0,$$
$$T^{11}_{mnm'n'}(P) = -\delta_{mm'}\delta_{mn'}b_n,$$
$$T^{22}_{mnm'n'}(P) = -\delta_{mm'}\delta_{mn'}a_n,$$

де $\delta_{mm'}$ - символ Кронекера. Це все призводить до того, що всі формули Т-матричного методу зводяться до звичайних формул теорії Мі [2].

За винятком коефіцієнтів $A_n(y)$, вираз (11) записаний у формі зручній для проведення розрахунків з використанням рекурентних співвідношень.

Одержимо рекурентне співвідношення для $A_n(y)$ у вигляді неперервного дробу:

$$A_n(y) = -\frac{n}{y} + \left[\frac{n}{y} - A_{n-1}(y)\right]^{-1} \tag{14}$$

Якщо $y = mx = p - iq$,де $p = \nu \cdot x$ і $q = \chi \cdot x$, а p і q – відповідно дійсна і уявна частини показника заломлення, функцію $A_0(y)$ можна виразити через тригонометричні й гіперболічні функції дійсного аргументу:

$$A_0(y) = \frac{\sin(p)\cdot\cos(p) + i\cdot sh(q)\cdot ch(q)}{\sin^2 p + sh^2 q} \tag{15}$$

Формула (15) визначає похідну функції для $A_n(y)$, що звичайно використається для обчислення $A_n(y)$ при будь-яких $n = 1, 2, 3 ....$

Одним з важливих параметрів методу Т матриць є інтенсивність розсіювання для неполяризованого падаючого променю, яка визначаються за формулою:

$$I = |S_1|^2 + |S_2|^2 \tag{16}$$

Якщо частинки симетричні відносно площини, перпендикулярної до вісі симетрії, можливі також додаткові спрощення Т-матриці. Тобто половина елементів Т-матриці рівна нулю, а інші елементи розраховуються по половині поверхні частинок, тобто розрахунки зменшуються в чотири рази[1].

Ключовою перевагою Т-матричного методу є використання функцій зенітного і азимутального кутів с добре вивченими і дуже зручними аналітичними властивостями. Наслідком цього є сукупність універсальних аналітичних властивостей Т-матриць. Найважливішими є закони трансформації Т-матриці при поворотах та трансляціях системи координат [2].

Пакет Т-матричних програм можна знайти на електронному сервері http://www.giss.nasa.gov/~crmim

Цей пакет може бути використаний для розрахунку світлорозсіювальних властивостей як для простих вісесиметричних частинок, так і кластерів, які складаються з однорідних сферичних частинок.

Аналітичні методи мають недолік введення різних обмежень на розмір, форму або показник заломлення розсіювача. Чисельні методи можуть вирішити проблему однократного розсіювання без істотних обмежень. Головний недолік чисельних методів, так як і методів формалізму Т-матриці – це довгий час обчислення, який потрібний, щоб забезпечити точне рішення [4].

Висновки

Підтверджено, що застосування Т-матричного методу для дослідження особливостей взаємодії лазерного випромінювання з форменими елементами крові людини дозволяє визначити спотворення форми, розмірів, орієнтації і конфігурації світлорозсіювальних елементів при патологічних змінах. Застосування чисельних методів дозволяє вирішити проблему однократного розсіювання без істотних обмежень.

Література

1. Arturo Quirantes. T-matrix method and computer code for randomly oriented, axially symmetric coated scatterers. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 92 (2005) 373–381, 2005

2. Мищенко М. И. Электромагнитное рассеяние в случайных дисперсных средах: фундаментальная теория и приложения. - Киев - Нью-Йорк – 2007.

3. Mishchenko M. I. , Travis L.D. Lacis A.A. Scattering, absorption, and emission of light by small particles. – Cambridge: Cambridge Univ. Press. 2002. – 445 p.

4. С.В. Павлов, Т.І. Козловська, В.П. Думенко. Аналіз методів розповсюдження випромінювання в біологічних середовищах на основі застосування методу Монте-Карло. – Принципові концепції та структурування різних рівнів освіти з оптико-електронних інформаційно-енергетичних технологій. – Вінниця – 2008.

References

1. Arturo Quirantes. T-matrix method and computer code for randomly oriented, axially symmetric coated scatterers. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 92 (2005) 373-381, 2005

2. MI Mishchenko Эlektromahnytnoe scattering in sluchaynыh dyspersnыh environments: fundamentalnaya theory and applications. - Kiev - New York - 2007.

3. Mishchenko M. I., Travis L.D. Lacis A.A. Scattering, absorption, and emission of light by small particles. - Cambridge: Cambridge Univ. Press. 2002. - 445 p.

4. SV Pavlov, TI Kozlovsky, VP Dumenko. Analysis methods for spreading radiation in biological environments through the use of Monte Carlo. - Fundamental concepts and structuring of different levels of education optoelectronic information-energy technologies. - Vinnytsya - 2008.

Рецензія/Peer review : 21.6.2016 р. Надрукована/Printed :27.6.2016 р.
Стаття рецензована редакційною колегією