

При измерениях на цитометре мы получаем индикатрисы светорассеяния одиночных клеток (тромбоцитов). Индикатриса зависит от размера, формы и показателя преломления клетки. Обратная задача светорассеяния – это задача нахождения параметров клетки по индикатрисе. Для решения обратной задачи необходимо сравнивать экспериментальные сигналы с теоретическими, посчитанными для разных параметров.

Мерой близости теоретической и экспериментальной индикатрис может являться, например, L2-норма разности теоретического и экспериментального сигналов.

Тромбоциты представляют собой дисковидные клетки [i]. В качестве оптической модели тромбоцита была взята форма сплюснутого сфероида. Для такой формы можно рассчитывать индикатрисы светорассеяния различными методами. В данной работе использовался метод дискретных диполей [ii]. Расчет одной индикатрисы данным методом для типичного тромбоцита занимает порядка 1 мин.

Выбранная оптическая модель тромбоцита может быть описана четырьмя параметрами, например:

- $r_{ev}$  – радиус сферы эквивалентного объема
- $\varepsilon$  – отношение большой полуоси к малой
- $n$  – показатель преломления
- $\beta$  – угол между направлением падения излучения и осью симметрии сфероида.

При расчетах методом DDA рассеивающий объект делится на одинаковые диполи, размер которых должен быть много меньше длины волны. Обычно достаточно 10 диполей на длину волны в среде. В наших вычислениях использовалось 12. Если же малая ось сфероида была меньше длины волны, то использовалось 12 диполей на ось, чтобы более аккуратно описать форму частицы.

Для расчетов использовалась программа ADDA (<http://code.google.com/p/a-dda/>).

Типичная командная строка выглядела так:

```
adda -shape ellipsoid 1 ASPRAT -lambda WLEN -size DIAM -m  
REL_REF_INDEX 0.00000 -scat_grid_inp 1.txt -phi_integr 7 -dir DIRECTORY -  
orient 0 BETA 0 -dpl DPL
```

где ASPRAT -  $\varepsilon$ , WLEN -длина волны в среде, DIAM - большая ось сфероида, REL\_REF\_INDEX - относительный показатель преломления частицы, DIRECTORY - директория для сохранения файлов расчета, BETA - угол ориентации  $\beta$ , DPL - количество диполей на длину волны.

В результате расчета в выходные файлы программы записывается индикатриса в зависимости от полярного угла. Полярный угол меняется от 10 до 70 градусов с шагом 1 (это задается в файле 1.txt).

Из литературы известно, что объем тромбоцитов лежит в пределах 2-20 фл [i],[iii], что соответствует  $r_{ev}=0.8..1.7$  мкм. Отношение полуосей для типичного тромбоцита составляет 3-6 ([i],[iv]), однако часть тромбоцитов (эхиноциты) имеют меньшее отношение полуосей, вплоть до 1. Типичный для биологических клеток показатель преломления – 1.4. Исходя из этих данных, мы выбрали следующие диапазоны для базы данных:

Параметр тромбоцита	Нижняя граница	Верхняя граница
$r_{ev}$	0.5 мкм	2 мкм
$\varepsilon$	1	8
$n$	1.35	1.5
$\beta$	$0^\circ$	$90^\circ$

Расчет базы данных производился на кластере ИВЦ НГУ. Кластер состоит из узлов, объединяющих по 8 ядер (процессоры Xeon 5355 и Xeon E5540). Каждый узел обладает 14 Гб памяти. Для расчетов одновременно использовались 16 узлов. Таким образом, было задействовано 128 процессоров, что позволило рассчитывать 100000 индикатрис за сутки. При этом параметры индикатрис выбирались случайным образом внутри указанных границ. Среди преимуществ случайного выбора параметров можно выделить следующие:

- Все точки базы данных имеют различные координаты по каждому параметру, что позволяет использовать их даже при слабой зависимости индикатрисы от одного из параметров (в то время как в базе данных с регулярной решеткой будут почти совпадающие индикатрисы, возникающие при движении вдоль такого параметра);
- При любом линейном преобразовании параметров распределение точек в базе данных остается равномерным;
- При объединении баз данных, насчитанных в одинаковых границах, распределение точек также остается равномерным;
- Интегралы по базе данных, которые возникают при статистической обработке (это дальнейшее развитие метода решения обратной задачи с использованием базы данных), естественным образом берутся методом Монте-Карло.

Всего было насчитано примерно 500000 индикатрис. Они записаны построчно в файле database.txt. Первые 4 столбца – это параметры в порядке, указанном в таблице, следующие 61 столбец – индикатриса. Полный файл не был сохранен в этом форке проекта, чтобы уменьшить размер репозитория.

Также в файле test\_1000.txt находится дополнительная 1000 индикатрис в том же формате, рассчитанных тем же способом. Они могут быть полезны для тестирования базы данных.

В файле experiment\_1000.txt – 1000 типичных экспериментальных индикатрис. Каждая строчка – 1 индикатриса, 61 столбец соответствует 61 точке по углу рассеяния (от 10 до 70 градусов)

Автор описания и провела генерирование данных Боровкова С.В (бак НГУ, 2014)

---

i Frojmovic MM, Panjwani R. *Geometry of normal mammalian platelets by quantitative microscopic studies*. Biophysical journal, vol 16 1976.

ii M. A. Yurkin and A. G. Hoekstra. *The discrete-dipole-approximation code ADDA: capabilities and known limitations*. J. Quant. Spectrosc. Radiat. In press.

iii Paulus JM. *Platelet size in man*. Blood, 1975, 46: 321-336

iv Adrian R.L. Gear and Renata K. Polanowska-Grabowska. *The platelet shape change*. Platelets in Thrombotic and Non-thrombotic Disorders, Cambridge University Press, 2002.