

С.В. ПАВЛОВ, Т.І. КОЗЛОВСЬКА, В.П. ДУМЕНКО

АНАЛІЗ МЕТОДІВ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАННЯ В БІОЛОГІЧНИХ СЕРЕДОВИЩАХ НА ОСНОВІ ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

*Вінницький національний технічний університет,
Хмельницьке шосе, 95, м. Вінниця, 21021 Україна,
Тел. (432) 580125, E-mail: tatyana kozlovskaya@rambler.ru*

Анотація. У даній роботі проаналізовано основні принципи розповсюдження випромінювання у біологічних середовищах на основі методу Монте-Карло, запропоновано рекомендації щодо застосування даного методу для створення оптико-електронних систем аналізу поля мікроциркуляції периферичного кровообігу.

Аннотация. В данной работе проведен анализ основных принципов распространения излучения в биологической среде на основании метода Монте-Карло моделирования, предложено рекомендации для создания оптико-электронных систем анализа поля микроциркуляции периферического кровообращения.

Abstract. The basic principles of distribution of radiation in the biological environment on the basis of Monte Carlo simulations are analyzed in this paper and suggested recommendations for the creation of optoelectronic systems analysis field microcirculation of peripheral circulation.

Ключові слова: Монте-Карло моделювання, множинне розсіювання, розсіювальне середовище.

ВСТУП

Останнім часом широкого розповсюдження отримали методи неінвазивної лазерної та фотонної діагностики [1,2,5,6]. У першу чергу великий інтерес представляють собою прості математичні моделі розповсюдження випромінювання у біологічних середовищах, особливістю яких являється те, що вони повинні описувати розповсюдження випромінювання в умовах сильного багатократного розсіювання, що домінує над поглинанням. Пошарове вимірювання лазерного випромінювання всередині тканини, що використовується в оптичній томографії та спектроскопії біологічних об'єктів потребувало розробки нових методів для вирішення проблем перетворення прямого та зворотного випромінювання [3].

До неінвазивних оптичних методів діагностування периферійного кровообігу відноситься фотоплетизмографічний (ФПГ) метод. Саме ФПГ метод дозволяє підвищити достовірність контролю і діагностики стану локального периферійного кровообігу при діагностиці ранніх форм атеросклерозу, тромбофлебиту, облітеруючого ендартеріїту, порушень мікроциркуляції у хребетно-рухомих сегментах при вертебродіагностиці, стану мікроциркуляції при захворюванні на системний червоний вовчак (СЧВ), оцінювання стану периферійних судин у щелепно-лицьовій ділянці при запальовальних процесах, визначення гемодинамічних показників кровотоку при пульсодіагностиці та ін. Крім того, ФПГ має допоміжне діагностичне і прогностичне значення при вивченні багатьох судинних і нервових захворювань, що є зараз найчастішою причиною смерті і інвалідності у молодому віці.

Застосування методу Монте-Карло для аналізу розповсюдження оптичного випромінювання в біотканині є досить перспективним. Метод оснований на числовій імітації фотонного перетворення у розсіювальному середовищі.

Проста імітація зображення, що використовується у методі Монте-Карло, має такі переваги:

- можна використовувати будь-яку матрицю розсіювання; немає ніяких перешкод для використання індикатриси з великим переднім максимумом чи для застосування експериментальних результатів у вигляді розсіювальної матриці;
- будь-яке допустиме число детекторів може використовуватись в методі Монте-Карло без помітного збільшення часу витрат на обчислення; не має проблем в обчисленні параметрів випромінювання всередині середовища;
- вирішення проблем в складному середовищі можливе, коли освітленість залежить не лише від оптичної глибини середовища, але й від поперечних координат.

Однак, відмітимо і недоліки методу Монте-Карло. Отримані результати підлягають статистичній зміні до декількох відсотків. Ці похибки зменшити неможливо, так як витрати часу на обробку зростають

в чотири рази при цьому відбувається подвійне збільшення результату точності. Тому цей метод не придатний для вирішення проблем, що вимагають високу точність. Метод Монте-Карло не застосовують для великої оптичної глибини ($\tau > 100$). [1,2,6,7]

АНАЛІЗ МЕТОДІВ ВЗАЄМОДІЇ ОПТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З БІОТКАНИНОЮ

Теорія Мі. Теорію Мі може бути застосовано до проблеми однократного розсіювання клітинами-еритроцитами [2]. По-перше, еритроцити не містять ніяких клітинних органел, тоді як його клітинна мембрана дуже тонка і не впливає істотно на процес розсіювання, це означає, що еритроцит може розглядатися як однорідний розсіювач. По-друге, еритроцити легко деформуються і не зберігають двовогнуту дископодібну форму. Таким чином, коли вони випадково орієнтовані, то їх можна розглядати як рівноцінні за об'ємом сфери.

Згідно теорії Мі профіль розсіювання, профіль затухання і фазова функція розсіювання еритроцитами визначаються таким чином [2]:

$$\sigma_s^{Mie} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2); \quad \sigma_t^{Mie} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n); \quad p^{Mie}(\theta) = \frac{1}{k^2 r^2} (|S_1|^2 + |S_2|^2), \quad (1)$$

де

$$S_1(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} \left\{ a_n \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} + b_n \frac{d}{d\theta} P_n^1(\cos \theta) \right\} \quad S_2(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} \left\{ b_n \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} + a_n \frac{d}{d\theta} P_n^1(\cos \theta) \right\},$$

де $P_n^1(\cos \theta)$ - це зв'язані функції Легендре, а a_n і b_n - це коефіцієнти рядів Мі (які залежать від довжини хвилі λ , розміру і відносного показника заломлення $n = \sqrt{\varepsilon}$ розсіювачів).

Метод наближення Вензеля, Крамера, Бріллюена (ВКБ). Однократне розсіювання видимого і близького інфрачервоного світла RBC може розглядатися у структурі наближення ВКБ (Вензеля, Крамера, Бріллюена) [2]. Наближення ВКБ придатне для частинки довільної форми. Вважається, що напрям і поляризація падаючої хвилі залишається сталою. Це наближення дійсне, коли довжина хвилі падаючого світла λ , невелика порівняно з характерним розміром частинки D , і коли відносний показник заломлення частинки $n = \sqrt{\varepsilon}$ близький до одиниці, тобто

$$(\varepsilon - 1)kD \gg 1 \quad \text{та} \quad \varepsilon - 1 < 1. \quad (2)$$

Для падаючого світла з довжиною хвилі 800 нм, $\varepsilon \approx 1.1$, $k = 7.85$ мкм і $D \approx 5.5$ мкм. Відповідно $(\varepsilon - 1) \approx 0.1$ і $(\varepsilon - 1)kD \approx 5.18$. Ці значення лежать в межах дійсного ряду наближення ВКБ, і таким чином це може бути безпечно застосовано, щоб вирішити проблему однократного RBC розсіювання світла.

Профіль затухання і профіль поглинання визначаються такими формулами:

$$\sigma_t = k \operatorname{Im} \int_V 2(n-1) \exp[-ik(n-1)z_1 + ik(n-1)z] dV', \quad \sigma_a = \int_V k\varepsilon^n \frac{4}{|n+1|^2} \exp[-2kn_i(z-z_1)] dV', \quad (3)$$

де $n = n_r + in_i$ - відносний показник заломлення частинки.

Метод наближення Релея, Ганса, Дебая (РГД). У літературних джерелах є опис процесу однократного розсіювання світла еритроцитом, використовуючи наближення РГД (Релея, Ганса, Дебая). Подібно наближенню ВКБ, воно може бути застосовано до частинки довільної форми. В рамках цього наближення вважається, що електричне поле усередині частинки може бути наближене випадковим електричним полем. Це припущення дійсне, якщо виконується співвідношення [2]

$$(\varepsilon - 1)kD \ll 1 \quad \text{і} \quad \varepsilon - 1 < 1. \quad (4)$$

Амплітуда розсіяного поля в дальній зоні згідно наближенню РГД є такою

$$f(\bar{s}, \bar{i}) = \frac{k^2}{4\pi} \left[-\bar{s} \times (\bar{s} \times \hat{e}_i) \right] V S(\bar{s}, \bar{i}), \quad (5)$$

де

$$S(\bar{s}, \bar{i}) = \frac{1}{V} \int_V (n^2 - 1) \exp(ik(\bar{i} - \bar{s})r') dV'.$$

Використання наближення РГД забезпечує точний опис процесу однократного розсіювання RBC при узгодженні з даними вимірювання прямого розсіювання RBC на довжині хвилі 577 нм [2].

Наближення дифракції Фраунгофера і аномальної дифракції. Розсіювання на малі кути одним еритроцитом може розглядатися у структурі Фраунгофера або аномальних теорій дифракції [1,2], оскільки для падаючого видимого або близького інфрачервоного світла з довжиною хвилі λ параметр розміру RBC, α , набагато більший, ніж одиниця ($\alpha = \pi D/k$).

Згідно аномальному наближенню дифракції, амплітуда мало-кутового розсіювання у дальній зоні ($z \rightarrow \infty$) визначається такими рівняннями:

$$f^{ad}(\bar{a}) = \frac{k}{2\pi i} \int \exp(-ik\bar{a}\bar{\rho}) \omega(\bar{\rho}) d\rho, \quad \omega(\bar{\rho}) = \left\{ \exp[i\Phi(\bar{\rho})] - 1 \right\} \eta(\bar{\rho}), \quad \Phi(\bar{\rho}, \infty) = \Phi(\bar{\rho}) = k \int_{-\infty}^{\infty} [n(\bar{\rho}, z') - 1] dz', \quad (6)$$

де $\rho = \rho(x, y)$ - це радіальна координата; a - проекція напрямку розсіювання на площині $z = \text{const}$; $\eta(\rho)$ - це функція тіні, яка рівна одиниці усередині проекції частинки, і рівна нулю за її межами; $i\eta(\rho, z)$ - це комплексний показник заломлення розсіювача.

Напіваналітичні і чисельні методи. Сьогодні актуальним є застосування напіваналітичних (метод Т-матриці) і чисельних (методи граничного елемента, кінцевого елемента, кінцевої різниці, або методи цілочисельних рівнянь поверхні і об'єму) підходів. Аналітичні методи, описані вище, мають недолік введення різних обмежень на розмір, форму або показник заломлення розсіювача. Чисельні методи можуть вирішити проблему однократного розсіювання без істотних обмежень. Головний недолік чисельних методів, також як і формалізму Т-матриці, - це довгий час обчислення, який потрібний, щоб забезпечити точне рішення.

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

Загальна схема даного методу основана на центральній граничній теоремі імовірності, в якій випадкова величина $Y = \sum_{i=1}^N X_i$, дорівнює сумі великої кількості N довільних випадкових величин X та

S з однаковими математичними сподіваннями m та дисперсіями σ^2 , завжди розподілена по нормальному закону з математичним сподіванням $N \cdot m$ та дисперсією $N \cdot \sigma^2$.

З точки зору рівняння переносу випромінювання метод Монте-Карло заключається у комп'ютерному моделюванні випадкового переходу N числа фотонів [1,2, 7,8]. Суть методу - врахування явищ розсіювання та поглинання на всьому оптичному шляху фотона через непрозоре середовище. Відстань між двома зіткненнями із логарифмічного розподілу, використовуючи випадкове число, що генерується комп'ютером. Для врахування поглинання, кожному фотону присвоюється вага, і при розповсюдженні через середовище, ця вага постійно зменшується. Якщо має місце розсіювання, вибирається новий напрямок розповсюдження у відповідності з фазовою функцією та іншим випадковим числом. Ця процедура продовжується до тих пір, поки фотон не вийде з розглядаємого об'єму або його вага не досягне певної величини [7]. Метод Монте-Карло включає в себе 5 основних кроків: генерація джерела фотона, генерація траєкторії, поглинання, ліквідація, реєстрація.

АЛГОРИТМ ІМІТАЦІЇ

Розглянемо алгоритм прямої імітації фотонного переходу в середовищі, представлений методом Монте-Карло. Він дає можливість вільного переходу фотонів, у випадку їх розміщення на шарі, що містить розсіяні частки. Шлях переходу одиночного фотону в середовищі визначається методом комп'ютерної імітації. В цьому випадку фотони розглядаються як балістичні частки. Інший вигляд можливий у випадку фотонного переходу, що оцінюється підходящим імовірнісним розповсюдженням. В моделі, в процесі вивчення, кожен фотон може бути еластично розсіяним або поглиненим при зіткненні з частками. Безперечний результат кожного виду оснований на встановленні постійно розподілених випадкових чисел. Імовірність розсіювання в даному напрямку визначається відповідно до розсіювання в одиночних частках. Необхідно уточнити переріз розсіювання та оцінити матрицю розсіювання для кожної взаємодії з розсіювачем в процесі числової імітації фотонного переходу в

середовищі.

Коли випадковий фотон входить в розсіювальний шар, він може пройти вільний шлях довжиною l . Значення l залежить від концентрації часток і величини перерізу. Вільний шлях l – випадкова величина, яка використовує будь-які позитивні значення з густиною імовірності

$$p(l) = \rho\sigma_{ext} e^{-\rho\sigma_{ext}l}, \quad (7)$$

де ρ і σ_{ext} часткова концентрація і відмирання перерізу розсіяних часток відповідно. Часткова реалізації вільної довжини шляху l визначається величиною випадкового числа γ , яке постійно розповсюджується в інтервалі $[0,1]$

$$\int_0^1 p(l)dl = \gamma. \quad (8)$$

Підставимо формулу (7) в (8), тоді значення l матиме вигляд

$$l = \frac{1}{\rho\sigma_{ext}} \ln \gamma. \quad (9)$$

Якщо, пройшовши дистанцію l , фотон залишається всередині розсіювального об'єму, тоді можлива фотонно-часткова взаємодія (розсіювання чи поглинання) вибрана випадковим чином.

Густина фотонної імовірності розсіювання у вказаному напрямку всередині сферичної системи координат являється функцією двох змінних $p(\theta, \varphi)$, яка залежить від розсіяних часток матриці Мюллера $M(\theta, \varphi)$ і вектора Стокса S , який взаємодіє з фотоном. Рух балістичного фотона в розсіювальному середовищі можна описати з допомогою послідовності перетворення для відносної системи координат. Вектор Стокса, взаємодіючи з фотоном, змінюється при кожному розсіюванні. Новий вектор Стокса являє собою попередньо перетворений вектор Стокса в нову площину розсіювання і матрицю Мюллера розсіяних часток. Тоді, використовуючи генератор випадкових чисел, наступне значення l вільної довжини шляху фотона запам'ятовується і обчислюється нове значення координат зіткнення фотону в просторі. Ця процедура повторюється доти, поки фотон проходить через розсіювальну систему (рис.1).

Фотони, які залишають розсіювальне середовище, накопичуються в спеціальних комірках датчика, число яких визначається напрямком фотонного переходу. Крім того, під час реєстрації, фотони класифікуються у відповідності з додатковими параметрами визначення фотонного переходу в середовищі. Цим параметром може бути розсіяна множина чи довжина шляху, пройдена фотоном. Для кожного випромінювання фотона ми записуємо напрямок і координати точки, в якій досліджується випромінювання розсіювального шару. Просторове розповсюдження розсіювального випромінювання в шарі можна отримати шляхом поляризації з допомогою аналізу даних для досить великої кількості фотонів. Результати цього дослідження еквівалентні обчисленням на основі аналітичного перетворення розв'язку рівняння.

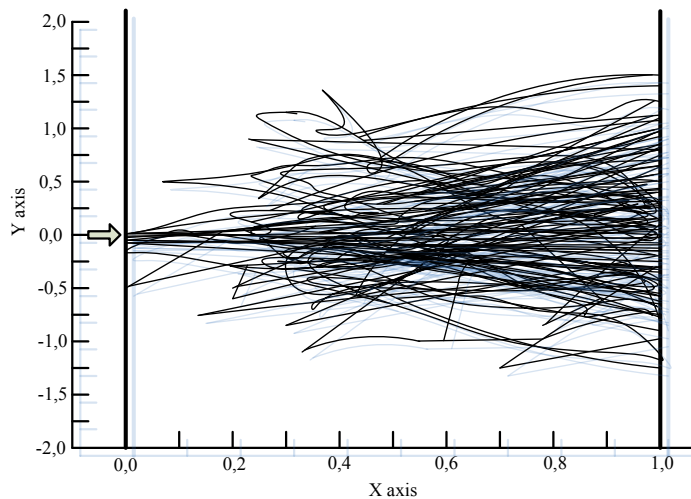


Рис. 1. Траєкторії фотона в розсіювальному середовищі [2,9]

Згідно методу Монте-Карло, моделювання фотонної траєкторії являється підходящим для імітації множини розсіювальних ефектів в системі випадково розміщених часток. Більш того, ця схема дає можливість для наближеного підходу до описання ефектів інтерференції, спричинених просторовими частками. І, останнє, вона може включати інтерференцію розсіяних областей в обчислення LSM і інтегральні перерізи для довільних часток. Іншими словами, на першій стадії ми пояснюємо ефекти інтерференції для імітації властивостей одиничного розсіювання, і тоді ми використовуємо ці

властивості в імітаціях Монте-Карло для множинного розсіювання. Таке наближення являється допустимим, якщо розміри області розміщення частки значно менші, ніж значення фотонної довжини шляху [1,7,8,9].

Побудуємо алгоритм імітації (рис. 2). Вважатимемо, що частки середовища, на яких відбувається розсіювання і поглинання, являються сферично симетричними. Таке наближення часто використовується в аналогічних випадках і оснований на тому, що в процесі проходження через середовище із сильним розсіюванням, фотон взаємодіє з частками під різними кутами.

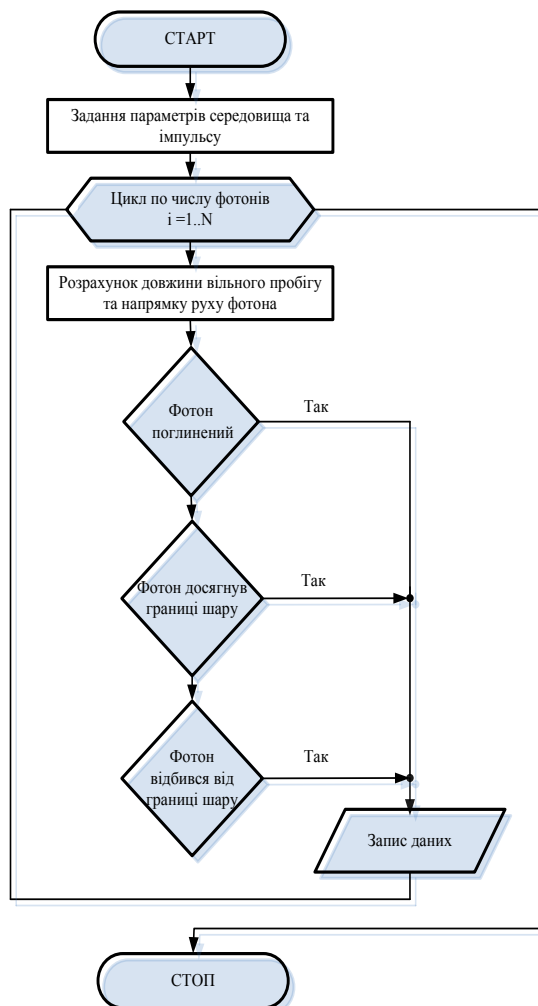


Рис. 2. Алгоритм імітації

Тому можна застосовувати усереднену індикатрису розсіювання. Застосування даної моделі і порівняння чисельних розрахунків з експериментальними результатами, показали, що дане наближення задовільно описує властивості більшості біологічних тканин.

ВИСНОВКИ

Згідно методу Монте-Карло, моделювання фотонної траєкторії являється підходящим для імітації множини розсіювальних ефектів в системі випадково розміщених часток. Більш того, ця схема дає можливість для наближеного підходу до описання ефектів інтерференції, спричинених просторовими частками. І, останнє, вона може включати інтерференцію розсіяних областей в обчислення LSM і інтегральні перерізи для довільних часток. Іншими словами, на першій стадії ми пояснюємо ефекти інтерференції для імітації властивостей одиночного розсіювання, і тоді ми використовуємо ці властивості в імітаціях Монте-Карло для множинного розсіювання. Таке наближення являється допустимим, якщо розміри області розміщення частки значно менші, ніж значення фотонної довжини шляху.

Основною перевагою методу Монте-Карло є зручність та пристосованість цього методу для вирішення складних граничних задач в багатокомпонентних середовищах. Крім того, метод Монте-Карло являється зручним для побудови інтегральних операторів зв'язку між характеристиками початкового проникаючого випромінювання у вимірювальних в експерименті величин, що дає можливість ефективного проведення масових розрахунків і вирішення зворотніх задач для реконструкції характеристик початкового випромінювання по результатам експериментальних вимірювань.

Ефективність застосування даного методу визначається, по-перше, розвитком, в методі, способів зменшення дисперсії розрахунків; по-друге, прогресом в області створення швидкодіючих багатопроекторних обчислювальних систем.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Фотоплетизмографічні технології контролю серцево-судинної системи: (Монографія) / С.В.Павлов, В.П.Кожем'яко, В.Г.Петрук, П.Ф. Колісник – Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2007.–254 с.
2. Tuchin V. Handbook of Optical Biomedical Diagnostics.- Bellingham. SPIE, 2002. – 1093 P.
3. Тимчик Г.С. Операційні властивості когерентних оптичних спектроаналізаторів при освітленні вхідного транспаранта випромінюванням, які містять вищі моди Гауса-Ерміта // Оптико-електронні інформаційно-енергетичні технології, 2002. – № 1. – С. 131–136.
4. Чутники електромагнітного випромінювання для біотехнічних досліджень / Г.С. Тимчик, В.І. Скицюк, М.А. Вайнтрауб, Т.Р. Ключко. – К.: МП Леся, 2004. – 64 с
5. Кузьмич В.В. Основные принципы и особенности транскутанной "отражательной" оксиметрии // Мед. техника. –1993.- №3 – С. 36-42.
6. Зимняков Д.А., Тучин В.В. Оптическая томография тканей. Кантовая электроника, Т.32, №10, с.849-867, 2002.
7. Тучин В.В., Приезжев А.В., Шубочкин Л.П. Лазерная диагностика в биологии и медицине. - М.: Наука, 1989 - 237с.
8. H. C. Van de Hulst, Light Scattering by small Particles, Wiley, New York (1957).
9. P. Chylek, G. Videen, D.J.W. Geldart, J.S. Dobbie, and H. C. W. Tso, "Effective medium approximations for heterogeneous particles", in Light scattering by nonspherical Particles: Theory, Measurements, and Applications, M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, and L.D. Travis (eds.), Ch.9, pp. 273-308, Academic Press, San Diego (2000).
10. Niemz M.H. Laser – Tissue Interactions: Fundamentals and Applications. – Berlin, 1996. – 305 p.
11. Star W.M. Diffusion Theory of Light Transport // Optical-Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue / Ed. by Welch A.J. and van Gemert M.J.C. – N.Y., 1995. – P. 131-206.22.
12. Smithies D.J., Butler P.H. Modelling the Distribution of Laser Light in Port-Wine Stains with the Monte Carlo Method // Physics in Medicine and Biology. – 1995. – Vol. 40. – P. 701-733.

Надійшла до редакції 15.11.2008р.

ПАВЛОВ СЕРГІЙ ВОЛОДИМИРОВИЧ – д.т.н., професор, завідувач кафедри загальної фізики та фотоніки, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна

КОЗЛОВСЬКА ТЕТЯНА ІВАНІВНА – аспірант кафедри загальної фізики та фотоніки, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.

ДУМЕНКО ВІКТОРІЯ ПЕТРІВНА – здобувач кафедри лазерної техніки та фотоніки, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.