

脉冲响应函数在 Monte Carlo 模拟中的应用研究*

李振华 来建成 王振东 贺安之
(南京理工大学应用物理系, 南京, 210094)

摘要: Monte Carlo 方法是研究复杂面光源入射条件下光在生物组织分布规律的唯一有效手段,但直接的 Monte Carlo 模拟存在计算量大、收敛速度慢的问题。通过引入生物组织脉冲响应函数的概念,利用卷积方法计算光在穿过组织一定深度后的分布规律,编制了相应的程序并进行了大量计算机模拟,在此基础上,提出了一种对模拟结果进行评价的方法,利用该方法分析了光源离散量与脉冲响应函数模拟量对光场分布计算结果的影响,证明基于脉冲响应函数的 Monte Carlo 模拟可以极大地提高计算效率和收敛速度。

关键词: Monte Carlo 模拟 脉冲响应函数 光传输 模拟结果评价

The application of impulse response function in Monte Carlo simulation of light distribution in biological tissues

Li Zhenhua, Lai Jiancheng, Wang Zhendong, He Anzhi

(School of Science, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing, 210094)

Abstract: Monte Carlo method is the only effective solution in the study of light distribution in biological tissues irradiated by a complex surface source. However, direct Monte Carlo simulation demands large computational capacity because of its low rate of convergence. In this paper, the concept of impulse response function in biological tissues is introduced, thus light distribution in certain depth of the biological tissue can simply be obtained by calculating the convolution of incident source function and the impulse response function. On the basis of computer simulation, a criterion is proposed to evaluate the results of Monte Carlo simulation. By means of the criterion, the influence of impulse response function and dispersed quantity of the light source is analysed comprehensively, which shows that the calculating efficiency is greatly improved by the introduction of impulse response function in Monte Carlo simulation of light distribution in biological tissues.

Key words: Monte Carlo simulation impulse response function light distribution simulating results evaluation

引 言

随着激光在医学中的广泛应用,“激光医学”已经成为一门新兴的科学,而“组织光学”(tissue optics)成为联系光学与生命科学的基础和桥梁。组织光学的中心内容就是研究光在复杂生物组织中的传输规律,这同样也是激光在疾病治疗与无创伤检测方面如:光动力疗法(PDT)、弱激光血液辐照疗法、激光手术、激光针灸、荧光检测等应用的理论基础。目前,已有的描述光在复杂生物组织中传输规律的理论方法可分为两大类,一类是解析法,如 Kubel-Munk 理论^[1]、漫射近似法^[2]和 Beer 吸收定理^[3]等;另一类是数值模拟法,主要采用 Monte

* 江苏省自然科学基金资助。

Carlo 模拟^[4,5]。所有的解析理论均是在一定的近似条件下得出的,与实际有较大的差距而且难以处理复杂面光源照射下的情况。Monte Carlo 模拟从理论上可以处理任何条件下的光传输问题,能得到更符合实际,精度更高的结果,是现在研究生物组织光传输问题的主流方法,但是在处理面光源与二维分布问题时受计算量的严重限制,而使其对面光源照射下光分布的二维问题无能为力。目前,大多集中于单点入射与一维情况,而对于面光源照射下的二维光分布的研究较少,对模拟结果也缺乏一种有效的评价方法。

我们针对 Monte Carlo 模拟的上述局限性,将均匀生物组织看成是一个线性空间不变系统,引入脉冲响应函数,利用卷积研究面光源照射条件下生物组织中光能量场的二维分布。通过模拟表明计算效率显著提高,较好的处理了复杂面光源照射下组织中的光传输问题。

1 理论模型

在通常的激光诊疗应用中,生物组织的横向尺寸一般远大于入射光束直径,因此,可以将生物组织看成是一个线性的平移不变系统,一个光子通过生物组织形成一个弥散的像分布函数,即本文中所述脉冲响应函数 $h(x, y)$,它可以表征该组织系统的传输特性。

根据线性系统理论^[6],在以函数 $f(x, y)$ 表示的面光源照射时,组织内某层面或透射面上的光能量场分布函数 $g(x, y)$ 可以由下面的卷积求得:

$$g(x_2, y_2) = \iint_{\infty} f(\alpha, \beta) h(x_2 - \alpha, y_2 - \beta) d\alpha d\beta = f(x_2, y_2) * g(x_2, y_2) \quad (1)$$

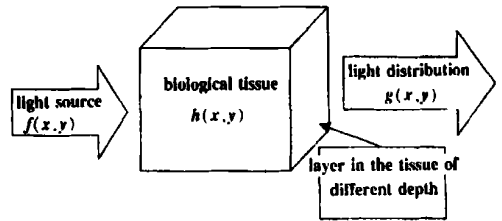


Fig. 1 System model of light propagation in the tissue

系统模型如图 1。

在分析了现有方法的基础上,我们采用了具有较好精度的 Monte Carlo 模拟^[4,7]来获得生物组织的脉冲响应函数 $h(x, y)$,同时利用呈高斯分布的随机数来模拟实际的理想激光光源。整个模拟过程的流程图如图 2。

2 模拟结果的评价方法

为了在实际计算中确定合理的光源离散量和模拟光子量,我们采用峰值相对误差

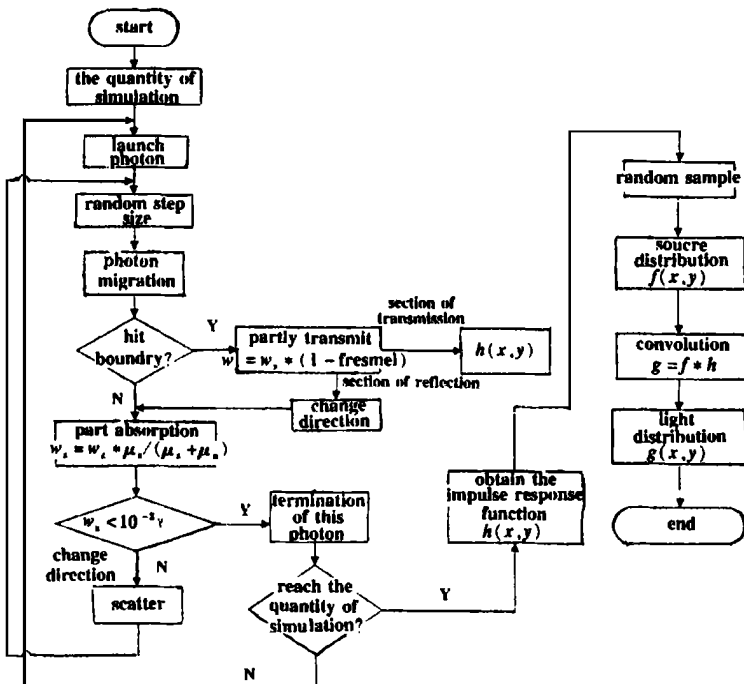


Fig. 2 The flow chart of the whole simulation

与平均相对误差来对模拟结果进行评价。

2.1 峰值相对误差判定

$$\eta_p = [\max(g') - \max(g)] / \max(g) \tag{2}$$

式中, g 为达到统计稳定的光场分布, g' 为某个中间计算结果。如果 $\eta_p < 5\%$, 则认为 g' 的收敛程度已达到实用要求。

2.2 平均相对误差判定

$$\eta_a = \frac{\sum_{i,j} |g'(i,j) - g(i,j)|}{\sum_{i,j} g(i,j)} \tag{3}$$

当 $g'(i,j) < 0.05 \max[g'(i,j)]$ 时有可能产生很大的误差, 而该点的光强在实际应用中已基本不起作用, 忽略这些点对实际结果没有影响。若 $|g'(i,j) - g(i,j)| / g(i,j) > 30\%$, 则认为粗大误差, 将该点剔除。如果 $\eta_a < 5\%$, 则认为 g' 的收敛程度已满足要求。在上面两个判定中将误差上限定为 5%, 是因为常用医用激光器本身的功率或能量稳定性在 5% 左右。

Table 1 The tissue parameters used in simulation

n	$\mu_a(\text{cm}^{-1})$	$\mu_s(\text{cm}^{-1})$	g	$d(\text{cm})$
1.37	0.93	11	0.86	0.3

3 模拟结果与评价

我们从定性与定量两个角度出发对模拟中所获得的结果进行了评价, 得出

了相应的结果, 并分析了影响模拟面光源照射时对组织中光场分布达到统计稳定的因素。模拟中采用的组织样品参数如表 1。

3.1 定性分析

3.1.1 改变脉冲响应函数的模拟量 我们对不同脉冲响应函数的模拟量对模拟结果的影响进行了分析。采用的模拟量分别为 $10^3, 3 \times 10^3, 10^4, 2 \times 10^5$, 其对应的模拟结果如图 3~ 图 9 所示。以下图中的纵坐标为相对光能大小, 水平坐标表征光场的横向分布, 每格大小为 $0.01 \text{cm} \times 0.01 \text{cm}$ 。

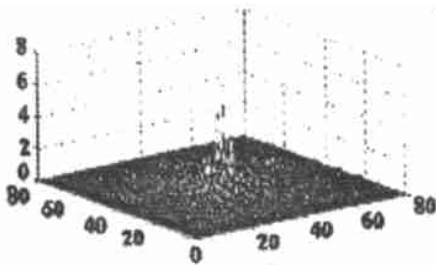


Fig. 3 The impulse response function corresponding to the simulation quantity of 10^3

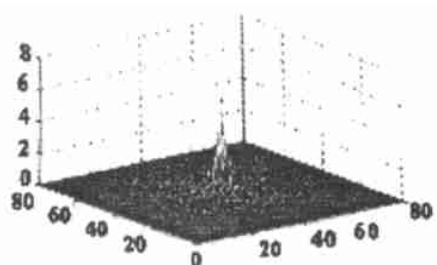


Fig. 4 The impulse response function corresponding to the simulation quantity of 3×10^3

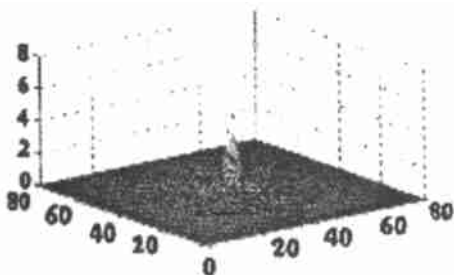


Fig. 5 The impulse response function corresponding to the simulation quantity of 2×10^5

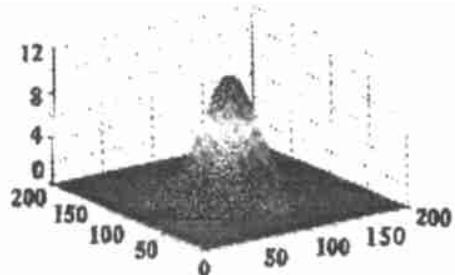


Fig. 6 Light distribution on the transmission plane of simulation quantity of 10^3

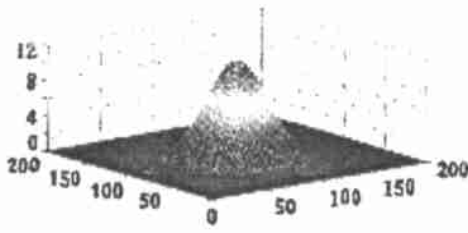


Fig. 7 Light distribution on the transmission plane of simulation quantity of 3×10^3

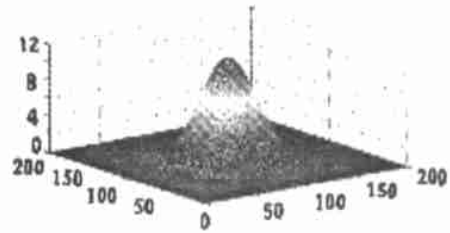


Fig. 8 Light distribution on the transmission plane of simulation quantity of 10^4

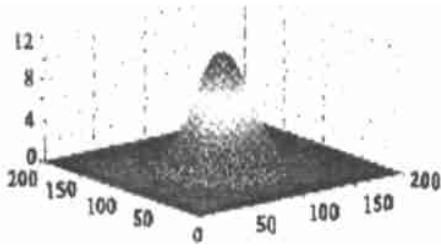


Fig. 9 Light distribution on transmission plane of simulation quantity of 2×10^5

其中,图 3~ 图 5 分别为不同模拟量的脉冲响应函数,而图 6、图 7、图 9 为在高斯分布的面光源照射下透射面上的二维光场分布的模拟结果,分别由图 3、图 4、图 5 的脉冲响应函数通过卷积计算得出。从模拟结果的定性分析看,模拟量为 10^3 的脉冲响应函数还存在较大的高频起伏,统计还没达到稳定,而后两者的形状一致,基本不存在高频起伏,说明这时的脉冲响应函数已经达到

了统计稳定。图 6、图 7、图 8 的结果与图 9 相比十分相近,没有明显的差别,因而不能得出明显的定性判别结果。但是引入脉冲响应函数后的结果与传统模拟的结果图 10 相比,明显提高了计算效率与统计稳定性。

本处模拟中光源的离散量均为 10^5 ,文中给出图 5、图 9 的结果只是用来作为定量计算与定性判断的一个基准。

3.1.2 改变光源的离散量 我们采用的不同光源离散量为 $5 \times 10^3, 10^4, 10^5$,其对应的图分别为图 11、图 12、图 9,脉冲响应函数如图 5。

从光场分布图 11、图 12 看还存在着微小的缺陷,这是由光源的离散量不足而使源光场分布不均造成的。从图 9 可知,将光源的离散量增加到 10^5 就得出较好的模拟结果。

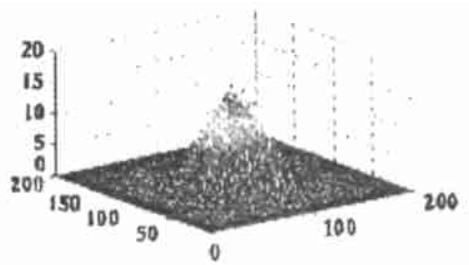


Fig. 10 The light distribution obtained by direct simulation

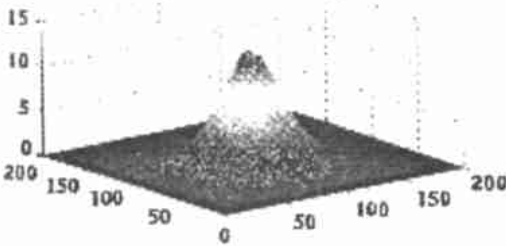


Fig. 11 The light distribution on the transmission plane corresponding to discrete quantity of 5×10^3

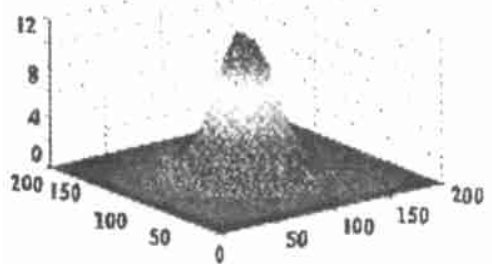


Fig. 12 Light distribution on the transmission plane corresponding to discrete quantity of 10^4

3.2 模拟结果的定量分析

Table 2 Inaccuracy of the simulation result of different simulation quantity

3.2.1 不同的脉冲响应函数模拟量

利用所提出的统计收敛性判别方法对模拟所得的结果进行定量计算, 这里的判定以图 9 为基准。计算的结果如表 2。

	standard(g)	Fig. 6	Fig. 7	Fig. 8
peak relative error	Fig. 9	5.04%	1.73%	0.89%
average relative error		5.7%	2.9%	0.89%

从计算的结果可以看出, 随着脉冲响应函数的模拟量的增加, 最终透射面上的光场分布的峰值相对误差与平均相对误差都随之降低, 这说明我们的模拟是逐步收敛的。根据前面提出的两个判据相结合对计算结果进行综合评定, 认为图 7、图 8 已经达到了模拟中的统计稳定性要求。即对于该参数的组织, 其脉冲响应函数的模拟量只要达到 3×10^3 , 就可得到满意的模拟结果。

3.2.2 不同的光源离散量

对不同光源离散量的误差计算如表 3。从表 3 中同样可以看出, 峰值相对误差与平均相对误差都随着离散量的增加而降低, 同样说明模拟是逐渐收敛的。根据前面的判据认为图 12 已趋近于稳定。而图 10 传统

Table 3 Inaccuracy of the simulation result of different source discrete quantity

	standard(g)	Fig. 11	Fig. 12	Fig. 10
peak relative error	Fig. 9	11.1%	4.72%	42%
average relative error		6.6%	5.5%	16.6%

Monte Carlo 模拟的结果虽然已用了 10^5 点的模拟结果但其统计稳定性仍很差。

4 讨 论

我们在引入脉冲响应函数的基础上, 建立了利用卷积计算面光源照射下组织中光传输规律的理论模型, 并编制了相应的程序; 对不同的脉冲响应函数模拟量与光源离散量进行了数值模拟, 并对本模型与传统 Monte Carlo 模拟得出的结果进行了比较; 提出了一种结果评价方法, 分析了不同的脉冲响应函数模拟量与光源离散量对模拟结果的影响。研究结果表明, 影响模拟结果精度的因素为脉冲响应函数的模拟量与光源的离散量, 这两者的取值直接决定着最终光分布的统计稳定。从这两者出发可以分析传统采用的 Monte Carlo 模拟运算量大、计算时间长且统计稳定性差的原因。对于传统模拟中采用 10^5 的光子模拟量, 相当于我们提出模型中的光源离散量为 10^5 , 这对于光源离散量是足够了, 但是计算每个位置点的脉冲响应函数的等效模拟量则很小, 对于分布窄而陡的光源照射, 比较少的光子量就可以使模拟结果达到实用要求, 尤其是在趋近于点入射时的情况, 但在分布宽而缓的面光源照射时, 在相同量的光子入射下每个点的等效模拟量很小而使得该点处入射的光子形成的分布不稳定, 这导致模拟结果的稳定性差。从上面的分析可以得出: 传统 Monte Carlo 处理面光源问题时难以达到统计稳定的原因主要是每个位置处计算光子形成分布的等效模拟量太小。理论上可以通过提高入射光子量来解决这一问题, 但是随着模拟量的增加, 计算时间迅速增加, 而对于分布较宽的光源每个位置点的等效模拟量随总模拟量的增加很慢, 因而难以通过简单的增加模拟量来达到需要的模拟精度。针对这一问题我们提出了新的模型——引入信息光学中光学系统理论, 将生物组织看成线性空间不变系统, 利用脉冲响应函数与光源的卷积来计算组织中的光分布。实际计算表明引入了脉冲响应函数后节约了计算量, 节省了计算时间, 达到了更好的统计稳定性。

激光诱导向列相液晶分子重新取向的研究*

钱祥忠**

(淮南工业学院数理系, 淮南, 232001)

摘要: 用液晶分子运动的动力学方程, 求出了激光诱导向列相液晶分子重新取向的取向角、折射率改变、阈值场强和上升时间的近似表达式。讨论了它们随液晶材料参数、激光强度和激光在液晶中传播方向的变化, 进行了数值计算。给出了激光能诱导向列相液晶分子重新取向的必备条件, 得到向列相液晶的各向异性是其分子重新取向的根本原因。

关键词: 向列相液晶 各向异性 激光诱导 分子重新取向 折射率改变

Study on laser induced molecular reorientation in nematic liquid crystals

Qian Xiangzhong

(Department of Mathematics and Physics, Huainan Institute of Technology, Huainan, 232001)

Abstract: The approximate formula of the laser induced molecular reorientation angle, refractive index change, thresholded field strength and rise time in nematic liquid crystal are obtained by means of the hydrodynamic equation of liquid crystal molecule motion. The dependence of the above parameters on the liquid crystal material parameters, laser intensity and its propagation inside liquid crystal is discussed and calculated. The essential condition which laser can induce molecular reorientation in nematic liquid crystal is given. The essential cause of molecular reorientation in nematic liquid crystal is anisotropy of its molecules have been obtained.

Key words: nematic liquid crystal anisotropy laser induced molecular reorientation refractive index change

* 安徽省自然科学基金资助。

** 电子科技大学光电子技术系博士研究生。

参 考 文 献

- 1 Ishimaru A. Wave Propagation and Scattering in Random Media. New York: Academic, 1978
- 2 Cheong W F, Prael S A, Welch A J. IEEE J Q E, 1990; 26(12): 2166~ 2185
- 3 Koitum R R, Rava R P, Fitzmaurice M *et al.* IEEE Trans Biomedical Engng, 1989; 36: 1222~ 1231
- 4 林煜. 激光杂志, 1997; 18(1): 52~ 55
- 5 Wang L H, Jacques S L. Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered tissues. Ph D dissertation, University of Texas M D Anderson Cancer Center, 1992
- 6 苏显渝, 李继陶编著. 信息光学. 第 1 版, 北京: 科学出版社, 1999
- 7 徐钟济 编著. 蒙特卡罗方法. 第 1 版, 上海: 上海科学技术出版社, 1985

作者简介: 李振华, 男, 1964 年出生。副教授。主要研究领域为激光光电子学。