

Системой верхнего уровня и системой хранения информации является персональный компьютер или распределенная сеть ПК в зависимости от требований налагаемых на систему.

Что касается программного обеспечения то реализовано: системное ПО для работы с периферийными устройствами и распределения памяти, прикладное ПО реализующее управляющий модуль, ПО пред- и постобработки данных, ПО обмена данных, ПО интерфейса пользователя а также СУБД системы. Программное обеспечение разработано с использованием интегрированных сред разработки: RIDE для программирования микроконтроллера, Sun ONE Studio 4Me для программирования мобильных устройств, Bulder 6.0 для реализации системы верхнего уровня и СУБД.

### Литература

1. <http://www.bksv.com>
2. <http://www.onosokki.co.jp>
3. <http://www.endevco.com>
4. <http://www.belmt.com>
5. <http://www.caravan.ru/~motronik/pribors.html>
6. *Мирский Г.Я.* Аппаратурное определение характеристик случайных процессов. М.: Энергия . 1972. 368с.
7. Исследование физических основ и разработка методов анализа нестационарных процессов в системах диагностики состояния: Отчет о НИР (заключительный) /БГУ/; Руководители В.М.Скрипник, А.А.Белый. №ГР 19963450; Минск, 1998. 540с.
8. *Бендат Дж., Пирсол А.* Прикладной анализ случайных данных: Пер. с англ. – М.:Мир, 1989. 540с.
9. *Белый А.А., Бовбель Е.И., Микулович В.И.* Алгоритмы БПФ и их свойства// Зарубежная радиоэлектроника. 1979. №2. С.3–29.
10. <http://book.itep.ru>
11. USER GUIDE PXAC3x 16-bit Microcontroller with CAN Controller, 2000 Jan 14.

## РАЗРАБОТКА ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ В БИЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

**С. И. Хиревич**

До недавнего времени источником для большинства наших представлений о внутренней структуре вещества служили исследования методами оптической спектроскопии. В настоящее время наблюдается стремительный рост инструментальных средств исследований вещества, основанных на различных физических процессах. Одно из таких средств – измерения с помощью ядерного магнитного резонанса (ЯМР).

Основные достоинства ЯМР-измерений:

- высокая разрешающая способность – на десять порядков больше, чем у оптической спектроскопии;

- возможность вести количественный учет (подсчет) резонирующих ядер, это открывает возможности для количественного анализа вещества;
- спектры ЯМР зависят от характера процессов, протекающих в исследуемом веществе, поэтому эти процессы можно изучать указанным методом, причем доступной оказывается временная шкала в очень широких пределах – от многих часов до малых долей секунды;
- современная радиоэлектронная аппаратура и ЭВМ позволяют получать параметры, характеризующие явление в удобной для исследователей форме; данное обстоятельство особенно важно, когда речь идет о практическом использовании экспериментальных данных.

Важной особенностью ЯМР является возможность осуществлять неразрушающие наблюдения, а так же то, что измерения ЯМР не оказывают вредных воздействий на биологические образцы. В данное время существуют методы измерения ЯМР, есть результаты, но отсутствует законченная трехмерная математическая модель. Имеются аналитические модели Бронштейна (1979 г.) [1] и Калахана (1995 г.) [2], описывающие простейший случай одной ячейки с закрытыми или полуоткрытыми границами (данные модели разработаны для трех геометрий – сферы, круга и отрезка). Но данные модели имеют следующие недостатки: количество моделируемых ячеек – только одна; нет произвольной конфигурации границ ячейки; данные модели не учитывают время релаксации.

Ранее мною была разработана модель одномерной системы биологических клеток, разделенных мембранами. Она была основана на решении уравнения, представляющего собой второй закон Фика, модифицированный для пульсирующего градиента магнитного поля:

$$\frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla(D(\vec{r})\nabla S(\vec{r}, t)) + (\sqrt{-1}\gamma g(t)\vec{r} - \frac{1}{T(\vec{r})})S(\vec{r}, t).$$

Модель реализована на языке C++. Также была разработана двумерная модель одиночной биологической клетки, которая была реализована в среде MATLAB с использованием встроенной реализации метода конечных элементов (МКЭ). Эти модели являются этапами на пути к реализации трехмерной численной модели. В среде MATLAB нет возможности решать дифференциальные уравнения в частных производных в трехмерной области. Это одна из основных причин, побудивших меня начать детальное изучение МКЭ.

В основе МКЭ лежит поиск решения исходного дифференциального уравнения (ДУ) на заданной области  $\Omega$  в следующем виде:

$$S \approx \hat{S} = \sum_{m=1}^M S_m N_m,$$

где  $\hat{S}$  – значения функции  $S$  в точке  $t$  области  $\Omega$ , а  $N_m$  – некоторые базисные функции. Подход МКЭ состоит в разбиении области  $\Omega$  на ряд неперекрывающихся элементов  $\Omega_i$  и построении затем аппроксимации  $\hat{S}$  кусочным образом, т.е. отдельно на каждой подобласти [3]. Часто исходную область разбивают на элементы треугольной формы, т.к. с помощью семейств треугольников можно легко и достаточно точно представить область с криволинейными границами сложной формы. Процедура разбиения области на треугольники называется триангуляцией. Для того, чтобы базисные функции наилучшим образом аппроксимировали искомое решение, форма каждого треугольника должна стремиться к равносторонней, т.е. наименьший угол треугольника в сетке – к  $60^\circ$ . Также, в участках области, где нужна более подробная информация о поведении решения, необходимо сгущение сетки.

Сначала мною была предпринята попытка разработки собственного алгоритма триангуляции, суть которого заключается в следующем:

1. Поиск треугольника с малым минимальным углом;
2. Поиск двух смежных с данным треугольников;
3. Разбиение полученного пятиугольника на треугольники с большим минимальным углом, чем исходный.

Были получены неудовлетворительные результаты – аномальные сгущения сетки, содержащие треугольники с малыми минимальными углами. Следующая попытка – расстановка узлов сетки заранее, а потом лишь соединение их по критерию Делоне [4]. Данный алгоритм оказался также непригоден применительно к моей задаче из-за большой трудоемкости расстановки точек в случае сложной геометрии области. Далее был реализован алгоритм Рапперта [5], давший прекрасные результаты (Рис 1.).

Следующим этапом реализации МКЭ является выбор типа базисной функции (БФ). В целях простоты, удобства реализации были выбраны линейные БФ.

Применение МКЭ позволяет решение исходного дифференциального уравнения свести к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). После выбора БФ следует этап ансамблирования, результатом которого является СЛАУ. Ансамблирование представляет собой анализ каждого элемента для составления конкретного условия для каждой БФ на данном элементе. Анализ следует производить, совершая «обход» от одной вершины элемента к другой в одинаковом направлении для всех элементов. Задача определения обхода вершин треугольника была решена с помощью преобразований параллельного переноса и поворота. В случае стационарной задачи элементы СЛАУ вычисляются следующим образом:

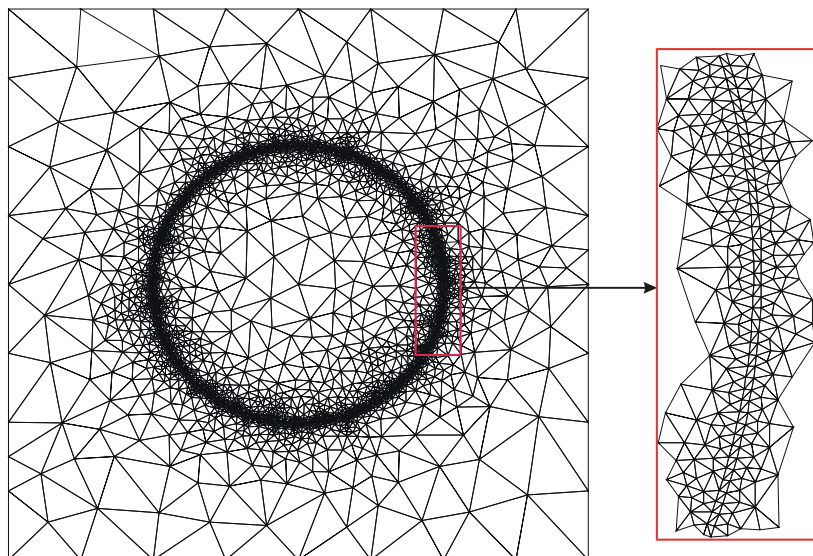


Рис. 1. Триангуляция Делоне с применением алгоритма Рапперта

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \left( \frac{\partial N_i^e}{\partial x} D \frac{\partial N_j^e}{\partial x} + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} D \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \right) dx dy .$$

Из этой формулы можно видеть, что при выборе линейных БФ интегрирование сводится к простому вычислению площади элемента. После завершения данных промежуточных этапов были получены результаты решения простейшего уравнения диффузии в стационарном случае.

При решении нестационарной задачи возникает необходимость ансамблирования еще одной глобальной матрицы, элементы которой вычисляются следующим образом:

$$C_{ij}^e = \int_{\Omega_e} N_i^e N_j^e dx dy .$$

Можно видеть, что в данном случае возникает необходимость расчета 5 интегралов на области каждого элемента. Очевидно, что при прямом подходе это представляет собой очень трудоемкую задачу. Решение ее было получено с помощью квадратурных формул Гаусса [6], которые позволили процедуру интегрирования заменить простым вычислением значений интегрируемой функции в нескольких «особых» точках.

При решении нестационарной задачи требуется получение решения СЛАУ на каждом временном шаге с одинаковой левой и разными правыми частями, что стимулирует использование для решения данной СЛАУ метода LU-факторизации [7]. Прямая реализация, т.е. без оптимизации программного кода, требует значительных временных затрат для

решения задачи даже на относительно разряженной сетке, что не позволило получить удовлетворительные результаты при наличии градиента магнитного поля.

В результате проделанной работы были изучены и реализованы алгоритмы триангуляции, получено неравномерное разбиение области, минимальный угол сетки доведен примерно до  $35^\circ$ , решены задача быстрого выявления направления обхода треугольников, задача быстрого интегрирования многочлена в области треугольника, реализован метод LU-факторизации. Дальнейшей целью данной работы является оптимизация программы с целью повышения скорости работы, а также построение трехмерной модели.

### Литература

1. *Brownstein K. R. and Tarr C. E.* // Phys. Rev. A 19, 2446, 1979.
2. *Callagan P. T.* Pulsed-gradient spin-echo NMR for planar, cylindrical, and spherical pores under conditions of wall relaxation // J. Magn. Reson. Ser. A 113, 1995.
3. *Зенкевич О., Морган К.* Конечные элементы и аппроксимация / Пер. с англ. – М.: Мир, 1986.
4. *Делоне Б. Н.* О пустоте сферы // Изв. АН СССР, ОМЭН. 1934, 4.
5. *Ruppert J.* A Delaunay refinement algorithm for quality 2-dimensional mesh generation // Journal of Algorithms. 1994. № 2.
6. *Cowper E. R.* Gaussian quadrature formulae for triangles // Int. J. Num. Meth. Eng. 1973. v. 7.
7. *Мулярчик С. Г.* Численные методы: Конспект лекций. // Мн., БГУ, 2001.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ ИСКАЖЕНИЙ НА ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВО *FCS*

**Е. В. Хомич**

Флуоресцентная корреляционная спектроскопия (*FCS*) – это один из методов, обладающий высоким разрешением, пространственного и временного анализа веществ чрезвычайно низкой концентрации [1,2]. В данном подходе для исследования, т. е. для получения интересующих кинетических параметров вещества, используется явление флуоресценции. Образец освещается лазерным излучением, в результате чего молекулы переходят в возбужденное состояние, а затем излучают флуоресцентное свечение, которое и детектируется. Но, в отличие от других флуоресцентных методов, в *FCS* наиболее интересующим параметром является не интенсивность излучения сама по себе, а интенсивность спонтанных флуктуаций флуоресценции, вызываемых некоторыми кинетическими процессами, которые имеют место в веществе (например,