

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° , 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,

диффузией). Данный метод извлекает информацию из этих флуктуаций посредством расчета и построения их автокорреляционной функции (АКФ) и дает характеристики рассматриваемых кинетических процессов, ответственных за флуктуации сигнала. По этим характеристикам и можно судить о свойствах вещества.

При разработке метода *FCS* было показано, что нормированная автокорреляционная функция флуктуаций интенсивности флуоресценции для модели, учитывающей диффузию смеси нескольких компонент, имеет следующий вид [3]

$$G(\tau) = 1 + \frac{1}{N} \left(\sum_i \frac{F_{difi}}{(1 + \tau/\tau_{difi}) \sqrt{1 + \tau/(a^2 \tau_{difi})}} \right), \quad (1)$$

где: N – суммарное количество молекул всех компонент смеси внутри освещенного объема; F_{difi} – удельная фракция частиц i -го типа ($\sum_i F_{difi} = 1$; $i = 1, 2, 3$); τ_{difi} – соответствующее характеристическое диффузионное время; a – отношение параметров, описывающих уменьшение интенсивности лазерного излучения в e^2 раз в аксиальном и поперечном направлениях.

Поток зарегистрированных фотонов на выходе флуоресцентного корреляционного спектрографа может быть представлен потоком случайных событий [4]. Метод *FCS* предъявляет к его моментным функциям 1-го и 2-го порядка конкретные требования: интенсивность потока должна быть постоянной, а АКФ иметь вид (1). Таким образом, удобной математической моделью данного потока случайных событий может служить парнокоррелированный поток с постоянной интенсивностью и приведенной выше нормированной АКФ, так как механизм его образования гарантирует получение потока с заданными характеристиками [5].

При проведении любых измерений приборы, через которые проходит исследуемый сигнал, неизбежно вносят в него различные искажения. Для получения достоверных данных необходим учет и исследование влияния этих преобразований на данный сигнал и, соответственно, на оценки параметров модели, получаемые путем его анализа, а также нахождение диапазона изменения уровня искажения, в котором относительное смещение оцениваемых параметров модели невелико.

Установку для проведения *FCS* можно представить последовательностью блоков, каждый из которых представляет собой имитационную модель некоторой части исследуемого процесса [4]. Первый блок – блок генерации исходного парнокоррелированного потока, имитирующего поток фотонов, вылетающих из освещенного объема образца. Второй –

блок инструментальных искажений. Третий – блок построения АКФ потока. И последний четвертый – блок анализа АКФ и восстановления параметров модели при помощи их итерационной подгонки по методу наименьших квадратов. Блок инструментальных искажений, в свою очередь, можно представить в виде линейной последовательности блоков искажений различного типа. Общая структура имитационной модели установки изображена на рис. 1.

Исследование влияния разного рода искажений на сигнал проводилось следующим образом. Вначале генерировался исходный парнокоррелированный поток, затем осуществлялось его преобразование искажением заданного уровня и типа и строилась АКФ. Оценки параметров полученной АКФ находились с помощью итерационной подгонки по методу наименьших квадратов. Данный эксперимент повторялся много раз для накопления статистики и вычисления среднего и дисперсии. Результатом эксперимента являлось исследование качественного влияния искажений на восстановление параметров модели и нахождение диапазона изменения уровня искажения, в котором относительное смещение оцениваемых параметров модели невелико.

Исходные экспериментальные данные: интенсивность потока $I = 4450$ Гц, время моделирования $T = 1000$ с, число частиц в освещенном объеме $N = 5$, параметр $a = 10$, удельная фракция частиц одного типа $F_{диф1} = 1$, характеристическое диффузионное время $\tau_{диф1} = 5 \cdot 10^{-5}$ с, ширина канала построения АКФ – $2 \cdot 10^{-7}$ с.

Исследование влияния независимых потерь на восстановление параметров показало (рис. 2), что данное преобразование не оказывает сильного воздействия на исходный поток. Корреляционная зависимость остается такой же, вследствие чего восстановленные характеристики потока являются достоверными вплоть до уровня потерь в 50 %. Выше этой отметки оставшееся число событий в потоке становится недостаточным для статистики. Эти результаты хорошо согласуются с теорией, из которой известно, что независимые потери не должны оказывать влияния на корреляционную зависимость.

Изучение влияния непродлевающегося случайного мертвого времени (рис. 3) подтвердило тот факт, что оно является одним из основных искажающих факторов. В эксперименте мертвое время представляло собой случайную величину, равномерно распределенную на интервале $[dt - 0,05 \cdot dt; dt + 0,05 \cdot dt]$, где середина отрезка dt принимала значения от 0 до $3 \cdot 10^{-5}$ с, или, в единицах каналов построения АКФ, от 0 до 150 каналов. Как можно видеть из графиков, мертвое время, превышающее 10 каналов, уже начинает вносить существенные изменения.

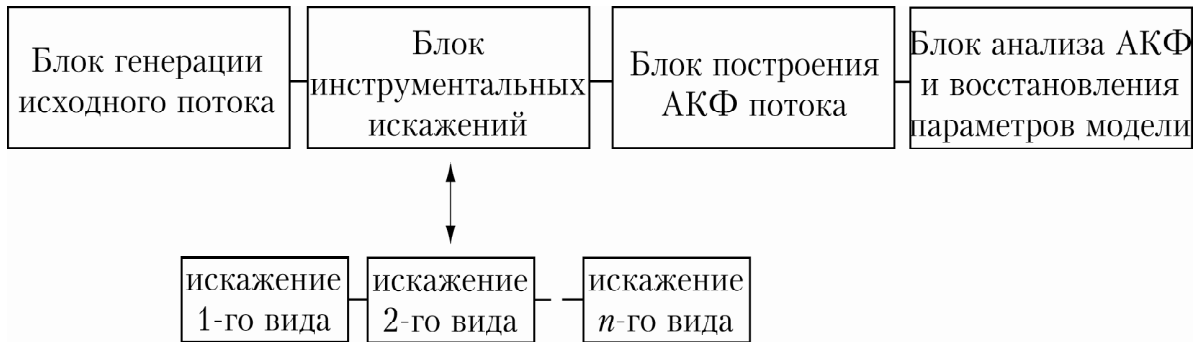


Рис. 1. Структура имитационной модели флуоресцентного корреляционного спектроскопа

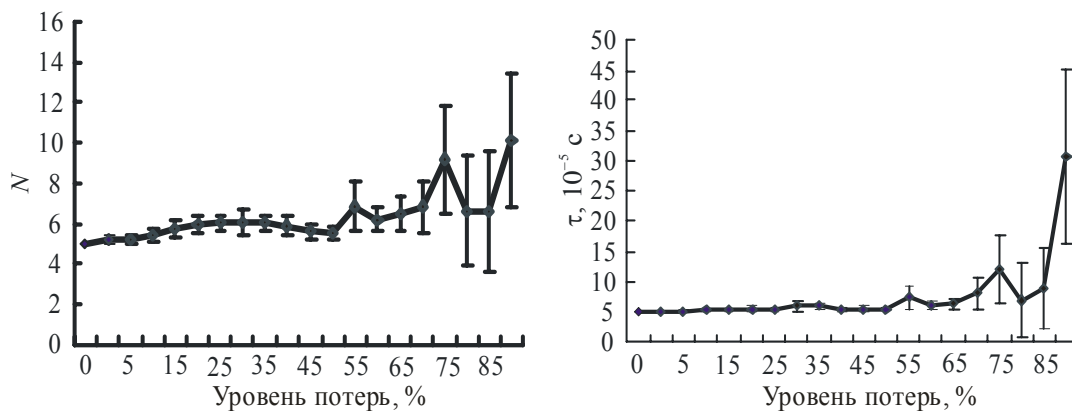


Рис. 2. Влияние независимых потерь на параметры N и τ

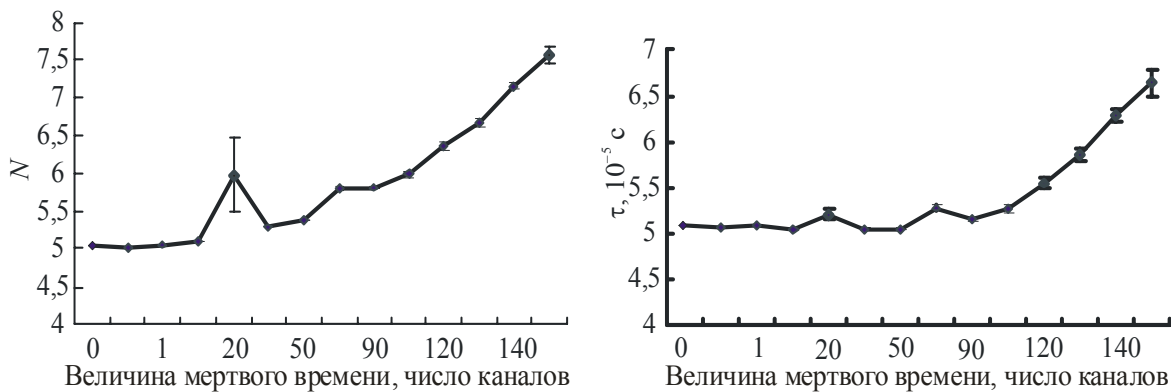


Рис. 4. Влияние непродлевающегося случайного мертвого времени на параметры N и τ

Было установлено также существенное влияние на корреляционную зависимость (рис. 4) случайной величины сдвига, равномерно распределенной на интервале $[of - 0,05 \cdot of, of + 0,05 \cdot of]$. Центральное значение of изменялось в пределах от 0 до $2,4 \cdot 10^{-5}$ с (от 0 до 120 каналов).

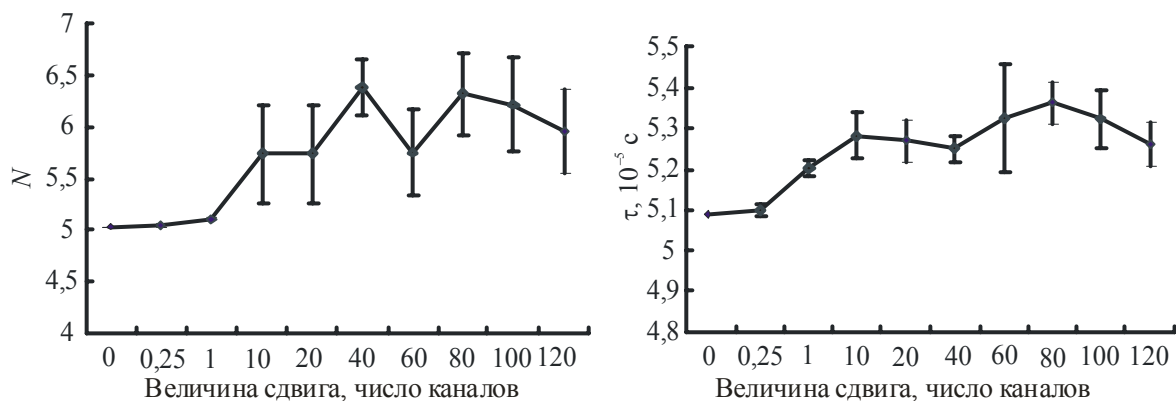


Рис. 4. Влияние случайного сдвига на параметры N и τ

Литература

1. Magde D., Elson E. L., and Webb W. W. Fluorescence correlation spectroscopy. II. An experimental realization. *Biopolymers* 1974. No13. P. 29–61.
2. Elson E. L., and Magde D. Fluorescence correlation spectroscopy. I. Conceptual basis and theory. 1974. No13. P. 1–28.
3. Rigler R., Mets Ü., Widengren J., and Kask P. Fluorescence correlation spectroscopy with high count rates and low background: analysis of translational diffusion. *Eur. Biophys. J.* 1993. 22. P. 169–175.
4. Апанасович В. В., Коляда А. А., Чернявский А. Ф. Статистический анализ случайных потоков в физическом эксперименте. Мн.: Университетское, 1988. 256 с.
5. Апанасович В. В., Новиков Е. Г. Моделирование парнокоррелированного потока случайных событий / Автоматика и телемеханика. 1989. №11. С. 86–91.

РАЗЛІК СПЕКТРА ПРАПУСКАННЯ ФАТОННЫХ КРЫШТАЛЯЎ

В. У. Ціхановіч

1. УВОДЗІНЫ

Тэрмін “аднамерны фатонны крыштал” выкарыстоўваецца для абазначэння глыбока прамадуляванай аптычна неаднароднай структуры, уласцівасці якой перыядычна змяняюцца ўздоўж аднаго накірунку [1, 2]. Гэта адбываецца з-за таго, што брэгаўская дыфракцыя ўласных электрамагнітных станаў блохаўскага тыпу на краі зоны Брылюэна такой структуры прыводзіць да ўзнікнення фатоннай забароненай зоны (photonic band gap) для выпраменьвання [3, 4]. Пры наяўнасці поўнай забароненай зоны распаўсюджванне святла ў фатонным крыштале падаўляецца ў любым напрамку ў спектральным дыяпазоне, які адпавядае забароненай зоне. Гэтая ўласцівасць з’яўляецца асабліва важнай для практычнага прымянення фатонных крышталёў, таму першаснай задачай тэорыі