

УДК 681.518.3: 535.243.22

С. М. Кватернюк¹**ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ЕФЕКТУ ЛОКАЛІЗОВАНОГО ПОГЛИНАННЯ ВИПРОМІНЮВАННЯ У РОЗСІЮВАЛЬНИХ ЧАСТИНКАХ НА МУЛЬТИСПЕКТРАЛЬНІ ВИМІРЮВАННЯ**¹Вінницький національний технічний університет

Досліджено вплив ефекту локалізованого поглинання випромінювання хромофорами у розсіювальних частинках різної форми неоднорідних біологічних середовищ на точність мультиспектральних вимірювань їх біофізичних та структурних параметрів. Розраховано поправкові коефіцієнти для моделей неоднорідних біологічних середовищ з частинками різної форми та їх залежності від довжини хвилі та геометричних розмірів частинок. Отримані результати важливі для зменшення похибок вимірювання біофізичних та структурних параметрів неоднорідних біологічних середовищ мультиспектральними методами.

Ключові слова: мультиспектральний контроль, неоднорідні біологічні середовища, частинки, світло-розсіювання.

Вступ

Мультиспектральні телевізійні вимірювання можуть використовуватись для прикладних задач екологічного моніторингу, біомедичної діагностики та контролю якості продукції, що зводяться до вимірювального контролю параметрів частинок у приповерхневому шарі неоднорідних біологічних середовищ [1—10]. Зокрема, це такі задачі, як вимірювання параметрів розсіювальних частинок на прикладі фітопланктону у водних середовищах [1—5], еритроцитів у крові [7—10], жирових частинок у молоці. При цьому необхідно визначити середні розміри частинок, чисельну концентрацію частинок у певному об'ємі середовища, концентрації хромофорів у об'ємі частинок чи усереднену концентрації хромофорів у об'ємі середовища тощо.

Актуальність теми зумовлена необхідністю зменшення похибок опосередкованого вимірювання параметрів неоднорідних біологічних середовищ відповідно до задач екологічного моніторингу, біомедичної діагностики та контролю якості продукції з урахуванням їх оптико-фізичних параметрів.

Мета роботи — зменшити систематичну складову похибки вимірювань параметрів неоднорідних біологічних середовищ за рахунок впливу ефекту локалізованого поглинання випромінювання у розсіювальних частинках.

Для досягнення вказаної мети необхідно розв'язати такі задачі:

- оцінити вплив ефекту локалізованого поглинання випромінювання в неоднорідних біологічних середовищах в залежності від розмірів та форми розсіювальних частинок;
- розрахувати поправкові коефіцієнти, що дозволить компенсувати систематичну складову похибки мультиспектральних вимірювань в залежності від довжини хвилі.

Комп'ютерне моделювання ефекту локалізованого поглинання випромінювання у розсіювальних частинках неоднорідних біологічних середовищ

Поширення світла в дисперсному середовищі залежить від характеристик розсіювання та поглинання його елементарного об'єму. Якщо середовище багатоконпонентне і оптичні властивості кожної складової відомі, то зазвичай характеристики середовища знаходять як середньозважені параметри компонент з ваговими коефіцієнтами, рівними їх об'ємним концентраціям. Фізично це відповідає «розмиванню» властивостей окремих компонент на весь елементарний об'єм або ади-

тивному додаванню. Такий підхід використовується для розв'язання багатьох практичних задач. Однак, в оптиці біологічних об'єктів відоме явище ефекту локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками (ефект «сита») [7—11], який зводиться до того, що основне поглинання випромінювання у неоднорідному біологічному середовищі відбувається у локалізованих поглиначах, що містять певні хромофори. При цьому об'ємна концентрація локалізованих поглиначів може бути невеликою, наприклад, декілька відсотків. Якщо для визначення показника поглинання елементарного об'єму використати адитивний підхід і «розмити» поглинання хромофорів у цьому об'ємі, то отримаємо досить сильне поглинання в елементарному об'ємі неоднорідного біологічного середовища. Проте зрозуміло, що значна частка випромінювання пройде через слабопоглинаючі ділянки середовища між локалізованими поглиначами. В цьому і полягає ефект локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками на оптичні характеристики, який у англійській літературі називають "pigment packaging". Під локалізованими мають на увазі поглинання світла в обмежено малій за об'ємом області неоднорідного біологічного середовища, що необхідно враховувати під час визначення параметрів елементарного об'єму. Задача зводиться до оцінки внеску поглинання локалізованих поглиначів у сумарну поглинальну здатність неоднорідного біологічного середовища. При цьому слід врахувати певні особливості, у яких виникає ефект локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками. Показники заломлення розсіювальних частинок і основного середовища близькі, тому їх індикатриси сильно витягнуті вперед, а розсіювання світла відбувається у вузькій області кутів [12, 13]. Крім того, концентрація світлорозсіювальних частинок, що є локалізованими поглиначами випромінювання невелика, а тому розсіюванням на них, у порівнянні з розсіюванням іншими компонентами, часто можна знехтувати. При цьому показник поглинання неоднорідного біологічного середовища чисельно дорівнює поглиненню одиничним об'ємом потоку випромінювання за одиничного падаючого потоку з поправкою на ефект локалізованого поглинання [14, 15]

$$k(\lambda) = k_A(\lambda)f_A + Ck_B(\lambda)f_B + k_C(\lambda)(1 - f_A - f_B) = K_A(\lambda) + K_B(\lambda) + K_C(\lambda), \quad (1)$$

де λ — довжина хвилі, k_A і k_B — показники поглинання однорідно розчинених у об'ємі середовища речовин і локалізованих поглиначів; f_A і f_B — їх об'ємні концентрації, k_C — показник поглинання основної частини неоднорідного біологічного середовища, K_A , K_B , K_C — внески відповідних компонент в сумарне поглинання, C — поправковий коефіцієнт, що враховує ефект локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками.

При цьому

$$k_B(\lambda) = f_{ch_1} \cdot k_{ch_1}(\lambda) + f_{ch_2} \cdot k_{ch_2}(\lambda) + f_{ch_3} \cdot k_{ch_3}(\lambda) + \dots, \quad (2)$$

де $k_{ch_i}(\lambda)$ — показник поглинання хромофорів, f_{ch_i} — концентрація хромофорів у локалізованих поглиначах.

Також можна ввести параметр $F_i = f_B \cdot f_{ch_i}$ як концентрацію хромофорів у всьому об'ємі неоднорідного біологічного середовища.

Якщо знехтувати впливом ефекту локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками, то поправковий коефіцієнт буде дорівнювати $C = 1$. Ефект локалізованого поглинання випромінювання за своїм фізичним змістом ніби зменшує ефективну концентрацію хромофорів у розсіювальних частинках та загалом у неоднорідному біологічному середовищі, тобто $C < 1$.

Показник поглинання частинок неоднорідних біологічних середовищ $k_B(\lambda)$ залежить від вмісту у них певних хромофорів. Для частинок фітопланктону це хлорофіли a , b і c , каротиноїди, фікобіліни та ін. [16]. Концентрація цих пігментів залежить від багатьох факторів (виду фітопланктону, температури, концентрації у водному середовищі розчинених біогенних та токсичних речовин тощо). При цьому поглинання хлорофілу a є домінуючим. Вміст пігментів у фітопланктоні можливо визначити методами спектрофотометрії або хроматографії, наприклад, у спиртовій чи ацетатній витяжці. При цьому клітини фітопланктону руйнуються, а хромофори переходять у однорідну суміш. Оскільки при цьому у середовищі відбуваються біохімічні реакції і його параметри швидко змінюються з часом, то додають спеціальні фіксуєчі речовини, наприклад, етиловий спирт, які також впливають на результати вимірювань концентрацій хромофорів. Типовим значенням показника поглинання суміші пігментів фітопланктону на довжині хвилі 440 нм є

$k_{B440} = 5 \text{ мм}^{-1}$, яке використаємо для подальших розрахунків поправкових коефіцієнтів. При цьому нормоване значення показника поглинання на різних довжинах хвиль відносно цього значення буде

$$\bar{k}_B(\lambda) = k_B(\lambda) / k_{B440}, \quad (3)$$

де k_{B440} — показник поглинання на довжині хвилі 440 нм; $k_B(\lambda)$ — коефіцієнт поглинання на різних довжинах хвиль.

Форма світлорозсіювальних частинок, що є локалізованими поглиначами випромінювання у неоднорідних біологічних середовищах може бути різною. У роботі [10] розраховано поправковий коефіцієнт для частинок у вигляді циліндрів з середньою довжиною L і середнім діаметром D . Вісь циліндра орієнтована по відношенню до падаючого світла під кутом α . Знехтуємо відбиванням і заломленням світла на поверхні частинок вважаючи його близьким до основного середовища. Частина поглинання елементарного об'єму, зумовлена лише частинками, локалізованими поглиначами,

$$K_B(\lambda) = NS(\lambda) = Ck_B(\lambda)f_B = C\bar{k}_B(\lambda)k_{B440}f_B, \quad (4)$$

де N — кількість частинок у одиниці об'ємі середовища; $S(\lambda)$ — поглинання однієї частинки; C — поправковий коефіцієнт, що враховує ефект локалізованого поглинання випромінювання розсіювальними частинками; $k_B(\lambda)$ — спектральний показник поглинання локалізованих поглиначів; f_B — об'ємна концентрація частинок; $\bar{k}_B(\lambda)$ — нормоване значення показника поглинання; k_{B440} — показник поглинання на довжині хвилі 440 нм.

Для поглиначів циліндричної форми орієнтованих під кутом α між напрямком падіння світла і віссю циліндра використаємо формулу поправкового коефіцієнта, отриману у [10] з урахуванням умови $L \gg D$ та нормованого показника поглинання

$$C_1 = \frac{\sin \alpha [1 - \exp(-\bar{k}_B(\lambda)k_{B440}L/\sin \alpha)]}{\bar{k}_B(\lambda)k_{B440}\pi D/4}, \quad (5)$$

де α — кут між напрямком падіння світла і віссю циліндра; L — довжина циліндра; D — діаметр циліндра.

Математична модель неоднорідного біологічного середовища з частинками у вигляді циліндрів орієнтованих хаотично чи під певним кутом до падаючого випромінювання зручна для дослідження суспензії еритроцитів, певних видів фітопланктону тощо. Результати розрахунку залежності поправкового коефіцієнта C_1 від діаметра частинок за умови їх орієнтації під кутом $\alpha = 45^\circ$ до падаючого випромінювання та певним значенням довжини циліндра на довжині хвилі 440 нм показано на рис. 1.

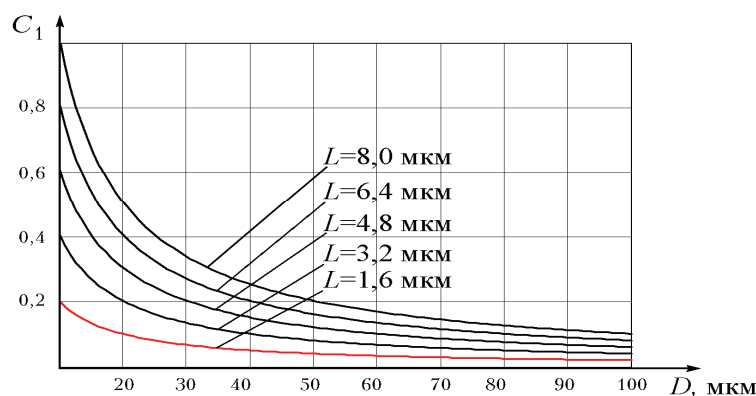


Рис. 1. Залежність поправкового коефіцієнта C_1 від діаметра частинок за умови їх орієнтації під кутом $\alpha = 45^\circ$ до падаючого випромінювання на довжині хвилі 440 нм

Для багатьох прикладів неоднорідних біологічних середовищ різного походження локалізовані поглиначі можна представити у вигляді хаотично орієнтованих циліндрів за $L \gg D$ (судини у біотканинах шкіри людини, нитчасті водорості у водних середовищах тощо) та використовувати поправковий коефіцієнт, що враховує локалізоване поглинання з роботи [8]

$$C_2 = 2\sqrt{3} \frac{1 - \exp\left[-\pi \bar{k}_B(\lambda) k_{B440} D(1 - 0,043 \bar{k}_B(\lambda) k_{B440} D)/(2\sqrt{3})\right]}{\pi \bar{k}_B(\lambda) k_{B440} D} \quad (6)$$

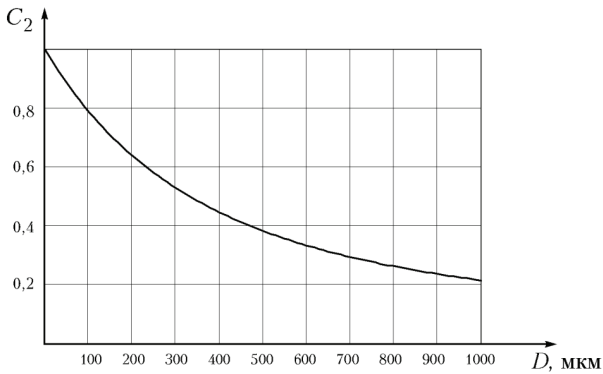


Рис. 2. Залежність поправкового коефіцієнта C_2 від діаметра частинок на прикладі хаотично орієнтованих циліндрів на довжині хвилі 440 нм

Результати розрахунку залежності поправкового коефіцієнта C_2 від діаметра частинок на прикладі хаотично орієнтованих циліндрів на довжині хвилі 440 нм показано на рис. 2.

Крім того, наведемо особливо цікавий випадок зі сферичними поглиначами, який може бути використаний для низки практичних задач (частинки фітопланктону у водних середовищах, жирові частинку у молоці, латексні емульсії тощо). Якщо у роботі [10] у формулу для розрахунку поправкового коефіцієнта підставити значення коефіцієнта поглинання сферичного поглинача, діаметр сфери D_s та нормоване значення показника поглинання $\bar{k}_B(\lambda)$, то отримаємо:

$$C_3 = 1,5 \left(1 - \left[1 - (1 + D_s \bar{k}_B(\lambda) k_{B440}) \exp(-D_s \bar{k}_B(\lambda) k_{B440}) \right] / \left[0,5 (D_s \bar{k}_B(\lambda) k_{B440})^2 \right] \right) / (D_s \bar{k}_B(\lambda) k_{B440}), \quad (7)$$

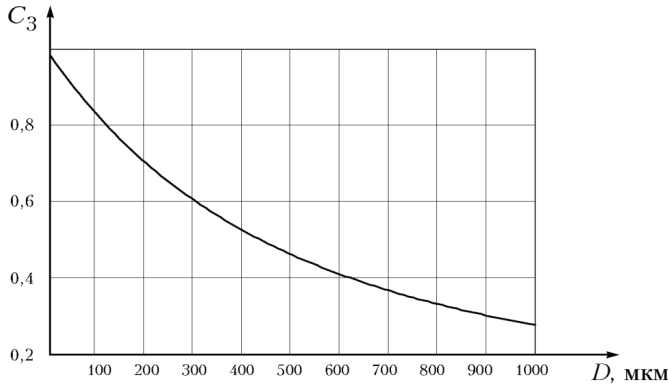


Рис. 3. Залежність поправкового коефіцієнта C_3 від діаметра сферичних частинок на довжині хвилі 440 нм

де D_s — середній діаметр сферичних частинок.

Результати розрахунку залежності поправкового коефіцієнта C_3 від діаметра частинок на прикладі сферичних поглиначів на довжині хвилі 440 нм показано на рис. 3.

Розрахунок поправкових коефіцієнтів у робочому діапазоні засобів мультиспектрального телевізійного вимірювального контролю

Максимум поглинання хромофорів фітопланктону знаходиться на довжині хвилі 440 нм. Нормовані значення коефіцієнта поглинання хромофорів фітопланктону на різних довжинах хвиль наведено у таблиці.

Нормовані значення коефіцієнта поглинання хромофорів фітопланктону

$\bar{k}_B(\lambda)$	0,536	0,714	1	0,964	0,714	0,429	0,179	0,089	0,071	0,064
λ , нм	400	425	440	450	475	500	525	550	575	600

Для мультиспектральних вимірювань важливі зміни поправкових коефіцієнтів C_1, C_2, C_3 у робочому діапазоні роботи засобів мультиспектрального телевізійного вимірювального контролю. Тому визначимо залежності цих поправкових коефіцієнтів від довжини хвилі за заданих значень середніх геометричних розмірів розсіювальних частинок. На рис. 4а показано залежності поправкового коефіцієнта $C_1(\lambda)$ для орієнтованих під кутом $\alpha = 45^\circ$ розсіювальних частинок у формі циліндрів довжиною 3,2 мкм і різним діаметром. Для моделі неоднорідного біологічного середовища у вигляді суспензії розсіювальних частинок у формі циліндрів, орієнтованих під певним кутом до падаючого світла поправкові коефіцієнти $C_1(\lambda)$, які враховують ефект локалізованого

поглинання випромінювання практично не залежать від довжини хвилі. Так, за довжини циліндрів 3,2 мкм та їх діаметрі 10 мкм на довжині хвилі 440 нм поправковий коефіцієнт буде $C_1 = 0,40743577$, а на довжині хвилі 600 нм $C_1 = 0,4074366$, що складає близько 0,0002% і суттєво менше інших складових похибки мультиспектральних вимірювань, яка була оцінена для лабораторного зразка засобу мультиспектральних телевізійних вимірювань близько 0,5%. Це дозволяє знехтувати зміною поправкових коефіцієнтів на різних довжинах хвиль для цієї моделі неоднорідного біологічного середовища.

На рис. 4б показані залежності поправкового коефіцієнта $C_2(\lambda)$ для моделі неоднорідного біологічного середовища з розсіювальними частинками у формі хаотично орієнтованих циліндрів з різним діаметром та нескінченною довжиною. За діаметра циліндрів 5 мкм на довжині хвилі 440 нм поправковий коефіцієнт буде $C_2 = 0,222$, а на довжині хвилі 600 нм $C_2 = 0,857$. Відмінність при цьому складає 74,15%, що суттєво більше загальної похибки мультиспектральних вимірювань (0,5%) і не може бути знехтувана.

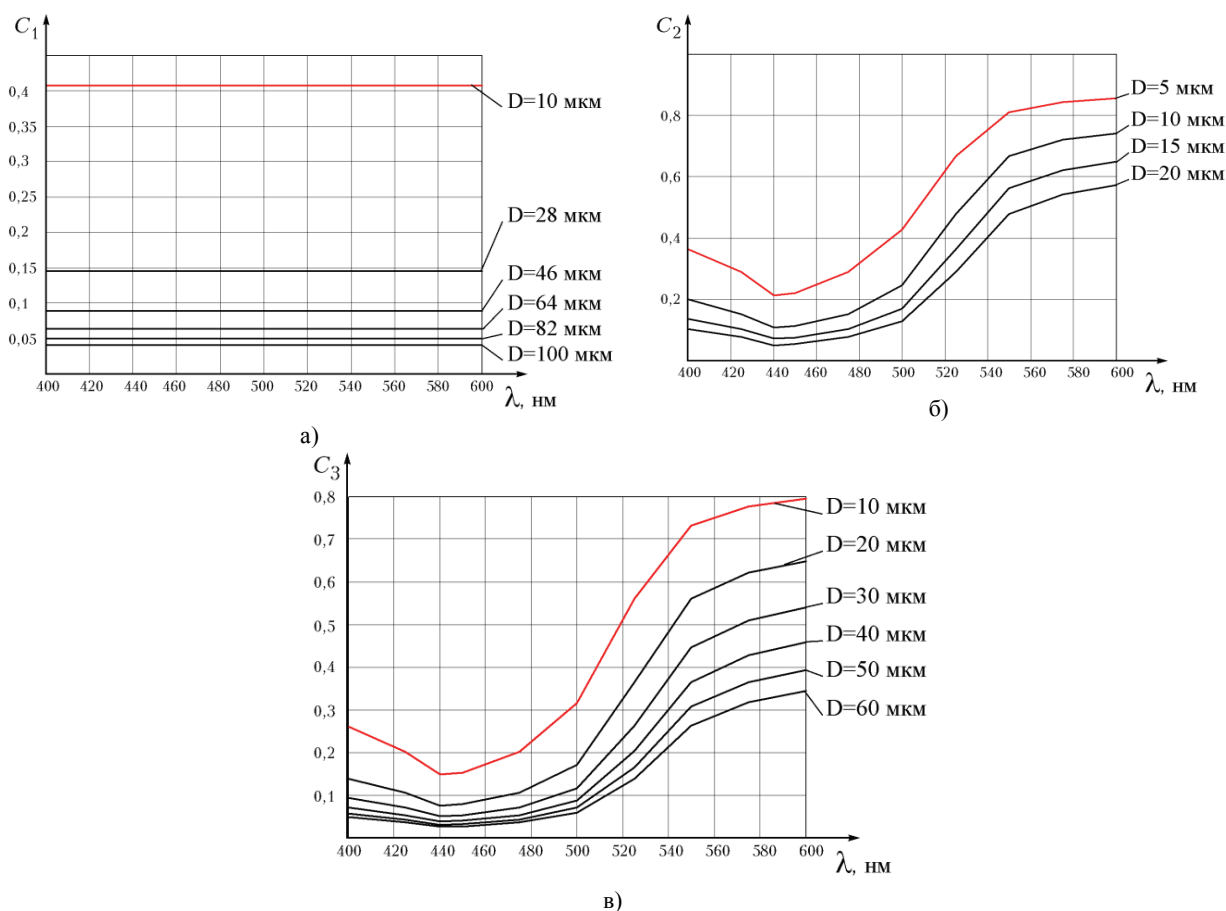


Рис. 4. Залежності поправкових коефіцієнтів за заданих значень середніх геометричних розмірів розсіювальних частинок

На рис. 4в показані залежності поправкового коефіцієнта $C_3(\lambda)$ для моделі неоднорідного біологічного середовища з розсіювальними частинками сферичної форми різного діаметра. При діаметрі сферичних частинок 10 мкм на довжині хвилі 440 нм поправковий коефіцієнт буде $C_3 = 0,152$, а на довжині хвилі 600 нм $C_3 = 0,795$. Відмінність при цьому складає 80,891%, що суттєво більше загальної похибки мультиспектральних вимірювань і також не може нехтуватись.

Висновки

Показано, що локалізоване поглинання випромінювання призводить до зменшення сумарного показника поглинання неоднорідних біологічних середовищ у порівнянні з рівномірним розподілом хромофорів у об'ємі середовища. Наслідком цього є збільшення глибини проникнення світла

в середовище і збільшення коефіцієнта його дифузного відбиття. Залежно від концентрації розсіювальних частинок, їх форми та розмірів, такі зміни глибини проникнення і коефіцієнта відбиття можуть бути досить значні. Тому без врахування ефекту локалізованого поглинання випромінювання у розсіювальних частинках неоднорідних біологічних середовищ похибки вимірювання їх біофізичних та структурних параметрів можуть досягати 70...80 %, що не дозволить використовувати розроблені засоби для прикладних задач екологічного контролю водних середовищ, біомедичної діагностики та контролю якості продукції. Враховуючи цей ефект та вносячи відповідні поправкові коефіцієнти, за використання математичної моделі, яка достатньо точно описує поширення світлового випромінювання в об'єкті дослідження, можна отримати загальну похибку вимірювань не більше 0,5 %, зумовлену випадковою складовою похибки вимірювань.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Experimental studies of phytoplankton concentrations in water bodies by using of multispectral images / [V. Petruk, S. Kvaternyuk, V. Pohrebennyk et al.] // Water Supply and Wastewater Removal. Editors: Henryk Sobczuk, Beata Kowalska. — Lublin : Lublin University of Technology, 2016. — P. 161—171.
2. The method of multispectral image processing of phytoplankton for environmental control of water pollution / [V. Petruk, S. Kvaternyuk, V. Yasynska et al.] // Proc. SPIE, Optical Fibers and Their Applications, 2015. Vol. 9816, 98161N (17 December 2015). — P. 98161N-1—98161N-5; doi: 10.1117/12.2229202.
3. Оптический контроль содержания загрязняющих веществ в водных средах на основе метода биоиндикации по фитопланктону / [В. Г. Петрук, С. М. Кватернюк, В. В. Барун и др.] // Медэлектроника. — 2012 : Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии. — VII МНТК. — Минск, Беларусь, 13 — 14 декабря 2012. — С. 80—81.
4. The spectral polarimetric control of phytoplankton in photobioreactor of the wastewater treatment / V. G. Petruk; S. M. Kvaternyuk; Y. M. Denysiuk; K. Gromaszek // Proc. SPIE, Optical Fibers and Their Applications. — 2012. — Vol. 8698, 86980H. — P. 86980H-1—86980H-4.
5. Патент України G01N 21/21 Спосіб мультиспектрального телевізійного вимірювального контролю екологічного стану водних об'єктів за параметрами фітопланктону / В. Г. Петрук, С. М. Кватернюк, О. Є. Кватернюк, Р. В. Петрук. — № 99580МПК (2006) ; заявл. 05.01.2015 ; опубл. 10.06.2015, Бюл. № 11. — 5 с.
6. Кватернюк С. М. Метод та засоби мультиспектрального телевізійного вимірювального контролю стану неоднорідних біологічних середовищ / С. М. Кватернюк // Вісник Вінницького політехнічного інституту. — 2017. — № 1. — С. 15—22.
7. Барун В. В. Особенности спектральной поглощательной способности эритроцитов крови / В. В. Барун, А. П. Иванов // Альманах клинической медицины : Медицинская физика и инновации в медицине : III Троицкая конференция (3–6 июня 2008 г.) — М. : МОНИКИ. — 2008. — Т. XVII, Часть 1. — С. 28—31.
8. Особенности спектрофотометрической диагностики суспензии эритроцитов / [А. П. Иванов, В. В. Барун, С. М. Кватернюк та ін.] // II-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю (Екологія/Ecology-2009) : зб. наук. статей. — Вінниця, 23–26 вересня 2009 р. — Вінниця : ФОП Данилюк, 2009. — С. 294—298.
9. Патент на изобретение Республики Беларусь. Способ определения длины агрегатов до 40 мкм / В. В. Барун, А. П. Иванов, В. Г. Петрук, С. М. Кватернюк. — № 16919 от 26.11.2012, Заяв. 29.03.2010. — 6 с.
10. Спектральные особенности распространения света в морской воде с сильно поглощающими водорослями / [В. В. Барун, С. М. Кватернюк, А. П. Иванов и др.] // Проблемы оптической физики и биофотоники : 12-я Международная молодежная научная школа по оптике, лазерной физике и биофотонике. 23—26 сентября 2006 г. : материалы конф. — Саратов, 2009. — С. 78—85.
11. Барун В. В. Оценка вклада локализованного поглощения света кровеносными сосудами в оптические свойства биологической ткани / В. В. Барун, А. П. Иванов // Оптика и спектроскопия. — 2004. — Т. 96. — № 6. — С. 1019—1024.
12. Иванов А. П. Физические основы гидрооптики / А. П. Иванов. — Минск : Наука и техника, 1975. — 504 с.
13. Зеге Э. П. Перенос изображения в рассеивающей среде / Э. П. Зеге, А. П. Иванов, И. Л. Кацев. — Минск : Наука и техника, 1975. — 327 с.
14. Иванов А. П. Оптика рассеивающих сред / А. П. Иванов. — Минск : Наука и техника, 1975. — 592 с.
15. Копелевич О. В. Малопараметрическая модель оптических свойств морской воды / О. В. Копелевич // Оптика океана ; под ред. Монин А. С. — М. : Наука, 1983. — Т. 1. — С. 208—234.
16. Кобленц-Мишке О. И. Пигменты фитопланктона мезотрофных и эвтрофных районов тропической Пацифики / О. И. Кобленц-Мишке, М. А. Семенова // Труды Института океанологии АН СССР. — 1975. — Т. 102. — С. 131—139.

Рекомендована екології та екологічної безпеки ВНТУ

Стаття надійшла до редакції 20.07.2017

Кватернюк Сергій Михайлович — докторант, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедри екології і екологічної безпеки, e-mail: serg.kvaternuk@gmail.com.

Вінницький національний технічний університет, Вінниця

S. M. Kvaterniuk¹

Investigation of the Influence of the Effect of Localized Absorption in Scattering Particles on Multispectral Measurements

¹Vinnitsia National Technical University

The influence of the effect of localized absorption by chromophores in scattering particles of various forms of inhomogeneous biological media on the accuracy of multispectral measurements of their biophysical and structural parameters is studied. Correction coefficients for models of inhomogeneous biological media with particles of different shapes and their dependence on the wavelength and geometric sizes of the particles are calculated. The obtained results are important for reducing the measurement errors of biophysical and structural parameters of inhomogeneous biological media by multispectral methods.

Keywords: multispectral control, inhomogeneous biological media, particles, light scattering.

Kvaterniuk Sergii M. — Doctoral Student, Cand. Sc. (Eng.), Assistant Professor, Assistant Professor of the Chair of Ecology and Ecological Safety, e-mail: serg.kvaternuk@gmail.com

С. М. Кватернюк¹

Исследование влияния эффекта локализованного поглощения в рассеивающих частицах на мультиспектральные измерения

¹Винницкий национальный технический университет

Исследовано влияние эффекта локализованного поглощения хромофорами в рассеивающих частицах различной формы неоднородных биологических сред на точность мультиспектральных измерений их биофизических и структурных параметров. Рассчитаны поправочные коэффициенты для моделей неоднородных биологических сред с частицами различной формы и их зависимости от длины волны и геометрических размеров частиц. Полученные результаты важны для уменьшения погрешностей измерения биофизических и структурных параметров неоднородных биологических сред мультиспектральными методами.

Ключевые слова: мультиспектральный контроль, неоднородные биологические среды, частицы, светорассеяние.

Кватернюк Сергей Михайлович — докторант, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры экологии и экологической безопасности, e-mail: serg.kvaternuk@gmail.com