

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ЗАМКНУТЫМИ ВНУТРЕННИМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ

© 2010 г. М. С. Павлов; И. В. Красников, канд. физ.-мат. наук;
А. Ю. Сетейкин, канд. физ.-мат. наук

Амурский государственный университет, г. Благовещенск

E-mail: sizerf@mail.ru

В общем случае получение аналитического решения задачи распространения света в многокомпонентных биологических тканях является трудно осуществимым, даже для простых случаев. Поэтому решение данной задачи находится с использованием численных методов. Одним из таких методов, широко применяемых в различных областях науки, является метод Монте-Карло. В данной работе рассмотрена модификация метода Монте-Карло для моделирования процессов распространения света в биологических тканях для трехмерной геометрии среды с замкнутыми внутренними неоднородностями.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, фазовая функция рассеяния, конечно-элементная сетка.

Коды OCIS: 260.0260, 170.3660, 000.1430

Поступила в редакцию 22.04.2010

Введение

Применение лазеров считается одним из перспективных направлений исследований для медицинской диагностики и клинического применения. В связи с этим востребованными становятся модели, позволяющие описать распространение излучения в биологической среде. Построение модели распространения оптического излучения в многокомпонентных мутных средах можно условно разделить на две части. Первая часть – это описание среды, ее геометрии и оптических свойств. Вторая часть – описание распространения излучения. Описание распространения излучения в мутной среде может быть получено двумя путями. Первый основан на решении уравнений Максвелла и считается фундаментальным описанием. Однако его применение ограничено, когда речь идет о сложных средах, для которых трудно получить аналитическое решение. Другим методом описания распространения света в мутных средах является теория переноса излучения [1]. Данный подход основан на решении интегрально-дифференциального уравнения, описывающего изме-

нение проникающего внутрь среды светового потока, известное как линейное уравнение переноса излучения. Оно является упрощением модели взаимодействия, поскольку не учитывает квантовые эффекты и волновую природу света. Согласно данной теории пучок излучения описывается интенсивностью $J(x, y, z, \mathbf{s})$. Интенсивность излучения в произвольной точке исследуемой среды описывается уравнением переноса излучения

$$\frac{dJ(x, y, z, \mathbf{s})}{ds} = -\mu_t J(x, y, z, \mathbf{s}) + \frac{\mu_s}{4\pi} \int_{4\pi} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') J(x, y, z, \mathbf{s}') d\Omega', \quad (1)$$

где \mathbf{s} – направление распространения излучения, $\mu_t = \mu_s + \mu_a$ – коэффициент ослабления, равный сумме коэффициентов поглощения и рассеяния, $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ – фазовая функция рассеяния материала, определяющая часть излучения, пришедшего по направлению \mathbf{s}' будет распространяться в направлении \mathbf{s} . То есть определяет функцию плотности вероятности для рассеяния фотонов в среде. Рис. 1 иллюстрирует случай рассеяния фотона в мутной среде.

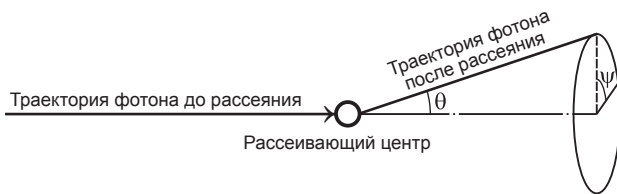


Рис. 1. Отклонение фотона при рассеянии. Угол отклонения – θ , азимутальный угол – ψ .

Методы моделирования

Для решения задач теории переноса излучения для сред с произвольной конфигурацией и любыми граничными условиями перспективным считается метод Монте-Карло [2–6]. Изначально данный метод применялся для численного интегрирования. Основная идея метода основана на получении большого числа реализаций случайного процесса, который построен таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи. Применительно к моделированию какого-либо физического процесса данный метод подразумевает моделирование поведения отдельных элементарных частей физической системы. Применительно к задаче распространения света, моделируется поведение фотонов. То есть исходя из законов, которые управляют движением фотонов в ткани, моделируется “случайный ход” фотонов в среде. Направление движения фотонов задается углом отклонения и азимутальным углом.

Траектория движения фотонов в среде выражается через функции плотности вероятности $p(x)$, которые зависят от оптических параметров среды. К таким параметрам относят: коэффициент поглощения, коэффициент рассеяния, параметр анизотропии. Для учета отражения или преломления на границе раздела двух под областей используют закон Френеля.

Функцию плотности вероятности свободного пробега фотонов до актов взаимодействия можно определить, используя закон Бугера–Ламбера–Бера [1, 5], следующим образом:

$$P(x, y, z, \mathbf{s}) = \exp\left(-\int_{(x_1, y_1, z_1)}^{(x_2, y_2, z_2)} \mu_t(x, y, z) ds\right). \quad (2)$$

Как уже упоминалось, функция плотности распределения вероятности, которая определяет вероятность рассеяния фотонов для угла отклонения, это фазовая функция, которая обычно определяется эмпирически. Наиболее часто в оптике тканей используется функция Хени–Гринштейна [1–3, 5]

$$p(s, s') = p(\cos\theta) = \frac{(1-g^2)}{4\pi(1+g^2-2g\cos\theta)^{3/2}}. \quad (3)$$

Когда фотон отклоняется на угол θ , предполагается, что он отклоняется аксиально-симметрично относительно первоначального направления распространения на азимутальный угол ψ , который однородно распределен в пределах интервала $[0, 2\pi]$. В данной работе не рассматривается асимметричное рассеяние. Функция плотности вероятности $p(\psi)$ является постоянной и равняется $1/2\pi$.

После запуска N фотонов для каждого узла сетки имеем некоторую выборку статистических весов (X_1, X_2, \dots, X_n) , полученных средой в его окрестности. Для этих величин проводится статистическая обработка. Наиболее важными являются математическое ожидание и выборочная дисперсия.

Пусть вес всех N фотонов соответствует некоторому значению энергии q . Тогда математическое ожидание полученного веса узлом сетки

$$\bar{X} = (1/n) \sum_{i=1}^n X_i, \quad (4)$$

где n – число поглощений в окрестности рассматриваемого узла, X_i – статистический вес, поглощенный в окрестности рассматриваемого i -го узла.

Значение математического ожидания может быть использовано для вычисления плотности энергии следующим образом:

$$Q = (\bar{X}q)/V, \quad (5)$$

где V – объем окрестности рассматриваемого узла, q – энергия, которой соответствует полный статистический вес N пакетов фотонов.

Для учета поглощения часто используют прием, называемый неявным захватом фотонов (*implicit photon capture technique*) [4–6]. При моделировании рассматривается движение не каждого фотона в отдельности, а пакета фотонов. Пакет фотонов (в дальнейшем для простоты фотон или пакет) моделирует движение множества фотонов по схожей траектории, в результате при взаимодействии со средой поглощается только часть фотонов из пакета, а оставшаяся часть продолжает движение.

На границе раздела двух сред с разными показателями преломления, или двух под областей с разными оптическими свойствами внутри одной среды, фотон может отразиться или пройти через нее. Для вычисления вероятности

отражения в данной работе использовали закон Френеля [3, 4].

Анализ результатов

Воздействие лазерного излучения ультрафиолетового и инфракрасного диапазонов на кожный покров человека широко применяют в медицине. Биологическая среда является неоднородной и ее оптические параметры представляют собой сложные функции от пространственных координат. Однако среду можно разбить на достаточно малые подобласти, в пределах которых оптические свойства среды можно задать приближенно. Наиболее простым является приближение постоянными, линейными и квадратичными функциями. Для моделирования методом Монте-Карло в трехмерном пространстве очень важным фактором является то, каким образом выполняется такое разбиение.

Удобный инструментарий для описания сложных сред может предложить конечно-элементный метод. В данной работе геометрия среды описывается в виде конечно-элементной сетки. Применение метода Монте-Карло для моделирования распространения излучения при таком задании среды имеет ряд особенностей, которые и рассмотрены в работе. Чем проще форма элементов разбиения, тем меньше вычислительных ресурсов понадобится для расчетов. Поэтому использование тетраэдров в качестве элементов сетки делает задачи перехода (выхода за пределы элемента) между элементами и нахождения пакета внутри элемента сетки достаточно простыми [7]. Для определения качества сетки требуется выработать некоторый критерий. Сетка, с помощью которой проводится аппроксимация расчетной области разбиением на элементарные ячейки, является одним из основных факторов, определяющих точность и сходимость численного решения задачи. Согласно теории [8], свойства сетки в основном зависят от формы элементов разбиения. Качественными при такой оценке считаются сетки, где каждый элемент является

правильным или близким к правильным тетраэдрам. Следовательно, некачественной будет считаться сетка, содержащая вырожденные или близкие к вырождению элементы. При таком подходе исходная геометрия расчетной области может быть произвольной. Практический интерес может представлять случай, когда среда содержит внутреннюю замкнутую неоднородность. Поэтому для оценки точности и адекватности разработанного алгоритма в качестве тестовых были выбраны задачи распространения излучения с длинами волн 400 и 800 нм. Кожа имеет неоднородную структуру, и, соответственно, неоднородные оптические параметры. В качестве расчетной области была выбрана среда, состоящая из нескольких слоев (рогового слоя, эпидермиса и дермы) с замкнутой неоднородностью сложной формы. Замкнутая неоднородность смоделирована в виде сложной фигуры, ограниченной двумя эллипсоидальными поверхностями; дополнительно введен слой, моделирующий воздух. На рис. 2 приведена геометрия расчетной среды, подвергаемой лазерному облучению. Центр пучка смещен относительно начала координат вдоль оси ox на 0,001 см и направлен перпендикулярно вверх, его радиус – 0,001 см. Усредненные параметры каждого слоя и неоднородности представлены в табл. 1 и 2. Для

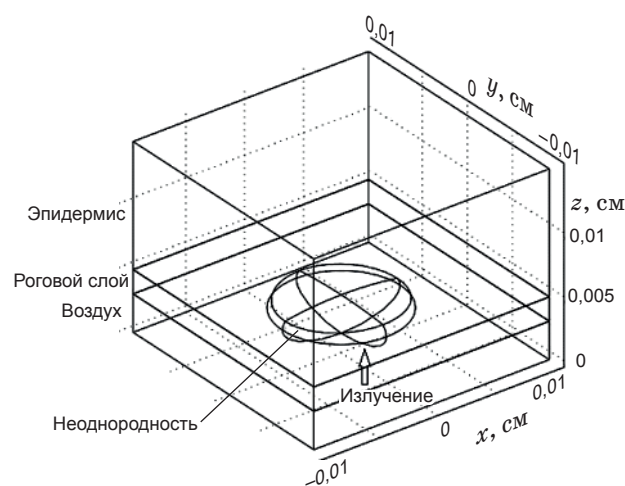


Рис. 2. Геометрия расчетной среды.

Таблица 1. Параметры расчетной среды (длина волны 400 нм) [9]

Название слоя	Показатель преломления	Коэффициент поглощения, см^{-1}	Коэффициент рассеяния, см^{-1}	g , параметр анизотропии
Неоднородность	1,53	116	1160	0,8
Роговой слой	1,53	230	2000	0,9
Эпидермис	1,40	66	800	0,74

Таблица 2. Параметры расчетной среды (длина волны 800 нм) [9]

Название слоя	Показатель преломления	Коэффициент поглощения, см ⁻¹	Коэффициент рассеяния, см ⁻¹	<i>g</i> , параметр анизотропии
Неоднородность	1,45	1	20	0,8
Роговой слой	1,4	1	25	0,9
Эпидермис	1,36	4	45	0,85
Дерма	1,4	0,8	57	0,9

излучения с длиной волны 400 нм коэффициент поглощения достаточно высок и потому оно должно сильно поглощаться, не проникая глубоко внутрь среды.

Для графического представления распространения излучения в среде была выбрана плоскость сечения *xz*. На рис. 3 показано рас-

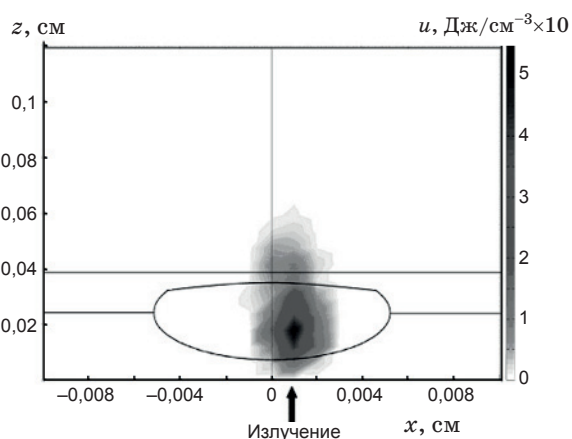


Рис. 3. Распределение плотности поглощенной энергии *u* в плоскости сечения *xz* для длины волны 400 нм.

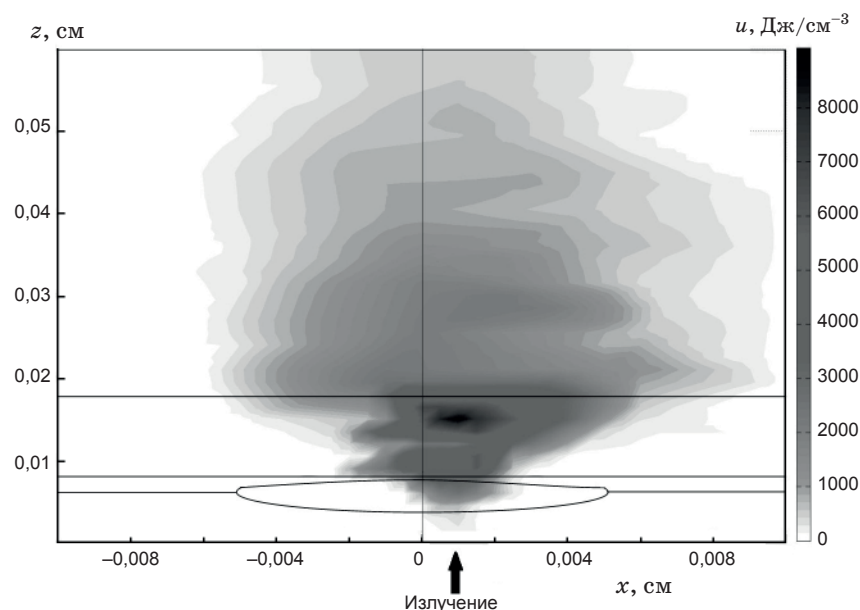


Рис. 4. Распределение плотности поглощенной энергии *u* в плоскости сечения *xz* для инфракрасного излучения.

пределение плотности поглощенной энергии в этой плоскости для излучения с длиной волны 400 нм.

Для излучения с длиной волны 800 нм коэффициент поглощения значительно меньше коэффициента рассеяния и моделируется сильно рассеивающая среда. Следовательно, глубина его проникновения должна быть больше, чем при использовании ультрафиолетового излучения. Поэтому к расчетной области добавлен еще один слой, дерма – толщиной 0,05 см. На рис. 4 показано распределение плотности поглощенной энергии в плоскости *xz* для излучения с длиной волны 800 нм.

Характер взаимодействия лазерного излучения с биологической тканью зависит от коэффициента поглощения для данной длины волны. В ультрафиолетовой области спектра преобладает поглощение, поэтому вклад рассеяния сравнительно мал, и излучение проникает так же неглубоко внутрь среды. Для излучения от 600 до 1500 нм, так называемого “терапевтического окна”, рассеяние превалирует над поглощением, и глубина проникновения излуче-

ния значительно больше, чем для ультрафиолетовой области спектра.

В обоих случаях лазерное излучение имеет одинаковую мощность и энергию. Глубина проникновения ультрафиолетового излучения невелика. Поэтому для излучения с длиной волны 400 нм большая часть энергии будет поглощена в области малого объема поверхности кожи, и плотность поглощенной энергии значительно больше, чем в случае с длиной волны 800 нм.

Заключение

В работе рассмотрен процесс распространения оптического излучения различных спектральных диапазонов в биологических тканях. Моделирование проводили с помощью модифицированной версии метода Монте-Карло. Задание расчетной области в виде сетки с элементами в форме тетраэдров для трехмерного моделирования распространения излучения позволяет работать с биологическими средами произвольной геометрии. Полученные результаты моделирования дают наглядное представление о распределении плотности поглощенной энергии излучения в среде. При запуске 1 000 000 пакетов фотонов погрешность метода не превышает 1%. Полученное пространственное распределение плотности поглощенной энергии хорошо согласуется с другими работами авторов и литературными источниками [1, 10–14].

Алгоритм, разработанный на основе метода Монте-Карло, обладает рядом преимуществ. Предлагаемый метод является очень гибким, хорошо адаптируется для сред с различной геометрией и позволяет получать трехмерную информацию о распределении света в тканях. Данный алгоритм может быть применен для диагностики структурных изменений биологической ткани произвольной замкнутой геометрии, а также для расчета температурных полей и границ области деструкции при лазерной терапии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Оптическая биомедицинская диагностика. В 2 т. Т. 1 / Пер. с англ. под ред. Тучина В.В. М.: Физматлит, 2007. 560 с.
2. *Meglinski I.V.* Quantitative assessment of skin layers absorption and skin reflectance spectra simulation in the visible and near-infrared spectral regions // *Physiological measurement*. 2002. № 23. P. 741–753.
3. *Meglinski I.V.* Influence of refractive index matching on the photon diffuse reflectance // *Physics in medicine and biology*. 2002. № 47. P. 4271–4285.
4. *Jacques S.L., Wang L.-H.* Monte Carlo Modeling of Light Transport in Tissue // In: *Welch A.J., Martin J.C. Van Gemert. Optical-thermal response of laser-irradiated tissue* Plenum press. New York, 1995. № 12. P. 301–357.
5. *Welch A.J.* Optical-thermal response of laser-irradiated tissue / A. Welch, M. Vangemert. Plenum Publishing Corporation, 1995. 952 с.
6. *Wang L.-H., Jacques S.L., Zheng L.-Q.* MCML-Monte Carlo modeling of photon transport in multi-layered tissues // *Computer Methods and Programs in Biomedicine*. 1995. V. 47. P. 131–146.
7. *Pavlov M.S., Krasnikov I.V., Seteikin A.Yu.* Three-dimensional model of light propagation in biological tissues // *Scientific and Technical Reports SPbGPU*. 2008. V. 67. № 6. P. 120–123.
8. *Шайдуров В.В.* Многосеточные методы конечных элементов. М.: Наука, 1989. 288 с.
9. *van Gemert M.J.C., Jacques S.L., Sterenborg H.J.C.M., Star W.M.* Skin Optics // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. 1989. V. 36. № 12. P. 1146–1154.
10. *Сетеikin А.Ю.* Анализ методом Монте-Карло процессов распространения лазерного излучения в многослойных биоматериалах // *Информатика и системы управления*. 2002. № 6. С. 31–35.
11. *Приезжев А.В., Тучин В.В., Шубочкин Л.П.* Лазерная диагностика в биологии и медицине. М.: Наука, 1989. 240 с.
12. *Сетеikin А.Ю.* Анализ методом Монте-Карло процессов распространения лазерного излучения в многослойных биоматериалах // *Изв. вузов. Физика*. 2005. № 3. С. 53–57.
13. *Seteikin A. Yu., Krasnikov I. V.* The analysis of the thermal effects arising at interaction of laser radiation with the multilayered biomaterial by using Monte-Carlo method // *Proc. SPIE*. 2007. V. 6595.
14. *Krasnikov I.V., Seteikin A.Yu.* An analysis of thermal effects resulting from laser radiation interaction with a multilayered biotissue // *Russian Physics Journal*. 2006. V. 49. № 10. P. 1139–1144.