

Справочная таблица для спектрального анализа мутных сред в режиме отражения, основанная на расчете методом Монте-Карло*

Сянь Вэнь, Сивей Чжун, Тиньтинь Ю, Дэн Жу

Волоконно-оптическая спектроскопия диффузного отражения использована для характеристики фантомов биоткани с заданными оптическими свойствами. Для коммерческого зонда, детектирующего отраженный свет (шесть освещающих волокон, расположенных вокруг центрального детектирующего волокна, расстояние между волокнами 480 мкм; R400-7, Ocean Optics, США), на основе расчетов методом Монте-Карло построена справочная таблица для создания функции $getR(\mu_a, \mu_s')$, где μ_a – коэффициент поглощения, а μ_s' – приведенный коэффициент рассеяния. Экспериментальные значения отражательной способности однородных калиброванных фантомов с заданными оптическими свойствами сравнивались с расчетными значениями из справочной таблицы. Отклонение между экспериментальной и прогнозируемой величинами составило в среднем 12.1%.

Ключевые слова: оптические волокна, диффузное отражение, оптические спектры, мутные среды, метод Монте-Карло.

1. Введение

Разрабатывавшаяся более 20 лет спектроскопия ближнего ИК диапазона стала привлекательным инструментом для решения разного рода аналитических задач для всех видов образцов из различных областей, в том числе сельского хозяйства, пищевой, химической, фармацевтической и текстильной промышленности, полимеров, косметики и медицины [1–4]. Спектроскопия диффузного отражения является эффективным методом для неинвазивного получения информации об оптически чувствительных молекулярных компонентах мутных сред. Для количественной оценки соотношения спектральных компонент применяется либо метод многомерного анализа [5, 6], либо метод на основе физической модели [7, 8]. Метод многомерного анализа отработывается на эмпирической модели анализа спектров с известными концентрациями каждого компонента среды, в то время как физическая модель «пересчитывает» отражение на каждой длине волны в оптические свойства (коэффициент поглощения μ_a (см⁻¹), приведенный коэффициент рассеяния μ_s' (см⁻¹)), а затем определяет состав мутной среды по ее оптическим свойствам. По сравнению с методом многомерного анализа физическая модель дает представление о каждой компоненте спектра без какой-либо априорной информации о наборе спектров среды.

Для создания физической модели спектра отражения были предложены диффузионное приближение [8], полу-

эмпирическое аналитическое решение [9], основанная на эксперименте справочная таблица (СТ) [7, 10], а также модель, использующая моделирование методом Монте-Карло (МК) [11, 12]. Диффузионное приближение подходит для описания только многократного рассеяния, но неприменимо для близко расположенных освещающих и детектирующих волокон [13]. Сочетание диффузионного приближения с экспериментами на фантомах позволило разработать полуэмпирическое аналитическое решение, справедливое для такого случая [9]. Однако при расширении используемого диапазона оптических свойств для сохранения необходимой точности требуется большее количество параметров для калибровки [14]. Таким образом, экспериментальная СТ становится альтернативным описанием отражательной способности мутных сред с различными оптическими свойствами [7]. СТ была получена путем измерения коэффициента отражения фантомов с известными оптическими свойствами. Однако точность определения оптических свойств при инверсном моделировании «страдает» не только от конечного числа используемых фантомов, но и от артефактов, вызванных подготовкой фантомов к измерениям. В противоположность этому, моделирование методом МК – золотым стандартом моделирования – широко используется для исследования сложных систем и процессов, проверки приближенных теоретических моделей и оценки новых методов [15]. Его также можно использовать при любой конструкции зонда и для анализа спектров диффузного отражения [11, 12]. Хотя первичное моделирование времязатратно, СТ на основе метода МК способна обеспечить быстрый анализ спектра. Для построения такой СТ при моделировании необходимо учитывать геометрию волоконного зонда, а достоверность СТ должна быть проверена экспериментально.

Были сконструированы волоконно-оптические зонды, состоящие из расположенных по кругу шести освещающих волокон, доставляющих белый свет, и центрального волокна для сбора отраженного света в спектрально-чувствительный детектор [7]. В настоящей работе в качестве примера используется коммерчески доступный зонд

* Перевод с англ. А.П.Попова.

Xiang Wen, Xiewei Zhong, Tingting Yu, Dan Zhu. Britton Chance Center for Biomedical Photonics, Wuhan National Laboratory for Optoelectronics-Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China; Key Laboratory of Biomedical Photonics of Ministry of Education, Department of Biomedical Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China; e-mail: dawnzh@mail.hust.edu.cn

Поступила в редакцию 19 февраля 2014 г., после доработки – 20 марта 2014 г.

R-400-7 (Ocean Optics, США), однако разработанная процедура применима к любым зондам подобной конструкции. В этом зонде близкое расположение волокон (диаметр каждого волокна 400 мкм, расстояние между центрами волокон 480 мкм) и окружающий металлический фланец, поддерживающий волокна, делают неправомерным непосредственное применение диффузионной теории для предсказания отклика зонда для сред с различными оптическими свойствами. Геометрия зонда отличается от геометрии, рассмотренной в предыдущих работах с моделированием методом МК [11, 12]. Представленный метод МК-моделирования откроет более широкие возможности применения коммерчески доступного датчика для спектрального анализа.

В настоящей работе была подготовлена СТ на основе МК-расчетов и разработана функция интерполяции СТ для конкретных значений коэффициента поглощения μ_a и приведенного коэффициента рассеяния μ'_s с целью получения коэффициента отражения волоконно-оптического зонда R . Для калибровки и проверки СТ измерялся коэффициент отражения фантомов с различными оптическими свойствами.

2. Материалы и методы

2.1. Профиль волоконного зонда

Лицевая сторона волоконно-оптического зонда R-400-7 (Ocean Optics, США) показана на рис.1. Шесть расположенных по кругу волокон доставляют свет от галогеновой вольфрамовой лампы HL-2000 (Ocean Optics, США) к образцу, а центральное волокно собирает отраженный от среды свет и доставляет его в спектрометр USB-4000 (Ocean Optics, США). Диаметр всех волокон $2r = 400$ мкм ($NA = 0.22$), а расстояние между центрами освещающих и детектирующего волокон $d = 480$ мкм. Волокна поддерживает металлический фланец радиусом 740 мкм. Источник света – галогеновая вольфрамовая лампа – имеет широкий спектр в видимом и ближнем ИК диапазонах. Для анализа использовалась часть спектра в диапазоне 500–900 нм с разрешением 1.5 нм (ширина на полувысоте). Все спектры были откалиброваны по сертифицированному отражательному стандарту SRS-99-020 (Labsphere, США). Калибровочные спектры собирались на фиксированном расстоянии (5 см) от стандарта.

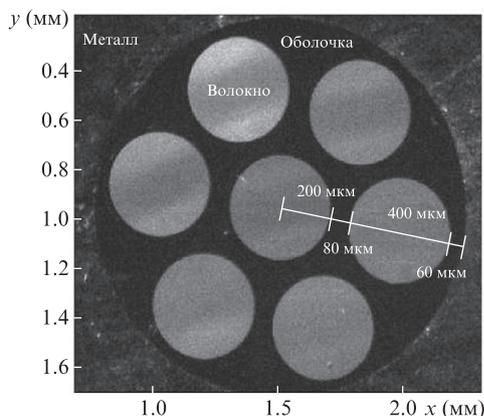


Рис.1. Лицевая сторона волоконно-оптического зонда. Диаметры всех волокон составляют 400 мкм, расстояние между центрами волокон – 480 мкм. Радиус металлического фланца, поддерживающего волокна, равен 740 мкм.

2.2. МК-моделирование коэффициента отражения

Подробная процедура моделирования отражения R реализована и описана в работе [4]. Для сокращения времени расчета был применен метод ускоренного МК-моделирования с использованием графического процессора [16], а для получения зависимости коэффициента диффузного отражения R от диаметра освещающего волокна использована программа CONV [17]. После этого коэффициент отражения интегрировался по всей площади собирающего волокна для определения вероятности детектирования фотона, прошедшего фиксированное расстояние (для данной геометрии зонда). Безразмерный моделируемый коэффициент отражения, собранный волоконном (M_R), определялся из выражения

$$M_R = 6 \int_{d-r}^{d+r} 2R(x)x \arccos\left(\frac{d^2 + x^2 - r^2}{2dx}\right) dx, \quad (1)$$

где коэффициент перед интегралом учитывает наличие шести освещающих волокон, окружающего волокно детектора; R – коэффициент отражения, полученный после обработки по программе CONV; d – расстояние между центрами волокон; r – радиус волокна.

В моделировании методом МК число имитируемых фотонов было 10^6 , показатели преломления мутной среды и зонда составляли 1.4 и 1.52 соответственно, а фактор анизотропии рассеяния – 0.7. В общей сложности была промоделирована отражательная способность мутных сред со 120 различными комбинациями μ_a и μ'_s в диапазонах: $\mu_a = 0.001 - 19.7 \text{ см}^{-1}$ и $\mu'_s = 0.3 - 614.4 \text{ см}^{-1}$. Двумерная матрица рассчитанного коэффициента отражения $R_s(\mu_a, \mu'_s)$ в логарифмическом масштабе может служить справочной таблицей для ожидаемого значения коэффициента отражения R для среды с заданными коэффициентами μ_a и μ'_s . Функция $\text{getR}(\mu_a, \mu'_s)$, написанная в MATLAB, возвращает значение R_s для выбора значений μ_a и μ'_s .

2.3. Калибровка моделируемого спектра в экспериментах с однородными фантомами

Для калибровки МК-моделирования были изготовлены однородные фантомы с различными оптическими свойствами. Фантомы изготавливались из 20%-интралипида (SichuanKelun Pharmaceutical Co., Ltd, Китай) с добавлением туши (Solarbio, Китай). Для создания 21 фантома использовались растворы интралипида трех концентраций (20%, 5% и 1.25%) в качестве рассеивателя и туши (семь концентраций) в качестве поглотителя. Перед использованием туши коэффициенты поглощения всех имеющихся в наличии растворов измерялись на высокоточном спектрофотометре (Lambda 950, Perkin Elmer, США). Для определения оптических свойств фантомов предварительно проводились измерения плотности мощности в сочетании с методом добавления поглотителя [18]. Оптические свойства раствора интралипида различных концентраций показаны на рис.2. Поглощение раствора интралипида было обусловлено, в первую очередь, водой и липидами, причем в области длин волн, больших 700 нм, преобладало поглощение воды. Калибровочные эксперименты показали хорошее совпадение измеренных и опубликованных коэффициентов поглощения интралипида и воды в спектральном диапазоне 700–1000 нм [19, 20].

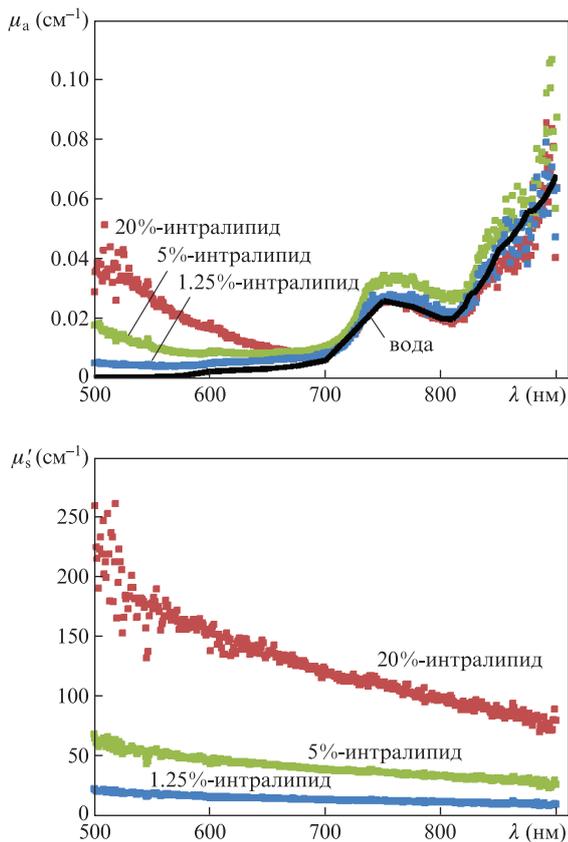


Рис.2. Оптические свойства растворов интралипида, восстановленные в результате измерения плотности мощности в сочетании с методом добавления поглотителя: коэффициенты поглощения растворов интралипида концентраций 20%, 5% и 1.25% и воды (данные из работы [19]) (а), а также коэффициенты рассеяния растворов интралипида тех же концентраций (б).

Коэффициент рассеяния растворов интралипида (20%, 5% и 1.25%) охватывает диапазон 8.11–260 см⁻¹. Добавление от одного до семи раз (по 200 мкл) имеющегося раствора туши в каждый из трех растворов интралипида (объемом 200 мл) изменяло коэффициенты поглощения фантомов от 0.0032 до 31.6 см⁻¹. После каждого добавления туши новое значение коэффициента отражения фантома добавлялось к набору данных $R_c(\mu_a, \mu'_s)$. Чтобы получить лучшую оценку для СТ на основе метода МК, использовался только спектр от 600 до 800 нм (низкий уровень шума, см. рис.2).

Поскольку моделируемый коэффициент отражения R_s нормирован, перед сравнением с измеренным коэффициентом отражения R_s должен быть умножен на константу K . Уравнение

$$\chi = \sum \left[K \frac{R_s(\mu_a, \mu'_s)}{R_c(\mu_a, \mu'_s)} - 1 \right]^2 \quad (2)$$

использовалось для нахождения постоянной K , при которой χ достигает минимума ($K = 10^{3.228}$).

2.4. Различие между экспериментальными и прогнозируемыми результатами

Результаты экспериментальных измерений отражательной способности R_c , полученные от однородных калиброванных фантомов тканей с заданными оптическими свой-

ствами, сопоставлялись с предсказанными значениями с помощью функции $K \text{ get } R_s(\mu_a, \mu'_s)$. Относительное отклонение данных эксперимента и прогноза рассчитывалось следующим образом (D_{\max} – максимальное отклонение, D_{mean} – среднее отклонение):

$$D_{\max} = \max \left\{ \text{abs} \left[\frac{R_c(\mu_a, \mu'_s) - K \text{ get } R_s(\mu_a, \mu'_s)}{R_c(\mu_a, \mu'_s)} \right] \right\}, \quad (3)$$

$$D_{\text{mean}} = \text{mean} \left\{ \text{abs} \left[\frac{R_c(\mu_a, \mu'_s) - K \text{ get } R_s(\mu_a, \mu'_s)}{R_c(\mu_a, \mu'_s)} \right] \right\}. \quad (4)$$

3. Результаты

3.1. Моделирование методом Монте-Карло коэффициента отражения для данной геометрии волоконного зонда

Распределения плотности мощности излучения и коэффициента отражения, полученные при расчетах методом МК, приведены на рис.3. Центр освещающего волокна расположен в точке с координатами $x = 0.048$ см, $y = 0$, а центр детектирующего волокна – в точке $x, y = 0$. На рис.3,а показано распределение плотности мощности излучения $F(x, z)$ при $y = 0$ (в Вт/см² на каждый доставленный 1 Вт или в 1/см²), а на рис.3,б – коэффициента отражения $R(x, y)$ (в 1/см²). Эти два рисунка соответствуют случаям умеренного и низкого рассеяния. Свет распространяется широким фронтом, выходя за пределы детектирующего волокна. Если рассеяние увеличивается, свет концентрируется вокруг детектирующего волокна, и измеряемый сигнал с зонда увеличивается. Рис.3,в и г показывают $F(x, z)$ и $R(x, y)$ в случае высокого коэффициента рассеяния, иллюстрируя, как такое рассеяние ограничивает распространение света вокруг освещающего волокна

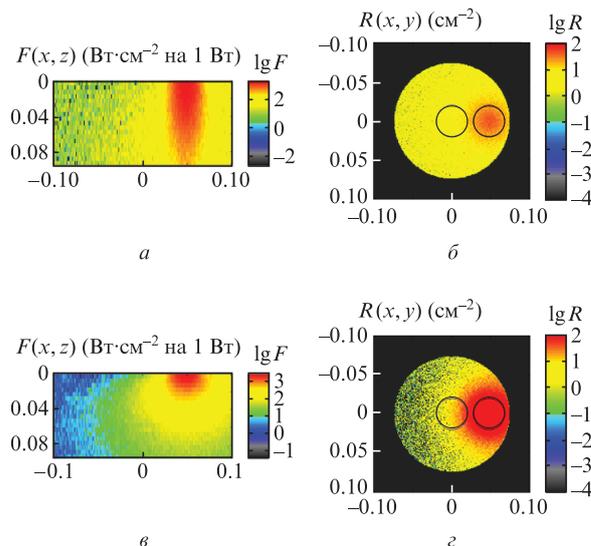


Рис.3. Результаты расчета методом Монте-Карло коэффициента отражения зонда: распределения плотности мощности излучения $F(x, z)$ (в Вт·см⁻² на каждый доставленный 1 Вт) в плоскости, проходящей через центры волокон ($\mu_a = 0.729$ см⁻¹) (а, в), и локального коэффициента отражения $R(x, y)$ (в см⁻²) (б, г). Центральный черный круг показывает детектирующее волокно, черный круг с центром в точке $x = 0.048$ см – освещающее волокно при умеренном ($\mu'_s = 960$ см⁻¹) (а, б) и сильном ($\mu'_s = 153.60$ см⁻¹) (в, г) рассеянии ткани.

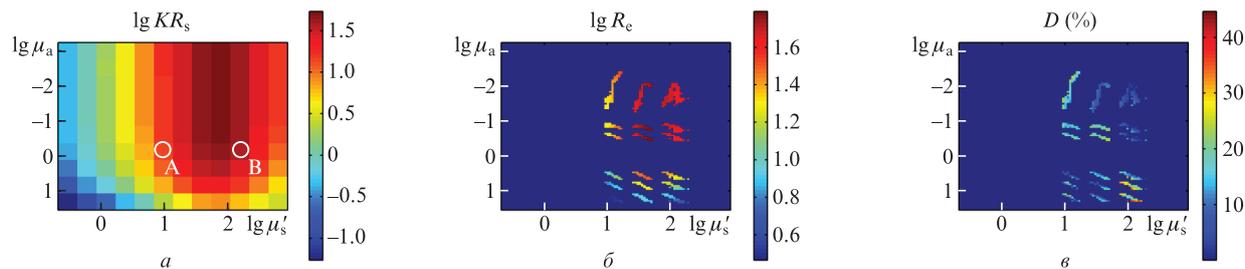


Рис.4. СТ для отражения, построенная по результатам расчета методом МК (а), измеренные спектры отражения от калиброванных фантомов ткани (б) и отклонение СТ-интерполяции от экспериментальных спектров (в).

и экранирует детектирующее волокно от попадания света. Таким образом, дальнейшее увеличение коэффициента рассеяния приводит к уменьшению детектируемого излучения.

3.2. СТ для спектрального анализа, рассчитанная по методу Монте-Карло

На рис.4,а показана справочная таблица, построенная по результатам МК-моделирования, для сред с различными оптическими свойствами. СТ построена в логарифмических координатах, отображающих зависимость $\lg KR_s$ от $\lg \mu_a$ и $\lg \mu'_s$ (все оптические параметры под знаком логарифма имеют одинаковую размерность – см^{-1}). Позиция, отмеченная меткой А, соответствует уровню рассеяния от низкого до умеренного (рис.3,а, б), как и в экспериментальной СТ, когда рассеяние мало и растет, свет концентрируется ближе к центру и число фотонов, достигающих детектирующего волокна, увеличивается. Следовательно, градиент $\partial(KR_s)/\partial \mu'_s$ положителен. Позиция, отмеченная меткой В, соответствует случаю высокого коэффициента рассеяния (рис.3,в, г). При дальнейшем увеличении рассеяния свет еще больше концентрируется вокруг освещающего волокна, и число фотонов, достигающих детектирующего волокна, уменьшается. Следовательно, градиент $\partial(KR_s)/\partial \mu'_s$ отрицателен. На рис.4,б показаны результаты измерения коэффициента отражения на фантомах биоткани. Из-за малого числа фантомов диапазон оптических свойств экспериментальной СТ не такой большой, как для СТ на основе МК, но наблюдается та же тенденция изменения отражательной способности при изменении μ_a и μ'_s . С ростом коэффициента поглощения коэффициент отражения зонда уменьшается. При увеличении рассеяния отражение, регистрируемое зондом, сначала увеличивается, достигает максимума при $\mu'_s = 10^{1.5} - 10^{2.0}$, а затем снижается. Отклонение результатов МК-моделирования от измеренных в экспериментах на фантомах диапазона изменений оптических характеристик интерполяция $\text{get}R(\mu_a, \mu'_s)$ хорошо согласуется с результатами измерений (среднее отклонение 12.1%, диапазон отклонения 0–44.7%).

4. Обсуждение результатов

При анализе отраженного от среды излучения, собранного зондом с близкорасположенными освещающими и детектирующими волокнами, СТ отражательной способности может быть построена либо по результатам экспериментов на фантомах биоткани, либо при МК-моделировании. По сравнению с экспериментальной СТ, мо-

делируемая СТ имеет ряд практических преимуществ. Во-первых, объем и точность данных в моделируемой СТ могут быть установлены в соответствии с требованиями спектрального анализа. Однако для мутных сред распределение данных больше зависит от естественных спектральных свойств компонентов среды. Во-вторых, фактор анизотропии среды при МК-моделировании может быть выбран в соответствии с рассеивающими свойствами анализируемой среды. И самым главным преимуществом МК-моделирования является возможность предсказания спектральной чувствительности зонда на стадии его проектирования, что дает информацию об отклике зонда в ответ на изменение поглощения и рассеяния. Тем не менее, следует обратить повышенное внимание на то, что различие между моделируемым и экспериментальным коэффициентами отражения в основном связано с экспериментальной ошибкой и подгоночным параметром K .

Из СТ, полученной на основе МК-моделирования, и экспериментальных результатов (рис.4) можно сделать вывод, что при постоянном коэффициенте поглощения измеренная зондом отражательная способность среды не является монотонной при изменении приведенного коэффициента рассеяния от низкого до очень высокого значения. Коэффициент отражения достигает максимума, когда приведенные коэффициенты рассеяния находятся в интервале $10^{1.5} - 10^2 \text{ см}^{-1}$. Некоторые предыдущие полуэмпирические аналитические решения, основанные на измерениях слабоссеивающих сред, предполагают монотонную зависимость между измеренным коэффициентом отражения и коэффициентом рассеяния среды [9, 21]. Это может приводить к неверным результатам анализа спектров в случаях, когда коэффициент рассеяния среды выше, чем 100 см^{-1} .

СТ определяет соотношение между μ_a и μ'_s однородной среды и сигналом отражения, зарегистрированным зондом Ocean Optics с диаметром волокон 400 мкм. Есть области значений μ_a и μ'_s , которые дают один и тот же сигнал отражения. Когда регистрируется коэффициент отражения на нескольких длинах волн и основные функции для спектральных компонент в однородной среде известны, методом наименьших квадратов можно аппроксимировать вклад каждой из спектральных компонент путем восстановления μ_a и μ'_s на длинах волн измерения и прогнозируя спектр с помощью коэффициентов отражения из СТ для значений μ_a и μ'_s . Сравнение экспериментальных и теоретических спектров позволяет провести аппроксимацию по методу наименьших квадратов и определить вклад каждой компоненты спектра. Однако для такой гетерогенной ткани, как кожа, спектральные компоненты распределены послойно. Анализ ее спектральных компонент требует модификации функциональной модели для

подгонки многослойного спектра к однородной модели или построения СТ более высокой размерности с оптическими свойствами каждого слоя кожи.

5. Заключение

Представлена справочная таблица для спектрального анализа однородных сред, созданная на основе расчетов методом Монте-Карло. Чтобы определить коэффициент отражения R , построена функция для интерполяции СТ для конкретных значений коэффициента поглощения μ_a и приведенного коэффициента рассеяния μ'_s . Экспериментально измеренные значения коэффициента отражения от однородных калиброванных фантомов ткани с заданными оптическими свойствами сравнивались со значениями, предсказанными построенной функцией. Отклонение между экспериментом и прогнозом составило в среднем 12.1%. СТ показала монотонное уменьшение коэффициента отражения при увеличении коэффициента поглощения и немонотонную зависимость отражения от коэффициента рассеяния для исследуемого зонда. СТ полезна для спектрального анализа однородных сред и расширяет область применения диффузной спектроскопии. Построенную функцию можно непосредственно использовать для коммерческого зонда, а протокол – при создании СТ для любого аналогичного оптоволоконного зонда.

Авторы выражают благодарность проф. Стивену Жаку из Орегонского университета здоровья и науки (США) за помощь. Исследование поддержано грантами Национального естественнонаучного фонда Китая (№81171376,

91232710, 812111313), Научного фонда для творческих научных групп (№61121004) и Научно-исследовательского фонда аспирантской программы высшего образования Китая (№20110142110073).

1. McClure W.F. *J. Near Infrared Spectrosc.*, **11**, 487 (2003).
2. Cao J., Sharma S. *ISRN Textiles*, **2013**, 649406 (2013).
3. Pojic M.M., Mastilovic J.S. *Food Bioprocess Tech.*, **6**, 330 (2013).
4. Zhong X., Wen X., Zhu D. *Opt. Express*, **22**, 1852 (2014).
5. Viscarra Rossel R.A., Walvoort D.J.J., McBratney A.B., Janik L.J., Skjemstad J.O. *Geoderma*, **131**, 59 (2006).
6. Borin A., Ferrão M.F., Mello C., Maretto D.A., Poppi R.J. *Anal. Chim. Acta*, **579**, 25 (2006).
7. Rajaram N., Nguyen T.H., Tunnel J.W. *J. Biomed. Opt.*, **13**, 050501 (2008).
8. Tseng S.H., Hayakawa C., Tromberg B.J., Spanier J., Durkin A.J. *Opt. Lett.*, **30**, 3165 (2005).
9. Zonios G., Dimou A. *Opt. Express*, **14**, 8661 (2006).
10. Nichols B.S., Rajaram N., Tunnel J.W. *J. Biomed. Opt.*, **17**, 057001 (2012).
11. Karlsson H., Fredriksson I., Larsson M., Stromberg T. *Opt. Express*, **20**, 12233 (2012).
12. Palmer G.M., Ramanujam N. *Appl. Opt.*, **45**, 1062 (2006).
13. Finlay J.C., Foster T.H. *Med. Phys.*, **31**, 1949 (2004).
14. Zonios G., Dimou A. *Biomed. Opt. Express*, **2**, 3284 (2011).
15. Zhu D., Lu W., Zeng S., Luo Q. *J. Biomed. Opt.*, **12**, 064004 (2007).
16. Jiang C., He H., Li P., Luo Q. *J. Innov. Opt. Health Sci.*, **5**, 1250004 (2012).
17. Wang L., Jacque S.L., Zheng L. *Comput. Meth. Prog. Bio.*, **54**, 141 (1997).
18. Martelli F., Zaccanti G. *Opt. Express*, **15**, 486 (2007).
19. Hale G.M., Query M.R. *Appl. Opt.*, **12**, 555 (1973).
20. Michels R., Foschum F., Kienle A. *Opt. Express*, **16**, 5907 (2008).
21. Zonios G., Dimou A. *Opt. Express*, **17**, 1256 (2009).