

用蒙特卡罗方法研究生物组织中的光分布

孙 威 应金品 李 江 林 煜

(浙江大学物理系, 杭州 310027)

提 要

本文利用蒙特卡罗方法研究准直光束通过生物组织时其内部光吸收剂量分布的特点. 计算模型设定的条件为: 组织与其边界折射率不同、组织为纵向有一定宽度的层状结构. 理论的计算模拟结果已同组织模拟体的实验结果作了比较, 两者能较好的吻合.

关键词 蒙特卡罗方法, 分布, 吸收, 散射.

1 引 言

随着激光在医学上应用的日益发展,特别是光动力疗法(Photodynamic Therapy)诊治恶性肿瘤的深入研究,促使人们对生物组织中光能的分布和传输问题越来越感兴趣. 确定生物组织中的光吸收剂量,研究其分布特点,对光动力疗法的诊断、治疗以及对激光在医学上的进一步应用都是十分重要的. 虽然光吸收剂量可以由仪器和其它一些手段来测量,但均难以实现在活体上进行无损检测. 而建立一个能正确模拟光子在生物组织中的传输过程的数学模型,在已知生物组织的光学特性的条件下就能够确切地计算出组织内部的光吸收剂量. 因此,建立这样一个数学模型是生物医学光学迫切需要进行的工作,也是光剂量学迫切要求解决的问题. 在这方面前人已进行过很多工作. 有适用范围仅局限于介质的光学特性和几何形状都比较简单的“辐射传递理论”^[1]. 另外,还有 BONNER 等人^[2,7]发展的漫射近似和离散坐标法,当生物组织具有强吸收或强散射性质时,这两种方法得到的结果与实际测量值较吻合. 但是,当吸收和散射作用都比较均衡时,这两种方法就显得难以胜任了. 然而,用蒙特卡罗方法模拟组织中光输运的方法却能很好的克服上述近似方法的不足之处. 蒙特卡罗方法是一种统计模拟随机抽样的方法,已广泛运用于模拟各种输运现象. FLOCK 等人^[2]利用蒙特卡罗方法模拟了强散射介质中的光输运过程. G. ZACCANTI^[1]用蒙特卡罗方法模拟了点源下生物组织中的光输运过程,还有一些作者如 WILSON 等人^[4~6]也在蒙特卡罗方法模拟方面做了一些工作. 本文即是在他们的工作基础上,把介质进一步假设为组织与外界折射率不匹配,组织纵向有一定宽度且考虑组织上下表面的反射和透射,准直光垂直入射的介质模型. 运用蒙特卡罗方法模拟生物组织内部的光输运过程,从而研究了组织中的光吸收剂量分布的特点,并得到一些有实际意义的结果.

2 理论模型与模拟

本文设定的组织模型和计算条件为：

1) 准直光源垂直入射到组织模型上表面, 光束无限细; 2) 组织与边界折射率不匹配, 考虑到组织中水份占有很大比例, 假设组织折射率为 1.33, 而边界即空气的折射率为 1.00; 3) 假设组织模型是横向宽度无限大, 纵向宽度为光子在组织中的平均自由程的 100 倍. 由于组织边界折射率不匹配, 因此在组织的上下表面要考虑光子的反射和透射; 4) 组织对光子有散射和吸收作用. 其中散射可以是各向同性, 也可以是各向异性的; 5) 在组织中传输的是光子. 不考虑其波动性, 也不计它的偏振性^[3]; 6) 在输运过程中光子的生存几率遵循输运理论的负指数衰减的规则.

蒙特卡罗方法模拟光在组织中的输运过程, 也即大量记录每个光子在组织中的行迹. 而模拟每个光子在生物组织中的行迹, 其步骤总体上讲有这么四步: 1) 根据入射条件确定起始跟踪点; 2) 确定光子行进的方向和下一次碰撞的位置; 3) 确定在该位置光子的吸收和散射部分; 4) 返回第二步. 如此循环计算, 直到光子权重小于某一设定值, 或者光子逸出生物组织上下表面时就结束对该光子的跟踪. 然后返回第一步记录另一光子, 直到所设定的光子数全部跟踪完毕. 详见以下分析:

2.1 光子权重的变化

入射光子初始权重被赋为 1. 光子前进到每一步都将有部分被吸收、部分被散射. 设第 $N - 1$ 次散射后继续传输的光子的权重为 W_{n-1} , 则第 N 次碰撞后权重的变化为:

$$W_n = W_{n-1} * \mu_s / (\mu_s + \mu_a) = W_{n-1} * ALBEDO \tag{1}$$

式中 μ_s 为组织的散射系数, μ_a 为组织的吸收系数. $\mu_s / (\mu_s + \mu_a)$ 为组织的反照率. 因此, 经过第 N 次碰撞后, 光子被吸收的几率为 $[W_{n-1} * (1 - ALBEDO)]$, 生存几率为 $(W_{n-1} * ALBEDO)$.

2.2 光子行进方向和碰撞位置的跟踪

设光子由第 M 个位置散射到第 $M + 1$ 个位置时, 两个位置矢和光子运动方向的单位矢分别表示为 r_m 、 s_m 和 r_{m+1} 、 s_{m+1} , 如图 1 所示. 选取原点固定在第 M 个位置的坐标系为 x_1, y_1, z_1 . 令 z_1 的方向和 s_m 一致. y_1 在包含 z_1 且垂直于原坐标系中 xy 平面的一个平面 p 内. z_1 则与 p 平面垂直. 设 r_m, r_{m+1} 在 xyz 系中的方向余弦值为 $(\mu_x, \mu_y, \mu_z), (\mu'_x, \mu'_y, \mu'_z)$. s_{m+1} 在 $x_1y_1z_1$ 系中的方向角为 (θ, φ) . 则两组方向余弦之间的关系可以通过坐标系旋转得到, 即

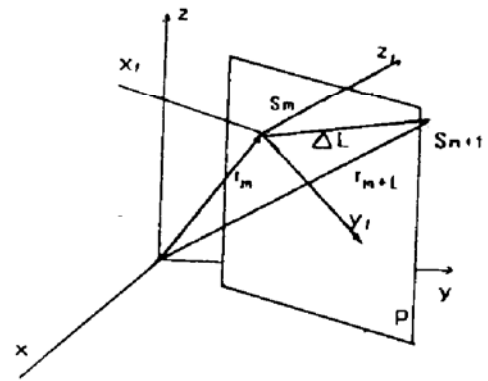


Fig. 1

$$\left. \begin{aligned} \mu'_x &= \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_x \mu_z \cos \varphi - \mu_y \sin \varphi) + \mu_x \cos \theta, \\ \mu'_y &= \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_y \mu_z \cos \varphi - \mu_x \sin \varphi) + \mu_y \cos \theta, \\ \mu'_z &= -\sqrt{1 - \mu_z^2} \sin \theta \cos \varphi + \mu_z \cos \theta. \end{aligned} \right\} \tag{2}$$

在 $x_1y_1z_1$ 系中的 θ, φ 角的取法为:

$$\left. \begin{aligned} \cos \theta &= 2 \xi_1 - 1 & (g = 0) \\ \cos \theta &= \{1 + g^2 - [(1 - g^2) / (1 - g + 2g\xi_1)]^2\} / 2g & (g \neq 0) \\ \varphi &= 2\pi\xi_2 \end{aligned} \right\} \tag{3}$$

式中 ξ_1, ξ_2 是 $(0, 1)$ 之间的任一随机数, g 为 Henyey-Grennstein 相函数近似公式中的散射角的平均余弦值. $0 \leq g \leq 1$, $g = 0$ 时表示组织对光子的散射是各向同性的, 而 $g = 1$ 时表示组织散射纯属前向散射.

设光子在第 M 个位置的 xyz 系坐标为 (x_0, y_0, z_0) , 散射方向余弦值为 (μ_x, μ_y, μ_z) , 则第 $M + 1$ 个位置的 xyz 系坐标 (x, y, z) 为:

$$x = x_0 + \Delta L * \mu_x, \quad y = y_0 + \Delta L * \mu_y, \quad z = z_0 + \Delta L * \mu_z, \quad (4)$$

式中, $\Delta L = -\ln \xi / \mu_t$ 为计算中所取的步长, $\mu_t = \mu_s + \mu_a$ 为组织的衰减系数.

2.3 光子的反射

由于生物组织与外界折射率不同, 组织内光子在多次散射碰撞传输到边界时, 将有反射和透射. 反射几率由菲涅尔反射系数给出:

$$R(\theta_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\theta_i - \theta_t)}{\sin^2(\theta_i + \theta_t)} + \frac{\tan^2(\theta_i - \theta_t)}{\tan^2(\theta_i + \theta_t)} \right], \quad (5)$$

$$\theta_t = \cos^{-1} \mu_t, \quad n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t,$$

式中 θ_i 为入射角, θ_t 为透射角. n_i, n_t 分别为组织和外界的折射率.

2.4 光子碰撞过程结束的条件

在光子透射到组织界外或光子权重减少至某一设定值(如 10^{-5})时, 光子将不再被跟踪.

3 结果分析

图 2~4 是蒙特卡罗方法数值计算的结果. 图中 a 表示组织的反照率, g 为组织的各向异性因子, r 表示某一点离光束入射点的距离.

图 2 中所示的是五种光学特性各不相同的组织在准直光入射时的表面漫反射率分布曲线. 从图中可见, 对具有相同反照率的组织模型, 由于 g 因子不同, 其分布曲线也有明显差异. g 因子较大者, 光子各向异性散射的程度增大, 单个光子的前向散射增强, 其结果是光子从组织表面透出几率变小. 表面漫反射几率分布是内部光吸收剂量分布的间接反映, 它将是组织无损检测的关键信息. g 因子的大小对组织内部各处光吸收剂量相互之间比例有决定性作用.

图 3 显示出的是各种组织模型不同径向距离时的内部纵向光吸收剂量分布曲线. 当 g 因子相同时, 其内部光吸收剂量分布曲线均类似, 如图 3(a)和图 3(c)所示; 而 a 值相同 g 值不同时, 其内部光吸收剂量分布曲线变化很大, 如图 3(a)和图 3(b)所示. 因此, 在测量组织光学特性时, 对 g 因子测量的准确性要求较高. 值得一提的是: 在图 3 各图的曲线中可以看到, 光强分布在某一深度上有一个极值, 这可以认为是散射、边界的透射和反射共同造成的效果.

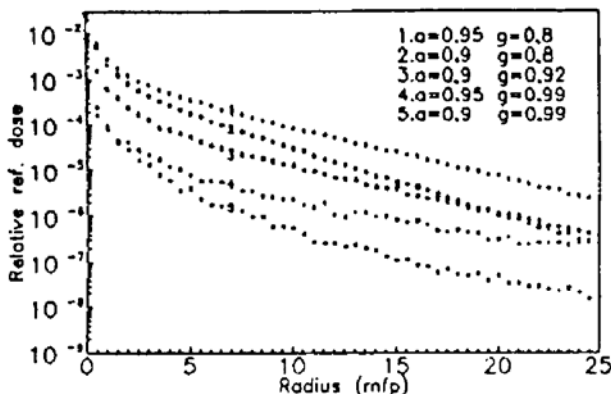


Fig. 2 The reflectance distribution for five tissues

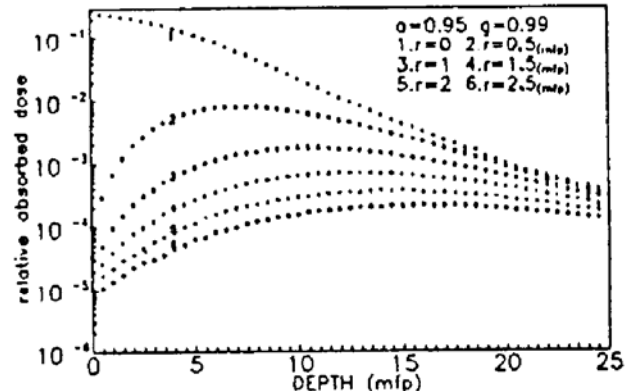


Fig. 3a The relative absorbed dose as a function of depth

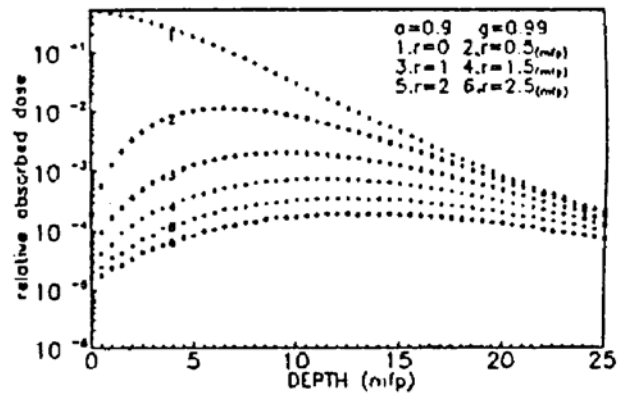
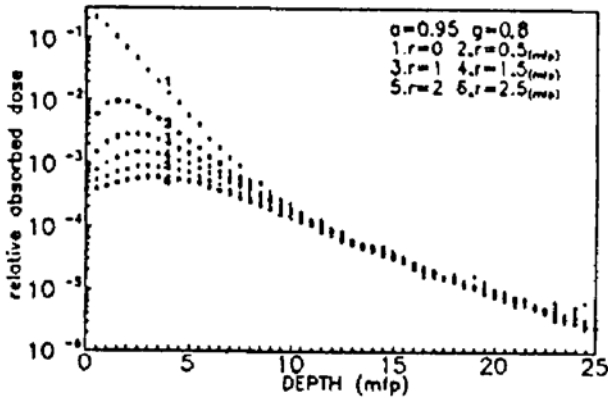


Fig. 3b The relative absorbed dose as a function of depth

Fig. 3c The relative absorbed dose as a function of depth

图 4 是两种光学特性组织模型在准直光入射时其内部光吸收剂量等值线的分布情况. 图中 e^{-3}, e^{-4} 等数值是指内部各处单位体积吸收剂量与光源入射剂量比例值. 从图中可以看到准直入射光对特定组织的有效作用范围. 如果在光动力疗法中把 e^{-5} 线作为有效作用范围, 则根据此图即可知道此线所包围体积是否已合乎治疗所要求的有效作用体积. 因此, 类似的图线将为临床治疗方案设计和光剂量的计算提供非常有用依据. 由图 4 各图也可以看到, 当 g 因子相同时, 同一比例的等值线在组织中处于比较相似的位置, 但对不同的 g 因子, 其位置差异较大. 由此也可见, g 因子是临床治疗、实验研究中的一个重要数据.

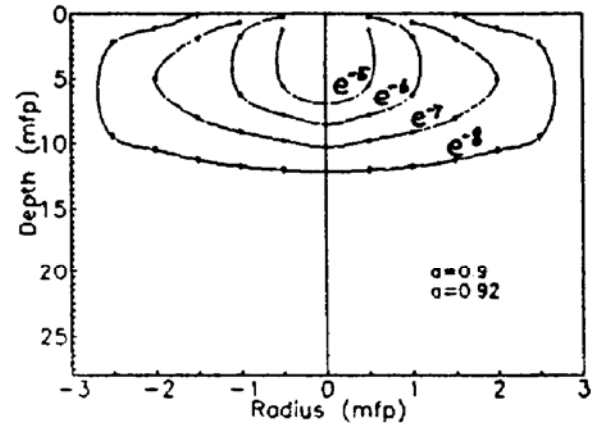
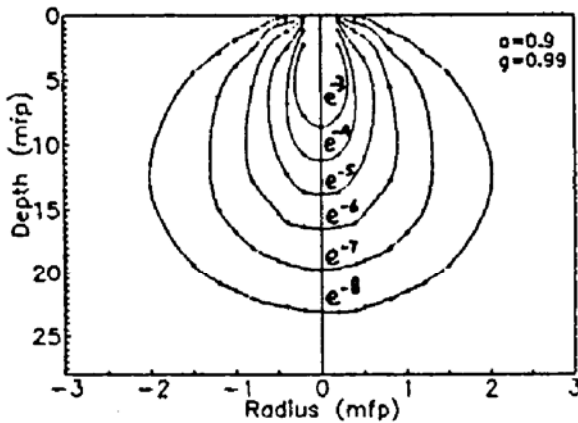


Fig. 4a The isodose line of internal absorption

Fig. 4b The isodose line of internal absorption

4 实验检验

在准直光照射下, 组织表面漫反射几率分布一方面是组织光学参量的反映, 另一方面也是组织内部光吸收剂量的间接反映. 因此, 可以通过验证表面漫反射几率分布来证明上述算法和结果的正确性.

鉴于用活体生物组织做实验的困难, 采用生物组织的光学模拟体来作为实验材料. 实验框图如图 5 所示. 组织模拟体选用脂肪乳剂, 其光学特性参数^[8]是 $\mu_s = 1.132, \mu_a = 0.01, g = 0$. 将一定量的脂肪乳剂置于大小合适的容器中. 探测头置于液面上. 准直光源由中心垂直入射, 探测头由中心沿液面横向移动测量表面漫反射率的分布. 其实验结果和用蒙特卡罗方法数值计算的结果之比较见图 6 所示. 从图 6 中可以看到, 两者吻合得非常好. 说明本文成功地运用蒙特卡罗法模拟了光子在组织中的运输过程.

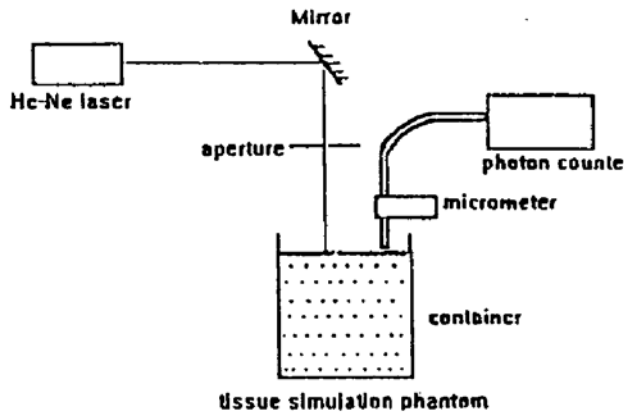


Fig. 5

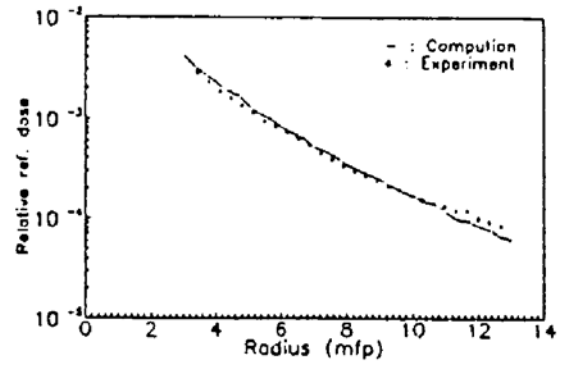


Fig. 6 The results of exp. compared with computation

参 考 文 献

- [1] Giovanni Zaccanti, Monte carlo study of light propagation in optically thick media; point source case. *Appl. Opt.*, 1991, **30**(15): 2031~2041
- [2] Stephen T. Flock, Monte carlo modeling of light propagation in highly scattering tissue-I; model predictions and comparison with diffusion theory. *IEEE Trans. Biomed.*, 1989, **36**: 1162~1168
- [3] A. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media*. Academic Press, USA, 1978, **1**: 175~182
- [4] B. C. Wilson, G. Adam, A monte carlo model for the absorption and flux distributions of light in tissue. *Medical Physics*, 1983, **10**(6): 824~830
- [5] S. A. Prahl, M. Keijzer, et al., A monte carlo model of light propagation in tissue. *SPIE Institute Series*, 1989, **IS-5**: 102~111
- [6] R. R. Meier, J. S. Lee et al., Atmospheric scattering of middle UV radiation from an internal source. *Appl. Opt.*, 1978, **17**(20): 3216~3225
- [7] R. F. Bonner, R. Nossal et al., Model for photon migration turbid biological media. *J. Opt. Soc. Am.*, 1987, **A4**: 423~432
- [8] Wei Sun, J. Li, W. Y. Li et al., Diffuse reflection measurements determining optical properties of tissues. *Proc. SPIE*, 1992, **1645**: 216~228

Monte Carlo method study of light propagation in tissues

SUN Wei YING Jinpin LI Jiang LIN Yu

(Physics Department of ZheJiang University 310027)

(Received 20 January 1993; revised 22 March 1993)

Abstract

The light propagation in a slab tissue with a collimated beam normally incident upon is simulated by Monte Carlo method. The characters of absorbed dose distribution in tissues are presented. The computation model is based on the assumption that the refraction indexes of tissue and air are mismatch and both surfaces of the slab have the reflection effect for photons. The computation results are in good agreement with the experimental results.

Key words Monte Carlo method, distribution, absorption, scattering.