

文章编号:1004-4213(2010)04-0669-6

基于 QLF 原理的龋齿探测方法中光学参量变化分析

王守涛,陈庆光,林斌[†],曹向群

(浙江大学 a. 现代光学仪器国家重点实验室; b. 国家光学仪器工程技术研究中心, 杭州 310027)

摘要:通过建立完整的病变牙齿模型和龋齿病变程度判据,利用蒙特卡罗仿真算法编程,完整模拟了牙齿组织中荧光的激发和传输过程,探讨了牙齿组织病变程度引起的光学参量变化与 QLF 荧光分布的关系.同时,利用 Tracepro 软件的荧光仿真功能验证了该过程的合理性.结果表明:随着龋齿部分病变程度增大,散射系数增大,吸收系数和荧光量子效率减小,健康组织和病变组织荧光分布差异增大.

关键词:QLF;蒙特卡罗;Tracepro;散射系数;吸收系数;荧光量子效率

中图分类号:O436

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103904.0669

0 引言

自 20 世纪 80 年代,定量光导荧光作为一种检测早期釉质龋变的光学技术正式提出以来,经过近 30 年的发展,该技术在早期龋齿检测中的应用前景不断明朗.2002 年,荷兰 Inspektor Research System 公司基于该原理开发出的 Inspektor 仪器商用化以后^[1],很多科研院所和临床机构以此仪器为平台进行研究和诊断,对早期龋齿的检测和治疗起了巨大的推动作用.

定量光导荧光技术(Quantitative Light-induced Fluorescence, QLF)是一种利用牙齿的自体荧光效应而发展起来的龋齿早期检测技术,目前在实验研究和临床验证方面均是热点.其工作原理是:牙齿在一定波长入射光作用下激发出荧光,荧光在组织体内部经过多重散射,最终在牙齿表面形成一定的光强相对分布.对于龋齿而言,由于脱矿而导致组织体内部光学参量改变,使此区域出射荧光强度小于周围健康组织,呈现暗斑.分析获取的荧光图像,实现对龋齿的检测与动态诊断.该技术由于具有无损性、可定量、快速实时、交互性强等优点,成为最有发展前景的龋齿早期检测光学方法.但目前对定量光导荧光技术应用于龋齿检测的研究主要集中于临床病例的研究,侧重于定性分析,缺乏光学基础理论的探讨.本文基于生物组织光学理论,利用改进的蒙特卡罗算法模拟了光导荧光的激发和传输过程;提出一种定量判断龋齿病变程度的仿真判据,能定量分析不同光学参量与 QLF 早期龋齿探测结果的

依存关系,结果与现有文献报道定量光导荧光对早期龋齿探测的结论完全吻合.从理论上系统解释了 QLF 探测早期龋齿的原理.

Tracepro 是内核基于蒙特卡罗算法,普遍用于照明系统,光度分析、辐射度分析及荧光特性分析的光线模拟软件,本文运用该软件的荧光分析功能模拟了不同光学参量变化对组织荧光辉度分布的影响,获得的结论与前期算法编程得到的结果相吻合.进而完成对该算法的合理性和定量光导荧光探测早期龋齿结论的验证.

1 理论模型

目前,描述激光能量在组织内的传输规律主要有两种理论:一是解析理论,即麦克斯韦方程组,由于其求解过程比较复杂,很少得到应用;另一理论是输运理论,即光子传输满足

$$\frac{dJ(r,s)}{ds} = -(\mu_a + \mu_s)J(r,s) + \frac{\mu_s}{4\pi} \int p(s,s')J(r,s')d\omega'$$

式中, $J(r,s)$ ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{Sr}^{-1}$)为辐射强度,表示单位时间通过垂直于 s 方向上的单位投影面积单位立体角的能量. $d\omega'$ 为 s' 方向上的微元立体角, $p(s,s')$ 为光子从方向 s 上散射到 s' 上的相函数,通常采用 Henyey-Greenstein 散射相位函数^[2].

对于某一具体模型,输运方程的精确解很难获得,人们提出了 Kubelka-Munk 法、漫射近似法、有限差分法、有限元法及加倍法等各种方法来求解传输方程,但其求解是参量在一定范围内的近似.若将光波在散射介质中的传输看成光子输运问题,那么蒙特卡罗(Monte Carlo, MC)方法作为一种灵活的求解方法可以成功用于研究光子在混沌介质中的传播^[3].

[†] Tel:0571-87951962-8111

Email:wjlin@zju.edu.cn

收稿日期:2009-08-24

修回日期:2009-11-13

本文采用蒙特卡罗算法模拟光子在牙齿组织模型中的传播,设定健康牙齿组织为半无限大的长方体模型,横向尺寸与光束半径相比可视为无限大,纵向深度 $Z=1$;病变龋齿部分定义为嵌套在其中的小长方体模块,横向半宽分别为 $X=5, Y=5$,纵向深度 $Z=0.5$;采用几何形状为正方形的均匀光源照明. 本文出现的无量纲数值均代表物理量大小相对值. 健康组织和病变组织具体光学参量大小按照临床实际牙齿的参量设定,将在 3.1 部分分别进行详细说明.

2 蒙特卡罗算法

2.1 算法简介

蒙特卡罗方法是一种统计模拟随机抽样的方法. 在计算机技术高度发展的今天,因其特有的灵活性已广泛用于模拟各种输运现象,解决各种物理问题. 蒙特卡罗模拟的基本思想是:利用随机抽样原理获得描述物理规律的随机抽样函数,并用随机数获取参量的概率分布,通过对模型或过程的多次抽样试验来计算所求参量的统计特征. 该方法用于模拟生物组织中的光传输,为解决生物混沌介质中的光传输问题提供了一个既灵活又不失严格的切实可行的方法^[3],目前已成为描述生物组织中光子分布的有效方法.

1995 年, Lihong Wang 等人在对多层生物组织光分布研究中,系统阐述了蒙特卡罗方法在生物组织光学领域中的应用过程,开发出仿真软件 MCML,并首次公开了其算法源码^[4],使该算法在生物组织光学中的应用得到进一步扩展. 但是,基于该算法进行龋齿荧光强度仿真分布的研究还未见有报道,本文在参考 Wang 等人算法源码基础上,引入荧光激发机制完整模拟荧光的激发和传输过程,并首次将该算法应用到 QLF 的理论研究,得到比较理想的结果.

2.2 仿真步骤

蒙特卡罗算法仿真光在生物组织中的具体步骤为^[5-6]:

设置坐标系,本文采用均匀方形光束垂直入射牙面,入射方向向下,并将牙面定义为 xOy 平面,如图 1.

进行光子初始化,设定光子在 $Z=0$ 的牙面入射, X, Y 坐标初始化为牙面设定范围内的某个随机值,初始权重预设为 1. 在自由程范围内,光子不与组织发生相互作用,传播方向由随机分布的经纬角决定,传播自由程大小由 $L = -\ln \xi / \mu_t$ 决定,式中 ξ 是 $(0, 1)$ 上均匀分布的随机数^[5], μ_t 是总的衰减系数,定义为散射系数和吸收系数之和;自由程范围之外,光子与组织主要存在散射和吸收两个相互作用过程,每个过程的作用大小分别由散射系数 μ_s 和吸收系数 μ_a 决定,

是否发生散射或者吸收由随机数与反照率 $\delta = \mu_s / (\mu_s + \mu_a)$ 的相对大小决定. 散射后,光子的位置和权重进行更新;吸收后,物质将会按照一定概率产生荧光,产生的荧光光子经初始化按照与激发光相同的规律进行传播. 本文只考虑了荧光的一次激发过程. 最后判断光子更新后的位置是否跃出组织的边界,进行反射和折射更新;判断更新后的权重是否小于阈值,如果满足终止条件则终止光子的传输,否则进入下一个光子的传输,直到最后一个光子完成传输过程. 统计出射位置,对结果进行分析.

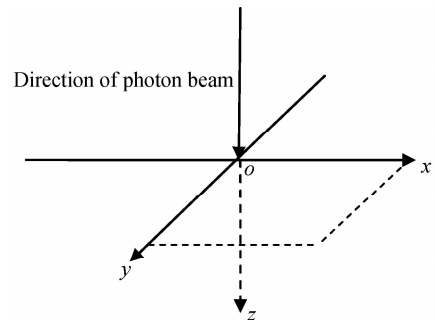


图 1 蒙特卡罗仿真坐标系

Fig. 1 Monte-Carlo simulation coordinate system

2.3 仿真流程图

蒙特卡罗仿真 QLF 荧光分布算法具体流程图如图 2.

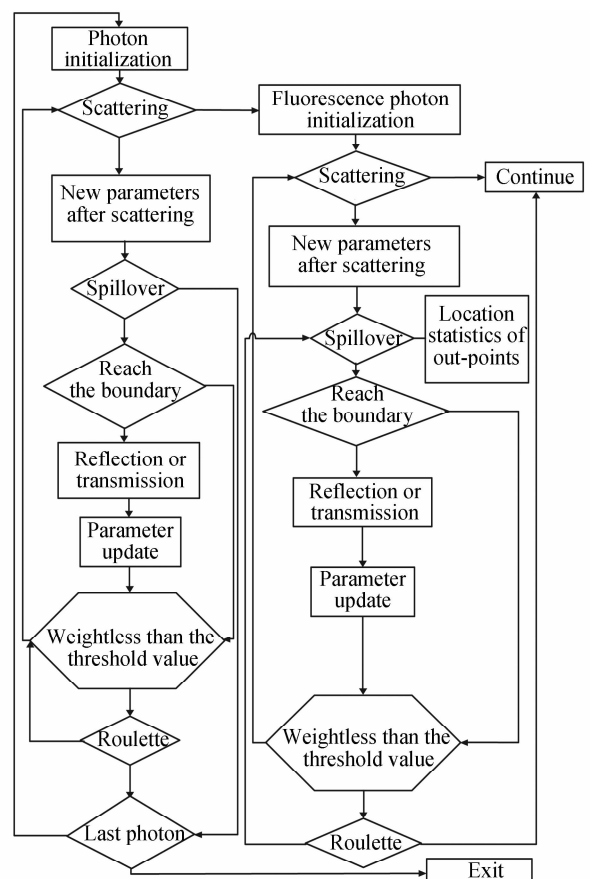


图 2 蒙特卡罗算法仿真 QLF 流程

Fig. 2 Flowchart of Monte Carlo algorithm to simulate QLF

3 模型和结果

3.1 模型与参量设置

依据相关文献[7]报道的牙釉质光学参量,仿真过程设定的组织光学参量如表 1.

蒙特卡罗仿真采用正方形的均匀光源照射牙面,照射面面积 10×10 ; Tracepro 采用面积为 10×10 ,光线数 200×200 的栅格光源照射牙面.

表 1 不同组织光学特性参量设置

Table 1 Optical properties parameters of different tissues

Optical parameter	Tissue	Health tissue	Carries tissue
μ_n /mm		3.0	5.0
μ_s /mm		10.0	30.0
Refractive index		1.62	1.5
Quantum efficiency		0.2	0.1
Anisotropic factor		0.95	0.95

3.2 仿真结果

采用 vc++6.0 工作平台,用 c 语言编程,结合 matlab 画图,得到 100 万个光子入射时,得到接收面的荧光分布图如图 3.

3.2.1 健康组织与龋变组织荧光分布图

图 3 灰度值较大部分是由出射的荧光光子叠加组成,灰度值越大,表示荧光光强越强,反之光强越弱.图 3 表示健康组织和龋变组织的荧光分布,图 3

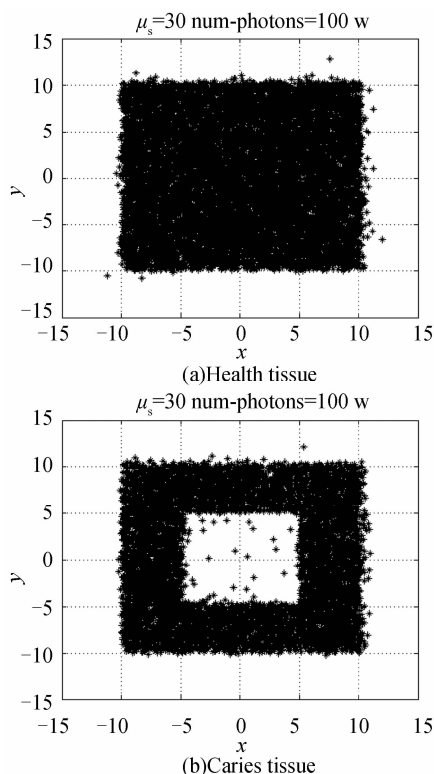


图 3 蒙特卡罗仿真健康和龋变组织荧光分布图

Fig. 3 Fluorescence distribution of Monte Carlo simulation of health and caries lesion tissue

(b)中间空白部分光子密度稀疏,在荧光图像上表现为明显的暗斑.

图 4 左面栅格部分代表不同荧光强度的分级标准;右面部分代表接收面不同荧光强度的分布情况.对比图 4(a)健康组织的均匀分布图,图 4(b)龋变组织在中央出现明显的暗区.

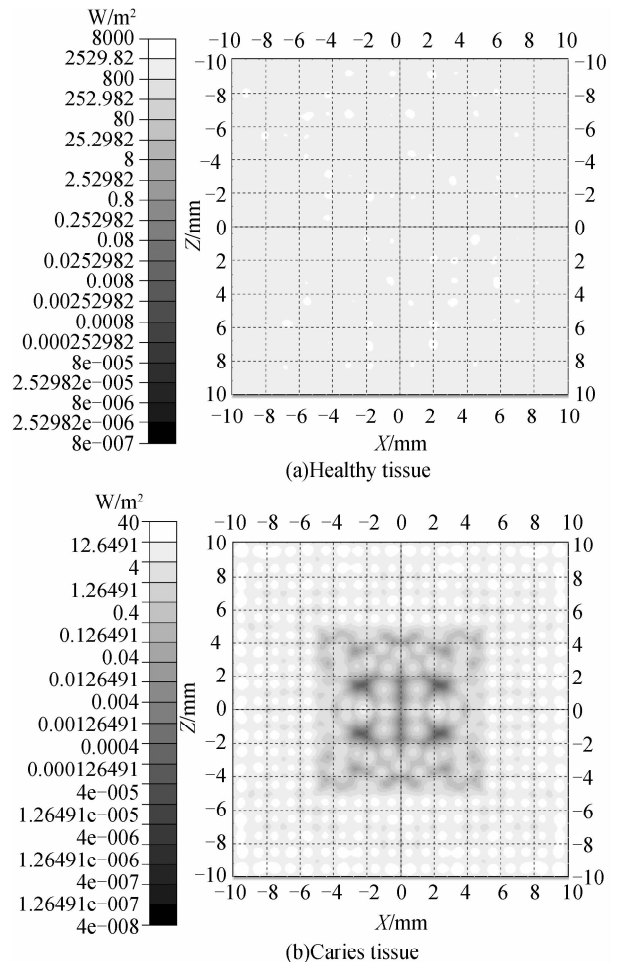


图 4 Tracepro 仿真健康和龋变组织荧光辉度分布图
Fig. 4 Fluorescence luminance map of Tracepro to simulate healthy and caries tissue

3.2.2 不同光学参量对荧光分布的影响

目前,QLF 技术定量描述龋齿病变程度的参量定义为荧光损失量 $\Delta Q = \Delta F \times \Delta S$,其中 ΔF 为依据暗斑周围健康组织重构出病损区的平均荧光强度与暗斑实际荧光强度的差值, ΔS 为暗斑的面积. ΔQ 越大,代表龋变的程度越严重,以此来定量描述龋齿的病变程度.由于 ΔS 主要受龋齿病变区域大小的影响,本文采用的模型中龋齿病损区域已确定,该物理量大小对不同龋齿不发生变化,因此忽略掉 ΔS 的影响,只考虑 ΔF . 根据实际的物理意义,本文将 ΔF 定义为健康组织和龋变组织出射表面背向

散射荧光光子平均权重的差值,即 $\Delta W = \frac{\sum W_{\text{health}}}{S_{\text{health}}} - \frac{\sum W_{\text{caries}}}{S_{\text{caries}}}$,式中, $\sum W_{\text{health}}$, $\sum W_{\text{caries}}$ 分别代表健康组织

和龋变组织出射表面背向散射荧光光子权重和, $S_{\text{health}}, S_{\text{caries}}$ 分别为健康组织和龋变组织的面积. 该物理量代表不同区域荧光权重的差值, 可以定量描述龋齿的病变程度.

用蒙特卡罗算法编程, 保持其他变量与健康组织相同的情况下, 分别得到特定光学参量与 ΔW 分布的定量曲线关系图; 同时利用 Tracepro 仿真分析得到不同光学参量变化时荧光分布辉度图, 与定量分布曲线图做对比.

1) 散射系数与荧光分布关系

图 5(a) 横坐标为龋变组织不同散射系数值, 纵

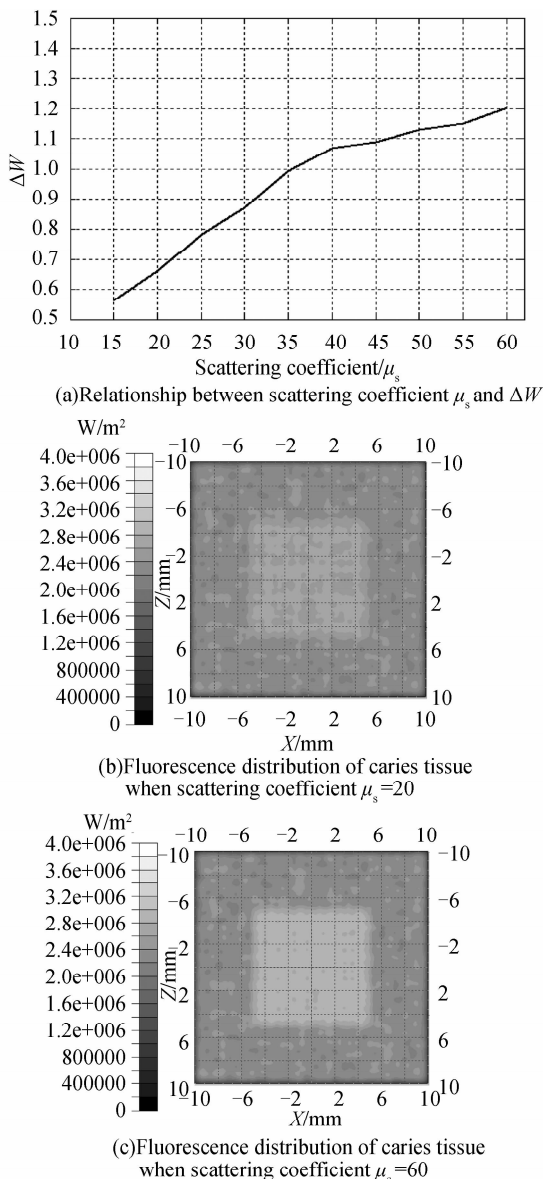


图 5 龋变组织散射系数 μ_s 与荧光分布关系

Fig. 5 Relationship between scattering coefficient of caries tissue and fluorescence distribution

坐标为相应 ΔW 的值, 代表 ΔW 随散射系数的分布变化曲线. 根据 ΔW 的定义, 该图定量反映散射系数与龋齿病变程度的关系. 图 5(b) 和 (c) 为 Tracepro 软件仿真时, 选取两个不同散射系数得到

的龋变组织荧光分布图, 定性说明了不同散射系数与荧光分布的关系.

2) 吸收系数与荧光分布关系

图 6(a) 横坐标为龋变组织不同吸收系数值, 纵坐标为相应 ΔW 的值, 代表 ΔW 随吸收系数的分布变化曲线. 根据 ΔW 的定义, 该图定量反映吸收系数与龋齿病变程度的关系. 图 6(b) 和 (c) 为 Tracepro 软件仿真时, 选取两个不同吸收系数得到的龋变组织荧光分布图, 定性说明了不同吸收系数与荧光分布的关系.

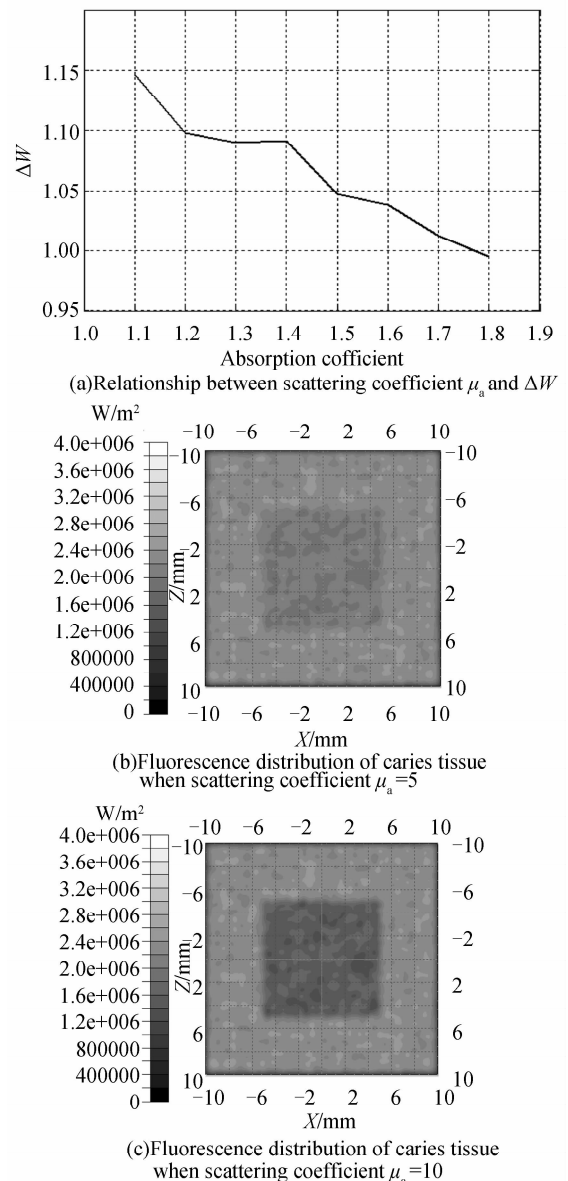


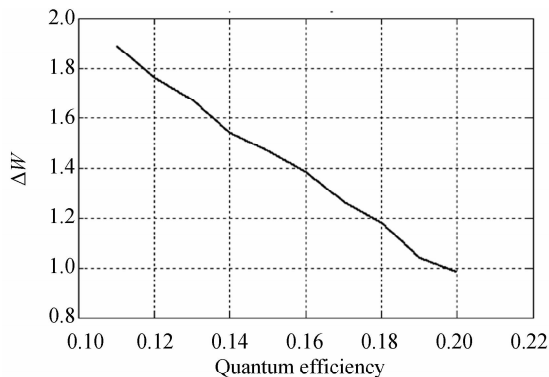
图 6 龋变组织吸收系数 μ_a 与荧光分布关系

Fig. 6 Relationship between absorption coefficient of caries tissue and fluorescence distribution

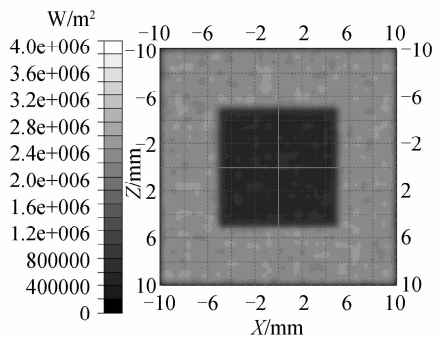
3) 荧光量子效率与荧光分布关系

图 7(a) 横坐标为龋变组织不同荧光量子效率值, 纵坐标为相应 ΔW 的值, 代表 ΔW 随荧光量子效率的分布变化曲线. 根据 ΔW 的定义, 该图定量反映了荧光量子效率与龋齿病变程度的关系. 图 7

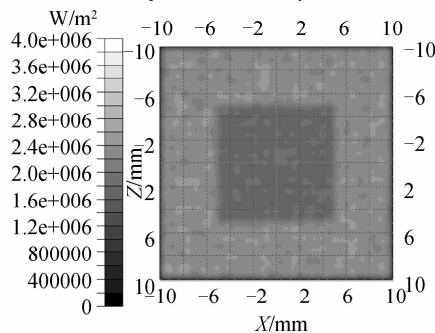
(b)和(c)为 Tracepro 软件仿真时,选取两个不同荧光量子效率得到的荧光分布图,定性说明了不同荧光量子效率与荧光分布的关系。



(a) Relationship between fluorescence quantum efficiency and ΔW



(b) Fluorescence distribution of caries tissue when quantum efficiency is 0.05



(c) Fluorescence distribution of caries tissue when quantum efficiency is 0.15

图7 龋变组织吸收系数 μ_a 与荧光分布关系

Fig. 7 Relationship between quantum_efficiency of caries tissue and fluorescence distribution

3.3 结果分析

图 3(a)和(b)、图 4(a)和(b)分别利用蒙特卡罗算法编程和 Tracepro 软件仿真,定性说明了健康组织与龋变组织荧光分布上的差异,论证了利用 QLF 探测早期龋齿的现实可行性。

不同光学参量对 QLF 探测早期龋齿结果的分析为:

1) 散射系数:在有效的生物组织参量范围内,牙齿龋变部分脱矿,散射微孔增加,导致散射系数增加,对激发光的吸收减少,产生的荧光变少,从而在荧光图上出现明显的暗斑^[8]。图 5 验证了该结论,同时,图 5(a)曲线进一步表明:健康组织散射系数保

持为确定值的前提下,随着龋变组织病变程度加深,散射系数增大,健康组织与龋变组织差异增大, ΔW 随之增大,定量说明了上述变化趋势;图 5(b)和(c)分别选取 $\mu_s=20, \mu_s=60$ 两个模型的荧光辉度图说明随着龋变部分散射系数增大,荧光分布图上健康组织与龋变组织荧光强度差异增大的变化趋势。

2) 吸收系数:随着龋变部分脱矿物质减少,吸收系数减小,激发光吸收率下降,产生的荧光变少,导致荧光图上暗斑的出现。图 6 验证了该结论,同时,图 6(a)曲线进一步表明:健康组织吸收系数保持为确定值的前提下,随着龋变组织病变程度加深,吸收系数减小,健康组织与龋变组织差异增大, ΔW 随之增大,定量说明了上述变化趋势;图 6(b)和(c)分别选取 $\mu_a=5, \mu_a=10$ 两个模型的荧光辉度图说明随着龋变部分吸收系数减小,荧光分布图上健康组织与龋变组织荧光强度差异增大的变化趋势。

3) 荧光量子效率:由于龋齿部分脱矿,产生荧光的羟基磷灰石减少,导致荧光效率减小,产生荧光减少,荧光图上出现明显暗斑。图 7 验证了该结论,同时,图 7(a)曲线进一步表明:健康组织荧光量子效率保持为确定值的前提下,随着龋变组织病变程度加深,荧光量子效率减小,健康组织与龋变组织差异增大, ΔW 随之增大,定量说明了上述变化趋势;图 7(b)和(c)分别选取荧光量子效率 quantum_efficiency=0.05, quantum_efficiency=0.15 两个模型的荧光辉度图说明随着龋变部分荧光量子效率减小,荧光分布图上健康组织与龋变组织荧光强度差异增大的变化趋势。

本文同时采用算法编程和 Tracepro 软件仿真并行的分析思路,不但应用 Tracepro 成熟的仿真功能验证了蒙特卡罗算法编程过程的准确性,而且可以系统说明 QLF 方法定量探测早期龋齿的理论依据,分析不同光学参量对探测结果的影响。

4 总结

目前,应用光学方法进行早期龋齿检测,已进入市场化的推广阶段。但由于龋变本身的复杂性,关于其探测机理的研究工作一直是很多科研机构研究的热点和难点。本文利用改进的蒙特卡罗算法研究了健康组织与龋变组织在荧光强度分布上的差异;探讨了龋变部分不同光学参量变化对 QLF 探测结果的影响;利用 Tracepro 验证了本文蒙特卡罗算法编程过程的合理性。为 QLF 探测早期龋齿提供初步系统的理论支持。

早期龋齿检测是一个全社会越来越关注的领域,利用光学方法进行早期龋齿的检测因其明显的

优势越来越受到重视.但是,由于牙齿荧光分布是散射、吸收、物质结构等多个因素相互作用的结果,实际牙齿本身表面不均匀分布等因素也会对结果产生很大的影响,使早期龋齿检测问题变的复杂.该课题的巨大市场需求对课题研究提出了更高的要求,在未来的工作中,还要从生物组织的物质结构变化机理和描述光子在其中传输的理论上作进一步深入研究创新.

参考文献

- [1] JIN Fang, LIN Bin, CAO Xiang-qun. The application of QLF technology in caries diagnosis[J]. *Optical Instruments*, 2008, **30**(2):44-47.
金芳,林斌,曹向群.定量光敏荧光技术在牙齿龋病诊断中的应用[J]. *光学仪器*, 2008, **30**(2):44-47.
- [2] YANG Lin, QIAN Sheng-you, HU Ai-ming, *et al.* Monte Carlo simulation of light absorption distribution in biological tissue for multi-beam light[J]. *Acta Laser Biology Sinica*, 2007, **16**(1):84-87.
杨林,钱盛友,胡爱明,等.蒙特卡罗模拟多束光辐照下生物组织中的光吸收分布[J]. *激光生物学报*, 2007, **16**(1):84-87.
- [3] XU Tang. Light propagation in biological tissue and measurements of the optical properties of tissue[D]. Tianjin: Nankai University, 2001:72-80.
- 许棠.生物组织中的光传输及生物组织光学特性参量测量的研究[D].天津:南开大学,2001:72-80.
- [4] WANG L H, STEVEN L J, ZHENG L Q, MCML-monte carlo modeling of light transport in multi-layered tissues [J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 1995, **47**(2):131-146.
- [5] LI Xi-rong, LIU Mu-hua, LI Jing, *et al.* Monte carlo simulates the light migration in fruit tissue[J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2007, **38**(6):103-105.
李细荣,刘木华,黎静,等.水果组织中光子传输的蒙特卡罗模拟[J]. *农业机械学报*, 2007, **38**(6):103-105.
- [6] SUN Ai-juan, TIAN Wei-jian, QU You-shan, *et al.* Simulation of light propagation in fiber optic taper by monte carlo method [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(4):552-554.
孙爱娟,田维坚,屈有山,等.锥形光纤中光波传输特性的蒙特卡罗模拟[J]. *光子学报*, 2006, **35**(4):552-554.
- [7] DARLING C L, HUYNH G D, FRIED D. Light scattering properties of natural and artificially demineralized dental enamel at 1 310 nm[J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2006, **11**(3):034023-1-034023-2.
- [8] YIN Wei. The application of QLF in clinic diagnosis and quantitative demineralization analysis [D]. Chengdu: Sichuan University, 2005:43-45.
尹伟.定量光导荧光技术在临床诊断和定量分析脱矿中的应用研究[D].成都:四川大学,2005:43-45.

Analysis of Changes in Optical Parameters in Methods to Detect Dental Caries Based on the Principle of QLF

WANG Shou-tao, CHEN Qing-guang, LIN Bin, CAO Xiang-qun

(a. State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation;

b. National Engineering Research Center for Optical Instrument, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: The complete pathological tooth model and the criterion of caries lesion extent are established. With the programme of Monte Carlo simulation algorithm, the process of fluorescence excitation and transmission in tooth tissue is completely simulated and the relationship between the changes of optical parameters caused by the tooth tissue lesions and fluorescence distribution of QLF is also explored. And, the legitimacy of the process above is verified using fluorescent functional of tracepro software. With the increase of lesion extent in dental caries part, the results show that the difference of fluorescence distribution between healthy and diseased tissue are increased with the increase of scattering coefficient and the reduce of absorption coefficient and fluorescence quantum efficiency.

Key words: QLF; Monte Carlo; Tracepro; Scattering coefficient; Absorption coefficient; Fluorescence quantum efficiency



WANG Shou-tao was born in 1984. Now, he is pursuing his M. S. degree at Zhejiang University. His main research interests focus on biomedical photonics.



LIN Bin was born in 1964, and obtained his Ph. D degree in 1995 from Zhejiang University. Now he is a professor and Doctoral Supervisor, and his research interests focus on photoelectrics, biomedical photonics, optical instrument etc.