

ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

1. Аннотация

Был разработан быстрый метод оценки несферичности для частицы произвольной формы с помощью комплексного спектра Фурье индикатрисы рассеяния, полученного на сканирующем проточном цитометре (СПЦ). Было показано, что амплитудный спектр недостаточно чувствителен к изменению формы объекта, поэтому дополнительно необходимо использовать фазовый спектр. На основе этого анализа был предложен параметр P , оценивающий несферичность из спектра рассеяния, и количественная характеристика η несферичности из геометрии произвольной частицы. Эти две величины сильно коррелируют друг с другом на смоделированных данных сфероидов и эритроцитов. Эта корреляция является основой метода и позволяет оценить несферичность и доверительный интервал к ней. Дополнительно данный метод был протестирован на экспериментальных данных частиц молочного жира и эритроцитов в процессе сферизации.

2. Тема работы

Спектральный метод оценки несферичности частиц по индикатрисе рассеяния.

3. Состав команды

1. Юркин Максим Александрович, к.ф.-м.н., с.н.с., ИХКГ СО РАН, руководитель
2. Романов Андрей Владимирович, м.н.с., ИХКГ СО РАН, исполнитель

4. Информация о гранте

Грант: РНФ №18-75-10030, «Влияние структурно-функциональных свойств эритроцитов на формирование нестабильных атером в патогенезе атеросклероза»

5. Научное содержание работы

1. Постановка задачи

Светорассеяние – один из самых распространенных подходов характеристики и исследования микрочастиц. Особо стоит выделить методы измерения светорассеяния от одиночных частиц. Они формируют пласт задач, связанных с решением обратной задачи светорассеяния. Обратные задачи светорассеяния не имеют как аналитического, так и какого-

либо универсального решения и зачастую полагаются на знание модели исследуемой частицы. Хотя некоторые методы устойчивы к малым отклонениям от идеальной модели, трудно контролировать малость этого отклонения и, следовательно, получаемую погрешность в определяемых характеристиках частицы. В данной работе рассмотрен простейший случай – отклонение морфологии частицы от однородного шара.

Ранее был разработан метод определения размера и показателя преломления однородных сферических частиц через амплитудный спектр Фурье. Ввиду того, что он устойчив к малым искажениям, был дополнительно рассмотрен фазовый спектр. Последний редко используется в обработке сигналов из-за отсутствия опорной точки, но сигнал светорассеяния обладает такой точкой – направление рассеяния вперед.

В данной работе был разработан прямой метод оценки сферичности отдельных частиц по их сигналам светорассеяния (индикатрисам), измеренных с помощью сканирующего проточного цитометра

2. Современное состояние проблемы

Наблюдаемыми данными в обратной задаче светорассеяния является так называемая картина светорассеяния, что зачастую представляет собой какие-либо параметры интенсивности рассеяния в диапазонах по полярному и азимутальному углам. А характеристики модели — морфологические данные и показатель преломления исследуемой частицы. Зачастую рассматриваются *параметрические* обратные задачи, то есть когда заранее предполагается определенная модель формы частицы.

Очень часто возникают вопросы о том, насколько верно данная модель описывает исследуемые частицы. Во многих случаях отклонение от этой модели трудно контролировать, а как следствие, трудно контролировать и погрешность.

Особо остро стоит проблема отклонения модели от однородного шара. Так, например, в работе экспериментально проверяется сферичность частиц кварца и хлорида натрия в аэрозоле. А работе проверяется потенциальная возможность прибора отличать одиночные шары от частиц волокон диоксида кремния. В работе с помощью численных расчетов проверяется состоятельность предположения сферичности частиц в процессе горения угля. Некоторые пытаются использовать поляризацию для решения этой проблемы. Например, работа, в которой предложен надежный метод различия шаров и не шаров по их поляризованному рассеянию назад для лидаров. В сканирующей проточной цитометрии подобная проблема поднималась при описании и характеристике одиночных частиц молочного жира.

Фундаментальная трудность заключается в том, что для корректного исключения одной модели, всегда требуется другая. Это приводит к проблеме предварительных предположений.

3. Подробное описание работы включая используемые алгоритмы

Ранее спектральный метод использовался для характеристики шаров. Алгоритм подразумевал выделение из амплитудного спектра двух параметров, которые сильно коррелировали с размером и показателем преломления. Построив отображение из двух параметров спектра в характеристики частицы удалось решить обратную задачу рассеяния для шара. Дополнительно была получена устойчивость параметров спектра к различным искажениям, а именно основного пика в спектре. Таким образом сформировалось предположение, что основной пик отвечает за форму частицы.

В данной работе был проведен анализ спектра картины рассеяния сфероидов в теории Релегя-Ганса-Дебая. Было показано, что амплитудного спектра недостаточно для какой-либо оценки несферичности, так как при некоторых ориентациях частицы форма амплитудного пика не изменялась вовсе. Обратив внимание на фазовый спектр, удалось получить аналитические выражения для фазы в максимуме амплитудного спектра при малых отклонениях от сферичности.

Экстраполяции результатов на общий случай помешала зависимость фазы от показателя преломления возникающая в реальном рассеянии. Для ее исключения был предложен алгоритм, включающий использование предыдущего спектрального метода характеристики шаров, ввиду его устойчивости к различным искажениям. Исследуемый сигнал обрабатывался методом характеристики шаров, по полученным размеру и показателю преломления строился теоретический сигнал с помощью теории Ми, затем вычислялась интегральная комплексная разница участков спектра содержащих основной пик, эта величина принималась за новый спектральный параметр, по которому в дальнейшем оценивалась несферичность.

Для того чтобы построить обратное отображение из параметра несферичности в характеристику несферичности, необходимо было разработать меру последней. Такой мерой стала минимальная объемная разница между произвольной формой и шаром, для сфероидов она имела аналитическую связь с отношением полуосей. Обработав смоделированные на кластере НГУ индикатрисы сфероидов и эритроцитов с использованием метода дискретных диполей и программного пакета ADDA, удалось построить искомое отображение, позволяющее оценивать среднее и доверительный интервал значений несферичности.

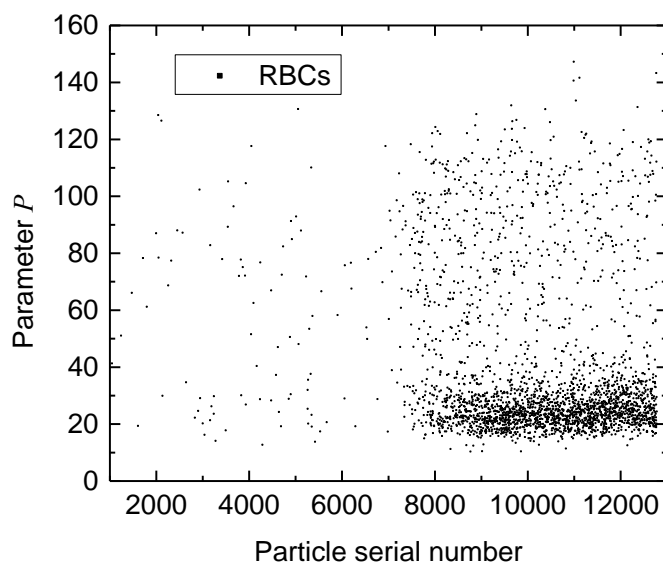
Метод был протестирован в условиях эксперимента на частицах молочного жира и процессе сферизации эритроцитов.

4. Полученные результаты

- Разработан метод оценки несферичности
- Проведен анализ поведения комплексного спектра в рамках теории РГД
- Введена общая характеристика несферичности для произвольной формы
- Метод протестирован на экспериментальных данных, качественно согласуется с альтернативным методом и во многом превосходит его

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

На иллюстрации показано зависимость параметра несферичности от индекса эритроцита в цитометре в процессе сферизации. Видно что с увеличением индекса, а как следствие с увеличением времени прошедшего с активации до регистрации частицы, число частиц с параметром P около 20 растет, что демонстрирует кинетику сферизации эритроцитов. (Пустая область в начале процесса происходит из-за того, что у слишком несферичных частиц невозможно высчитать спектральный параметр, так как данный метод работает только с небольшими отклонениями от сферичности)



6. Эффект от использования кластера

Некоторые из задач работы можно было бы решить и на обычных компьютерах, но только потратив месяцы вычислений для достижения требуемой точности. Наличие суперкомпьютера в режиме постоянной доступности принципиально упрощает все эти задачи и многократно повышает скорость их решения.

7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

Andrey V. Romanov, Anastasiya I. Konokhova, Ekaterina S. Yastrebova, Konstantin V. Gilev, Dmitry I. Strokotov, Valeri P. Maltsev, Maxim A. Yurkin, *Sensitive detection and estimation of particle non-sphericity from the complex Fourier spectrum of its light-scattering profile* Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 235 , 317-331 (2019) DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.07.001, Impact Factor - 2.955 Q1 (JCR 2018)