

组织光学特性的时间分辨蒙特卡罗仿真研究

叶静斋 陈辉

(桂林电子科技大学, 广西 桂林 541004)

摘要 组织的反射、透射和散射光检测都包含着组织的内部信息,可发展成为无损检测以及癌症早期诊断的重要手段,有着极为重要的意义。时间分辨蒙特卡罗模型能够预测组织的时间分布光学特性,具有精度高、灵活性强的优点,能适用于多种组织。但传统的蒙特卡罗模型中采用的 Henyey-Greenstein(HG)相函数存在一些问题。介绍了基于米氏理论的米氏相函数。利用几种相函数进行时间分辨蒙特卡罗仿真并与实验结果进行对比。结果表明,米氏相函数比 HG 相函数更能真实地体现人体组织的漫反射特性,但由于米氏相函数与组织的散射颗粒尺寸相关,而组织的散射颗粒大小不一,针对不同的组织有不同的颗粒分布模型,因此应用于具体模型时散射颗粒模型的选择会有一些困难。

关键词 生物光学;时间分辨蒙特卡罗模型;人体组织;Henyey-Greenstein 相函数;米氏相函数

中图分类号 O439;O242.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP48.071701

Time-Resolved Monte Carlo Simulation for Optical Properties of Tissues

Ye Jingzhai Chen Hui

(Guiling University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China)

Abstract Reflected, transmitted and scattered light from tissues contains information about tissue properties. Hence, it has potential to be used for noninvasive characterization of biomedical tissues, which can lead to the development of techniques for the early detection of cancer. Time-resolved Monte Carlo model can predict time dependent light distribution in tissues and has advantages of high precision and flexibility and can be used in many tissues. But there are some problems lie in Henyey-Greenstein (HG) phase function used in traditional Monte Carlo model. Thus, Mie phase function based on Mie theory is introduced. Comparison of time-resolved Monte Carlo simulations using several phase functions and experimental data shows that Mie phase function can predict diffuse reflectance of human tissue more real than HG phase function. Nevertheless, because Mie phase function is relative to scattering particle sizes of tissues and the sizes are different, the choice of scattering particle model is difficult when aiming at different particles distribution models.

Key words bio-optics; time-resolved Monte Carlo model; human tissue; Henyey-Greenstein phase function; Mie phase function

OCIS codes 170. 0170; 140. 0140; 170. 3660

1 引言

激光在医学诊断和治疗中日益广泛的应用极大地推动了组织光学的发展^[1]。人们已发展了多种理论分析方法来研究生物组织的光传输和散射特性,应用比较广泛的是基于辐射传输方程的输运理论。但由于精确的解辐射传输方程是很困难的,人们提出了一些近似模型,例如漫射近似模型^[2]、Kubelka-Munk^[3](KM)模型等。KM模型描述了均匀漫射光在匹配边界的各向同性介质中的传输行为。该模型的优点是比较简

收稿日期: 2011-01-15; **收到修改稿日期**: 2011-03-02; **网络出版日期**: 2011-04-25

基金项目: 广西省自然科学基金(0640066)和广西省信息与通信技术重点实验室(10905)资助课题。

作者简介: 叶静斋(1985—),男,硕士研究生,主要从事组织光学方面的研究。E-mail: 260811113@qq.com

导师简介: 陈辉(1976—),男,博士,副教授,主要从事光通信、光成像与信道传输特性等方面的研究。

E-mail: chenhui02@guet.edu.cn

单,能够从实验测得的反射率和透射率直接算出该模型下的散射系数和吸收系数,但该模型的适用范围相对来说比较狭窄。漫射近似模型的适用范围较大,也比 KM 模型精确,但由于光在生物组织中的传输过程的复杂性,仍有许多问题不能取得令人满意的结果。由于光子在组织中的散射过程又可抽象成光子的一系列随机过程,从而使得计算机数值模拟的方法,如蒙特卡罗(Monte Carlo)^[4,5]法成为研究光在介质中传输过程的一种有效方法。传统蒙特卡罗方法中普遍采用 Henyey-Greenstein(HG)^[6]散射相函数确定光子在生物组织中的散射方向。但 HG 函数存在未考虑入射光波长的影响,不能很好地描述漫反射光等问题。本文介绍了 HG 相函数、基于米氏理论的米氏相函数,将 HG 函数和米氏散射相函数应用于不同人体组织的时域蒙特卡罗模型中,并与实验结果作比较,对 HG 和米氏相函数的应用效果作了详细的研究和分析。

2 HG 相函数与米氏相函数的比较

与米氏相函数相比,HG 相函数相对简单的表达式为

$$P_{\text{HG}}(\theta, g) = \frac{1 - g^2}{[1 + g^2 - 2g\cos(\theta)]^{3/2}}, \quad (1)$$

式中

$$g = \langle \cos(\theta) \rangle = \frac{\int_0^\pi P_{\text{HG}}(\theta) \cos(\theta) d\theta}{\int_0^\pi P_{\text{HG}}(\theta) d\theta}. \quad (2)$$

HG 相函数是由实验数据拟合而来,而米氏相函数则是基于适用范围非常广泛的数学物理理论——米氏散射理论。由于米氏理论是球形介质在麦克斯韦方程组下的解析解,在处理波长量级粒子散射的问题上有其他理论无可比拟的精度。因此,相对于 HG 函数来说,基于米氏理论的米氏散射相函数可以较为准确地描述光子在生物组织中与等效球形颗粒碰撞后的散射特性。其形式为

$$P_{\text{Mie}} = \frac{2(|S_1|^2 + |S_2|^2)}{Q_{\text{sc}}\alpha^2}, \quad (3)$$

式中 $S_1(\theta)$, $S_2(\theta)$ 为振幅函数, Q_{sc} 为散射效率因子, $\alpha = \frac{\pi D}{\lambda}$ 为颗粒尺寸参数, D 为散射颗粒直径, λ 为入射光波长。 $S_1(\theta)$, $S_2(\theta)$, Q_{sc} 的计算公式为

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\theta) + b_n \tau_n(\theta)], \quad (4)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \tau_n(\theta) + b_n \pi_n(\theta)], \quad (5)$$

$$Q_{\text{sc}} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2). \quad (6)$$

式中 π_n 和 τ_n 是连带勒让得函数的函数,只与散射角 θ 有关,可用递推公式计算; a_n 和 b_n 是与贝塞耳函数和汉克尔函数有关的函数,它们的计算公式为

$$a_n = \frac{\psi_n(\alpha) \psi'_n(m\alpha) - m \psi'_n(\alpha) \psi_n(m\alpha)}{\zeta_n(\alpha) \psi'_n(m\alpha) - m \zeta'_n(\alpha) \psi_n(m\alpha)}, \quad (7)$$

$$b_n = \frac{m \psi_n(\alpha) \psi'_n(m\alpha) - \psi'_n(\alpha) \psi_n(m\alpha)}{m \zeta_n(\alpha) \psi'_n(m\alpha) - \zeta'_n(\alpha) \psi_n(m\alpha)}. \quad (8)$$

式中 m 为散射颗粒相对于周围介质的相对折射率, $\zeta_n(z)$ 和 $\psi_n(z)$ 分别是第一类汉克尔函数和贝塞耳函数; $\zeta'_n(z)$ 和 $\psi'_n(z)$ 分别是 $\zeta_n(z)$ 和 $\psi_n(z)$ 的导数。它们的计算方法已有介绍^[7,8]。算出 a_n 和 b_n 之后,即可根据(3)~(6)式计算米氏散射相函数。当某特定人体组织的米氏散射相关参数已知时,可求得该组织的各向异性因子 g 为

$$g = \frac{4}{\alpha^2 Q_{\text{sc}}} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+2)}{n+1} \text{Re}(a_n a_{n+1}^* + b_n b_{n+1}^*) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \text{Re}(a_n b_n^*) \right]. \quad (9)$$

由于人体组织的各向异性因子 g 取值范围为 $0.7 \sim 0.99$, 散射颗粒相对折射率 m 范围为 $1.0 \sim 1.1$, 因此取 $m=1.1, g=0.72$, 根据(9)式可得出与特定 g 值相对应的粒径因子 α , 进而根据(3)~(8)式计算相对应的米氏散射相函数, 如图 1 所示。可知, HG 相函数并不能很好地体现球形颗粒的散射特性。

3 时间分辨蒙特卡罗仿真

3.1 散射角的抽样

采用 HG 相函数的蒙特卡罗模型在对散射角 θ 进行抽样时的根据是

$$\cos \theta = \frac{1}{2g} \left\{ 1 + g^2 - \left[\frac{1 - g^2}{1 - g + 2g\xi} \right]^2 \right\}. \quad (10)$$

式中 ξ 为 $(0, 1)$ 均匀分布的随机数。而要为米氏相函数找到这样一个散射角生成公式非常困难, 因此需要为米氏相函数采用别的抽样方法。先将 $P_{\text{Mie}}(\theta)$ 按 θ 等间隔取离散并归一化, 使其满足

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1. \quad (11)$$

总存在 $(0, 1)$ 的均匀分布随机数 ξ 和整数 m 使得 $(1 < m \leq n)$:

$$\sum_{i=1}^{m-1} p_i < \xi \leq \sum_{i=1}^m p_i. \quad (12)$$

当(12)式左边为 0 时, $m=1$ 。这样, 只需找到与 m 对应的散射角 θ , 就可完成散射角的抽样。

3.2 时间分辨蒙特卡罗法

与稳态蒙特卡罗法^[9]不同的是, 时域蒙特卡罗法需要记录每个光子的运行时间, 因此需要建立一个一维数组 `time[]`, 并假定一个时间间隔 Δt 。假设激光入射时刻 $t=0$, 每增加一个 Δt , 则 i 加 1。光子从组织表面出射时, 按照它的出射时间 t 将其权重计入数组 `time` 中的一个元素。例如当 $t=2.12 \Delta t$ 时, 则该光子应该计入 `time[2]` 中。光子运行时间的计算公式为

$$t = s/c, \quad (13)$$

式中 c 为介质中的光速, $c = c_0/n$, c_0 为真空中的光速, s 为光子的随机迁移步长。这样, 通过模拟大量光子的传输并得出它们的出射时间和出射权重, 就可以得到一个超短脉冲在经过组织中传输后的时域光功率分布图。

3.3 HG 与米氏仿真结果比较

假设某人体组织光学参数为: 吸收系数 $u_a = 0.00434 \text{ mm}^{-1}$, 散射系数 $u_s = 6 \text{ mm}^{-1}$, $g = 0.72$, 组织厚度 $d = 10 \text{ mm}$ 。设置跟踪光子数量为 500000, 所有光子初始权重为 1, 仿真结果如图 2 所示。图 2 中米氏相函数率先到达透射峰值, HG 相函数延后较多。这是由于在 $g = 0.72$ 时, 米氏相函数明显偏向于前向散射(散射角小于 90°), 而 HG 相函数后向散射占的比重较大。因此, 采用米氏相函数的模型中, 光子有较大可能性在经历较少的碰撞后透射出组织表面, 而采用 HG 相函数的模型中, 光子需要经过较多碰撞才能透射, 光子传输路径较长, 造成 HG 相函数的透射峰值来得比较晚。

3.4 正态分布颗粒模型下的米氏相函数

以上讨论的米氏散射相函数考虑的都是单一粒径的等效球形颗粒模型, 而生物组织中实际散射颗粒直径为 $0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 不等(如图 3^[10])。

为了更好地模拟真实情况, 采用正态分布的球形颗粒模型, 其概率密度公式为

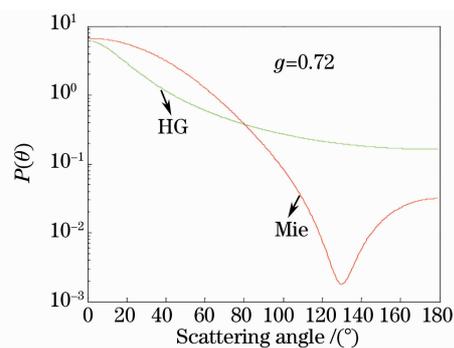


图 1 HG 和米氏相函数对比图

Fig. 1 Comparison of HG and Mie phase functions

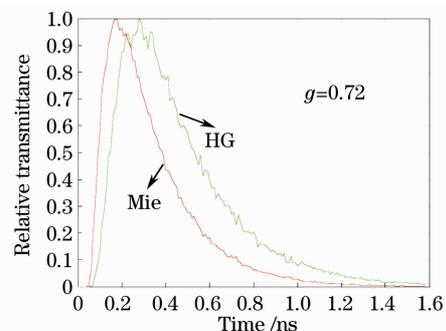


图 2 采用 HG 和米氏相函数的时间分辨仿真结果
Fig. 2 Results of time-resolved Monte Carlo simulations using HG and Mie phase functions

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (14)$$

式中 μ 是服从正态分布的随机变量的均值, σ 是此随机变量的方差。将此分布用于上述时域蒙特卡罗模型中, 采用类似于米氏相函数的处理方式, 对粒径因子 α 进行抽样

$$\sum_{i=1}^{N-1} f_i < \xi \leq \sum_{i=1}^N f_i, \quad \left(\sum_{i=1}^M f_i = 1, 1 < N \leq M\right). \quad (15)$$

然后根据抽样得到的粒径因子 α_N 可得到相应的各向异性因子 g_N , 抽样足够多的次数后可计算特定分布下各向异性因子 g 的均值 $\langle g \rangle$, 并与相应的 HG 相函数作比较。

3.5 几种相函数与人体动脉切片实验数据的对比

采用人体肺动脉切片实验结果作为参照标准。该实验用 632.8 nm 下 He-Ne 激光照射离体人体动脉和静脉组织, 然后用两个标准积分球系统测量其散射与吸收特性。设置人体动脉组织光学参数^[11]为: 吸收系数 $u_a = 4.8 \text{ cm}^{-1}$ 和散射系数 $u_s = 331 \text{ cm}^{-1}$, 并根据实验设置蒙特卡罗仿真参数为: $d = 0.027 \text{ cm}$, $g = 0.89$, 所用分布为 $N(4.6, 0.49)$, 跟踪 100000 个光子, 得结果如表 1 所示。

表 1 实验数据与仿真结果汇总

Table 1 Focusing results of various sources

Source	R_d	T_t	R_d error / %	T_t error / %
Experiment	0.154	0.437		
HG ($g = 0.89$)	0.208	0.444	35	1.6
Mie ($\alpha = 4.6$)	0.137	0.552	11	26.3
Mie (normal distribution)	0.145	0.537	5.8	22.8

表 1 中 R_d 为漫反射率, T_t 为总透射率(包括准直透射和漫透射)。

根据实验样本的光学参数, 可以用时域蒙特卡罗模型预测该组织上表面所有位置全部出射光子的时间分辨漫反射(假设光源为超短脉冲光), 如图 4 所示。由图 4 和表 1 可以看出, 由于切片样本厚度很薄(光子很容易透射), 大部分漫反射都发生在 20 ps 之内; 单一粒径和正态分布粒径模型下的仿真结果曲线大致相同, 正态分布粒径模型下的漫反射率与透射率与实验结果更为接近, 但两者对透射率的描述都不如 HG 相函数; HG 相函数在描述透射率的时候比米氏相函数更精确(由于样本切片表面并不完全光滑, 不同的实验得出的结果可能稍有不同), 但描述漫反射的时候误差相当大。值得注意的是, 米氏相函数模型在时间为 0~3 ps 时的漫反射率比 HG 相函数模型低很多(米氏模型在 0.2 以下, 而 HG 模型在 0.4~0.7), 这表明米氏相函数能更好地描述光子在组织中传播时的“香蕉路径”(早期出射光子比 HG 模型少), 如图 5 所示。

4 结 论

在人体组织的时间分辨蒙特卡罗模型中, 等效颗粒直径服从正态分布的米氏相函数效果最好, 与实验数据

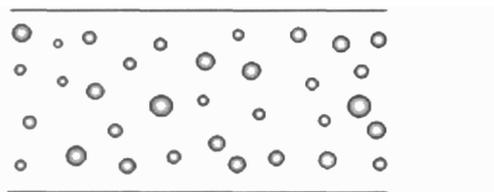


图 3 组织内部正态分布散射颗粒模型

Fig. 3 Scattering particles model for biological tissue

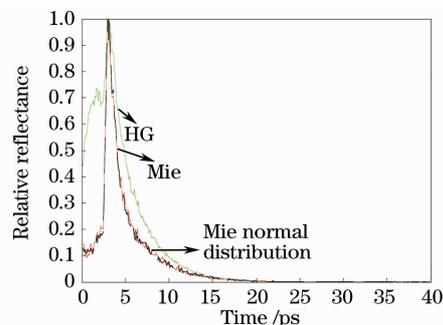


图 4 采用不同相函数的时域蒙特卡罗仿真结果

Fig. 4 Results of time-resolved Monte Carlo simulations using different phase functions

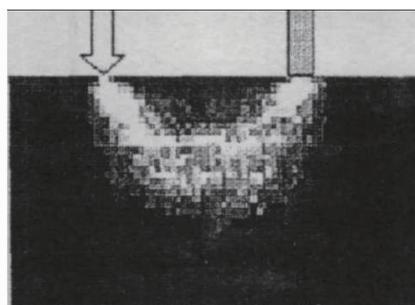


图 5 光子在组织中的传播路径

Fig. 5 Transport paths in tissue

最为接近;HG 相函数对透射率的预测比较准确,但对漫反射率的预测误差很大,而漫反射率恰恰是众多医学诊疗的重要指标;无论是单一颗粒直径的米氏相函数还是颗粒直径服从正态分布的米氏相函数,对光子传输路径的描述都比 HG 相函数要准确。由于人体组织的散射颗粒尺寸不一,因此要精确地描述特定组织中的散射颗粒分布还需要大量的实验研究和理论分析,米氏散射相函数对组织光学特性的描述仍然存在很大的提升空间。

参 考 文 献

- 1 F. F. Jobsis. Noninvasive, infrared monitoring of cerebral and myocardial oxygen sufficiency and circulatory parameters[J]. *Science*, 1977, **198**(4323): 1264~1267
- 2 S. T. Flock, B. C. Wilson, D. R. Wyman *et al.*. Monte-Carlo modeling of light propagation in highly scattering tissues-I: model predictions and comparison with diffusion theory[J]. *IEEE Trans, Biomed. Eng.*, 1989, **36**(12): 1162~1168
- 3 Wei Huajiang, Li Xiaoyuan, Wu Guoyong *et al.*. Scattering and absorbing characteristics of human arteries and veins in Kubelka-Munk model at He-Ne laser in vitro[J]. *Chinese J. Lasers*, 2001, **A28**(6): 573~576
魏华江, 李晓原, 巫国勇 等. Kubelka-Munk 模型下人血管对 He-Ne 激光的散射与吸收特性[J]. *中国激光*, 2001, **A28**(6): 573~576
- 4 Giovanni Zaccanti. Monte Carlo study of light propagation in optically thick media: point source case[J]. *Appl. Opt.*, 1991, **30**(15): 2031~2041
- 5 B. C. Wilson, G. Adam. A Monte Carlo model for the absorption and flux distributions of light in tissue[J]. *Med. Phys.*, 1983, **10**(6): 824~830
- 6 L. G. Henyey, J. L. Greenstein. Diffuse radiation in the galaxy[J]. *Astrophys. J.*, 1940, **3**: 117~137
- 7 C. F. Bohren, D. R. Huffman. Absorption and Scattering of Light by Small Particles[M]. New York: John Wiley & Sons, 1983. 82
- 8 Xiang Jiansheng, He Junhua. Numerical calculation of Mie theory[J]. *Journal of Applied Optics*, 2007, **28**(3): 363~366
项建胜, 何俊华. Mie 光散射理论的数值计算方法[J]. *应用光学*, 2007, **28**(3): 363~366
- 9 S. A. Prahl, M. Keijzer, S. L. Jacques *et al.*. A Monte Carlo model of light propagation in tissue[J]. *SPIE Institute Series*, 1989, **5**: 102~111
- 10 Zhang Yingying, Wang Qinghua, Lu Hongyan *et al.*. Equivalent partial's model of biological tissue and calculation of Mie phase function[J]. *Acta Laser Biology Sinica*, 2007, **16**(1): 79~83
张颖颖, 王清华, 陆红艳 等. 生物组织光散射等效颗粒模型及 Mie 相函数计算[J]. *激光生物学报*, 2007, **16**(1): 79~83
- 11 Scott A. Prahl, Ashley J. Welch. A review of the optical properties of biological tissues[J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1990, **26**(12): 2166~2185