

ЕКОЛОГІЯ ТА ЕКОЛОГІЧНА КІБЕРНЕТИКА

УДК 681.518.3: 535.243.2

В. Г. Петрук, д-р техн. наук, проф.;

С. М. Кватернюк;

І. В. Васильківський, канд. техн. наук;

А. П. Іванов, д-р фіз.-м. наук, проф.;

В. В. Барун

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІНДИКАТРИС РОЗСІЮВАННЯ ЧАСТИНОК ПОЛІДИСПЕРСНИХ ВОДНИХ СЕРЕДОВИЩ

Здійснено математичне моделювання індикатрис розсіювання однорідних та неоднорідних частинок полідисперсних водних середовищ (ПВС). Порівняно результати, обчислені за наближенням Релея-Ганса-Дебая (РГД) та на основі теорії Мі.

Вступ

Автоматизований контроль стану водних екосистем розвинутий недостатньо, оскільки інтегральні показники, за якими оцінюється їх стан, у значній мірі є відносними і суб'єктивними. Такі середовища є складними полідисперсними системами, що включають в себе частинки різних типів, розмірів і форми, які знаходяться у завислому стані в колоїдних розчинах та перебувають у складній взаємодії. Забруднення водних об'єктів призводить до зміни видового складу водних екосистем та їх гідробіологічних показників. В першу чергу це стосується різних видів фітопланктону, що використовуються у якості біоіндикаторів. Частинки фітопланктону полідисперсних водних середовищ (ПВС) є біологічними клітинами та їх агломератами. Основним параметром ПВС, як об'єкта контролю, є об'ємні концентрації частинок певних типів. Кількісні співвідношення між об'ємними концентраціями частинок різних типів у ПВС можуть бути критерієм оцінки стану природних водних екосистем.

Оптико-фізичні параметри таких середовищ можуть виходити за встановлені межі допустимих інтервалів відхилення, що зумовлено типом, формою, орієнтацією, спектральними та поляризаційними властивостями завислих у них частинок [1—3]. Вивчення морфології клітин та їх внутрішньої структури дає можливість отримання додаткової інформації, що дозволить достовірніше ідентифікувати частинки та підвищити вірогідність контролю їх об'ємних концентрацій.

Дослідження проводяться у рамках співпраці з світовими науковими школами Інституту фізики ім. Степанова НАН Беларусі та вченими Сибірського відділення РАН.

Постановка задачі

Метою дослідження є розроблення математичних моделей світлорозсіювання оптично м'яких частинок ПВС для забезпечення можливості створення нових систем контролю стану водних середовищ.

Теоретичні ж результати, одержані при цьому, доповнять деякі не вивчені раніше аспекти, зокрема, в оптиці розсіювання, теорії переносу випромінювання у полідисперсних водних середовищах.

Світлорозсіювання оптично м'яких однорідних частинок полідисперсних водних середовищ розглянемо на прикладі еритроцита, а оптично м'яких частинок складної внутрішньої структури — на прикладі лімфоцита.

Математичні моделі однорідних та неоднорідних частинок ПВС

Однорідні частинки ПВС можуть мати досить складну форму, для описування якої існує низка параметричних моделей. Наприклад, у роботі [4] запропоновано таку модель частинки у сферичній системі координат:

$$r = a \cos^6 \varphi + b, \quad (1)$$

де a та b — константи, а r і φ — відстань та азимутальний кут у сферичній системі координат.

Перетворення форми частинки, а також утворення лінійних агрегатів можна моделювати за допомогою овалів Кассіні, що описуються у декартовій системі координат рівнянням

$$(x^2 + y^2)^2 - 2c^2(x^2 - y^2) = a^4 - c^4, \tag{2}$$

де a та c — константи.

Рівняння (2) має явний розв'язок у декартовій системі координат

$$y = \pm k_1 \sqrt{\sqrt{a^4 + 4c^2x^2} - x^2 - c^2}, \tag{3}$$

де k_1 — коефіцієнт підгонки моделі до реальних розмірів.

У полярній системі координат рівняння овалу Кассіні таке:

$$\rho^4 - 2c^2\rho^2 \cos 2\varphi = a^4 - c^4, \tag{4}$$

що дає такий розв'язок:

$$\rho = \pm \sqrt{c^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{c^4 \cos^2 2\varphi + a^4 - c^4}}. \tag{5}$$

За певних значень параметрів така модель дозволяє отримати форму частинки, близьку до визначеної за допомогою електронного мікроскопу (рис. 1), що доводить адекватність вибраних моделей та можливість їх застосування. Для моделювання тривимірної поверхні частинок у сферичних координатах зручніше використовувати модель на основі овалу Кассіні.

Більшість частинок полідисперсних водних середовищ неоднорідні і мають складну форму. Їх вміст можна описати як основне середовище з численними включеннями (гранулами) та ядром. Простою моделлю частинки з ядром є двошарова модель рис. 2а. Передбачається, що частинка складається із сферичного однорідного ядра радіусу r_1 з абсолютним комплексним показником заломлення n_1 , оточеного сферично симетричною однорідною оболонкою радіусу r_2 з абсолютним комплексним показником заломлення n_2 . Для моделювання неоднорідних частинок ПВС використовується модель зернистої кулі, показана на рис. 2б.

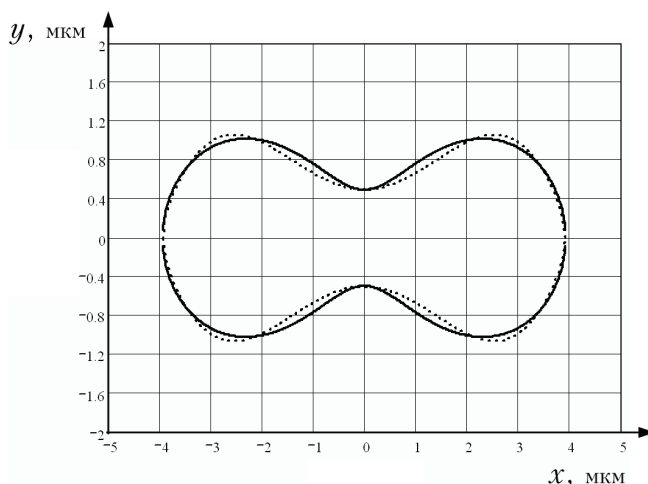


Рис. 1. Результати порівняння профілю частинки ПВС на основі овалу Кассіні (суцільна лінія) та визначеного за допомогою електронного мікроскопу (крапкова лінія)

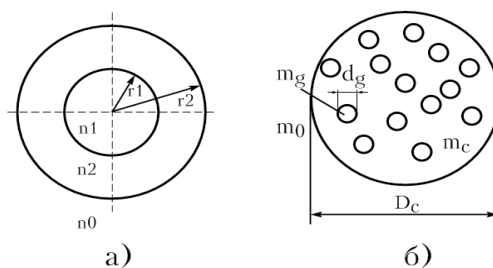


Рис. 2. Оптично м'які частинки ПВС складної структури

Світлорозсіювання сферичними частинками на основі теорії Мі

Теорія Мі, що описує послаблення, поглинання і розсіювання світла однорідними кулями детально викладена в роботах [7, 8]. Це може бути використано для моделювання однорідних сферичних частинок ПВС, що виправдано за спеціальних експериментальних умов, таких, як сферизація зі збереженням об'єму чи осмотичне набухання. Результати моделювання можуть порівнюватись з вимірюванням для латексних суспензій з відомими розмірами частинок. Відповідно до [7] відмітимо основні висновки теорії щодо розв'язання задачі обчислення індикатриси для однорідних частинок з дифракційним параметром Мі 50 з довжиною хвилі $\lambda = 470$ нм. Як показано в роботі [7], для досягнення прийнятної точності можна обмежитись врахуванням впливу $N^* \approx 1,2\rho + 10$ парціа-

льних хвиль, тобто $N^* = 72$. Обчисливши амплітуди парціальних хвиль c_l, b_l з використанням функцій Рікатті-Бесселя та Рікатті-Ханкеля першого роду, визначимо φ -складову інтенсивності розсіяного випромінювання. Результати моделювання наведено на рис. 3.

Основна частина енергії інтенсивності розсіяного випромінювання для оптично м'яких частинок ПВС зосереджена у основній пелюстці індикатриси. Рівень бічних пелюсток на багато порядків менший. Значна частина інформації про форму і розміри частинок зосереджена у бічних пелюстках. Аналізувати індикатриси для φ - і θ -складової інтенсивності розсіяного випромінювання зручніше у логарифмічному масштабі. Теорія Мі дозволяє лише оцінити загальні закономірності індикатриси інтенсивності розсіяного випромінювання оптично м'яких частинок ПВС і неприйнятна для аналізу частинок складнішої форми та внутрішньої структури.

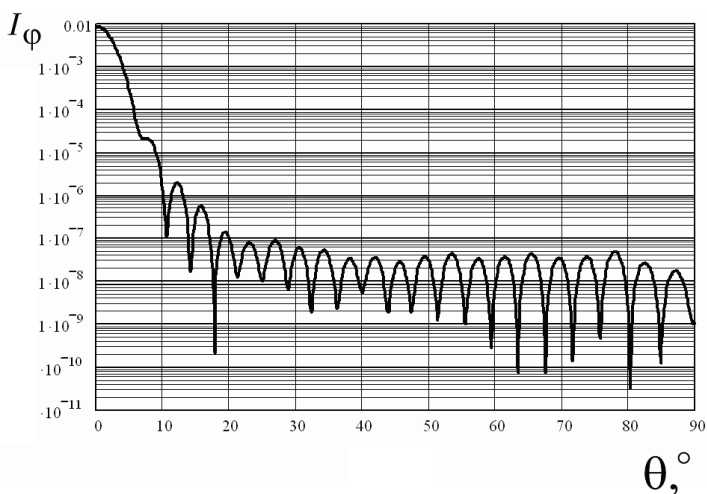


Рис. 3. Логарифмічна індикатриси для φ -складової інтенсивності розсіяного випромінювання

Розрахунок індикатриси розсіювання в рамках РГД для оптично м'яких частинок складної структури

Для дослідження індикатриси розсіювання для частинок, що місять ядро та гранули, використовуємо наближення Релея-Ганса-Дебая (РГД), припускаючи, що $|m - 1| \ll 1$ і для цитоплазми, і для гранул. Однак умова $|m - 1|kd \ll 1$ виконується не завжди, тому застосування РГД дасть лише наближені результати. Згідно з РГД, лише діагональні елементи амплітудної матриці розсіювання S_1 та S_2 не дорівнюють нулю [8]

$$S_1(\mathbf{n}) = -\frac{ik^3}{2\pi} \sum_{i=0}^N (m_i - 1) V_i h(V_i, \mathbf{n}), \quad S_2(\mathbf{n}) = S_1(\mathbf{n}) \cos \theta, \tag{6}$$

де частинка розділена на $N + 1 \frac{1}{2}$ областей: $i = 0$ відповідає цитоплазмі, а решта N — гранулам, m_i та V_i — це показник заломлення і об'єм кожної області, \mathbf{n} — вектор напрямку розсіювання, а $h(V, \mathbf{n})$ — такий формфактор:

$$h(V, \mathbf{n}) = \frac{1}{V} \int_V d^3r \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}), \tag{7}$$

де $\mathbf{q} = k(\mathbf{e}_z - \mathbf{n})$, \mathbf{e}_z — одиничний вектор по осі z . Формфактор кулі, розташованої в центрі координат, обчислюється аналітично [8]

$$h_s(\rho, \theta) = g_s(u) = \frac{3}{u^3} (\sin u - u \cos u); \quad u = qr = 2\rho \sin \frac{\theta}{2}, \tag{8}$$

де r і ρ — це радіус і дифракційний параметр кулі, а залежність від азимутного кута відсутня.

Використовуючи лінійність формули (6) за множником $m - 1$, розглянемо окремо однорідну цитоплазму у вигляді кулі з множником $m_c - 1$ і гранули з множником $m_g - m_c$. Тоді формула (6) переписується у вигляді

$$S_1(\mathbf{n}) = -\frac{ik^3}{2\pi} \left[(m_c - 1) V_c h_s(\rho_c, \theta) + (m_g - m_c) V_g h_s(\rho_g, \theta) \xi(N) \right], \tag{9}$$

де $\xi(N)$ — залежність від положення гранул $\xi(N) = \sum_{i=1}^N \exp(i\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{q})$. Усереднення $\xi(N)$ за всіма можливими положеннями гранул виконується незалежно для кожного доданку в сумі, отже:

$$\langle \xi(N) \rangle = N h_s(\rho_c - \rho_g, \theta). \tag{10}$$

Для достатньо малих об'ємних долей гранул ($f \ll 1$) нехтуватимемо впливом неперекриття гранул на статистичні властивості положення гранул

$$\langle |\xi(N)|^2 \rangle = N + N(N-1) h_s^2(\rho_c - \rho_g, \theta). \tag{11}$$

Використовуючи формули (9) та (11), отримаємо:

$$\begin{aligned} \langle |S_1(\theta)|^2 \rangle = & \left| \frac{2}{3} \rho_c^3 \right|^2 \left(\left| (m_c - 1) h_s(\rho_c, \theta) + f (m_g - m_c) h_s(\rho_g, \theta) h_s(\rho_c - \rho_g, \theta) \right|^2 + \right. \\ & \left. + \left| f (m_g - m_c) h_s(\rho_g, \theta) \right|^2 \left[1 - h_s^2(\rho_c - \rho_g, \theta) \right] / N \right). \end{aligned} \tag{12}$$

Увівши до моделі ядро діаметром D_{core} та коефіцієнтом заломлення m_{core} , відповідно, змінимо вираз (12):

$$\begin{aligned} \langle |S_1(\theta)|^2 \rangle = & \left| \frac{2}{3} \rho_c^3 \right|^2 \left(\left| (m_c - 1) h_s(\rho_c, \theta) + f_1 (m_{core} - m_c) h_s(\rho_{core}, \theta) + \right. \right. \\ & \left. \left. + f_2 (m_g - m_c) h_s(\rho_g, \theta) h_s(\rho_c - \rho_g, \theta) \right|^2 + \left| f_2 (m_g - m_c) h_s(\rho_g, \theta) \right|^2 \left[1 - h_s^2(\rho_c - \rho_g, \theta) \right] / N \right). \end{aligned} \tag{13}$$

де $f_1 = NV_{core}/(V_c)$ — об'ємна частина ядра, $f_2 = NV_g/(V_c)$ — об'ємна частина гранул, V_{core} — об'єм ядра.

Моделювання індикатрис із застосуванням наближення РГД для зернистої кулі з $m_c = 1,015$; $m_g = 1,2$; $\lambda = 0,47$ мкм; $D_c = 8$ мкм; гранул з $D_g = 0,1$; $N = 2000$, ядра з $D_{core} = 3,5$ мкм; $m_{core} = 1,2$ проведено у Mathcad 13.0, результати моделювання показано на рис. 4, 5

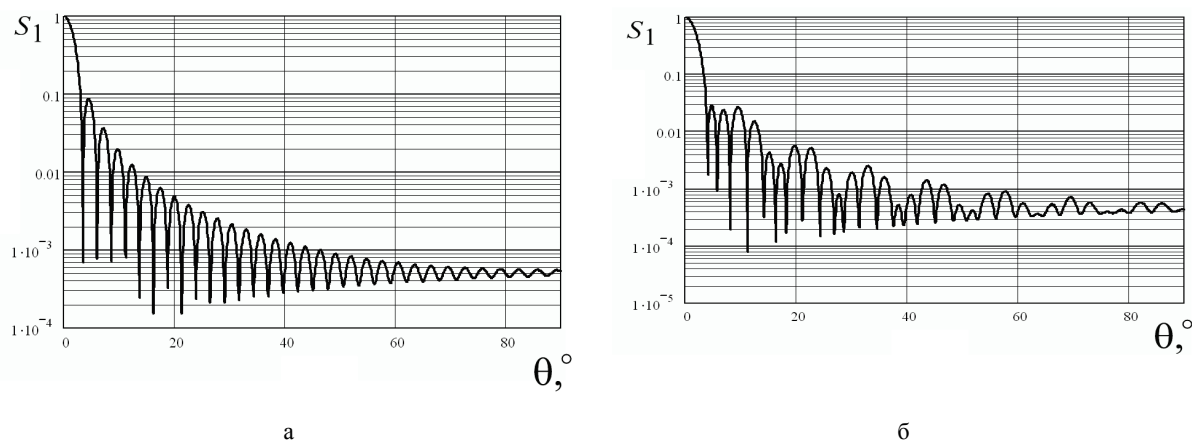


Рис. 4. Логарифмічні індикатрисі інтенсивності розсіяного випромінювання для моделі зернистої кулі з ядром за наближенням РГД: а — $m_{core} = 1,015$; б — $m_{core} = 1,05$,

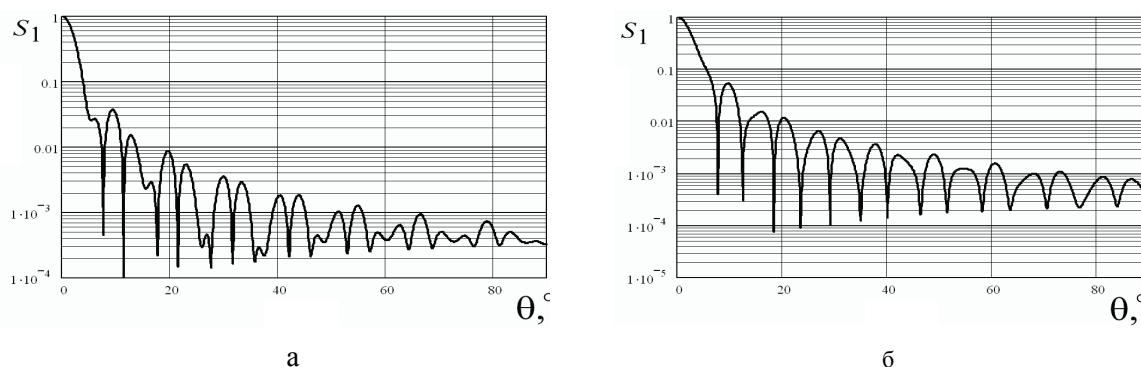


Рис. 5. Логарифмічні індикатриси інтенсивності розсіяного випромінювання для моделі зернистої кулі з ядром за наближенням РГД: а — $m_{core} = 1,1$, б — $m_{core} = 1,2$

Результати моделювання індикатрис розсіювання за наближенням РГД є менш точними, у порівнянні зі строгими моделями за теорією Мі чи методом дискретних диполів, однак дозволяють оцінити їх загальні закономірності. Збільшення розміру гранул, а, відповідно, і збільшення їх об'ємної частки приводить до згладжування бічних пелюсток індикатриси. Зі збільшенням відносного показника заломлення ядра його вплив на загальну індикатрису зростає. Оскільки дифракційний параметр ядра менший, ніж клітини, відповідним чином змінюється форма індикатриси. Оскільки в РГД недиагональні елементи амплітудної матриці розсіювання дорівнюють нулю, то поляризація випромінювання не враховується, що у цьому випадку є суттєвим недоліком.

Висновки

Отримані результати моделювання індикатрис розсіювання оптично м'яких частинок ПВС дозволили виявити їх зв'язок з типом, формою та структурою цих частинок. Це може бути використано для вивчення морфології частинок та їх внутрішньої структури, що дозволить достовірніше їх ідентифікувати та підвищити вірогідність контролю стану ПВС.

Подальші дослідження індикатрис розсіювання оптично м'яких частинок ПВС планується здійснювати за допомогою методу Монте-Карло та гібридної апроксимації, що дозволить врахувати особливості світлорозсіювання, які визначаються як тривимірною формою їх поверхні, так і складною внутрішньою будовою частинок.

Роботу виконано за сприяння Міністерства освіти і науки України відповідно спільному українсько-білоруському проекту.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Петрук В. Г. Фізико-хімічний механізм антистоксового поглинання гуморальними середовищами з позицій координатної теорії кристалічного поля / В. Г. Петрук // Вісник Вінницького політехнічного інституту — 1995. — № 2. — С. 78—82.
2. Тучин В. В. Исследование биотканей методами светорассеивания / В. В. Тучин // Успехи физических наук. — 1997. — Т. 165. — Вып. 5. — С. 517—539.
3. Энциклопедия клинических лабораторных тестов ; под ред. Н. У. Тица. — М. : Лабинформ, 1997. — 960 с.
4. Методы светорассеяния в анализе дисперсных биологических сред. / [Лопатин В. Н., Приезжев А. В., Апонасенко А. Д. и др.] — М. : Физматлит, 2004. — 384 с.
5. He J. P., Light scattering by multiple red blood cells / Karlsson A., Swartling J., Andersson-Engels S. // J. Opt. Soc. Am. A — 2004. — V. 21. — P. 1953—1961.
6. Bainton D. F. Neutrophilic leukocyte granules: from structure to function // Adv. Exp. Med. Biol. — 1993. — V. 336. — P. 17—33.
7. Лопатин В. Н. Введение в оптику взвесей клеток / В. Н. Лопатин, Ф. Я. Сидько. — Новосибирск : Наука, 1988. — 240 с.
8. Борен К. Поглощение и рассеяние света малыми частицами // К. Борен, Д. Хафмен. — М. : Мир, 1986. — 664 с.

Рекомендована кафедрою екології та екологічної безпеки

Надійшла до редакції 30.10.09
Рекомендована до друку 26.11.09

Петрук Василь Григорович — завідувач кафедри; **Кватернюк Сергій Михайлович** — аспірант, **Васильківський Ігор Володимирович** — доцент.

Кафедра екології та екологічної безпеки, Вінницький національний технічний університет

Іванов Аркадій Петрович — професор, **Барун Володимир Володимирович** — науковий співробітник.

Лабораторія оптики розсіювальних середовищ, Інститут фізики ім. Степанова НАН Білорусі, м. Мінськ