

УДК 004.94

DOI: [10.26102/2310-6018/2024.46.3.022](https://doi.org/10.26102/2310-6018/2024.46.3.022)

Фрактальный подход к численному моделированию фотонного транспорта в биологических тканях на основе метода статистических испытаний Монте-Карло

А.Ю. Потлов✉

*Тамбовский государственный технический университет, Тамбов,
Российская Федерация*

Резюме. В работе представлен вычислительно эффективный подход к математическому моделированию процесса миграции фотонов в биологических тканях. При этом ткани живых организмов описываются как сильно рассеивающие среды с явно выраженной анизотропией и относительным показателем преломления выше, чем у воздуха. Предложенный подход представляет собой модифицированную версию метода статистических испытаний Монте-Карло, в связи с чем вычисление длины свободного пробега фотона, вероятности акта поглощения или рассеяния, потери энергии при акте поглощения, нового направления движения в случае акта рассеяния и поведения фотона на границе моделируемого объекта или его отдельного относительно обособленного участка производятся по классическим формулам. Главной отличительной особенностью предложенного решения является описание пакета фотонов в виде древовидного фрактала. При этом опорная траектория просчитывается классическим образом, а остальные достраиваются по принципу самоподобия с поправкой на наличие или отсутствие областей резкой смены оптических свойств. Такой подход позволяет повысить производительность вычислений посредством снижения количества фотонов в пакете при пропорциональном увеличении количества рассматриваемых пакетов. Предложенное решение предназначено для использования при разработке новых и совершенствовании известных методов оптической томографии и эластографии.

Ключевые слова: математическое моделирование, высокопроизводительные вычисления, биологические ткани, оптическая томография, оптическая эластография, метод Монте-Карло, траектории движения фотонов, фракталы.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект МК-231.2022.4).

Для цитирования: Потлов А.Ю. Фрактальный подход к численному моделированию фотонного транспорта в биологических тканях на основе метода статистических испытаний Монте-Карло. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2024;12(3). URL: <https://moitvvt.ru/ru/journal/pdf?id=1648> DOI: 10.26102/2310-6018/2024.46.3.022

Fractal approach to Monte Carlo based numerical simulation of photon transport in biological tissues

A.Yu. Potlov✉

Tambov State Technical University, Tambov, the Russian Federation

Abstract: The paper presents a computationally efficient approach to mathematical modeling of the photon migration process in biological tissues. In this case, the tissues of living organisms are described as strongly scattering media with pronounced anisotropy and a relative refractive index higher than that of air. The proposed approach is a modified version of the Monte Carlo statistical testing method, in connection with which the calculation of the photon mean free path, the probability of an absorption or scattering act, energy loss during an absorption act, a new direction of motion in the case of an act of

scattering and the behavior of a photon at the boundary of the modeled object or its separate relatively isolated section are performed according to classical formulas. The main distinctive feature of the proposed solution is the description of a photon packet as a tree-like fractal. In this case, the reference trajectory is calculated in the classical way, and the rest are completed according to the principle of self-similarity, adjusted for the presence or absence of areas of abrupt change in optical properties. This approach allows increasing the computing performance by reducing the number of photons in a packet with a proportional increase in the number of packets under consideration. The proposed solution is intended for use in the development of new and improvement of known methods of optical tomography and elastography.

Keywords: mathematical modeling, high-performance computing, biological tissues, optical tomography, optical elastography, Monte Carlo method, photon trajectories, fractals.

Acknowledgments: The study was carried out with the financial support of the Grants Council of the President of the Russian Federation (project MK-231.2022.4).

For citation: Potlov A.Yu. Fractal approach to Monte Carlo based numerical simulation of photon transport in biological tissues. *Modeling, optimization and information technology*. 2024;12(3). URL: <https://moitvivr.ru/ru/journal/pdf?id=1648> DOI: 10.26102/2310-6018/2024.46.3.022 (in Russ.).

Введение

Оборудование для оптической томографии является одним из наиболее перспективных секторов рынка медицинской техники. Бурный прогресс в области оптических методов биомедицинской диагностики [1–3], особенно если речь идет о системах с высокой степенью визуализации, имеет совокупность причин. Совершенствуются источники излучения, детекторы, оптические интерферометры, системы синхронизации, вычислительные модули. Однако не стоит забывать о достижениях в области биофизики, материаловедения и методологии обработки оптических сигналов [4–6]. Глубокое понимание биофизических основ взаимодействия оптического излучения с биологическими тканями и иными сильно рассеивающими средами в сложных условиях (например, в ситуациях движения или деформирующего воздействия) позволяет создавать более эффективные системы, сочетающие в себе оптическую томографию и эластографию, ангиографию, доплерографию и даже эндоскопию [7–9]. Одним из наиболее эффективных методов, помогающих при интерпретации результатов физических (натурных) экспериментов в подобных сложных условиях является математическое моделирование процесса распространения оптического излучения в биологических тканях.

Наиболее достоверными и универсальными математическими моделями фотонного транспорта в сильно рассеивающих средах с оптическими свойствами биологических тканей являются численные модели на основе метода статистических испытаний Монте-Карло [1, 3, 5]. Высокая достоверность вычислений достигается за счет расчета вероятностных траекторий движения достаточно большого (в современных исследованиях чаще всего фигурируют сотни миллионов фотонов) количества фотонов. Основной недостаток заключается в том, что уменьшение погрешности вычислений на один порядок требует увеличения количества моделируемых траекторий фотонов на два порядка [1]. Таким образом, вышеуказанные модели требуют либо многодневного моделирования для каждого отдельного случая, либо суперкомпьютерных вычислений. Оба варианта не очень удобны для задач совместного анализа результатов физических и компьютерных экспериментов. Резкое снижение количества рассматриваемых траекторий фотонов снижает достоверность вычислений ниже порогового уровня, необходимого для выявления каких-либо закономерностей, связывающих условия эксперимента и получаемый результат. В качестве компромисса довольно часто при

моделировании фотонного транспорта методом Монте-Карло используют пакетный подход, когда некоторое количество фотонов (в современных исследованиях чаще всего фигурирует число в десять тысяч) объединяют в пакет и их траектории считают практически идентичными [7, 10].

Целью проводимого исследования, является разработка вычислительно эффективного варианта статистической модели фотонного транспорта на основе метода Монте-Карло посредством использования принципа самоподобия для описания траекторий фотонов в рамках одного пакета.

Материалы и методы

Предлагаемый подход к моделированию состоит из двух основных стадий: I) описание оптических свойств и геометрии моделируемого объекта; II) расчет траекторий пакетов фотонов. Дополнительными стадиями [2, 8] могут, например, быть: комплексирование полученных пространственных распределений фотонной плотности с геометрической моделью для оценки характеристик движения нормированного максимума фотонной плотности [6], формирование структурного изображения оптической когерентной томографии [9], переход к спектроскопическим моделям и т. п.

Первая стадия во многом классическая. Геометрическая модель описывает контуры внешних и внутренних границ исследуемого объекта, а также пространственные распределения коэффициентов поглощения, рассеяния, анизотропии, преломления [2, 11]. Простейший и наиболее эффективный способ ее формирования – это распознавание уже имеющегося изображения и использование его как априорной информации [11]. Например, в качестве опорного изображения может послужить В-скан, полученный методом сверхвысокочастотного УЗИ [12]. Для упрощения дальнейших расчетов геометрическая модель сегментируется на совокупность неперекрывающихся пространственных блоков по принципу однородности.

Вторая стадия для чрезмерно неоднородных участков геометрической модели ничем не отличается от классического моделирования фотонного транспорта методом статистических испытаний Монте-Карло [1–4]. Траектория каждого фотона в таком случае плохо предсказуема, и соответственно, чем больше траекторий было независимо рассчитано, тем точнее моделирование [3, 5]. Но, применительно к относительно однородным участкам для повышения вычислительной эффективности рассчитываются не все траектории, а только опорные, с последующим восстановлением недостающих траекторий на основе принципа самоподобия (Рисунок 1).

Длина свободного пробега фотона, L , вычисляется на основе псевдослучайного числа ξ следующим образом [3]:

$$L = -l_{ph} \ln(1 - \xi),$$

где l_{ph} – транспортная длина свободного пробега фотона, соответственно равная:

$$l_{ph} = [\mu_a(x, y, z) + \mu'_s(x, y, z)]^{-1},$$

где $\mu_a(x, y, z)$ и $\mu'_s(x, y, z)$ – коэффициент поглощения и коэффициент рассеяния (штрих справа сверху от символа в данном случае означает редуцированную форму), соответственно.

Вероятность акта поглощения, p_a , для известного фотона в известной точке моделируемого объекта вычисляется следующим образом [3, 5]:

$$p_a = p_s - 1 = \frac{\mu_s(x, y, z)}{\mu_a(x, y, z) + \mu_s(x, y, z)},$$

где p_s – вероятность акта рассеяния.

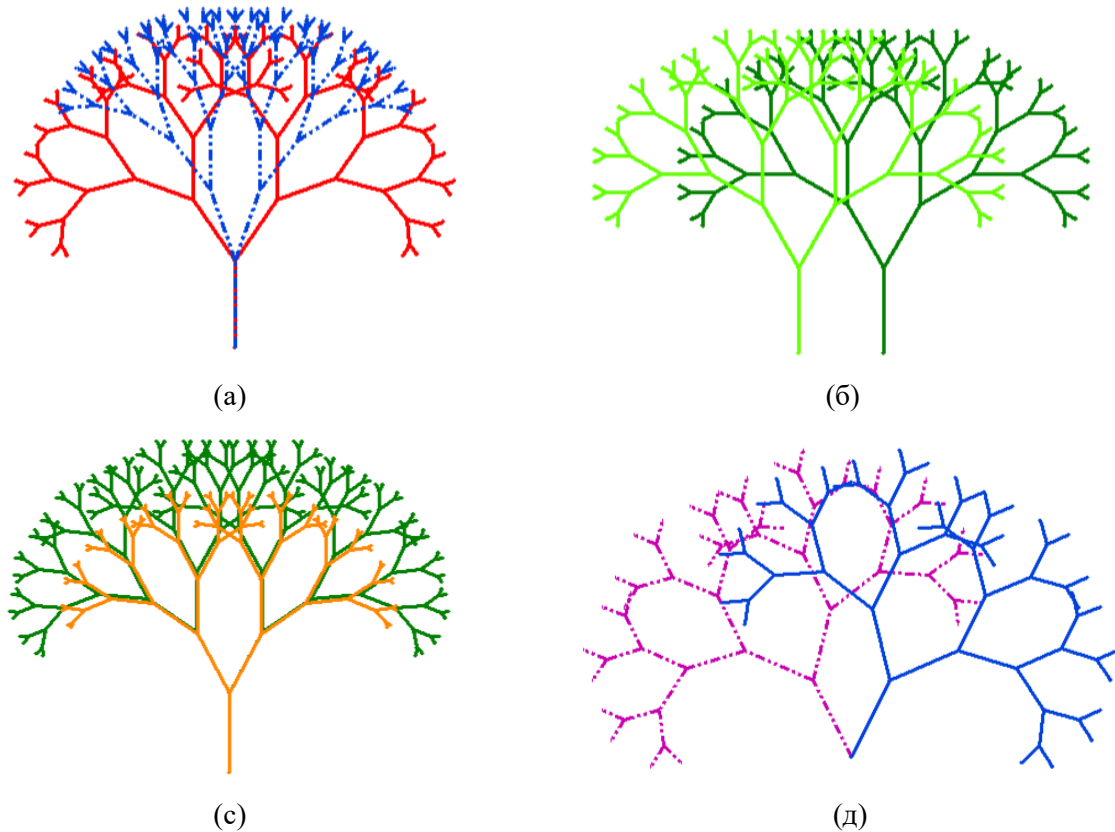


Рисунок 1 – Обоснование целесообразности использования древовидных фракталов для описания пакетов фотонов при: а) сужении сканирующего пучка; б) аксиальном смещении сканера; в) повторном сканировании; д) малоугловом растровом сканировании
Figure 1 – Explanation of the feasibility of using tree fractals to describe photon packets with: a) narrowing of the scanning beam; b) axial displacement of the scanner; c) repeated scanning; d) small-angle raster scanning

В случае акта поглощения энергия фотона экспоненциально уменьшается в соответствии с законом Бугера-Ламберта-Бера [1–3]:

$$W_{i+1} = W_i \cdot e^{-\mu_a(x,y,z)L},$$

где W_i и W_{i+1} – «статистический вес» фотона до и после акта поглощения.

В случае акта рассеяния фотон изменяет направление [2–4] своего движения следующим образом:

$$\begin{cases} u'_x = \frac{\sin \theta (u_x u_z \cos \varphi - u_y \sin \varphi)}{\sqrt{1 - u_z^2}} + u_x \cos \theta \\ u'_y = \frac{\sin \theta (u_y u_z \cos \varphi - u_x \sin \varphi)}{\sqrt{1 - u_z^2}} + u_y \cos \theta \\ u'_z = -\sqrt{1 - u_z^2} \sin \theta \cos \varphi + u_z \cos \theta \end{cases} .$$

Поскольку свободный пробег фотона между актами взаимодействия с математической точки зрения представляет собой вектор, для удобства построения фрактального дерева (например, варианта дерева Пифагора) запишем его в комплексной форме и используем формулу Эйлера для связи комплексной экспоненты с тригонометрическими функциями:

$$e^{\theta(u_x i + u_y j + u_z k)} = \cos \theta + (u_x i + u_y j + u_z k) \sin \theta,$$

где $(u_x i, u_y j, u_z k)$ – единичный вектор. При таком подходе самоподобие векторов можно организовать посредством их дублирования, смещения и вращения (Рисунок 2).

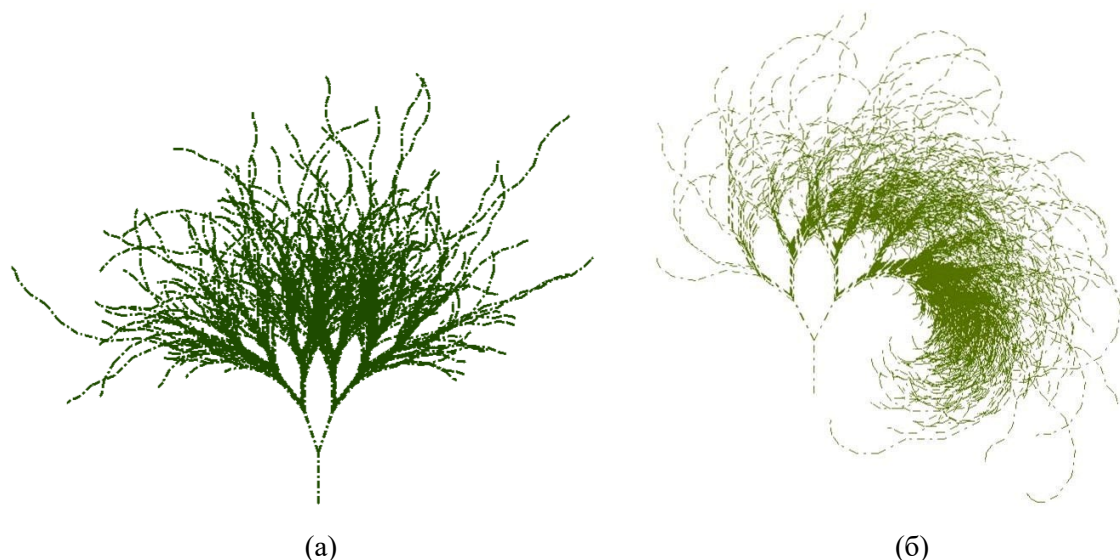


Рисунок 2 – Выполненные в виде фракталов пакеты фотонов в однородном: а) протяженном неперекрывающемся пространственном блоке; б) несимметричном блоке
Figure 2 – Photon packets described in the form of fractals in a homogeneous: a) extended non-overlapping spatial block; b) asymmetric block

Построение ветвей фрактального дерева (Рисунок 2) строго подчиняется принципу коммутативности комплексных чисел и в основном сведено к одной из наиболее вычислительно эффективных операций умножения вектора на число. К тому же использование различных вариантов дерева Пифагора является общепризнанным подходом к математическому моделированию в биофизике и биомедицине, например, при численном описании бронхиального дерева, оценке вариантов ветвления кровеносных сосудов, изучении особенностей анатомического строения коралловых полипов и т. п.

Результаты и обсуждение

Для оценки эффективности предложенного подхода к моделированию фотонного транспорта была проведена серия компьютерных и физических экспериментов [6, 9].

Компьютерная модель была реализована в среде «National Instruments LabVIEW («Emerson Electric Co.», США) без использования дополнительных наборов инструментов. Пример вычисленного на основе авторской модели пространственного распределения фотонной плотности в центральном сечении однородного объекта показан на Рисунке 3. В качестве вычислительного модуля использован ноутбук «Асер

Nitro 5» на базе процессора «Intel i9-12900H» с тактовой частотой до 5 ГГц, 16 Гб оперативной (DDR4) и 12 Гб видеопамяти («GeForce RTX 3060»).

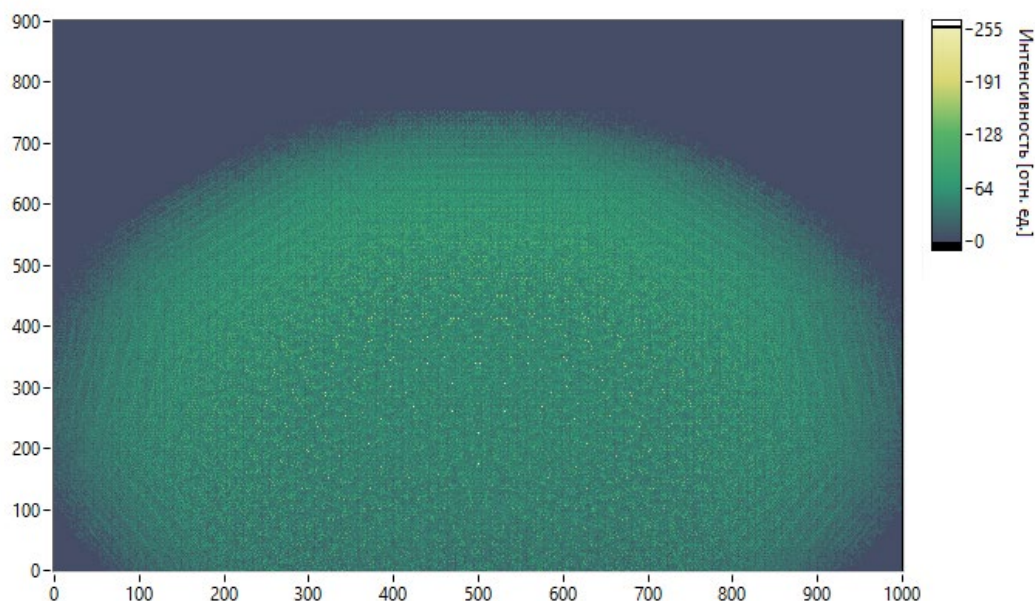


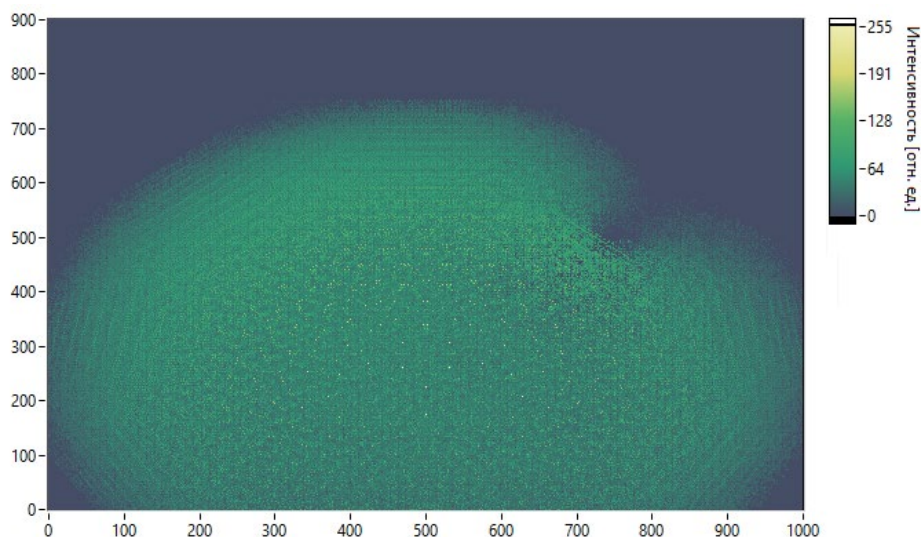
Рисунок 3 – Пространственное распределение фотонной плотности в однородном слябе
Figure 3 – Spatial distribution of photon density in a homogeneous slab

Затраты машинного времени на получение вышеуказанного распределения (Рисунок 3) составили $\approx 16,3$ секунды, при этом использовалось 25 тысяч пакетов по 100 фотонов. Фантом с геометрической точки зрения представлял собой сляб длиной 5 см, шириной 2,5 см и толщиной 2,25 см. Коэффициент поглощения составлял $0,008 \text{ мм}^{-1}$, а редуцированный коэффициент рассеяния был соответственно равен $0,6 \text{ мм}^{-1}$.

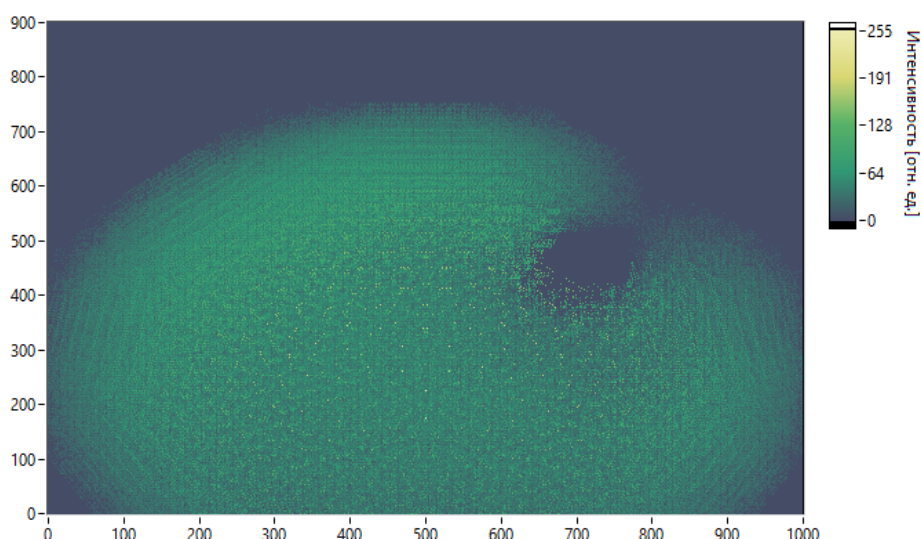
Для оценки уровня достоверности результата математического моделирования была разработана и изготовлена натурная модель [6, 9] с точно такими же геометрией и оптическими свойствами. Натурная модель представляла собой стабильный фантом из ювелирной эпоксидной смолы («Craft Crystal Resin», Словения). В качестве поглощающих и рассеивающих добавок, соответственно, использовались порошковые металлы, а также мелкодисперсный диоксид титана.

Достоверность результатов моделирования была подтверждена посредством сравнения расчетных и реальных уровней фотонной плотности для совокупности точек на границах исследуемого объекта. При этом для сбора экспериментальных кривых был использован спектрометр «Aurora 4000» («CNI», Китай). Серия сравнительных экспериментов показала, что уровень достоверности моделирования в среднем составляет 96 %. Режим работы источника излучения (модуляционный, импульсный, непрерывный), временные задержки и накопительный эффект были учтены [9]. Также была сделана поправка, связанная с использованием относительных единиц [6, 13].

Пример рассчитанного с помощью авторской модели пространственного распределения фотонной плотности для неоднородного объекта (поглощающая неоднородность) приведен на Рисунке 4.



(а)



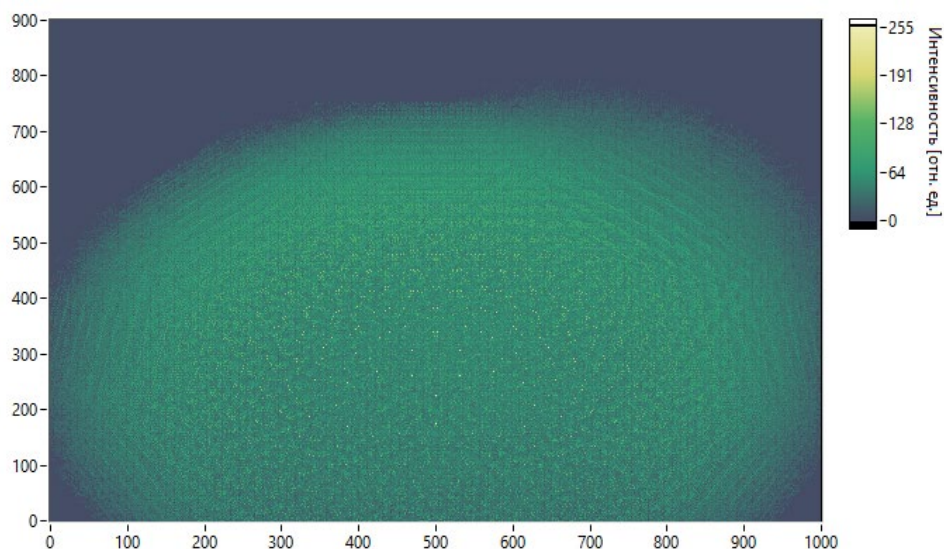
(б)

Рисунок 4 – Пространственное распределение фотонной плотности в слое со сферической неоднородностью

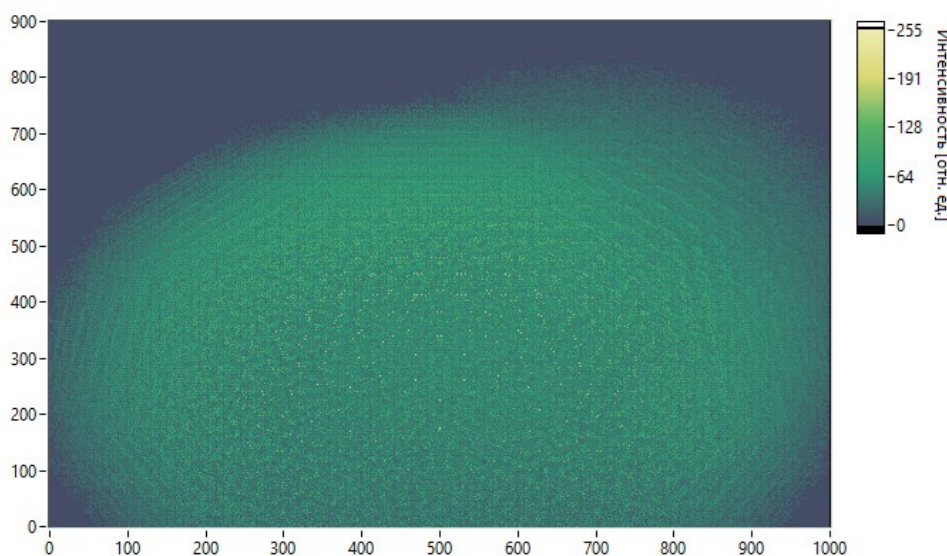
Figure 4 – Spatial distribution of photon density in a slab with a spherical inhomogeneity

На Рисунке 4 поглощающая неоднородность в первом случае (а) имеет диаметр 3 мм, а во втором (б) она вдвое больше. Коэффициент поглощения неоднородности составляет $0,024 \text{ мм}^{-1}$ (в три раза выше, чем у однородной части), с точки зрения коэффициента рассеяния она ничем не отличается от остальной (однородной) части фантома. Резкая разница между распределениями фотонной плотности на Рисунке 3 и Рисунке 4 в значительной мере объясняется более быстрым убыванием энергии фотонов в области поглощающей неоднородности [9], что укоротило их траектории в окрестности этой неоднородности. Для сравнения на Рисунке 5 показаны пространственные распределения фотонной плотности в неоднородном объекте с рассеивающей неоднородностью. Редуцированный коэффициент рассеяния неоднородной части также выбран втрое превышающим соответствующий показатель однородной части ($1,8 \text{ мм}^{-1}$ против $0,6 \text{ мм}^{-1}$). В этом случае (Рисунок 5) в основном произошло уменьшение средней

длины свободного пробега фотона [13] в области рассеивающей неоднородности, что удлинило траектории фотонов в окрестности этой неоднородности.



(a)



(б)

Рисунок 5 – Пространственное распределение фотонной плотности в неоднородном слое
 Figure 5 – Spatial distribution of photon density in a inhomogeneity slab

На Рисунке 5 неоднородность является рассеивающей и имеет диаметр 3 мм в первом случае (а) и 6 мм во втором (б). Затраты машинного времени на моделирование неоднородных случаев (Рисунок 4 и Рисунок 5) превысили аналогичные затраты в однородном случае, и соответственно составили $\approx 16,7$ и $\approx 17,5$ секунды. Разница в результатах при идентичном вычислительном модуле и количестве моделируемых фотонов связана с большим количеством сегментов в геометрической модели и более сложным контуром их границ, что соответственно усложнило формирование ветвей фракталов в виде деревьев Пифагора. Тем не менее, даже 17,5 секунд – это чуть более чем на 35 % быстрее, чем то же самое программное обеспечение в классическом случае,

т. е. с отключенным режимом повышения производительности вычислений за счет использования принципа самоподобия.

Заключение

В работе представлен вычислительно эффективный подход к математическому моделированию фотонного транспорта в биологических тканях на основе метода статистических испытаний Монте-Карло и характерного для фракталов принципа самоподобия. Предложенная модель позволяет ускорить процесс численного моделирования пространственных распределений фотонной плотности в биологических тканях без существенных потерь в достоверности получаемых результатов. Сравнение результатов математического моделирования с результатами натуральных экспериментов [6, 13] показало, что достоверность результатов численных расчетов по предложенной методике в среднем составляет 96 %. В рассмотренных случаях, когда моделировались распределения фотонной плотности в однородном слябе, а также в том же слябе с одной относительно крупной поглощающей и рассеивающей неоднородностью удалось добиться 35 % снижения затрат машинного времени.

Разработанная модель может быть полезна для совместного использования с результатами физических экспериментов, например, в задачах выявления закономерностей, связывающих изменения в оптических свойствах исследуемого биообъекта с характеристиками оказанного на него деформирующего воздействия [8, 12, 14].

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ / REFERENCES

1. Periyasamy V., Pramanik M. Advances in Monte Carlo Simulation for Light Propagation in Tissue. *IEEE Reviews in Biomedical Engineering*. 2017;10:122–135. <https://doi.org/10.1109/RBME.2017.2739801>
2. Bashkatov A.N., Genina E.A., Kochubey V.I., Tuchin V.V. Quantification of Tissue Optical Properties: Perspectives for Precise Optical Diagnostics, Phototherapy and Laser Surgery. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2016;49(50). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/49/50/501001>
3. Kangasniemi J., Mozumder M., Pulkkinen A., Tarvainen T. Stochastic Gauss-Newton Method for Estimating Absorption and Scattering in Optical Tomography with the Monte Carlo Method for Light Transport. *Biomedical Optics Express*. 2024;15(8):4925–4942. <https://doi.org/10.1364/BOE.528666>
4. Moiseev A.A., Ksenofontov S.Yu., Terpelov D.A., Gelikonov G.V., Kiseleva E.B., Sirotkina M.A., Gladkova N.D., Yashin K.S. Optical Coherence Angiography without Motion Correction Preprocessing. *Laser Physics Letters*. 2019;16(4). <https://doi.org/10.1088/1612-202X/aaf996>
5. Palmer G.M., Ramanujam N. Monte Carlo-based Inverse Model for Calculating Tissue Optical Properties. Part I: Theory and Validation on Synthetic Phantoms. *Applied Optics*. 2006;45(5):1062–1071. <https://doi.org/10.1364/AO.45.001062>
6. Потлов А.Ю., Фролов С.В., Проскурин С.Г. Численное моделирование миграции фотонов в однородных и неоднородных цилиндрических фантомах. *Оптика и спектроскопия*. 2020;128(6):832–839. <https://doi.org/10.21883/OS.2020.06.49417.33-20>
Potlov A.Yu., Frolov S.V., Proskurin S.G. Numerical Simulation of Photon Migration in Homogeneous and Inhomogeneous Cylindrical Phantoms. *Optics and Spectroscopy*. 2020;128(6):835–842. <https://doi.org/10.1134/S0030400X20060168>

7. Palmer G.M., Zhu C., Breslin T.M., Xu F., Gilchrist K.W., Ramanujam N. Monte Carlo-based Inverse Model for Calculating Tissue Optical Properties. Part II: Application to Breast Cancer Diagnosis. *Applied Optics*. 2006;45(5):1072–1078. <https://doi.org/10.1364/AO.45.001072>
8. Plekhanov A.A., Gubarkova E.V., Sirotkina M.A., Sovetsky A.A., Vorontsov D.A., Matveev L.A., Kuznetsov S.S., Bogomolova A.Y., Vorontsov A.Y., Matveyev A.L., Gamayunov S.V., Zagaynova E.V., Zaitsev V.Y., Gladkova N.D. Compression OCT-Elastography Combined with Speckle-Contrast Analysis as an Approach to the Morphological Assessment of Breast Cancer Tissue. *Biomedical Optics Express*. 2023;14(6):3037–3056. <https://doi.org/10.1364/BOE.489021>
9. Frolov S.V., Potlov A.Yu., Petrov D.A., Proskurin S.G. Monte Carlo Simulation of a Biological Object with Optical Coherent Tomography Structural Images using a Voxel-based Geometry of a Medium. *Quantum Electronics*. 2017;47(4):347–354. <https://doi.org/10.1070/QEL16204>
10. Cook P.D., Bixler J.N., Thomas R.J., Early E.A. Prediction of Tissue Optical Properties using the Monte Carlo Modeling of Photon Transport in Turbid Media and Integrating Spheres. *OSA Continuum*. 2020;3(6):1456–1476. <https://doi.org/10.1364/OSAC.377805>
11. Yang X., Ren A., Zhu T., Hu F. A Novel Digital Phantom Using an Optical Noncontact Measurement System. *IEEE Life Sciences Letters*. 2016;2(1):1–4. <https://doi.org/10.1109/LLS.2016.2568259>
12. Schuetzenberger K., Pfister M., Messner A., Froehlich V., Garhoefer G., Hohenadl C., Schmetterer L., Werkmeister R.M. Comparison of Optical Coherence Tomography and High Frequency Ultrasound Imaging in Mice for the Assessment of Skin Morphology and Intradermal Volumes. *Scientific Reports*. 2019;9(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-50104-4>
13. Фролов С.В., Потлов А.Ю. Система эндоскопической оптической когерентной томографии с повышенной точностью позиционирования катетера. *Медицинская техника*. 2019;(1):5–8.
Frolov S.V., Potlov A.Yu. An Endoscopic Optical Coherence Tomography System with Improved Precision of Probe Positioning. *Biomedical Engineering*. 2019;53(1):6–10. <https://doi.org/10.1007/s10527-019-09866-4>
14. Mekonnen T., Cheng S., Kourmatzis A., Amatory J. Simultaneous Multi-Spatial Scanning Optical Coherence Tomography (OCT) based on Spectrum-Slicing of a Broadband Source. *Measurement Science and Technology*. 2019;30(4). <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ab0c63>

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ / INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Потлов Антон Юрьевич, кандидат технических наук, доцент кафедры «Биомедицинская техника» Тамбовского государственного технического университета, Тамбов, Российская Федерация
Anton Yu. Potlov, Ph.D in Engineering, Associate Professor of the Biomedical Engineering Department of the Tambov State Technical University, Tambov, the Russian Federation.
e-mail: zerner@yandex.ru
ORCID: [0000-0001-9376-3688](https://orcid.org/0000-0001-9376-3688)

Статья поступила в редакцию 23.08.2024; одобрена после рецензирования 07.09.2024; принята к публикации 10.09.2024.

The article was submitted 23.08.2024; approved after reviewing 07.09.2024; accepted for publication 10.09.2024.