

文章编号: 0253-2239(2007)03-0510-5

用于偏振散射光谱术研究的并行蒙特卡罗程序*

鞠 珊 邓 勇 鲁 强 骆 清 铭

(华中科技大学生物医学光子学教育部重点实验室, 武汉光电国家实验室生物医学光子学研究部, 武汉 430074)

摘要: 偏振散射光谱术是一种新型的早期癌症无损光学检测技术。目前, 对这一技术的机理研究缺乏较好的理论手段。引入并行计算方法, 采用斯托克斯(Stokes)参量和米勒(Müller)矩阵分别描述光子包和介质的偏振特性, 实现了可用于模拟偏振散射光谱的并行偏振蒙特卡罗程序。程序基于消息传递接口(Message passing interface, MPI)并行开发平台, 采用主-从(Master-slaver)并行计算模型, 并用任务池方法实现动态负载平衡。混浊介质后向偏振散射光谱的模拟和实验结果对照证实了程序的正确性; 程序并行效率分析表明了程序在任务规模和节点规模上具有良好的可扩展性, 对于较大规模的任务, 使用 n 个从节点的模拟时间约为使用 1 个从节点模拟时间的 $1/n$ 倍。

关键词: 生物光学; 蒙特卡罗模拟; 并行计算; 偏振散射光谱术

中图分类号: Q63; O436.2 文献标识码: A

Parallel Monte-Carlo Program for Polarized Light Scattering Spectroscopy

Ju Shan Deng Yong Lu Qiang Luo Qingming

(Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Key Laboratory of Biomedical Photonics, Ministry of Education, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074)

Abstract: Spectroscopy of polarized light scattering is a novel technique prospected to diagnose precancerous lesions. However, a perfect theoretical method to study the mechanism of this technique is absent. With the parallel computing and Stokes-Müller formalism to describe the polarization of photon and media, respectively, a Monte-Carlo program, which can simulate the spectra of polarized light scattering, is developed. The program is designed with a master-slave architecture based on message passing interface (MPI), and a dynamic load balance is obtained via taskpool scheme. It has been validated by the comparison of polarized light backscattering spectra in turbid media between simulation and experiments. Furthermore, results show that this program can provide excellent scalability of task size and slaver number. For long-time required simulations, the computational time of using n slavers can be reduced as almost $1/n$ times of using 1 slaver.

Key words: biological optics; Monte-Carlo simulation; parallel computing; spectroscopy of polarized light scattering

1 引 言

癌症病理学研究表明超过 85% 的癌症源于上皮组织^[1]。这些癌症如能在早期得以诊断并治疗, 大部分患者可以痊愈。因此, 早期癌症的检测一直以来都是研究的热点。癌症的早期特性表现为上皮层内细胞核尺寸增大、核染色质增加。要检测到这些癌症的早期信号, 现在临床医学还不得不依靠病理切片、细胞涂片等组织活检手段。这种侵入式的随机活检往

往给患者带来很大的痛苦, 并且检测效率很低。光学方法因具有无创性, 所以特别适合于早期癌症检测^[1~9]。其中散射光谱术由于能够定量测量组织的结构和形态学参量, 因而受到了广泛关注。众多研究表明偏振光的散射光谱即偏振散射光谱术对上皮组织的光学性质特别敏感^[4~9], 如差分偏振散射光谱^[4~7](后向散射光的平行与垂直分量之差)能够重建上皮组织细胞核的尺寸分布和相对折射率, 并用于

* 国家自然科学基金(30470460)资助课题。

作者简介: 鞠 珊(1981-), 女, 重庆人, 硕士研究生, 主要从事组织光学蒙特卡罗模拟研究。E-mail: jushan2000@163.com

导师简介: 鲁 强(1973-), 男, 湖南宁乡人, 教授, 硕士生导师, 主要从事生物医学光子学方面的研究。

E-mail: luqiang@mail.hust.edu.cn

收稿日期: 2006-06-01; 收到修改稿日期: 2006-09-01

早期癌症检测；偏振比光谱能够有效判别约化散射系数相同并且组成非常相似的混浊介质^[8]。

目前,对偏振散射光谱术的研究集中于各类癌症早期诊断的实验研究^[4~9],对于检测机理的深入探讨则相对较少,很多基本的问题都缺乏切实分析。由于生物组织的高散射性,目前还缺乏用于研究偏振散射光谱术机理的有效理论方法。蒙特卡罗模拟是一种高精度、易于使用的用于研究光在混浊介质中传输的常用方法,但是由于受计算资源的限制,传统的串行蒙特卡罗方法如非偏振蒙特卡罗模拟程序 MCML^[14]和偏振蒙特卡罗模拟程序^[12]无法用于光谱研究。为此,本文引入并行计算方法,基于消息传递接口(Message passing interface, MPI)并行程序开发平台,采用主-从(Master-slaver)并行结构和任务池进行任务动态分配,实现了可用于模拟偏振散射光谱的并行偏振蒙特卡罗程序,从而为偏振散射光谱术的机理性研究提供了一种有效的手段。

2 方 法

2.1 介质光学参量计算

介质的光学性质由以下参量描述:折射率 n , 散射系数 μ_s , 吸收系数 μ_a , 相函数 $p(\theta, \phi)$ 和单次散射米勒矩阵 $M(\theta)$, 其中 θ 表示散射角, ϕ 表示方位角。模拟中,介质为小球悬浮液,其中小球直径满足均值为 d , 方差为 Δd 的高斯分布,单层粒子可满足多高斯分布。对于含有 N 种不同粒子的介质,其等效光学参量由以下式子给出,其中单个粒子的光学参量则由米氏理论^[10]计算:

$$\begin{cases} \mu_x = \sum_{i=1}^N \mu_{x,i}, & (\mu_x \text{ 表示 } \mu_s, \mu_a), & (1) \\ p(\theta, \phi) = \sum_{i=1}^N p_i(\theta, \phi) \mu_{s,i} / \left(\sum_{i=1}^N \mu_{s,i} \right), & (2) \\ M(\theta) = \sum_{i=1}^N M_i(\theta) \mu_{s,i} / \left(\sum_{i=1}^N \mu_{s,i} \right), & (3) \end{cases}$$

相函数 $p(\theta, \phi)$ 和米勒矩阵 $M(\theta)$ 满足如下归一化:

$$\begin{cases} \int_{4\pi} p(\theta, \phi) d\Omega = 1, & (4) \\ 2\pi \int_0^\pi m_{11}(\theta) \sin \theta d\theta = 1. & (5) \end{cases}$$

2.2 光子包散射描述

对于单个光子包,用 4 个变量描述其状态: w 表示光子包的强度,初始化为 1,随着吸收而减少; $(x, y, z)^T$ 表示光子包在全局坐标系中的位置;单位向量组 (e_s, e_p, e_r) , $e_s \times e_p = e_r$ 分别表示光子包的垂直、平行分量方向和运动方向; $S \equiv (I, Q, U, V)^T$ 表示光子包的斯托克斯参量。

对于单次散射,其散射前方向矢量 (e_s, e_p, e_r) 与散射后方向矢量 (e'_s, e'_p, e'_r) 的关系如下(图 1),其中散射角 θ 和方位角 ϕ 由相函数 $p(\theta, \phi)$ 确定, p_n 表示第 n 次散射平面,具体方法见文献^[11]。

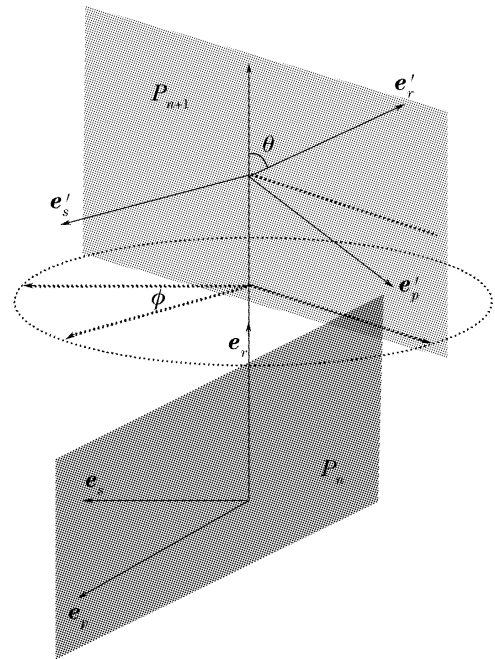


图 1 单次散射的方向变换

Fig. 1 Change of directions caused by single scattering

$$[e'_s, e'_p, e'_r] = [e_s, e_p, e_r] \begin{bmatrix} \cos \phi & -\cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \sin \phi \\ \sin \phi & \cos \theta \cos \phi & \sin \theta \cos \phi \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (6)$$

散射前后斯托克斯参量关系如下:

$$S' = M(\theta)R(\phi)S, \quad (7)$$

其中 $R(\phi)$ 表示旋转矩阵,

$$R(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\phi & -\sin 2\phi & 0 \\ 0 & \sin 2\phi & \cos 2\phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

当波长小于 650 nm 时,不同组织模型的差分偏振散射光谱非常相近;当波长大于 650 nm 时,光谱之间的差别较大,振荡频率随着大粒子浓度的增加而增加,波峰由 4 个增加至 9 个。由此可见,差分偏振散射光谱对粒子尺寸非常敏感,即小部分粒子尺寸的改变能够引起光谱的较大变化。

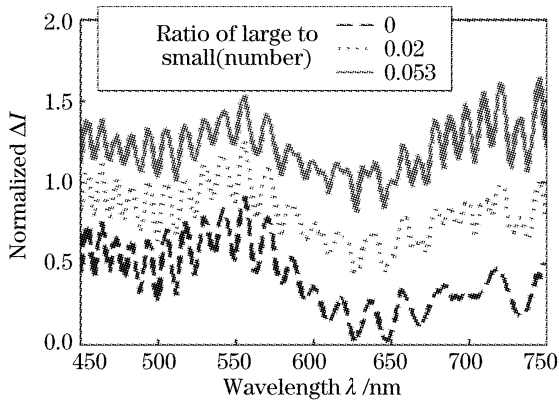


图 4 不同组织模型光谱

Fig. 4 Simulated spectra of different tissue models

3.2 程序并行效率分析

程序的并行效率可由程序对任务规模和节点规模的扩展性来衡量。对于相同的介质,计算任务的规模由模拟光子数衡量。模拟时间是指从提交任务到结果文件输出之间的时间间隔。为了消除网络涨落的影响,每个数据都是 3 次测试的平均值,并且测试时所有节点均无其它计算任务。

以单个光子的平均模拟时间衡量程序对任务规模的可扩展性^[13]。由图 5 可知,对于不同模拟光子数的任务,单个光子的平均模拟时间比较稳定,表明程序对任务规模的可扩展性良好。随着模拟光子数的减少,虽然从节点的计算时间减少,但是由于程序中串行部分的执行时间几乎不变,因此单个光子的平均模拟时间呈现逆向增长的趋势。

节点规模由从节点的数目衡量,用加速比衡量程序对节点规模的可扩展性^[13],加速比定义为 $S_p = t_1/t_n$, t_1 表示使用 1 个从节点所用模拟时间, t_n 表示

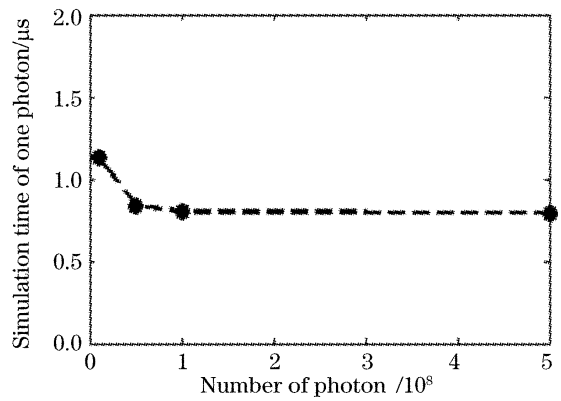


图 5 任务规模的可扩展性(8 个从节点)

Fig. 5 Scalability in task size (8 slavers)

使用 n 个从节点所用模拟时间。表 1 给出了各个任务的输入参量和分别用 1、16 个从节点模拟所需的计算时间(均值±标准偏差)以及相应的加速比。随着模拟光子数和组织厚度的增加即任务规模的增加,加速比约为理想值 16 即使用 n 个从节点的模拟时间约为使用 1 个从节点模拟时间的 $1/n$ 倍。图 6 为表 1 对应的加速比曲线,由图可知,加速比趋近理想值。随着从节点数增多,虽然各从节点的计算时间减少,但是由于任务规模恒定,单个任务粒度减少,从而使计算时间与通信时间比降低,因此实际加速比小于理想值。同时,加速比随着任务规模的增加而更接近理想值。

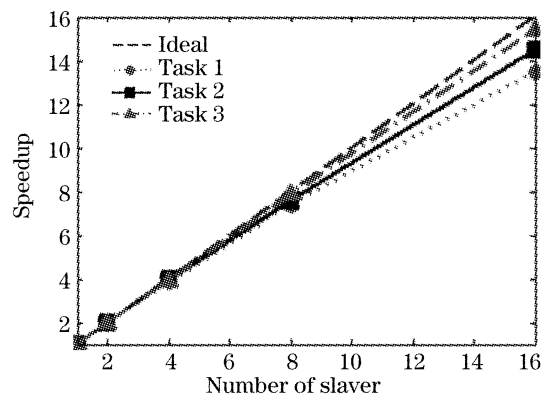


图 6 从节点规模的可扩展性

Fig. 6 Scalability in number of slavers

表 1 模拟使用 1 个和 16 个从节点的计算时间对比

Table 1 Comparison between computational times of using 1 and 16 slavers

Task	Number of photons / $\times 10^8$	Optical thickness τ	Elapsed time (1 slaver) (h:min:s)	Elapsed time (16 slavers) (h:min:s)	Speedup
Task1	0.5	1	00:05:24±00:00:03	00:00:24±00:00:01	13.7±0.5
Task2	1.0	1	00:10:46±00:00:06	00:00:45±00:00:00	14.3±0.1
Task3	1.0	20	05:12:07±00:02:00	00:20:18±00:00:20	15.4±0.2

4 结 论

本文实现了可用于研究偏振散射光谱的并行偏

振蒙特卡罗程序,该程序基于集群环境的信息传递接口平台。介质为小球悬浮液,其光学参量由米氏

理论计算。斯托克斯参量和米勒矩阵用于描述光子包和介质的偏振特性。在并行处理上,采用主-从模型,主节点负责任务划分、任务分配和结果处理,从节点模拟光子包迁移;在任务分配上,采用任务池方法实现了动态负载平衡。程序模拟了聚苯乙烯小球水溶液的后向偏振散射光谱,模拟结果与实验结果一致,验证了程序的正确性;同时不同大小粒子比模型的偏振散射光谱说明了偏振散射光谱对粒子尺寸的敏感性,特别是在波长 650~750 nm。最后给出单个光子平均模拟时间和加速比,结果表明程序在任务规模和节点规模上具有良好的可扩展性,特别适合于任务规模较大的模拟。

参 考 文 献

- 1 Yong Deng, Qiang Lu, Qingming Luo. Determining particle size distribution and refractive index in a two-layer tissue phantom by linearly polarized light[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2006, **4**(1): 45~48
- 2 Lu Qiang, Zeng Shaoqun, Luo Qingming *et al.*. Monte Carlo simulation for MPE fluorescence microscopy in turbid media [J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, **21**(9): 1073~1078 (in Chinese)
鲁 强,曾绍群,骆清铭等. 混浊介质多光子激发荧光显微成像的蒙特卡罗模拟[J]. *光学学报*, 2001, **21**(9): 1073~1078
- 3 Lu Qiang, Zeng Shaoqun, Luo Qingming *et al.*. Rapid modeling of MPE microscopic imaging through turbid medium[J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, **21**(12): 1509~1512 (in Chinese)
鲁 强,曾绍群,骆清铭等. 混浊介质多光子激发显微成像的快速模型[J]. *光学学报*, 2001, **21**(12): 1509~1512
- 4 Rajan S. Gurjar, Vadim Backman, Lev T. Perelman *et al.*. Imaging human epithelial properties with polarized light scattering spectroscopy [J]. *Nature Medicine*, 2001, **7**(11): 1245~1248
- 5 Young L. Kim, Yang Liu, Ramesh K. Wali *et al.*. Simultaneous measurement of angular and spectral properties of light scattering for characterization of tissue microarchitecture and its alteration in early precancer[J]. *IEEE J. Sel. Quantum Electron.*, 2003, **9**(2): 243~256
- 6 V. Backman, M. B. Wallace, L. T. Perelman *et al.*. Detection of preinvasive cancer cells [J]. *Nature*, 2000, **406** (brief communications): 35~36
- 7 Vadim Backman, Rajan Gurjar, Kamran Badizadegan *et al.*. Polarized light scattering spectroscopy for quantitative measurement of epithelial cellular structures in situ[J]. *IEEE J. Sel. Quant. Electron.*, 1999, **5**(4): 1019~1026
- 8 T. M. Johnson, J. R. Mourant. Polarized wavelength-dependent measurements of turbid media [J]. *Opt. Express*, 1999, **4**(6): 200~216
- 9 Konstantin Sokolov, Rebekah Drezek, Kirk Gossage *et al.*. Reflectance spectroscopy with polarized light: is it sensitive to cellular and nuclear morphology [J]. *Opt. Express*, 1999, **5**(13): 302~317
- 10 Craig F. Bohren, Donald R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* [M]. New York: Wiley, 1983. 82~129
- 11 Qiang Lu, Qingming Luo. On phase function of Monte Carlo simulation of light transport in turbid media[C]. *Proc. SPIE*, 2003, **5254**: 122~130
- 12 Jessica C. Ramella-Roman, Scott A. Prahl, Steve L. Jacques. Three Monte Carlo programs of polarized light transport into scattering media: part I [J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(12): 4420~4438
- 13 Liang Feng, Lu Qiang, Zeng Shaoqun. A parallel volume rendering algorithm based on MPI[J]. *Computer Engineering*, 2005, **31**(13): 171~173 (in Chinese)
梁 峰,鲁 强,曾绍群. 一种基于 MPI 的并行体绘制算法[J]. *计算机工程*, 2005, **31**(13): 171~173
- 14 Lihong Wang, Steven L. Jacques, Liqiong Zheng. MCML-Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues[J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 1995, **47**: 131~146