

УДК 615.47

**СУЧАСНІ МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ
РОЗСИЮВАННЯ ЛАЗЕРНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ БІОЛОГІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ
З ВИКОРИСТАННЯМ РІВНЯНЬ МАКСВЕЛА**

Дзюбенко Н.В., Богомолов М.Ф.

НТУУ «КПІ», РТФ, Київ, Україна

У статті розглянуто метод математичного моделювання процесів взаємодії лазерного випромінювання з біологічними частинками. Застосовано теорію, яка базується на макроскопічних рівняннях Максвелла, для опису послаблення, поглинання та розсіювання світла досліджуваним об'єктом.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: лазерне випромінювання, біологічні частинки, рівняння Максвелла, розсіювання світла, математичне моделювання.

**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЙЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА**

Дзюбенко Н.В., Богомолов Н.Ф.

В статье рассмотрен метод математического моделирования процессов взаимодействия лазерного излучения с биологическими частицами. Использована теория, основанная на макроскопических уравнениях Максвелла, для описания ослабления, поглощения и рассеяния света исследуемым объектом.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: лазерное излучение, биологические частицы, уравнения Максвелла, рассеяние света, математическое моделирование.

**CONTEMPORARY METHODS OF LASER LIGHT SCATTERING IN THE STUDY OF BIOLOGICAL
OBJECTS BY MEANS OF MAXWELL'S EQUATIONS**

Dziubenko N.V., Bogomolov M.F.

The method of mathematical modeling of the interaction of laser radiation with biological particles is considered in the paper. The theory based on the macroscopic Maxwell's equations is used to describe the attenuation, absorption and scattering of light by the studied object.

KEYWORDS: laser radiation, biological particles, Maxwell's equations, light scattering, mathematical modeling.

1. Вступ. Математичне моделювання є найбільш загальним методом дослідження в науці, а самі математичні моделі (ММ) можна представити, як систему математичних співвідношень, змінних, множин і т.д., що в достатній мірі адекватно відображає і описує дослідний об'єкт, процес чи явище.

За отриманими характеристиками розсіювання лазерного випромінювання на еритроцитах (RBC) можна об'єктивно оцінити їхню форму, а, відповідно, зробити висновки про стан здоров'я пацієнта. Найбільш актуальними сучасними методами математичного моделювання є напіваналітичні і чисельні [1].

Основною перевагою напіваналітичних і чисельних методів є відсутність різних обмежень на розмір, форму або показник заломлення розсіювача. Завдяки тому дані методи можуть

вирішити актуальну проблему однократного розсіювання без суттєвих обмежень.

Найбільш повна теорія, яка описує послаблення, поглинання і розсіювання світла однорідними сферами, базується на макроскопічних рівняннях Максвелла. Метод може застосовуватись як для обчислення параметрів однієї частинки, так і груп частинок.

2. Опис методу. Даний метод загалом застосовується для частинок з розмірами, що змінюються від області релеївської оптики до області геометричної оптики. Величини падаючого і розсіяного поля, як і поверхневих і внутрішніх полів, внесених в об'єкт розсіювання, розкладені в нескінченні ряди, що використовують базові функції. Для сфероїдальної частинки розсіювання, подібної RBC, відповідні базові функції – сферичні вектори хвиль [2].

В основу розв'язку проблеми світлорозсіювання на однорідній сфері покладено рівняння Максвелла:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= (\sigma - i\omega\varepsilon)\mathbf{E}, & \operatorname{rot} \mathbf{E} &= i\omega\mathbf{H}, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 0, & \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

де σ – електрична провідність; ω – кутова частота; ε – діелектрична стала.

Нехай на частинку радіуса a падає лінійно поляризована хвиля в напрямку z . Коливання електричного вектора \mathbf{E} співпадають з віссю OX , магнітного \mathbf{H} – з віссю OY (рис.1).

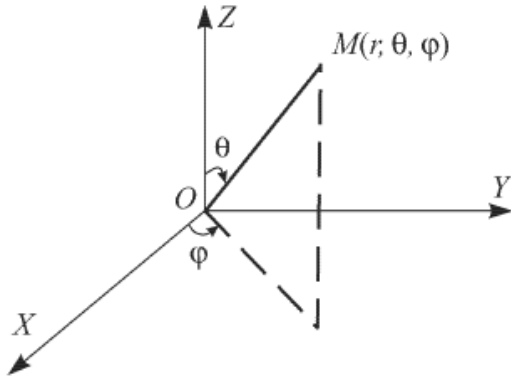


Рис. 1. Схема задачі.

«Зшиваючи» розв'язки для полів всередині і ззовні частинки на її поверхні і використовуючи розкладання плоскої хвилі по сферичним гармонікам, отримано вирази для амплітуд хвиль, які розсіяні частинкою у всіх напрямках. Повний розв'язок рівнянь Максвелла складається із множини часткових рішень. Компоненти поля розсіяної радіації можуть бути представлені у вигляді суми окремих парціальних хвиль [3]:

$$\begin{aligned} E_{\phi}^s &= \frac{-\sin\phi}{k} E_0 \frac{e^{ikr}}{r} i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (c_l Q_l + b_l S_l), \\ E_{\theta}^s &= \frac{\cos\phi}{k} E_0 \frac{e^{ikr}}{r} i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (b_l Q_l + c_l S_l), \\ H_{\phi}^s &= \frac{\cos\phi}{k} E_0 \frac{e^{ikr}}{r} i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (b_l Q_l + c_l S_l), \\ E_{\theta}^s &= \frac{\sin\phi}{k} E_0 \frac{e^{ikr}}{r} i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (c_l Q_l + b_l S_l), \end{aligned} \quad (2)$$

де $Q_l(\theta) = \frac{P_l^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta}$, – кутові функції;

$P_l^{(1)}(\cos\theta)$ – приєднані поліноми Лежандра; c_l , b_l – амплітуди парціальних хвиль, які є функціями ρ , m :

$$\begin{aligned} c_l &= \frac{\Psi_1(\rho)\Psi_1'\Psi_1'(m\rho) - m\Psi_1'(\rho)\Psi_1(m\rho)}{\xi_1(\rho)\Psi_1'(m\rho) - m\xi_1'(\rho)\Psi_1(m\rho)}, \\ b_l &= \frac{\Psi_1'(\rho)\Psi_1(m\rho) - m\Psi_1(\rho)\Psi_1'(m\rho)}{\xi_1'(\rho)\Psi_1(m\rho) - m\xi_1(\rho)\Psi_1'(m\rho)}, \end{aligned} \quad (3)$$

де l – номер парціальної хвилі; Ψ_1 , ξ_1 , та Ψ_1' , ξ_1' – відповідно функції Ріккати–Бесселя, Ріккати–Ханкеля першого роду та їх похідні.

Необхідно відмітити, що $\rho = ka$ – дифракційний параметр частинки; $m = n + i\chi$ – її комплексний відносний показник заломлення.

Для обчислення поперечників перерізу розсіяння і поглинання, поляризаційних характеристик і т.д. необхідно знати значення наступних функцій: $Q_l(\cos\theta)$, $S_l(\cos\theta)$, Ψ_1 , ξ_1 , Ψ_1' , ξ_1' .

Кутові функції Q_l , S_l задовольняють певним рекурентним співвідношенням. Для справедливо:

$$Q_l(z) = \frac{2l-1}{l-1} z Q_{l-1}(z) - \frac{1}{l-2}(z), \quad (4)$$

де $z = \cos(\theta)$; θ – угол рассеяния.

Для зручно користуватися наступною рекурсією:

$$S_l(z) = \frac{l^2}{l+1} Q_l(z) - \frac{(l+1)^2}{2l+1} Q_{l+1}(z). \quad (5)$$

При багатократному використанні рекурентних співвідношень (4) і (5) похибка не накопичується [4]. Тому, знаючи два перших члени Q_1 та Q_2 , можна знайти і всі інші, :

$$Q_1 = 1, \quad Q_2 = 3z. \quad (6)$$

Для обчислення функцій Ψ_1 , ξ_1 і їх похідних користуються відомими рекурентними співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \Psi_{l+1}(x) &= \frac{2l+1}{x} \Psi_l(x) - \Psi_{l-1}(x), \\ \xi_{l+1}(x) &= \frac{2l+1}{x} \xi_l(x) - \xi_{l-1}(x). \end{aligned} \quad (7)$$

Однак багатократне використання залежності (7) при обчисленні $\Psi_1(x)$ від малих l до великих супроводжується швидким накопиченням відносної похибки.

Щоб зменшити обчислювальні помилки при розрахунках функцій, доцільно використовувати наступну схему [5].

Якщо

$$D_l(x) = [\ln \Psi_l(x)]', \quad G_l(x) = [\ln \xi_l(x)]', \quad (8)$$

то амплітуди парціальних хвиль однорідних сфер можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} c_l &= \frac{\Psi_1(\rho)[D_l(m\rho) - mD_l(\rho)]}{\xi_1(\rho)[D_l(m\rho) - mG_l(\rho)]}, \\ b_l &= \frac{\Psi_1(\rho)[mD_l(m\rho) - D_l(\rho)]}{\xi_1(\rho)[mD_l(m\rho) - G_l(\rho)]}. \end{aligned} \quad (9)$$

У виразах (9) множник перед квадратними дужками включає лише функції дійсного аргументу.

Логарифмічні похідні (8) задовольняють співвідношенням [5]:

$$D_{l-1}(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{D_l(x) + 1/x}, \quad (10)$$

$$G_{l-1}(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{G_l(x) + 1/x}. \quad (11)$$

Обчислення $D_l(x)$ по (11) від малих значень l до великих призводить до нестабільності чисельних результатів при $l > |x|$. При розрахунку від більших значень l до менших рекурсії (10) завжди чисельно стабільна [4].

Завдяки швидкій збіжності до вірних значень логарифмічних похідних для $l = N \gg |x|$ зручно прийняти $D_N = 0$ і, підставивши в (10), обчислити $D_l(x)$ з номерами $N-1, N-2, \dots, 0$. При завчасно відомих великих N точність отримуваних результатів нечутлива до вибору початкового номера N .

При обчисленні $G_l(\rho)$ по (11) від малих значень l до великих відносна похибка не накопичується [4].

Для розрахунку функцій Ψ_l, ξ_l може використовуватись висхідна рекурсія (7). Знаючи

$$\begin{aligned} \xi_0(\rho) &= \sin(\rho) - i \cos(\rho), \\ \xi_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} - \cos \rho - i \left(\sin \rho + \frac{\cos \rho}{\rho} \right), \\ \Psi_0(\rho) &= \sin \rho, \\ \Psi_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} - \cos \rho, \end{aligned} \quad (12)$$

Можна отримати всі інші $\Psi_l(\rho), \xi_l(\rho)$.

При обчисленні рядів (4)–(5) підсумовування припиняється, коли вклад N^* -го члена ряду S_N складає не більше 10^{-8} від суми попередніх членів ряду:

$$S_{N^*} \leq 10^{-8} \sum_{l=1}^{N^*-1} S_l.$$

Як показано в роботі [4], при цьому $N^* \approx 1.2\rho + 10$.

На основі (2) для ϕ – складової інтенсивності розсіяного випромінювання, тобто, для інтенсивності тої частини розсіяного випромінювання, яка пройде через поляризатор з віссю вздовж осі ϕ , отримаємо

$$I_\phi = I_0 \frac{\sin^2 \phi}{k^2 r^2} \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (c_l Q_l + b_l S_l) \right|^2. \quad (13)$$

Аналогічно для θ -складової

$$I_\theta = I_0 \frac{\cos^2 \phi}{k^2 r^2} \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (c_l S_l + b_l Q_l) \right|^2. \quad (14)$$

де – інтенсивність падаючого потоку випромінювання.

Коефіцієнти розширення розсіяного поля були обчислені з відомих коефіцієнтів розширення падаючого поля на основі теореми еквівалентності і інтегрального представлення полів, внутрішніх і зовнішніх щодо розсіювача. Матриця, яка зв'язує коефіцієнти розширення падаючої хвилі з коефіцієнтами розширення розсіяної хвилі, називається T-матрицею [6]. Для сфер з розміром порядку довжини хвилі падаючого випромінювання і показником заломлення близьким до одиниці число умов розширення порівняно мале [3].

Для RBC число необхідних умов розширення набагато більше. Для еритроцитів матриці потрібно обчислити з високою точністю, і важливо виконати перевірку сходження [3].

Основна перевага ТММ полягає в його високій точності Використовуючи складені зображення полів, отримуємо відношення між коефіцієнтами розповсюдження для випадкових і розсіяних полів. Електричні поля з довжиною хвилі λ в середовищі повинні задовольняти рівняння Максвелла, представлені у векторному рівнянні Гельмгольца:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k^2 \mathbf{E} = 0$$

де $k = 2\pi / \lambda$ – хвильове число. Для сфероїдального об'єкту розсіювання основні функції – сферичні хвильові вектори M_ν і N_ν , де ν представляє сферичну гармоніку з індексами m й n . Цими функціями задаються (якщо використовується тимчасова залежність $e^{-i\omega t}$, де $\omega = 2\pi c/\lambda$, c – швидкість світла):

$$\begin{aligned} M_\nu^0(\mathbf{r}) &= \nabla \times \mathbf{r} e^{-im\varphi} P_n^m(\cos\theta) (j_n(kr) + in_n(kr)) \\ N_\nu^0(\mathbf{r}) &= k^{-1} \nabla M_\nu(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (15)$$

з геометричними параметрами, визначеними на рис.2, де – функції Лежандра, – сферичні функції Бесселя, – функції Ньюмана з індексами $n = 0, 1, 2, \dots$,

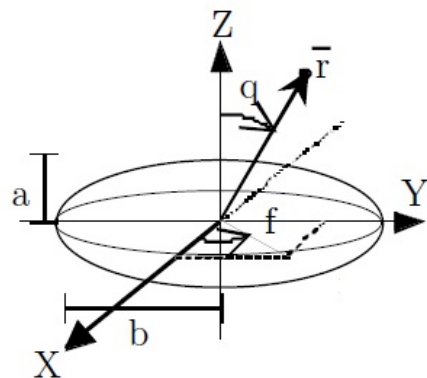


Рис.2. Зображення систем, використаних для виведення формалізму T-матриці [7].

$m = -n \dots n$. Ці функції – зовнішні хвилі, що виходять з однієї і тієї ж точки. Вони задовольняють векторному рівнянню Гельмгольца і формують набір функцій на одиничній сфері. Відповідні функції, які є одиничними за походженням, отримані з функцій, що виключають Ньюмана $n_n(kr)$ в рівнянні (6).

Таким чином, нормальні хвильові вектори $N_\nu^r(r)$ й $M_\nu^r(r)$ залежать від радіальної координати як функції Бесселя [7].

3. Висновки. Метод ТММ і його модифікація широко використовуються при розв'язанні теоретичних задач світлорозсіювання як могутній інструментарій при вирішенні різних практичних завдань. Головний недолік чисельних методів – тривалий час обчислення, який потрібний, щоб забезпечити точний розв'язок. Проте у зв'язку зі стрімким розвитком обчислювальної техніки даний недолік поступово втрачає свою вагу. Ведуться роботи по поліпшенню чисельної стабільності методу ТММ.

ЛІТЕРАТУРА

1. Мищенко М.И. *Электромагнитное рассеяние в случайных дисперсных средах: фундаментальная теория и приложения*. Киев–Нью-Йорк. – 2007.
2. Mishchenko M.I., Mackowski D. W., Travis L.D. Scattering of light by bispheres with touching and separated components. *Appl. Optics*. – 1995. –v.34, N 21. – P.4589–4599.
3. Лопатин В.Н., Приезжев А.В., Апонасенко А.Д., Шепелевич Н.В., Лопатин В.В., Пожиленкова П.В., Простакова И.В. *Методы светорассеяния в анализе дисперсных биологических сред*. М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2004. – 384 с.
4. Лопатин В.Н., Сидько Ф.Я. *Введение в оптику взвесей клеток*. Новосибирск: Наука. – 1988. – 240с.
5. Kattawar G.W. Plass G.N. Electromagnetic scattering from absorbing sphere. *Appl. Optics*. – 1967. – v.6, N8. – P. 1377–1382.
6. Борен К., Хафмен Д. *Поглощение и рассеяние света малыми частицами*. Пер. с англ. М.: Мир. – 1986. – 660 с.
7. Nilsson A.M.K., Alsholm P., Karlsson A., Andersson-Engels S. *T-matrix computations of light scattering by red blood cells*. Kristensson G. (ed.) Sweden. – 2001. – 24 p.