

2. О. Л. Соколов, О. Ю. Боренштейн. К определению и оценке энергетических спектров некоторых нестационарных случайных процессов.— «Изв. высш. учеб. заведений. Радиофизика», 1975, т. 18, № 4, с. 558—566.
3. И. А. Ибрагимов. Об оценке спектральной функции стационарного гауссовского процесса.— «Теория вероятности и ее применение», 1963, т. VIII, № 4, с. 391—429.
4. Н. Данфорд, Дж. Т. Шварц. Линейные операторы. Общая теория. М., Изд-во иностр. лит., 1962, с. 134, 146, 305—309.
5. Е. Титчмарш. Введение в теорию интегралов Фурье. М., Гостехиздат, 1948, с. 38—43.

Поступила в редакцию 18 декабря 1975 г.;
окончательный вариант — 11 апреля 1976 г.

УДК 518.5

Е. В. ХИЖНЯК, Ю. П. ЧЕРНОВ, М. И. ШТОКМАН
(Новосибирск)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ ПОЛЯ В ПРОВОДЯЩЕЙ СРЕДЕ

1. Введение. Проблема эффективного расчета электрических полей в проводящей среде, в которой имеются тела различной проводимости, представляет значительный прикладной интерес. Далее для определенности мы будем обсуждать одну из подобных систем — кондуктометрический датчик (КД), хотя вся теория, алгоритмы и программа численного расчета справедливы и в общем случае.

Такой датчик, предложенный в [1], представляет собой непроводящее тело со сквозным каналом, помещенное в электролит, в который погружены также электроды, создающие электрическое поле. При попадании в канал датчика посторонней частицы изменяются ток между электродами и поле в окружающем электролите (отклик датчика). Основная задача, возникающая при описании КД, заключается в нахождении отклика в зависимости от объема, формы и взаимного расположения частицы и канала.

Несмотря на широкое применение КД (см., например, [2]), их теория далека от совершенства. Наиболее последовательный из используемых подходов, предложенный Гровером и другими [3] и, независимо, Рабиновичем [4], основывается на рассмотрении канала датчика с частицей как элементарной ячейки гетерогенной системы. Этому подходу, однако, присущи принципиальные недостатки, основным из которых является введение феноменологического параметра — эффективного объема (длины) канала. Этот параметр не может быть рассчитан и определяется из эксперимента. Кроме того, подход [3, 4] не позволяет вычислить отклик датчика при нахождении частицы в области неоднородного поля, которое существует вследствие конечных размеров канала либо наводится частицей, приблизившейся к стенке канала на расстояние порядка собственных размеров. Другой подход, базирующийся на использовании краевых условий в формуле Грина, был развит в [5], но поскольку там существенно использовалось предположение о наличии в канале однородного поля, полученные оценки могут быть приняты лишь с теми же ограничениями, что и результаты [3, 4].

Наш подход основан на корректном решении уравнений электропроводности при соответствующих граничных условиях, что позволяет аналитически исследовать предельные случаи и провести численные

расчеты для модели реального датчика и частицы. Мы используем метод функций Грина, приводящий к интегральным уравнениям типа уравнений теории потенциала. Эти уравнения получены и в предельных случаях исследованы аналитически в разделе 2.

Численные расчеты проводились на ЭВМ БЭСМ-6, для чего была разработана АЛГОР-программа, позволяющая вычислить поле во всем пространстве при произвольной конфигурации канала и частицы. Результаты расчетов содержатся в разделе 3, где приведены формы откликов датчика для эллипсоидальной частицы и результаты усреднения по траекториям с помощью метода Монте-Карло. Для сферических частиц рассчитана также аппаратурная функция датчика (распределение амплитуд отклика). В рамках рассмотренной модели амплитуда отклика, усредненная по ориентациям частицы, пропорциональна объему частицы и не зависит от ее формы с точностью до нескольких процентов. В последнем разделе содержится обсуждение результатов, их сравнение с другими подходами и возможные приложения.

2. Основные уравнения и аналитические результаты. Рассмотрим задачу электропроводности в области R с проводимостью $\chi(r)$, изменяющейся скачком на поверхности* Γ раздела сред, на которой задается условие непрерывности тока. Область решения R ограничивается непроводящей Σ и проводящей Ξ поверхностями, на которых ставятся условия Неймана и Дирихле соответственно.

Вводя функцию Грина $G(r, r')$, удовлетворяющую соответствующим однородным условиям на Σ , Ξ , и частное решение $\phi_0(r)$ краевой задачи в области R (если R незамкнута, то ϕ_0 должно иметь заданное поведение при $r \rightarrow \infty$), получим представление для потенциала

$$\phi(r) = \phi_0(r) + \int_{\Gamma} G(r, r') v(r') d^2 r', \quad (1)$$

где интегрирование распространено на поверхность Γ и функция $v(r)$ удовлетворяет интегральному уравнению на Γ типа уравнений теории потенциала

$$v(r) = -2\chi(r) n(r) \left[\nabla \phi_0(r) + \nabla \int_{\Gamma} G(r, r') v(r') d^2 r' \right]. \quad (2)$$

Здесь $n(r)$ есть внешняя нормаль к Γ в точке r , $\chi(r)$ — кусочно-постоянная функция:

$$\chi(r) = [\kappa_+(r) - \kappa_-(r)] [\kappa_+(r) + \kappa_-(r)]^{-1}, \quad (3)$$

где $\kappa_+(r)$, $\kappa_-(r)$ — значения проводимости вне и внутри поверхности соответственно в окрестности точки $r \in \Gamma$.

При отсутствии поверхностей Σ , Ξ и однородном внешнем поле E имеем

$$G(r, r') = G_0(r, r') = -(4\pi|r-r'|)^{-1}, \quad \phi_0(r) = -Er. \quad (4)$$

Эта задача в некоторых случаях допускает аналитическое решение. Первый случай — проводимость частицы мало отличается от проводимости окружающей среды, т. е. $\chi \ll 1$. Тогда из (1), (2) в первом порядке по χ легко получить поле на больших расстояниях от частицы:

$$\phi = \phi_0 + \delta\phi, \quad \delta\phi(r) = -Er\chi V(2\pi r^3)^{-1}, \quad (5)$$

* Все поверхности могут быть несвязными; предполагается их достаточная гладкость и непрерывность на них потенциала поля.

где V — объем частицы. Видно, что отклик $\delta\phi$ пропорционален V и не зависит от формы частицы.

Для эллипсоидальной частицы уравнения точно решаются в эллиптических координатах. Ответ для отклика имеет вид (ср. (5))

$$\delta\phi(\mathbf{r}) = \sum_{ij} \beta_{ij} r_i E_j r^{-3}, \quad (6)$$

где β_{ij} — постоянный тензор, диагонализирующийся в главных осях эллипса и имеющий собственные значения

$$\beta^i = -V\chi[2\pi\chi(I_i+1)+1]^{-1}. \quad (7)$$

Здесь i нумерует главные оси эллипса

$$I_i = 3V(4\pi)^{-1} \int_0^\infty d\lambda \left[(\lambda + a_i^2) \prod_j (\lambda + a_j^2) \right]^{-1/2}, \quad (8)$$

где a_i — длина главной полуоси эллипса.

Если ориентация эллипса случайна, то отклик (6) должен быть усреднен:

$$\delta\phi \rightarrow \overline{\delta\phi} = \bar{\beta} Er r^{-3}, \quad \bar{\beta} = \frac{1}{3} \sum_i \beta_{ii}. \quad (9)$$

Средний отклик $\overline{\delta\phi}$ может быть легко вычислен для случая слабодеформированного непроводящего эллипса вращения (т. е. при $\chi=1$, $\varepsilon \ll 1$)

$$\overline{\delta\phi} = -3VEr(1+\varepsilon^4/50)(8\pi r^3)^{-1}, \quad (10)$$

где ε — эксцентриситет эллипса. Отсюда видно, что для не слишком больших деформаций усредненный отклик с большой точностью от ε не зависит. Этот аналитический результат находится в хорошем согласии с численными расчетами [6] фактора формы эллипсов в теории проводимости гетерогенных систем.

Изложенные здесь результаты для частицы в бесконечном пространстве справедливы и для частицы в зоне однородного поля достаточно длинного канала при замене внешнего поля на поле в канале.

3. Численная процедура и результаты. Для численных расчетов мы выбрали итерационную процедуру решения уравнения (2), которая была реализована * на языке АЛГОЛ-60 для ЭВМ БЭСМ-6 в достаточно универсальном виде. Модель датчика в общем случае представляет собой непроводящее несвязное тело произвольной формы и конечных размеров, образующее продольные каналы. Форма частицы — произвольная замкнутая поверхность.** В представляющей здесь первой версии программы поверхности Σ , E отсутствуют. Поверхность датчика считается включенной в Γ , что позволяет использовать «вакуумную» функцию Грина и однородное внешнее поле (4). Отклик (потенциал поля) может быть вычислен в произвольных точках пространства. Для моделирования случайности в положении и ориентации частицы относительно датчика используется метод Монте-Карло.

Численные расчеты, результаты которых приведены ниже, были проведены с моделью датчика, который представляет собой цилиндр большого, но конечного радиуса, имеющий соосный цилиндриче-

* Подробное описание программы будет опубликовано в специальной работе.

** Все поверхности могут быть несвязными; предполагается их достаточная гладкость и непрерывность на них потенциала поля.

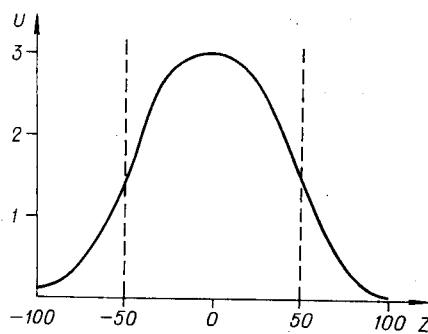


Рис. 1. Форма отклика датчика как функция Z -координаты центра частицы, находящейся на оси канала.
Вертикальные штриховые линии обозначают границы канала. Частица — сфера радиуса $a=10$.

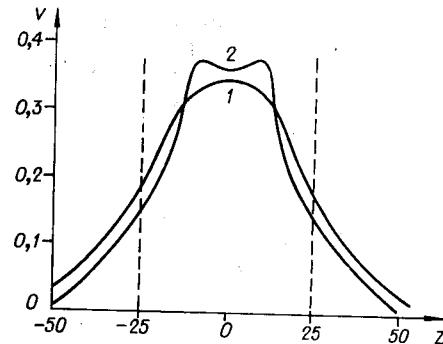


Рис. 2. Форма отклика датчика для частиц, двигающихся вдоль стенки канала.
Кривые 1 и 2 соответствуют прямолинейным траекториям $r=35$ и $r=42$ соответственно. Частица — сфера радиуса $a=5$. Длина канала $L=50$.

ский канал радиусом* $R=50$. Длина датчика $L=100$, когда не оговорено особо. Отклик регистрировался по разности потенциалов U в двух точках, лежащих на оси канала и симметрично удаленных относительно его центра на расстояние $H=200$. Использовалась модель непроводящей частицы, имеющей форму эллипсоида вращения.

Контроль сходимости и устойчивости численного метода производился изменением числа итераций и величины дискретности разбиения поверхностей для численного интегрирования, а также сравнением с точным аналитическим решением для эллипсоида в бесконечном пространстве. Для достижения точности в несколько процентов оказалось достаточно четырех итераций, что требует менее минуты времени центрального процессора БЭСМ-6.

Величина отклика вычислялась как функция положения центра эллипсоида в цилиндрической системе координат (Z, ρ, Φ) , ось Z которой совпадает с продольной осью канала. Начало системы координат фиксировано в центре канала, ρ — расстояние от точки до оси Z (прицельный параметр), Φ — азимутальный угол.

Форма отклика датчика для сферической частицы, находящейся на оси канала, приведена на рис. 1. Как видно, отклик имеет плавную колоколообразную форму с большими хвостами вне геометрического размера канала, амплитудное значение достигается в центре канала, граница канала совпадает с точкой перегиба. Ширина максимума отклика при уровне отклонения от амплитуды в 5% составляет примерно 30% длины канала.

Для исследования эффектов, связанных с искажением поля у границ канала, был исследован датчик длиной $L=50$. Результаты расчета отклика для двух траекторий частицы, параллельных оси канала, но не совпадающих с ней, представлены на рис. 2, из которого следует, что отклик имеет более резкую форму для частиц, проходящих вблизи стенки канала. Двугорбая форма отклика для сильно неаксиальных траекторий связана с эффектом искажения поля в пространстве между частицей и стенкой канала и с характером изменения поля вдоль канала. Эта форма согласуется с экспериментальными данными работы [3]. Однако даже для траектории $\rho=45$ разница между амплитудой и значением отклика при $Z=0$ составляет всего 4%. Геометрическая вероятность появления такой траектории меньше 10%. Поэтому при

* Все величины приводятся в относительных единицах, постоянных по всей работе.

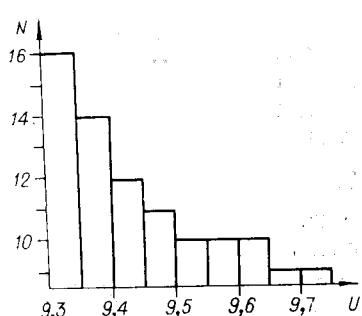


Рис. 3. Гистограмма распределения откликов по амплитудам (аппаратурная функция датчика) для сферических частиц радиусом $a=15$.

С помощью метода Монте-Карло моделировалось равномерное распределение координат частиц в срединной плоскости канала. Число разыгранных событий равняется 101. По вертикальной оси отложено число событий N , по горизонтальной оси — амплитуда отклика U , соответствующего данному событию.

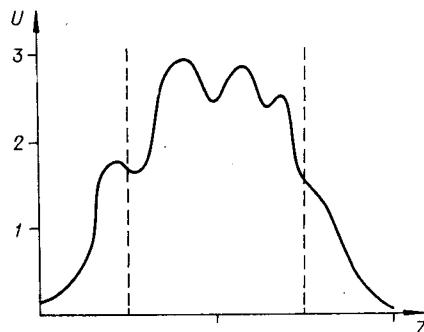


Рис. 4. Форма отклика для деформированного сфероида, совершающего поступательное движение вдоль канала.

Ориентация и положение сфероида в плоскости, ортогональной оси Z , разыгрывались по методу Монте-Карло как гауссовские случайные величины, коррелированные с предыдущими ориентацией и положением соответственно. Длины осей сфероида — 7,05 : 7,05 : 20,0.

дальнейших расчетах для сферических частиц за амплитуду отклика мы приняли значение отклика при $Z=0$.

Для сферических частиц с помощью метода Монте-Карло была вычислена аппаратурная функция датчика (распределение откликов по амплитудам для заданных частиц). В этом случае разброс по амплитудам вызывается изменением поля вблизи частицы в зависимости от случайного удаления частицы от центра канала, включая изменения поля, индуцированные самой частицей. Результаты расчета приведены на рис. 3. Аппаратурная функция имеет экспоненциальную форму, минимальную амплитуду отклика индуцирует частица вблизи центра канала, увеличению амплитуды соответствуют большие значения прицельного параметра ρ . Относительная дисперсия аппаратурной функции, характеризующая точность датчика как измерителя объема одиночных сферических частиц, составляет 6%.

Для исследования эффектов, связанных с несферичностью частицы, были рассчитаны отклики датчика на попадание в канал непроводящих эллипсоидальных частиц. При этом ориентация частиц фиксировалась углами Эйлера по отношению к системе координат, связанной с каналом. С помощью метода Монте-Карло моделировалась неопределенность в положении и ориентации эллипса, которая вызывается хаотичностью расположения частиц до попадания в канал и градиентом скоростей в канале, приводящим к вращению частицы. Градиент скоростей существует как в ламинарном (пуазейлевском), так и в турбулентном режимах протекания жидкости через канал.

Форма отклика для сфероидальной частицы, ориентация и положение которой в плоскости, ортогональной оси канала, являются случайными, приведена на рис. 4. Основная причина волнобразности кривой в этом случае — изменение ориентации сфероида: большему отклику соответствует перпендикулярность длинной оси сфероида к продольной оси канала. Из рисунка легко видеть, что амплитуда отклика для несферической частицы не характеризует объем частицы, а сложно зависит от ее формы и положения.

С большей точностью пропорциональны объему частицы усредненные по ее ориентации характеристики, например среднее значение от-

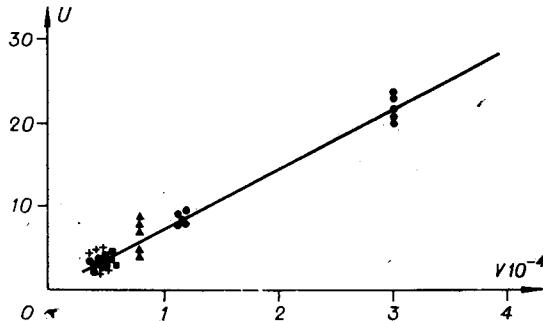


Рис. 5. Значения отклика датчика U для сфероидальных частиц различных объемов и деформаций. Положение и ориентация частицы случайным образом разыгрывались в срединной плоскости канала по методу Монте-Карло. Соотношения осей частицы для разных точек составляют ●— 1:1:1, ▲— 1:1:2, ■— 3:3:4, +— 11:11:8. Прямая линия — результат вычисления линейной регрессии $U = 6,67 \cdot 10^{-4} V + 3,43 \cdot 10^{-2}$; коэффициент линейной корреляции $r = 0,9997$.

стицы. Дисперсия аппаратурной функции и составляет 10% для сфероидов с соотношением осей 1:1:2 и 1–6% для сфер (ср. рис. 3). Следует отметить также линейность отклика в диапазоне двух порядков при изменении размеров частиц почти на порядок.

4. Обсуждение результатов и возможные приложения. Основное преимущество нашего подхода — корректная постановка краевой задачи теории электропроводности и малые затраты машинного времени, необходимые для ее численного решения. Это позволяет последовательно проводить расчеты для канала и частицы произвольной формы и взаимного расположения. В частности, мы смогли выполнить расчеты для частицы в зоне неоднородного поля, а именно: на подходе к каналу, в коротком канале и вблизи стенки канала.

Расчеты формы отклика датчика для частицы конечных размеров (см. рис. 1, 2) не имеют аналогов в литературе, так как принципиально не могут быть проведены в рамках методов [3—5]. Результаты рис. 1, 2 можно использовать для описания эффекта совпадения, т. е. одновременного счета датчиком двух или более частиц, поскольку отклик аддитивен для малых частиц, разнесенных на расстояния, намного большие их размеров.

Представленный на рис. 2 результат — увеличение крутизны фронтов импульса при неаксиальном прохождении частицы — может иметь приложение к системам с фокусировкой пучка частиц для улучшения параметров установки, в частности временного разрешения, и для уменьшения влияния совпадений.

Аппаратурная функция датчика (см. рис. 3) также может быть вычислена только при корректном подходе. С ее помощью находится предельное разрешение, даваемое прецизионными системами.

Отклик для несферической частицы (см. рис. 4) существенно зависит от ее ориентации. Этот результат согласуется с [3—5]. Поэтому в качестве основной характеристики мы выбрали усредненный по ориентации частицы отклик датчика в тот момент, когда частица находится в срединной плоскости канала. Эта величина (см. рис. 5) оказывается пропорциональной объему частицы (когда соотношение длин осей частицы не превосходит 2:1) с точностью до нескольких процентов. Подобный режим усреднения физически может быть осуществлен, как в ра-

клике в срединной плоскости канала (при $Z=0$) для ансамбля частиц фиксированного объема. Результаты исследования этой характеристики приведены на рис. 5, где представлены величины отклика, полученные методом монте-карловского розыгрыша ориентации и положения для частиц некоторых объемов и деформаций. Из этого рисунка ясно видно, что для деформированных частиц разброс по значениям отклика больше, чем для сферических, однако среднее значение отклика с точностью порядка нескольких процентов лежит на универсальной прямой зависимости отклика от объема частицы.

боте [7], путем использования пуазейлевского градиента скорости жидкости в канале.

В заключение авторы выражают благодарность Л. А. Андрианову за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. H. Coulter. U. S. Pat. 265 65 08, cl. 324—71, 1953.
2. M. J. Fullwyler. Electronic cell sorting by volume.—In: Automated Cell Identification and Cell Sorting, p. 97. New York and London. Academic Press, 1970. R. C. Leif. Ibid. p. 131.
3. V. B. Grover, J. Naaman, S. Ben-Sasson, F. Doljanski. Electrical sizing of particles in suspensions.—“Biophys. J.”, 1969, vol. 9, p. 1398.
4. Ф. М. Рабинович. Кондуктометрический метод дисперсионного анализа. Ч. 1. Л., «Химия», 1970.
5. J. Hurley. Sizing particles with a coulter counter.—“Biophys. J.”, 1970, vol. 10, p. 74.
6. S. Velick, M. Gorin.—“J. Gen. Physiol.”, 1940, vol. 23, p. 753.
7. D. C. Golbersuch. Observation of aspherical particle rotation in Poiseuille flow via the resistance pulse technique.—“Biophys. J.”, 1973, vol. 13, p. 265.

Поступила в редакцию 14 мая 1976 г.
