

Vpliv zmanjšanja simulacijskega volumna na napako in hitrost izračunov reflektance z metodo Monte Carlo

Miran Bürmen¹

¹Univerza v Ljubljani, Fakulteta za elektrotehniko, Tržaška 25, 1000 Ljubljana, Slovenija
E-pošta: miran.buermen@fe.uni-lj.si

Povzetek. Širjenje nepolarizirane svetlobe po bioloških tkivih pogosto formuliramo v okviru enačbe sevalnega prenosa energije. Ta za večino uporabnih geometrij ni analitično rešljiva, zato jo najpogosteje rešujemo numerično v okviru simulacij Monte Carlo. Tovrstno metodologijo je mogoče uspešno uporabiti v številnih eksperimentalnih postavitvah, ki vključujejo tudi prostorsko razločene meritve povratno sipane svetlobe (reflektance) z optično vlaknenimi sondami. V okviru te študije smo podrobneje proučili vpliv omejenega simulacijskega volumna na čas in natančnost izračunov prostorsko razločene reflektance zajete z linearno razporeditvijo optičnih vlaken v sondi. Rezultati kažejo, da je napaka pri izračunih reflektance s simulacijami Monte Carlo pri uporabi omejenega simulacijskega volumna največja za vzorce z nizkim absorpcijskim in reduciranim sipalnim koeficientom. Nasprotno, rezultati kažejo, da je napaka le malo odvisna od faktorja anizotropije sipalne fazne funkcije. Z zmanjšanjem simulacijskega volumna je mogoče izračuna reflektance pohitriti tudi do dvakrat, a le pri vzorcih z nizkim absorpcijskim ($\approx 1 \text{ cm}^{-1}$) in do zmernim reduciranim sipalnim koeficientom ($\approx 30 \text{ cm}^{-1}$). Poleg številnih bioloških tkiv se s tovrstnimi optičnimi lastnostmi pogosto srečujemo pri optičnih fantomih za vrednotenje in umerjanje reflektance izračunane s simulacijami Monte Carlo.

Ključne besede: reflektančna spektroskopija, absorpcija, sipanje, Monte Carlo simulacije, napaka, hitrost izračunov, optične sonde

The impact of a reduced simulation volume on the accuracy and computational time of the Monte Carlo reflectance simulations

Light propagation in biological tissues formulated within the framework of the radiative transport equation is frequently simulated by stochastic Monte Carlo simulations. Such methodology is used in numerous experimental settings including spatially resolved reflectance measurements conducted by optical fiber probes. In this paper, we analyse the impact of the simulation volume on the computational time and relative error of the Monte Carlo simulated reflectance for an optical fiber probe with a linear fiber layout. The results show, that the largest relative reflectance error for a reduced simulation volume is observed for samples with low absorption and reduced scattering coefficients and for larger source detector separations. A subsequent analysis revealed that the reflectance error does not significantly depend on the anisotropy factor of the scattering phase function. A twofold reduction in the computational time of the Monte Carlo simulations can be attained without significantly affecting the accuracy of the computed reflectance for the given experimental setting. However, the computational time is improved only for the samples that exhibit low absorption ($\approx 1 \text{ cm}^{-1}$) and up to medium reduced scattering ($\approx 30 \text{ cm}^{-1}$) coefficients. Such optical properties can be found in many biological tissues, and in particular in purely scattering optical phantoms that are frequently used for validation and calibration of the Monte Carlo reflectance simulations.

1 UVOD

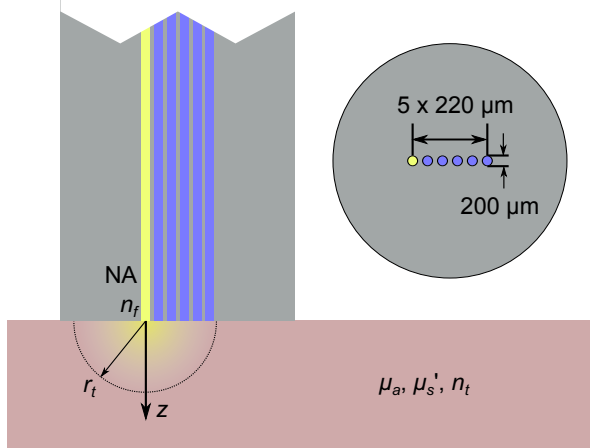
Povratno sipana svetloba (reflektanca) iz biološkega tkiva je bogata z informacijo o njegovi kemični sestavi in strukturi. Pri tem lahko absorpcijo svetlobe povežemo s sestavo glavnih tkivnih kromoforjev (kri, voda, melanin, maščobe, rumeni pigmenti), kompleksni proces sipanja svetlobe pa z lokalnimi spremembami lomnega količnika, ki so posledica morfologije in mikrostrukture tkiva [10], [13], [14], [11]. Prostorsko in valovno razločene meritve povratno sipane svetlobe (reflektance) lahko učinkovito izvedemo z optičnimi sondami z več vlakni [5], [12], [8], [2]. Širjenje nepolarizirane svetlobe v sipajočih medijih zadovoljivo dobro opišemo v okviru enačbe sevalnega prenosa energije (RTE). Zajeto reflektanco v tem primeru opišemo z absorpcijskim koeficientom μ_a in sipalnim koeficientom μ_s , ki določata atenuacijo kolimiranega snopa svetlobe, ter sipalno fazno (verjetnostno) funkcijo $p(s, s')$, ki določa verjetnost sipanja fotona iz vpadne smeri s v smer s' . Pri bioloških tkivih pogosto predpostavimo izotropnost sipalne fazne funkcije, ki se tako poenostavi v $p(\cos \theta)$, kjer θ pomeni kot med s in s' . V obstoječi literaturi se sipalne lastnosti tkiv pogosto poenostavljeno podajajo z reduciranim sipalnim koeficientom $\mu'_s = (1-g)\mu_s$, ki povezuje sipalni koeficient μ_s in prvi Legendrov moment g (povprečni kot sipanja) sipalne fazne funkcije [4]. Žal RTE v splošnem ni analitično rešljiva [7], [6] zato se pri njenem

reševanju najpogosteje poslužujemo stohastičnih simulacij Monte Carlo (MC) [15]. Pri tem simulacije dodatno pohitrimo z uporabo strojne opreme, najpogosteje z večjedrnimi grafičnimi pospeševalniki [1]. Ko izčrpamo razpoložljive možnosti za strojno pohitritev simulacij, nam ostanejo še tiste, ki so vezane na poenostavitve eksperimentalne geometrije. Pri tem moramo paziti, da s tovrstnimi poenostavitvami ne vnašamo dodatne ali prevelike napake v numerične izračune reflektance.

V okviru te študije smo podrobneje proučili možnosti za dodatne pohitritev Monte Carlo simulacij prostorsko razločene reflektance z uporabo omejenega simulacijskega volumna. Pri tovrstni simulacijah prenehamo slediti vsem fotonom, ki zapustijo izbrano okolico izvornega optičnega vlakna. Pristop je zanimiv predvsem takrat, ko je vrednost absorpcijskega koeficienta vzorca nizka, in se posledično fotoni lahko bistveno oddaljijo od izvornega optičnega vlakna.

2 METODOLOGIJA

Za namene študije smo uporabili polneskončno geometrijo biološkega tkiva in optično vlakneno sondo s šestimi linearno razporejenimi optičnimi vlakni premera $200\ \mu\text{m}$ in razdaljo med središči vlaken $220\ \mu\text{m}$. Tako smo v vsaki simulaciji izračunali reflektanco pri petih razdaljah med izvornim in sprejemnim vlaknom. Pri tem smo skrajno levo vlakno uporabili kot izvorno. Vrednost numerične odprtine (ang. numerical aperture) optičnih vlaken smo postavili na $NA = 0,22$, lomni količnik pa na $n_{fib} = 1,45$. Mejo med optično sondo in tkivom smo pri izračunih obravnavali lateralno uniformno. V simula-



Slika 1: Prikaz eksperimentalne postavitve s prečnim prerezom optične sonde in pripadajočo razporeditev oddajnega (rumeno) in sprejemnih (modra) optičnih vlaken na naležni površini

cijah Monte Carlo smo začetno pozicijo fotonov vzorčili enakomerno s prečnega preseka izvornega optičnega vlakna, začetno smer pa enakomerno iz prostorskega kota, ki ga omeujeta numerična odprtina vlakna in lomni količnik tkiva. Postopek naključnega vzorčenja

začetnih pozicij in smeri širjenja fotonov običajno udeležimo s pomočjo generatorja enakomerno razporejenih psevdonaključnih števil iz intervala $[0, 1]$. V ta namen je vsakokrat treba uporabiti nova štiri psevdonaključna števila, in sicer ξ_1 do ξ_4 . Začetne koordinate (x, y, z) in smer širjenja fotona (s_x, s_y, s_z) nato določimo po naslednjih enačbah:

$$x = x_0 + r_v \sqrt{\xi_1} \cos(2\pi\xi_2), \quad (1)$$

$$y = y_0 + r_v \sqrt{\xi_1} \sin(2\pi\xi_2), \quad (2)$$

$$z = 0, \quad (3)$$

$$\theta_{NA} = 1 - \xi_4(1 - \cos \arcsin(NA/n_t)), \quad (4)$$

$$s_x = \cos(2\pi\xi_3) \sin(\theta_{NA}), \quad (5)$$

$$s_y = \sin(2\pi\xi_3) \sin(\theta_{NA}), \quad (6)$$

$$s_z = \cos(\theta_{NA}), \quad (7)$$

kjer r_v pomeni radij x_0 in y_0 pa koordinati središča izvornega optičnega vlakna, n_t pa lomni količnik opazovanega vzorca. Podrobnejšo geometrijo eksperimentalne postavitve in optične sonde prikazuje slika 1. Optične lastnosti tkiva, ki smo jih obravnavali v okviru te študije, smo izbrali tako, da pokrivajo celoten razpon vrednosti absorpcijskega in reduciranega sipalnega koeficienta, ki jih navaja obstoječa literatura [4]. Pri tem smo vrednost absorpcijskega koeficienta μ_a spreminjali v razponu od $0\ \text{cm}^{-1}$ do $25\ \text{cm}^{-1}$, vrednosti reduciranega sipalnega koeficienta μ'_s pa v razponu od $5\ \text{cm}^{-1}$ do $60\ \text{cm}^{-1}$, in sicer oba s 25 enakomerno razporejenimi koraki. Lomni količnik biološkega tkiva smo postavili na $n_m = 1,33$. V simulacijah MC smo uporabili Henyey-Greenstein (HG) [3] model sipalne fazne funkcije, ki ga določa naslednja enačba:

$$p(\cos \theta) = \frac{1}{2} \frac{1 - g^2}{1 + g^2 - 2g \cos \theta}, \quad (8)$$

kjer θ pomeni kot med smerjo širjenja fotona pred sipanjem in po njem, parameter g pa faktor anizotropije sipalne fazne funkcije (povprečna vrednost $\cos(\theta)$). Pri simulacijah z omejenim volumnom tkiva smo prenehali slediti vsem fotonom, ki so se od izvornega vlakna oddaljili za več kot r_t . Referenčne izračune reflektance pri vrednosti absorpcijskega koeficienta $0\ \text{cm}^{-1}$ smo izvedli pri veliki vrednosti radija simulacijskega volumna $r_t = 30\ \text{mm}$. Vsi izračuni reflektance v tej študiji so bili izvedeni s pomočjo simulacij Monte Carlo podprtih z OpenCL™ vmesnikom. Pri tem smo v eni simulaciji sledili 10^8 fotonom. Za določitev reflektance, izmerjene skozi posamezna optična vlakna, smo izkoristili radialno simetrijo reflektance in s tem dodatno izboljšali kakovost signala.

3 REZULTATI

V prvem eksperimentu smo poskušali identificirati tista področja optičnih lastnosti, pri katerih nastane kot posledica omejenega simulacijskega volumna največja

napaka pri izračunih reflektance. V ta namen smo uporabili relativno majhen radij simulacijskega volumna $r_t = 1.5$ mm, ki komajda še zaobjame vsa optična vlakna. Ta lahko v dani geometriji popolnoma zaobjamemo s hemisfero radija 1.2 mm. Slika 2 prikazuje relativno napako izračunane reflektance pri vrednosti radija simulacijskega volumna $r_t = 1.5$ mm, in sicer za najmanjšo ($220 \mu\text{m}$) in največjo ($1100 \mu\text{m}$) razdaljo med izvornim in sprejemnim optičnim vlaknom. Vrednost faktorja anizotropije g sipalne fazne funkcije HG smo postavili na $g = 0.85$. Vidimo, da največja relativna napaka izračunane reflektance nastopi pri nizkih vrednostih absorpcijskega in reduciranega sipalnega koeficienta, in narašča z razdaljo med izvornim in sprejemnim vlaknom. Posledično smo v drugem eksperimentu podrobneje proučili vpliv vrednosti radija simulacijskega volumna r_t na relativno napako izračunane reflektance. V ta namen smo vrednost absorpcijskega koeficienta postavili na 0.01 cm^{-1} , vrednost reduciranega sipalnega koeficienta pa na 5 cm^{-1} , kar je najnižja vrednost, ki jo običajno še srečamo med biološkimi tkivi v vidnem in začetnem bližnjem infrardečem delu spektra [4]. Vrednost faktorja anizotropije sipalne fazne funkcije smo postavili na 0,85. Slika 3 prikazuje, kako se relativna napaka izračunane reflektance spreminja z radijem simulacijskega volumna r_t in razdaljo med izvornim in sprejemnim optičnim vlaknom. Vidimo, da je relativna napaka izračunane reflektance pri vseh sprejemnih optičnih vlaknih manjša od 2%, ko je radij simulacijskega volumna r_t približno večji ali enak 8 mm. V naslednjem koraku smo proučili, kako se relativna napaka reflektance spreminja v odvisnosti od faktorja anizotropije sipalne fazne funkcije. Slika 4 prikazuje relativno napako reflektance v odvisnosti od razdalje med izvornim in sprejemnim optičnim vlaknom za vrednosti faktorja anizotropije med 0,4 in 0,95. Pri izračunih smo uporabili radij simulacijskega volumna 8 mm, vrednost absorpcijskega koeficienta 0.01 cm^{-1} ter vrednost reduciranega sipalnega koeficienta 5 cm^{-1} . Za konec smo ocenili še faktorje pohitritve simulacij Monte Carlo, ki jih dosežemo pri simulacijskem volumnu $r_t = 8$ mm, ko relativna napaka reflektance za biološko zanimiv nabor optičnih lastnosti ne preseže 2%. Slika 5 prikazuje izračunane faktorje pohitritve pri vrednosti faktorja anizotropije 0,85.

4 RAZPRAVA

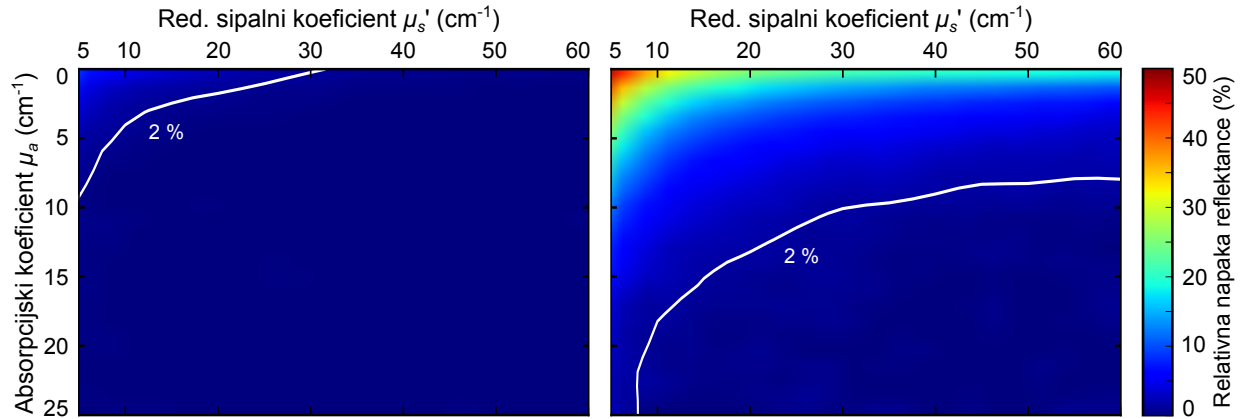
Rezultati eksperimentov kažejo, da lahko z zmanjšanjem simulacijskega volumna bistveno, tudi do dvakratno, pohitrimo MC simulacije, ne da bi pri tem bistveno vplivali na natančnost izračunov reflektance. Praktična uporaba tovrstnih pohitritev v izbrani geometriji optičnih vlaken je omejena na vzorce z nizkimi absorpcijskimi koeficienti (do $\approx 1 \text{ cm}^{-1}$) in vrednostmi reduciranega sipalnega koeficienta do približno 30 cm^{-1} . Pri tem je relativna napaka izračunane reflektance le malo odvisna

od faktorja anizotropije sipalne fazne funkcije (slika 4), hkrati pa močno odvisna od razdalje med izvornim in sprejemnim optičnim vlaknom (slika 3). V dani eksperimentalni geometriji lahko pri relativno nizki vrednosti absorpcijskega in reduciranega sipalnega koeficienta dosežemo okoli dvakratno pohitritev izračunov, ne da bi pri tem relativna napaka reflektance preseгла 2%. Pri naraščajočih vrednostih reduciranega sipalnega koeficienta, pa se pohitritev zmanjša in pri 30 cm^{-1} znaša približno 30%. Z optičnimi lastnostmi, ki omogočajo uporabo tovrstnih pohitritev, se pogosto srečujemo pri optičnih fantomih, ki so namenjeni za vrednotenje in umerjanje simulacij Monte Carlo [9]. Slednje pogosto pripravimo iz vodnih suspenzij polistirenskih mikrosferičnih delcev, ki brez dodatkov izkazujejo zelo nizek absorpcijski koeficient. Pri takšnih optičnih lastnostih je skoraj nujno uporabiti končni simulacijski volumen.

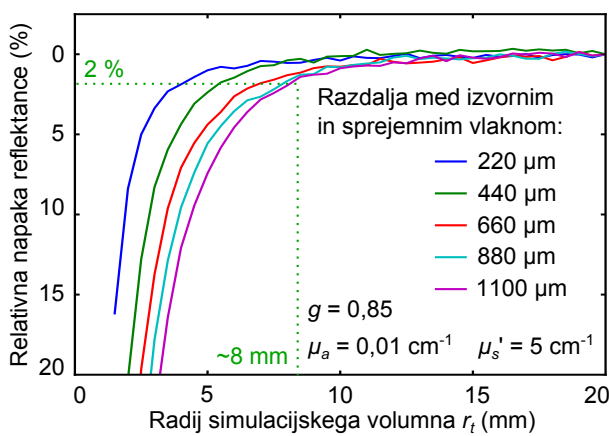
Pred praktično uporabo omejenega simulacijskega volumna je za izbrano eksperimentalno geometrijo treba podrobno proučiti vpliv na napako izračunane reflektance. Pri tej se pogosto zadovoljimo z največ 2 odstotno relativno napako. Glede na prikazane rezultate vidimo, da je napaka pri izračunih reflektance najmanjša za visoke vrednosti absorpcijskega koeficienta. Rezultati so smiselni, saj z naraščajočo absorpcijo fotoni pospešeno ugašajo in se večina tistih fotonov, ki bi jih pri polneskončni obravnavi medija zaznali skozi sprejemna optična vlakna, ne uspe dovolj oddaljiti od izvornega optičnega vlakna, da bi povzročili prekinitev simulacije. To je tudi razlog, da pri tovrstnih optičnih lastnostih vzorca zmanjšanje simulacijskega volumna ne vodi do bistvenih pohitritev simulacij Monte Carlo. Nasprotno se pri nizki vrednosti absorpcijskega in reduciranega sipalnega koeficienta, ko medij postaja prosojen, fotoni uspejo močno oddaljiti od izvornega vlakna. Posledično lahko z zmanjšanjem simulacijskega volumna bistveno pohitrimo izračune, a hkrati tudi najhitreje pridelamo nesprejemljivo veliko napako izračunane reflektance, saj je delež fotonov, ki zapustijo simulacijski volumen in bi jih pri polneskončni obravnavi medija zaznali skozi sprejemna optična vlakna, velik. Naraščanje relativne napake reflektance z razdaljo med izvornim in sprejemnim vlaknom je pričakovano, saj lahko fotoni pri večji razdalji med izvornim in sprejemnim vlaknom uberejo daljše poti, še zlasti pri nizkih vrednostih absorpcijskega koeficienta.

5 SKLEP

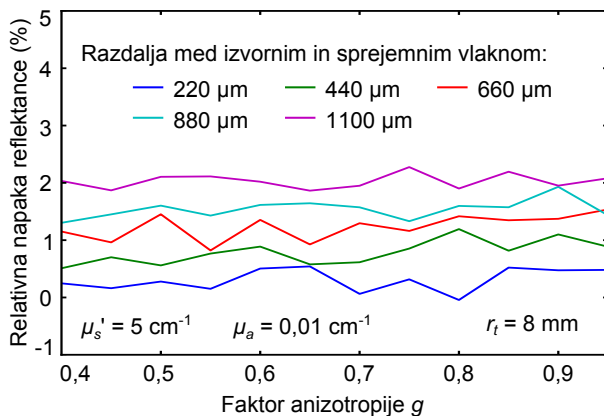
V študiji smo pokazali, da lahko s smiselno izbiro simulacijskega volumna pohitrimo izračune simulacij MC pri nizkih vrednostih absorpcijskega koeficienta, ne da bi pri tem bistveno vplivali na natančnost izračunov reflektance. Faktor pohitritve, ki ga na ta način lahko dosežemo, je odvisen predvsem od optičnih lastnosti vzorca in geometrije eksperimentalne postavitve. Na splošno je najbolje, da pred uporabo natančno ovre-



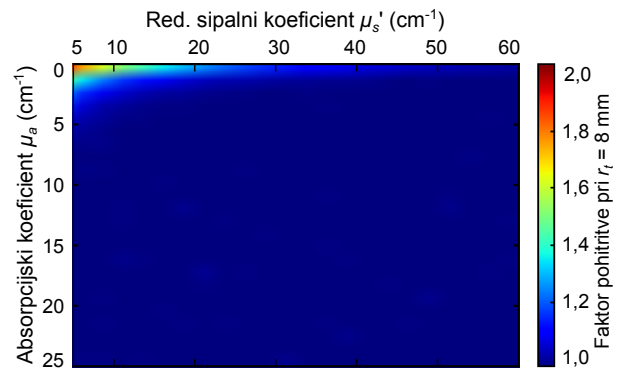
Slika 2: Relativna napaka reflektance pri radiju simulacijskega volumna $r_t = 1.5$ mm, prikazana v odvisnosti od absorpcijskega in reduciranega sipalnega koeficienta za najbližje (levo) in najbolj oddaljeno sprejemno optično vlakno (desno). Kontura razmejuje območje z relativno napako reflektance, manjšo od 2 %



Slika 3: Relativna napaka izračunane reflektance v odvisnosti od radija simulacijskega volumna r_t pri vrednosti absorpcijskega koeficienta 0.01 cm^{-1} , reduciranega sipalnega koeficienta 5 cm^{-1} ter faktorja anizotropije $0,85$



Slika 4: Relativna napaka reflektance v odvisnosti od razdalje med izvornim in sprejemnim optičnim vlaknom za vrednosti faktorja anizotropije med $0,4$ in $0,95$ pri absorpcijskem koeficientu 0.01 cm^{-1} , reduciranem sipalnem koeficientu 5 cm^{-1} in radiju simulacijskega volumna $r_t = 8$ mm



Slika 5: Faktor pohitritve simulacij Monte Carlo kot posledica zmanjšanja simulacijskega volumna pri $r_t = 8$ mm. Vrednost faktorja anizotropije g je bila pri izračunih $0,85$

dnotimo vpliv zmanjšane simulacijskega volumna za izbrano eksperimentalno geometrijo in pričakovani razpon optičnih lastnosti proučevanih vzorcev. Na podlagi rezultatov lahko nato določimo najmanjši simulacijski volumen, ki nam daje še zadostno točne izračune reflektance.

ZAHVALA

Raziskavo sta omogočila Ministrstvo za visoko šolstvo, znanost in tehnologijo Republike Slovenije v okviru programa P2-0232 in Javna agencija za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije v okviru projektov J2-7211, J7-6781, J2-7211 in J2-7118.

LITERATURA

- [1] Alerstam, E., Svensson, T., Andersson-Engels, S.: Parallel computing with graphics processing units for high-speed Monte Carlo simulation of photon migration. *Journal of Biomedical Optics* 13(6), 060504 (Dec 2008).
- [2] Bravo, J. J., Paulsen, K. D., Roberts, D. W., Kanick, S. C.: Sub-diffuse optical biomarkers characterize localized microstructure

- and function of cortex and malignant tumor. *Optics Letters* 41(4), 781–784 (Feb 2016).
- [3] Henyey, L. G., Greenstein, J. L.: Diffuse radiation in the Galaxy. *The Astrophysical Journal* 93, 70–83 (Jan 1941).
- [4] Jacques, S. L.: Optical properties of biological tissues: a review. *Physics in Medicine and Biology* 58(11), R37 (Jun 2013).
- [5] van Leeuwen-van Zaane, F., Gamm, U. A., van Driel, P. B. A. A., Snoeks, T. J. A., de Bruijn, H. S., van der Ploeg-van den Heuvel, A., Mol, I. M., Löwik, C. W. G. M., Sterenborg, H. J. C. M., Amelink, A., Robinson, D. J.: In vivo quantification of the scattering properties of tissue using multi-diameter single fiber reflectance spectroscopy. *Biomedical Optics Express* 4(5), 696 (May 2013).
- [6] Liemert, A., Kienle, A.: Light transport in three-dimensional semi-infinite scattering media. *Journal of the Optical Society of America A* 29(7), 1475 (Jul 2012).
- [7] Liemert, A., Kienle, A.: Novel analytical solution for the radiance in an anisotropically scattering medium. *Applied Optics* 54(8), 1963 (Mar 2015).
- [8] Naglič, P., Pernuš, F., Likar, B., Bürmen, M.: Limitations of the commonly used simplified laterally uniform optical fiber probe-tissue interface in Monte Carlo simulations of diffuse reflectance. *Biomedical Optics Express* 6(10), 3973–3988 (Oct 2015).
- [9] Pogue, B. W., Patterson, M. S.: Review of tissue simulating phantoms for optical spectroscopy, imaging and dosimetry. *Journal of Biomedical Optics* 11(4), 041102 (Aug 2006).
- [10] Rogers, J. D., Radosevich, A. J., Yi, J., Backman, V.: Modeling light scattering in tissue as continuous random media using a versatile refractive index correlation function. *IEEE journal of selected topics in quantum electronics : a publication of the IEEE Lasers and Electro-optics Society* 20(2), 7000514 (2013).
- [11] Schmitt, J. M., Kumar, G.: Turbulent nature of refractive-index variations in biological tissue. *Optics Letters* 21(16), 1310–1312 (Aug 1996).
- [12] Utzinger, U., Richards-Kortum, R. R.: Fiber optic probes for biomedical optical spectroscopy. *Journal of Biomedical Optics* 8(1), 121–147 (Jan 2003).
- [13] Wang, R. K.: Modelling optical properties of soft tissue by fractal distribution of scatterers. *Journal of Modern Optics* 47(1), 103–120 (Jan 2000).
- [14] Xu, M., Alfano, R. R.: Fractal mechanisms of light scattering in biological tissue and cells. *Optics Letters* 30(22), 3051–3053 (Nov 2005).
- [15] Zhu, C., Liu, Q.: Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues. *Journal of Biomedical Optics* 18(5), 50902 (May 2013).

Miran Bürmen je zaposlen na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani, kjer se pedagoško in raziskovalno ukvarja s spektroskopijo in hiperspektralnim slikanjem, modeliranjem spektroskopskih in hiperspektralnih slikovnih sistemov, obdelavo in analizo spektrov in hiperspektralnih slik ter modeliranjem širjenja svetlobe po sipajočih medijih.