

## Janusz MROCZKA, Piotr BINEK

KATEDRA METROLOGII ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ, UL. B. PRUSA 53/55, 50-317, WROCŁAW (POLITECHNIKA WROCŁAWSKA)

# Metoda Monte Carlo w opisie wielowarstwowych ośrodków dyspersyjnych

prof. dr hab. inż. Janusz MROCZKA

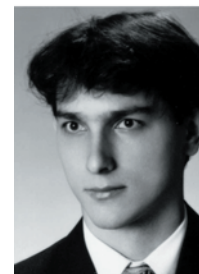
Kierownik Katedry Metrologii Elektronicznej i Fotonicznej Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się metodologią obserwacji i eksperymentu, algorytmizacją problemu odwrotnego, modelowaniem matematycznym pól fizycznych, analizą spektralną i polaryzacyjną promieniowania rozproszonego, reprezentacjami czasowo-częstotliwościowymi w przetwarzaniu danych.



e-mail: janusz.mroczka@pwr.wroc.pl

dr inż. Piotr BINEK

Doktor Politechniki Wrocławskiej. Zajmuje się badaniem rozpraszania światła w ośrodkach dyspersyjnych, tj. atmosfera, ośrodki medyczne, oraz aplikacją i praktycznym wykorzystaniem metod numerycznych w modelowaniu i symulacji problemów rozproszenia wielokrotnego w tym: równania transferu, pojedynczego rozpraszanie.



e-mail: piotr.binek@pwr.wroc.pl

### Streszczenie

Wielokrotne rozpraszanie światła w wielowarstwowych ośrodkach jest przedstawione na przykładzie ośrodka biologicznego skóry. Autorzy przedstawili nowy, szybki i elastyczny model numeryczny Monte Carlo i na jego podstawie wyznaczają rozproszenie światła odbitego od wielowarstwowego modelu skóry.

**Słowa kluczowe:** Metoda Monte Carlo, ośrodek wielowarstwowy, skóra

## Monte Carlo method in analysis of multi-layer dispersive medium

### Abstract

The multiple scattering of light in a multi-layer medium is described on the example of a biological medium – skin. Authors describe a new, elastic, and fast Monte Carlo method that calculates reflected light by a multi-layer model of skin.

**Keywords:** Monte Carlo method, multi-layer medium, skin

## 1. Wstęp

Badanie rozproszenia światła w ośrodkach dyspersyjnych jest zasadnicze w analizie złożonej struktury ośrodka, gdzie definiujące go parametry, np. funkcja fazowa, współczynnik tłumienia, załamania mogą zmieniać się z głębokością w ośrodku. Przykładami takich ośrodków, w których zmianie ulegają parametry fizyko-chemiczne są: atmosfera, w której można rozróżnić różne warstwy o zmiennej gęstości, kształcie cząsteczek, które z reguły są niesferyczne, oraz jej właściwości rozpraszające zależą silnie od głębokości, tj. od wysokości mierzonej od góry atmosfery w kierunku ziemi; układ atmosfera – ocean; oraz ośrodek biologiczny np. skóra.

Analiza matematyczna takiego ośrodka sprowadza się najczęściej do rozpatrywania pojedynczej warstwy, gdzie np. zmiana współczynnika załamania z głębokością w skórze jest przyjmowana jako wielkość uśredniona stała, bądź jest pomijana w celu uproszczenia analizy. Uproszczenie złożonej struktury wprowadza różne błędy w obliczeniach, które powodują zniekształcenie rzeczywistego obrazu ośrodka dyspersyjnego.

Obecnie prowadzone prace mają na celu skonstruowania odpowiedniego modelu do analizy złożonych wielowarstwowych ośrodków dyspersyjnych. Modelami numerycznymi używanymi w obliczeniu wielokrotnego rozproszenia światła są: metoda

dodawania-podwajania, wielu-strumieni oraz Monte Carlo. Każda z wskazanych metod ma swoje wady i zalety [5,6], a najbardziej z nich elastyczną okazuje się być metoda Monte Carlo [7], dla której poza dowolną geometrią ośrodka, źródłem promieniowania, można wpłynąć zmian współczynnika załamania na właściwości makroskopowe ośrodka.

Artykuł przedstawia wykorzystanie skonstruowanej przez autora metody Monte Carlo MCP w obliczeniu rozproszenia światła w wielowarstwowym ośrodku na przykładzie skóry. Autorzy rozpatrują różne modele skóry porównując otrzymane wyniki z dostępnymi publikacjami.

## 2. Wprowadzenie

Skóra jest jednym z największych organów ludzkiego ciała. Penetracja światła przez warstwę skóry jest ważnym elementem diagnostyki i terapii medycznej. Skóra jest zwykle dzielona na trzy warstwy: naskórek, skóra właściwa oraz podskórna warstwa tłuszczowa. Każda z wymienionych warstw jest zbudowana z jej własnych warstw.

W poszczególnych warstwach skóry wyróżnić możemy następujące zjawiska: absorpcję oraz rozpraszanie.

Absorpcja światła w skórze silnie zależy od zawartości wody, białek i tłuszczów. Jak wykazały badania, skóra zawiera różne chromofory, które absorbują światło w szerokim zakresie fal: od ultrafioletu do bliskiej podczerwieni [15]. Głównym elementem odpowiedzialnym za absorpcję światła w naskórku są melanocyty zawierające melaninę. Sama melanina jest silnie absorbującym związkami i jej właściwości są obecnie mało znane. Źródłem melaniny jest eumelalina odpowiedzialna za pigmentację skóry od czarnej do ciemno brązowej, oraz pheomelalina, która nadaje skórze koloru od żółtej do czerwono-brązowej. Drugim elementem silnie absorbującym światło w skórze jest krew a sama skóra zawiera około 0.2-5% krwi.

Optyczne rozpraszanie promieniowania w skórze jest podyktowane przez trzy elementy: zmianę współczynnika załamania ośrodka wywołaną różnymi wartościami współczynnika załamania w warstwach skóry, wpływem rozpraszania z włókien kolagenowych w skórze właściwej, membranową strukturą tkanek oraz małą skalą rozpraszania z cząstek w polimerach i agregatach tłuszczów. Współczynnik załamania włókien w skórze przyjmuje wartość równą 1.38 [10]. Sumując powyższe elementy wynikające z rozpraszania i absorpcji możemy zbudować model skóry i analizować jego własności optyczne, konieczne w badaniach diagnostycznych i terapeutycznych.

### 3. Metodyka pracy

#### 3.1. Wielowarstwowy model skóry

Oddziaływanie światła z wielowarstwową i wieloelementową skórą jest bardzo złożonym procesem. Naskórek odbija około 5-7% padającego światła. Ponadto, ważnym elementem jest wybór odpowiedniej długości światła, gdzie penetracja jest największa. Absorpcje światła rozproszonego przez skórę jest mierzona zawartością bilirubiny, nasycenia tlenem hemoglobiny oraz koncentracją innych związków we krwi i skórze. Rozpraszanie światła w skórze było analizowane przez wielu badaczy. Proste modele obejmowały pojedynczą warstwę, gdzie średnie optyczne parametry były podane dla całej skóry [2,9]. Kolejne modele coraz dokładniej uwzględniały problem absorpcji i rozpraszania światła, z rozdzieleniem poszczególnych warstw skóry. Jeden z takich modeli badał Gemert i Jacques [12] rozpatrując dwie warstwy – naskórka i skóry z jednorodnym rozkładem krwi. Ten prosty model był następnie wykorzystany w obliczeniu właściwości rozpraszających tkanki z pomiaru odbicia i transmisji [9]. Meglinski i Matcher [8] przedstawili model wielowarstwowej skóry z uwzględnieniem właściwości absorbujących i rozpraszających poszczególnych warstw skóry. Problem wielowarstwowej skóry pod kątem pigmentacji skóry badali Baranoski i Krishnaswamy [1] z wykorzystaniem do grafiki komputerowej.

Optyczne rozpraszanie promieniowania w skórze jest podyktowane przez trzy elementy: zmianę współczynnika załamania ośrodka wywołaną różnymi wartościami współczynnika załamania w warstwach skóry, wpływem rozpraszania z włókien kolagenowych w skórze właściwej, membranową strukturą tkanek oraz małą skalą rozpraszania z cząstek w polimerach i agregatach tłuszczów.

#### 3.2. Metoda Monte Carlo

Metoda Monte Carlo jest techniką skonstruowania probabilistycznego modelu rzeczywistego procesu do estymacji pewnych średnich właściwości, tj. wariancji i kowariancji. Jest jedną z metod rozwiązania równania transferu opisującego proces wielokrotnego rozproszenia światła.

Równanie transferu jest równaniem różniczkowo-całkowym opisywanym w metodzie Monte Carlo przez stacjonarne łańcuchy Markowa [7,13,16], które opisują kolizję „fotonu” z cząstkami w ośrodku, gdzie „foton” oznacza paczkę fotonów, która jest emitowana ze źródła promieniowania. Stacjonarny łańcuch Markowa jest definiowany jako sekwencja losowych stanów  $x_0, x_1, \dots, x_n$ , tak że rozkład  $x_n$  jest niezależny od wszystkich poprzednich stanów, z wyjątkiem jego bezpośredniego poprzednika  $x_{n-1}$ :

$$P(x_n = x | x_{n-1} = x', \dots, x_2 = s_2, x_1 = s_1) = P(x_n = x | x_{n-1} = x') = r(x', x). \quad (1)$$

Kiedy w ośrodku ma miejsce kolizja, tj. mogą wystąpić absorpcja lub rozpraszanie. W pierwszym przypadku foton kończy swoje życie, natomiast w drugim opuszcza on punkt kolizji w nowym kierunku.

W procesie symulacji foton emitowany ze źródła promieniowania wprowadzany jest w ośrodek. W trakcie podróży przez niego może doświadczyć: rozproszenia, absorpcji lub ucieczki z badanego ośrodka. W ostatnim przypadku kończy on swoje życie i wypuszczany jest kolejny foton. W procesie symulacji rejestruje się fotony zaabsorbowane, odbite i przechodzące przez ośrodek. W symulacji Monte Carlo zakłada się: stacjonarność procesu; nie ma zmiany długości fali;

promieniowanie jest opisywane przez jego skalarnie natężenie (nie uwzględniamy polaryzacji).

W poniższym artykule metoda Monte Carlo użyta do obliczenia RTE, wykorzystuje następujący schemat symulacji trajektorii fotonów [3,4,7,13,16]:

1. Oryginalna pozycja fotonu jest symulowana przez funkcję źródła.
2. Długość wolnej ścieżki  $\Delta s$  jest obliczana.
3. Sprawdzamy czy foton ucieka z ośrodka.
4. Współrzędne nowej kolizji są obliczane:

$$\begin{aligned} x &= x' + \mu_x \Delta s, \\ y &= y' + \mu_y \Delta s, \\ z &= z' + \mu_z \Delta s, \end{aligned} \quad (2)$$

gdzie  $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  są kosinusami kierunkowymi:

$$\begin{aligned} \mu_x &= \cos \varphi \cdot \sin \theta, \\ \mu_y &= \sin \varphi \cdot \sin \theta, \\ \mu_z &= \cos \theta. \end{aligned} \quad (3)$$

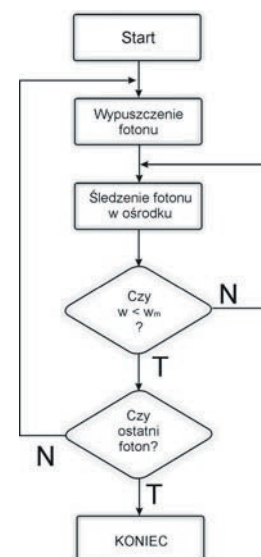
5. Symulujemy typ kolizji (absorpcja lub rozpraszanie).
6. Kosinus kąta rozpraszania  $\mu = \cos(\theta)$  jest wyznaczany:
7. Współrzędne nowego kierunku są obliczane:

$$\begin{aligned} \mu_x &= \mu_x' \mu - (\mu_y' \sin \varphi + \mu_z' \cos \varphi) \sqrt{(1 - \mu^2) / (1 - \mu_z'^2)} \\ \mu_y &= \mu_y' \mu + (\mu_x' \sin \varphi - \mu_z' \cos \varphi) \sqrt{(1 - \mu^2) / (1 - \mu_z'^2)} \\ \mu_z &= \mu_z' \mu + (1 - \mu_z'^2) \cos \varphi \sqrt{(1 - \mu^2) / (1 - \mu_z'^2)} \end{aligned} \quad (4)$$

w których  $\varphi = 2\pi R$ , gdzie R jest liczbą losową generowaną z rozkładu normalnego pomiędzy [0,1].

8. Idź do punktu 2.

Jeśli wystąpi ucieczka w (3) lub absorpcja w (5), to wypuszczany jest kolejny foton. Proces trwa do chwili kiedy wszystkie fotony zostaną wpuszczone w modelowany ośrodek. Algorytm metody Monte Carlo zaimplementowany w obecnym przypadku przedstawiono na Rys. 1.



Rys. 1. Algorytm metody Monte Carlo.  
Fig. 1. The algorithm of Monte Carlo method.

Metoda Monte Carlo nie jest szybką metodą obliczeniową, ale z wykorzystaniem technik redukcji różnic jej szybkość rośnie a otrzymana dokładność zwiększa się.

## 4. Wyniki

Do obliczenia światła rozproszonego w skórze wykorzystano model 3 i 5 warstwowy skóry przedstawiony w pracach Gamet i Jacques [11,12], Meglinski i Matcher [8] oraz Tuchin [14] opisany szerzej w pracy [13].

### 4.1. Model 3 warstwowy

Prostym intuicyjnie modelem skóry jest 3 warstwowy model, który przedstawił Jacques [11]. Model zbudowany jest z warstwy rogowej naskórka, warstwy podskórnej naskórka oraz skóry z różną koncentracją krwi wynoszącą odpowiednio: 0 %, 1% lub 2%. Symulacje zostały przeprowadzone także przy trzech różnych długości promieniowania widzialnego padającego na skórę w celu zbadania wpływu długości promieniowania na absorpcję światła przez krew. Jak wskazano wcześniej krew bardzo silnie absorbuje promieniowanie, a szczególnie w zakresie widma światła widzialnego. Ponadto widmo krwi utlenowanej i nieutlenowanej jest różne. Dlatego ważne jest zbadanie wpływu różnej koncentracji krwi w skórze. Właściwości optyczne i geometryczne dla prezentowanego modelu skóry przedstawiono w Tab. 1.

Tab. 1. Model 3 warstwowy skóry – parametry optyczne i geometryczne.  
Tab. 1. Three layered skin model – optical and geometrical properties.

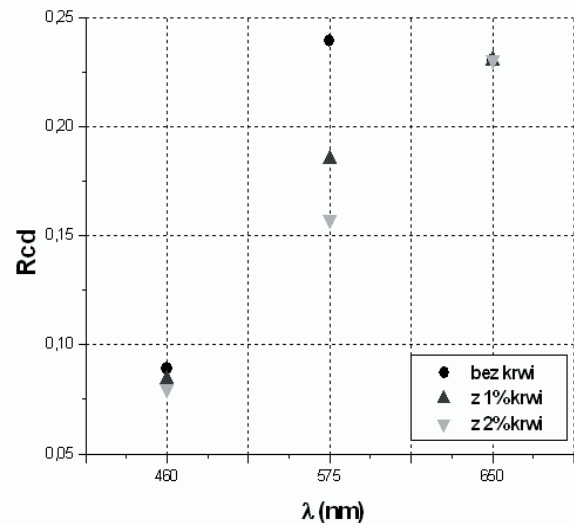
Warstwa	$\lambda$	$\mu_a$	$\mu_s$	g	n	d
Warstwa rogowa naskórka	460	30	210	0.75	1.45	0.001
	575	10	200	0.79		
	650	4	100	0.89		
Naskórek	460	30	210	0.75	1.45	0.01
	575	10	200	0.79		
	650	4	100	0.89		
Skóra bez krwi	460	11	216	0,75	1,40	0,2
	575	2,8	215	0,79		
	650	2	180	0,89		
Skóra z 1% krwi	460	13.69	219.8	0.75	1,399	0.2
	575	6.012	217.9	0.79		
	650	1.995	181.2	0.89		
Skóra z 2% krwi	460	16.38	223.7	0.75	1,399	0.2
	575	9.244	220.7	0.79		
	650	1.99	182.4	0.89		

W Tab. 2 przedstawiono wyniki symulacji. Obecna metoda Monte Carlo MCP została porównana z obliczeniami wykonanymi programem MCJ Jacques [11,12]. Wyniki otrzymane przez autorów ukazują wyższość obecnego modelu MCP w porównaniu do modelu MCJ. Różnica w wynikach jest rzędu 8 %.

Tab.2. Wyniki symulacji dla 3 warstwowego modelu skóry.  
Fig. 2. The results of simulation for 3 layers model of skin.

Ilość krwi	$\lambda$ [nm]	MCP	MCJ	Różnica [%]
0 %	460	0,0890	0,0823	7,5358
	575	0,2392	0,2242	6,2915
	650	0,2303	0,2154	6,4737
1%	460	0,0841	0,0776	7,7725
	575	0,1852	0,1729	6,6206
	650	0,2303	0,2154	6,4493
2 %	460	0,0799	0,0738	7,6406
	575	0,1573	0,1463	6,9631
	650	0,2306	0,2156	6,5129

Badania przy pomocy obydwu metod tj. MCP i MCJ pokazały, że w przypadku wielowarstwowej atmosfery, metoda MCP jest lepsza a jej dokładność jest porównywalna z metodą dodawania-podstawiania warstw.



Rys. 2. Odbicie Rcd dla modelu skóry przez różnej koncentracji krwi w skórze.  
Fig. 2. Reflectance Rcd of skin model for different blood concentration in skin.

Na Rys. 2 przedstawiono wykres zmian Rcd w funkcji długości padającej fali, przy różnych koncentracjach krwi w skórze. Największa czułość na zmianę ilości krwi w skórze jest dla długości fali 575 nm. Przy tej długości fali można badać rozkładu krwi w tkance, nasycenia tlenem mięśni podczas wysiłku, oraz dokonać oszacowania zmian wywołanych utlenowaniem i nasyceniem tkanki w krew. Przy dwóch skrajnych rozpatrywanych długościach fali, różnicę pomiędzy skórą bogatą w krew i jej pozbawioną są nieznaczne, a przy długości 650 nm niewidoczne.

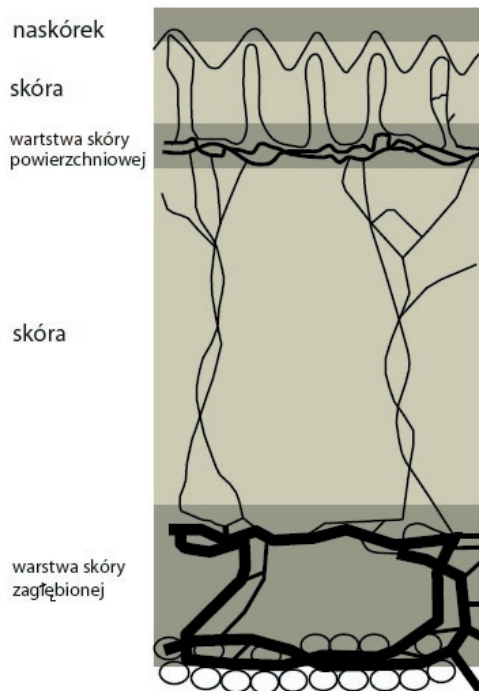
### 4.2. Model 5 warstwowy

Tuchin [14] oraz Meglinski i Sten [8] przedstawili bardziej złożony model skóry, która złożony jest odpowiednio z 5 lub 6 warstw. Parametry optyczne poszczególnych warstw skóry dla modelu 5 warstwowego ukazuje Tab. 2. W wielu aplikacjach medycznych, tj. tomografia optyczna, oksymetria, interesujący jest rozkład natężenia światła odbitego, które pada pod różnym kątem na skórę.

Tab. 3. Optyczne właściwości modelu 5 warstwowego skóry.  
Tab. 3. Optical properties 5 layers skin model.

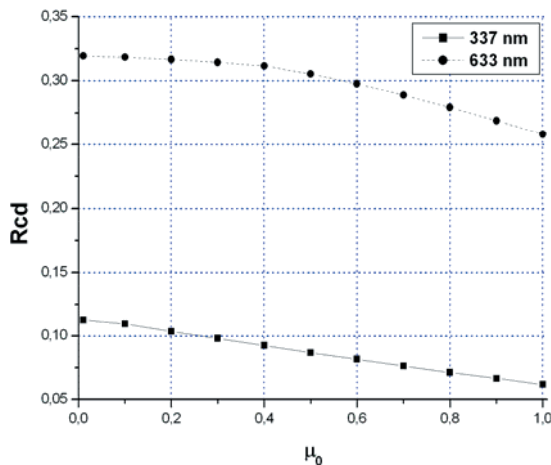
Warstwa	$\lambda$ [nm]	$\mu_a$	$\mu_s$	g	n	d
Naskórek	337	32	165	0,72	1,5	0,01
	633	4,3	107	0,79		
Skóra	337	23	227	0,72	1,4	0,02
	633	2,7	187	0,82		
Warstwa skóry powierzchniowej	337	40	246	0,72	1,4	0,02
	633	3,3	192	0,82		
Skóra	337	23	227	0,72	1,4	0,09
	633	2,7	187	0,82		
Warstwa skóry zagłębionej	337	46	253	0,72	1,4	0,06
	633	3,4	194	0,82		

Schematyczny przekrój skóry dla analizowanego modelu przedstawiono na Rys. 3.



Rys. 3. Przekrój przez 5 warstwową skórę from Tuchin [14].  
Fig. 3. The cross section of 5 layer skin from Tuchin [14].

Wykres zmian funkcji odbicia skolimowano-dyfuzyjnego  $R_{cd}$  w funkcji zmian kąta padania światła, przedstawia Rys. 4.



Rys. 4. Odbicie  $R_{cd}$  w funkcji kąta padania dla dwóch długości światła.  
Fig. 4. Reflectance  $R_{cd}$  as a function of incidence angle for two lengths of light.

Natężenie światła odbitego od skóry pod różnym kątem padania, zmienia się z zmianą długości fali. Wartość  $R_{cd}$  jest dużo większa dla 633 nm niż dla 337 nm, co jest wynikiem mniejszej absorpcji światła wywołaną melaniną obecną w skórze. Zauważmy ponadto, że wybór odpowiedniej długości fali do badania właściwości optycznych skóry i tkanek ma bardzo duże znaczenie, zarówno w diagnostyce medycznej jak i terapii światłem laserowym. Także kąt padania światła i kąt odbioru detektora w tomografii optycznej wpływają na wartość otrzymanego sygnału. Przy małych amplitudach funkcji odbicia  $R_{cd}$ , możemy mieć do czynienia z małym stosunkiem sygnału do szumu i zwrotna informacja o tkance może być zafałszowana.

## 5. Podsumowanie

Analiza rozproszenia światła w ośrodkach wielowarstwowych ma duże znaczenie w opisie, ocenie oraz weryfikacji skonstruowanych modeli symulacyjnych. Przedstawiona metoda Monte Carlo doskonale nadaje się do badania ośrodków wielowarstwowych, gdzie zmianie podlega szereg parametrów fizyko-chemicznych, które w dużym stopniu modyfikują otrzymane charakterystyki rozproszenia światła.

Złożoność i skomplikowana natura badanego ośrodka może być w prosty sposób zaimplementowana w metodzie Monte Carlo używając wskazanego algorytmu. Wykorzystując proste operacje matematyczne możliwe jest obliczenia złożonego równania transferu (RTE) [2,3].

Autorzy przedstawili złożoność modelu na przykładzie analizy wielowarstwowej skóry. Procesy rozpraszania, absorpcji w skórze są opisywane przez: zmianę współczynnika załamania ośrodka wywołaną różnymi wartościami współczynnika załamania w warstwach skóry, wpływem rozpraszania z włókien kolagenowych w skórze właściwej, membranową strukturą tkanek oraz małą skalą rozpraszania z cząstek w polimerach i agregatach tłuszczów. Przeprowadzone badania i symulacje wskazują, że metoda Monte Carlo doskonale nadaje się do badania ośrodków wielowarstwowych takich jak skóra.

Binek [13] przedstawił użycie metody Monte Carlo w badaniu wielowarstwowej atmosfery z różnymi właściwościami optycznymi poszczególnych warstw.

## Podziękowania

Artykuł i badania zostały sfinansowane przez Komitet Badań Naukowych KBN grant 3 T10C 030 26.

## 6. Literatura

- [1] Baranoski V.G., Krishnaswamy A., A study on skin optics, Technical Report CS-2004-01, Styczeń 2004.
- [2] Enejder A., Light scattering and absorption in tissue – models and measurements, Praca doktorska, Uniwersytet Lound, 1997.
- [3] Hendricks J.S., Booth T.E., MCVP variance reduction overview. W R. Alcouffe, R. Dautray, A. Forster, G. Ledanois, and B. Mercier, editors, *Methods and Applications in Neutronics, Photonics and Statistical Physics*, 83-92. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [4] Kattawar G.W., Plass G.N., Radiance and polarization of multiple scattered light from haze and clouds, *Applied Optics*, 7, 1519-1527, 1968.
- [5] Lenoble J., Radiative transfer in scattering and absorbing atmospheres, standard computational procedures, A. Deepak Publishing, 1985.
- [6] Liou K., An introduction to atmospheric radiation, Academic Press 1980.
- [7] Marchuk G.I. i inni, The Monte Carlo methods in atmospheric optics, Springer-Verlag, Berlin 1980.
- [8] Meglinski I.V., Matcher S.J., Computer simulation of the skin reflectance spectra, *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 70, 2003, 179-186.
- [9] Pickering J.W., Prah S.A. i inni, Double-integrating-sphere system for measuring the optical properties of tissue, *Appl. Opt.* 32, 1993, 399-410.
- [10] Saidi I.S., Jacques S.L., Tittle F.K., Mie and Rayleigh modeling of visible-light scattering in neonatal skin, *Appl. Opt.* 34, 1995, 7410-7418.
- [11] Wang L., Jacques S.L., Zheng L., MCML - Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues, *Computer Methods and Programs in Biomedicine* 47, 1995, 131-146.
- [12] Gemert M.J.C., Jacques S.L., Sterenborg H.J., Star W.M., Skin optics, *IEEE Tran. Biomedical engineering*, 36, 1989, 1146-1989.
- [13] Binek P., Analiza ośrodków gęstych z wykorzystaniem macierzy-T, Rozprawa doktorska, Politechnika Wroclawska, Wrocław 2007.
- [14] Tuchin V.V., Light scattering study of tissues, *Physics-Uspekh* 40, 1997, 495-515.
- [15] Young A.R., Chromophores in human skin, *Phys. Med. Biol.* 42, 1997, 789-802.
- [16] Zhensen W., Yi Y., Lihong C., Monte Carlo simulation for millimeter wave propagation and scattering in rain medium, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, vol. 13, 7, 69-82, 1992.