

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ФАКУЛЬТЕТ РАДІОФІЗИКИ, ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ СИСТЕМ
Кафедра медичної радіофізики

«На правах рукопису»

Робота допущена до захисту в ЕК
рішенням кафедри медичної радіофізики
від _____ 2026 року, протокол № _____.
Завідувач кафедри кандидат фіз.-мат. наук, доцент
_____ Сергій РАДЧЕНКО

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА БАКАЛАВРА
на тему:
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ
РОЗПОВСЮДЖЕННЯ СВІТЛА В БАГАТОШАРОВОМУ БІОЛОГІЧНОМУ
СЕРЕДОВИЩІ.

Виконав:

студент 4-го курсу
денної форми здобуття освіти
спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали
ОПП Електроніка та інформаційні технології в медицині
Каденко Олександр Леонідович _____

Наукові керівники:

кандидат фіз.-мат. наук, старший дослідник
Мамілов Сергій Олександрович _____

кандидат фіз.-мат. наук, доцент
Радченко Сергій Петрович _____

Рецензент:

доктор фіз.-мат. наук, доцент
Салюк Ольга Юріївна

Засвідчую, що у цій бакалаврській роботі
немає запозичень з праць інших авторів
без відповідних посилань
Студент _____ Олександр КАДЕНКО

Реферат

Дипломна робота: 48 с., 16 рис., 8 табл., 14 формул, 20 джерел.

У роботі досліджено процес поширення світлового випромінювання в багат шаровому середовищі методом Монте-Карло. Актуальність роботи зумовлена широким використанням оптичних технологій у медичній діагностиці та терапії, ефективність яких залежить від особливостей взаємодії світла з біологічними тканинами.

Для моделювання біологічне середовище представлено у вигляді багат шарової структури з індивідуальними оптичними параметрами кожного шару. Випромінювання моделюється у вигляді 10^7 кількості фотонів, які поширюються середовищем. Моделювання проводиться для трьох довжин хвиль: 605 нм, 868 нм та 1000 нм. Для кожного випадку виконано 20 незалежних запусків, що забезпечило статистичну достовірність результатів. Метою було визначення розподілу поглинутої енергії в шарах та вплив довжини хвилі на характер взаємодії випромінювання з тканиною.

У результаті моделювання встановлено, що найбільше поглинання енергії спостерігається для довжини хвилі 1000 нм. Встановлено, що зі збільшенням довжини хвилі від 605 нм до 1000 нм зменшується вплив розсіювання та зростає ефективність проникнення фотонів у внутрішні шари середовища.

Практичне значення роботи полягає у можливості використання отриманих результатів для вдосконалення методів оптичної діагностики, лазерної терапії та планування медичних процедур, пов'язаних із застосуванням світлового випромінювання.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, БІОМЕДИЧНА ОПТИКА, БІОЛОГІЧНА
ТКАНИНА, ПОШИРЕННЯ СВІТЛА, БАГАТОШАРОВЕ СЕРЕДОВИЩЕ,
ДОВЖИНА ХВИЛІ.

ЗМІСТ

Вступ	4
1.ОГЛЯД ТА АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ ВЗАЄМОДІЇ СВІТЛА З БІОЛОГІЧНИМИ ТКАНИНАМИ.....	5
1.1. Оптичні властивості біологічних тканин	5
1.2. Процеси взаємодії світлового випромінювання з тканинами	7
1.3. Особливості поширення випромінювання різних довжин хвиль	11
1.4. Методи моделювання поширення світла у біологічних тканинах	13
1.5. Аналіз існуючих програмних реалізацій	16
2.ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ТА ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МОДЕЛІ МОНТЕ-КАРЛО.....	19
2.1. Теоретичні основи методу Монте-Карло.....	19
2.2. Математична модель поширення фотонів.....	21
2.3. Розробка програмної моделі.....	26
2.4. Параметри моделювання.....	29
3.ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ МОДЕЛЮВАННЯ.....	31
3.1. Організація чисельного експерименту	31
3.2. Програмна реалізація моделі	35
3.3. Результати моделювання розподілу поглинутої енергії	38
ВИСНОВКИ	45
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	46

Вступ

Актуальність теми. Світлове випромінювання широко використовується в сучасній медицині для діагностики та лікування захворювань. Ефективність оптичних методів значною мірою залежить від особливостей взаємодії світла з біологічними тканинами, зокрема від процесів поглинання та розсіювання. Через складну структуру біологічних середовищ аналітичний опис поширення світла є складним, тому для дослідження таких процесів широко застосовується метод Монте-Карло, який дозволяє моделювати траєкторії фотонів і визначати розподіл енергії в тканині.

Моделювання світлопереносу є важливим для розвитку методів оптичної діагностики та лазерної терапії, а також для вибору оптимальних параметрів випромінювання під час медичних процедур. Тому дослідження поширення світла в багатошаровому біологічному середовищі є актуальною науковою та практичною задачею.

Метою роботи. Є створення алгоритму та його програмної реалізації для моделювання розповсюдження світла в багатошаровій біологічній тканині методом Монте-Карло та розрахунок розподілу поглинутої енергії в шарах багатошарового біологічного середовища на прикладі трьох довжин хвиль 605 нм, 868 нм та 1000 нм, які обрані як характерні для різної глибини проникнення та величини ефекту лазерно-симульованої фотодисоціації оксигемоглобіну внаслідок взаємодії світлового випромінювання з біологічними тканинами.

Об'єкт та предмет дослідження. Процес поширення світлового випромінювання в багатошаровому біологічному середовищі та математичні моделі, що описують взаємодію фотонів із різними шарами тканин

Методи дослідження. У роботі використано метод Монте-Карло для статистичного моделювання траєкторій фотонів, чисельні методи обробки результатів та програмні засоби для візуалізації отриманих даних.

1. ОГЛЯД ТА АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ ВЗАЄМОДІЇ СВІТЛА З БІОЛОГІЧНИМИ ТКАНИНАМИ

1.1. Оптичні властивості біологічних тканин

1.1.1. Показник заломлення біологічних середовищ

Показник заломлення є однією з основних оптичних характеристик біологічних тканин, яка визначає швидкість поширення світла в середовищі та впливає на процеси заломлення і відбиття випромінювання. Біологічні тканини є неоднорідними структурами, що складаються з клітин, міжклітинної рідини та різних органічних компонентів, тому їхній показник заломлення залежить від складу тканини, довжини хвилі та фізіологічного стану середовища. У біомедичній оптиці показник заломлення використовується для опису поширення фотонів у тканинах та є важливим параметром при моделюванні світлорозсіювання. Відмінності показників заломлення між окремими шарами середовища призводять до часткового відбиття та зміни напрямку поширення світла на межах поділу тканин.[1]

Дослідження показують, що показник заломлення біологічних тканин змінюється залежно від довжини хвилі випромінювання та може розглядатися як комплексна величина, дійсна частина якої характеризує процеси заломлення, а уявна - процеси поглинання. [2]

1.1.2. Коефіцієнт поглинання

Коефіцієнт поглинання характеризує здатність біологічної тканини поглинати енергію світлового випромінювання. Під час проходження фотонів через середовище частина їхньої енергії переходить у тепло або використовується у фотохімічних процесах. Основними поглинаючими компонентами біотканин є вода, гемоглобін, меланін та ліпіди. [3]

Величина коефіцієнта поглинання суттєво залежить від довжини хвилі світла. У видимому діапазоні значний внесок у поглинання робить гемоглобін, тоді як у ближньому інфрачервоному діапазоні домінує поглинання водою. Саме тому різні довжини хвиль мають різну глибину проникнення у тканини. Для опису процесу поглинання часто використовується закон Бугера-Ламберта-Бера:

$$I = I_0 e^{-\mu_a z} \quad (1.1)$$

де I_0 - початкова інтенсивність випромінювання, I - інтенсивність після проходження шляху z , μ_a - коефіцієнт поглинання. [2]

Коефіцієнт поглинання є одним із ключових параметрів у моделях поширення світла, оскільки визначає швидкість зменшення інтенсивності випромінювання в середовищі. При моделюванні в роботі цей параметр використовується для розрахунку частки енергії, що поглинається тканиною на кожному етапі руху фотона. [4]

1.1.3. Коефіцієнт розсіювання

Коефіцієнт розсіювання визначає кількість актів розсіювання фотонів у біологічній тканині на одиниці шляху. Розсіювання виникає через неоднорідність структури тканин, зокрема через різницю показників заломлення клітинних структур, мембран та міжклітинного середовища. У біологічних тканинах розсіювання переважно має напрямлений характер, тобто більшість фотонів після взаємодії продовжує рухатися вперед із незначною зміною напрямку. Значення коефіцієнта розсіювання залежить від типу тканини, її структури та довжини хвилі випромінювання. Зі збільшенням довжини хвилі зазвичай спостерігається зменшення розсіювання, що сприяє глибшому проникненню світла. [4]

У моделях Монте-Карло коефіцієнт розсіювання визначає середню довжину вільного пробігу фотона між двома актами взаємодії. Саме цей

параметр значною мірою формує просторовий розподіл світлової енергії в багат шаровому середовищі. [5]

1.1.4. Анізотропія розсіювання

Анізотропія розсіювання характеризує переважний напрямок поширення фотонів після акту розсіювання та описується фактором анізотропії g , який дорівнює середньому косинусу кута розсіювання. Значення параметра g може змінюватися від -1 до 1 . Для більшості біологічних тканин значення знаходиться в межах $0.7 - 0.99$, що свідчить про направлення розсіювання переважно в перед. [4]

Фактор анізотропії є важливим параметром при чисельному моделюванні, оскільки він визначає зміну траєкторії фотонів після кожного акту взаємодії. При великих значеннях g фотони здатні проникати глибше у середовище, оскільки напрямок їх руху змінюється незначно. Дослідження показують, що анізотропія розсіювання залежить як від довжини хвилі, так і від складу тканини. Цей параметр використовується для генерації нового напрямку руху фотона після розсіювання. [5]

1.2. Процеси взаємодії світлового випромінювання з тканинами

1.2.1. Відбиття та проходження випромінювання

Під час поширення світла у біологічних тканинах частина випромінювання відбивається на межах поділу середовищ, а інша частина проходить углиб тканини. Відбиття виникає через різницю показників, поверхнею шкіри та окремими шарами тканини. Найбільше відбиття спостерігається на зовнішній поверхні біологічного середовища. [6]

Процес проходження світла через тканину супроводжується багаторазовими актами розсіювання та поглинання. Інтенсивність випромінювання поступово зменшується зі збільшенням глибини

проникнення внаслідок втрати енергії фотонів. Частина світла після взаємодії з тканиною може виходити назад у вигляді дифузного відбиття або проходити крізь середовище. Кількість відбитого та пропущеного випромінювання залежить від багатьох факторів. У чисельних моделях поширення світла врахування процесів відбиття та проходження є необхідним для точного опису переносу енергії у середовищах. Для цього часто використовуються рівняння Френеля та статистичні методи моделювання. [7]

1.2.2. Глибина проникнення світла

Глибина проникнення світла характеризує відстань, на якій інтенсивність випромінювання у тканині зменшується до певного рівня внаслідок поглинання та розсіювання. Цей параметр є одним із найважливіших при дослідженні взаємодії лазерного випромінювання з біологічними середовищами та при виборі довжини хвилі для медичних застосувань. [2]

Глибина проникнення визначається оптичними властивостями тканини, зокрема коефіцієнтами поглинання та розсіювання. Значний вплив також має довжина хвилі випромінювання. Короткохвильове випромінювання зазвичай сильніше розсіюється та поглинається, тому проникає на меншу глибину. Випромінювання ближнього інфрачервоного діапазону характеризується меншою інтенсивністю поглинання і здатне проникати значно глибше у тканини.[4]

У біомедичній оптиці область спектра приблизно від 650 нм до 1000 нм часто називають «оптичним вікном біологічних тканин», оскільки саме в цьому діапазоні досягається найбільша глибина проникнення світла. Це пояснюється зменшенням поглинання гемоглобіном та водою. [8]

1.3. Особливості поширення випромінювання різних довжин хвиль

1.3.1. Взаємодія випромінювання з довжиною хвилі 605 нм

Випромінювання з довжиною хвилі 605 нм належить до видимого червоно-помаранчевого діапазону спектра та характеризується відносно високим рівнем поглинання у тканинах. Основними поглинаючими компонентами для цієї довжини хвилі є оксигемоглобін та дезоксигемоглобін, тому випромінювання на цій довжині хвилі активно взаємодіє з кровоносними судинами та поверхневими шарами тканини. Через значне розсіювання та поглинання світла з данною довжиною хвилі має порівняно невелику глибину проникнення. Більша частина енергії поглинається у верхніх шарах біологічного середовища, що робить таке випромінювання ефективним для поверхневих медичних процедур. [5, 9]

1.3.2. Особливості поширення випромінювання 868 нм

Довжина хвилі 868 нм належить до ближнього інфрачервоного діапазону та знаходиться в межах так званого «оптичного вікна» біологічних тканин. У цьому діапазоні коефіцієнти поглинання гемоглобіну та інших хромофорів є меншими, ніж у видимій області спектра, що забезпечує глибше проникнення світла у тканини. [5]

Для цієї хвилі характерне зниження інтенсивності розсіювання порівняно з коротшими хвилями. Завдяки цьому фотони здатні проходити більші відстані між актами взаємодії та проникати у глибші шари середовища. Такі властивості роблять випромінювання 868 нм перспективним для методів оптичної діагностики, фототерапії та дослідження внутрішніх структур тканин. [7]

1.3.3. Проникнення випромінювання 1000 нм

Випромінювання з довжиною хвилі 1000 нм також належить до ближнього інфрачервоного діапазону та характеризується значнішою глибиною проникнення у біологічній тканині. У цьому спектральному діапазоні вплив розсіювання є меншим, ніж для коротших хвиль, що дозволяє фотонам проходити значні відстані всередині середовища.

Разом із тим при даній довжині хвилі починає зростати поглинання водою, яка є одним із основних компонентів ьтканин. Це призводить до збільшення втрат енергії у глибоких шарах середовища. Незважаючи на це, випромінювання 1000 нм здатне проникати глибше порівняно з видимим діапазоном і широко використовується. [6,8]

1.3.4. Порівняння ефективності проникнення різних довжин хвиль

Глибина проникнення світла у біологічні тканини значною мірою залежить від довжини хвилі випромінювання.

Таблиця 1.1 – Коефіцієнт поглинання μ_a (см⁻¹)

Середовище	605 нм	868 нм	1000 нм
Епідерміс	14	11.8	9.6
Дерма	68.5	62	57
Артеріальна кров	1.8	0.65	0.45
Венозна кров	8.5	0.5	0.35
Підшкірний жир	1.3	0.8	1.2
М'язова тканина	13.5	2.7	1.9
Кістка	0.08	0.18	0.35

Таблиця 1.2 – Коефіцієнт розсіювання μ_s (cm^{-1})

Середовище	605 нм	868 нм	1000 нм
Епідерміс	630	515	460
Дерма	625	510	455
Артеріальна кров	365	220	180
Венозна кров	340	225	185
Підшкірний жир	1280	1080	980
М'язова тканина	890	640	540
Кістка	980	810	700

Таблиця 1.3 – Фактор анізотропії g

Середовище	605 нм	868 нм	1000 нм
Епідерміс	0.80	0.82	0.84
Дерма	0.85	0.88	0.90
Артеріальна кров	0.99	0.99	0.99
Венозна кров	0.99	0.99	0.99
Підшкірний жир	0.80	0.82	0.85
М'язова тканина	0.90	0.92	0.94
Кістка	0.90	0.92	0.93

Таблиця 1.4 – Показник заломлення n

Середовище	605 нм	868 нм	1000 нм
Епідерміс	1.40	1.40	1.40
Дерма	1.40	1.40	1.40
Артеріальна кров	1.36	1.36	1.36
Венозна кров	1.36	1.36	1.36
Підшкірний жир	1.44	1.44	1.44

М'язова тканина	1.37	1.37	1.37
Кістка	1.56	1.56	1.56

При використанні початкових табличних значень оптичних параметрів спостерігалось надто інтенсивне поглинання та розсіювання випромінювання у верхніх шарах біологічного середовища як зображено на Рис.1.1. У результаті більшість фотонів втрачала енергію ще на невеликій глибині, що ускладнювало аналіз

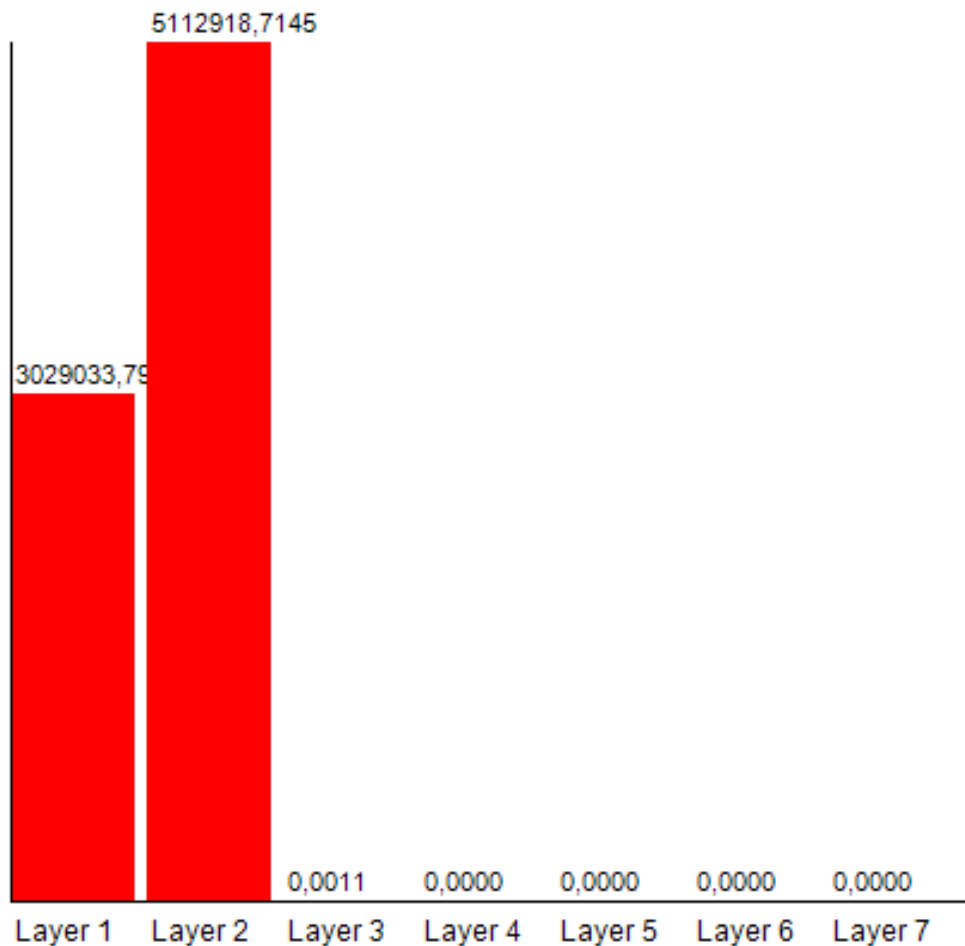


Рис.1.1 – Результат для 10^7 фотонів при табличних значеннях

Для проведення чисельного експерименту використовувалися оптичні параметри, отримані на основі літературних даних Таблиця 1.1, Таблиця 1.2, Таблиця 1.3, Таблиця 1.4.. З метою забезпечення наочності результатів та

отримання інформативного розподілу поглинутої енергії по всій глибині багат шарового середовища коефіцієнти поглинання μ_a та розсіювання μ_s були пропорційно масштабовані відносно табличних значень. Масштабування виконувалося однаково для всіх шарів та довжин хвиль, що дозволило зберегти співвідношення між оптичними властивостями тканин і не вплинуло на порівняльний аналіз результатів. Показник заломлення n , фактор анізотропії g та геометричні параметри шарів залишалися незмінними. Такий підхід використовувався виключно для підвищення інформативності моделювання та зменшення обчислювальних витрат. [4,7,9]

1.4. Методи моделювання поширення світла у біологічних тканинах

1.4.1. Аналітичні методи моделювання

Аналітичні методи моделювання використовуються для опису процесів поширення світла за допомогою математичних рівнянь. Основою таких методів є рівняння переносу випромінювання, яке описує зміну інтенсивності світла внаслідок поглинання, розсіювання та відбиття у середовищі. [8]

Аналітичні моделі дозволяють отримувати розв'язки у вигляді математичних залежностей для простих випадків однорідного або слабо неоднорідного середовища. Часто використовуються моделі експоненціального ослаблення випромінювання, що базуються на законі Бугера–Ламберта–Бера. Закон описує зменшення інтенсивності світла під час проходження через поглинаюче середовище залежно від коефіцієнтів шару. Аналітичні методи мають високу швидкість обчислень та просту математичну реалізацію. Проте їх застосування є обмеженим для складних багат шарових біологічних тканин, де одночасно відбуваються багаторазові процеси розсіювання, відбиття та неоднорідний розподіл оптичних параметрів. У таких випадках аналітична модель, а детальніше її точність суттєво знижується. Тому аналітичні методи зазвичай використовуються для попередньої оцінки

процесів переносу випромінювання або для перевірки результатів більш складних чисельних моделей. [9]

1.4.2. Дифузійні моделі

Дифузійні моделі застосовуються для опису поширення світла у сильно розсіяних біологічних середовищах. Вони є спрощенням рівняння переносу випромінювання та базуються на припущенні, що після великої кількості актів розсіювання напрямок руху фотонів стає майже випадковим. Основою дифузійного підходу є його рівняння, яке описує зміну густини світлового потоку в тканині. Моделі добре працюють для середовищ, де розсіювання значно переважає над поглинанням, а джерело світла знаходиться достатньо глибоко від межі тканини. [7]

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = D \nabla^2 \Phi - \mu_a \Phi + S \quad (1.2)$$

де Φ - густина фотонів, D - коефіцієнт дифузії, μ_a - коефіцієнт поглинання, S - джерело випромінювання.

Дифузійні моделі широко використовуються у задачах оптичної томографії, медичної діагностики та аналізу переносу світла у тканинах. Вони забезпечують меншу обчислювальну складність порівняно з Монте-Карло та дозволяють швидко отримувати результати для великих об'ємів середовища. [10]

Недоліком дифузійних моделей є зниження точності поблизу меж середовища, а також у випадках слабого розсіювання або сильного поглинання. Через це для складних багат шарових тканин часто використовують більш точні статистичні методи. [8]

1.4.3. Метод Монте-Карло та його переваги й недоліки

Метод Монте-Карло належить до найточніших чисельних підходів моделювання світла у біологічних і не тільки тканинах. Його основою є моделювання що базується на статистиці великої кількості фотонів, траєкторії яких визначаються випадковими величинами відповідно до середовища. Кожен фотон розглядається окремо. Для нього послідовно визначаються довжина пробігу, ймовірність поглинання, кут розсіювання та зміна напрямку руху. Процес повторюється доти, доки фотон не буде повністю поглинутий або не залишить межі середовища. Після завершення моделювання результати для всіх фотонів узагальнюються та піддаються статистичній обробці. Це дозволяє отримати достовірну оцінку розподілу світлової енергії та характеру поширення випромінювання в досліджуваному середовищі. [9]

Нажаль через його статистичний характер є багато важливих переваг і недоліків, які визначають його місце в оптичному моделюванні. Головна перевага полягає в тому, що він забезпечує дуже добру та високу точність. Відтворення методом рівняння переносу випромінювання, не потребує спрощень, які характерні для аналітичних або дифузійних моделей. Підхід є досить універсальним і дозволяє моделювати будь-яку геометрію середовища, від простих багаточастинкових структур до складних тривимірних моделей. Він коректно враховує всі фізичні механізми взаємодії фотонів із тканиною: поглинання, при якому вага фотона змінюється відповідно до співвідношення. [2,7]

$$W_{new} = W_{old} \frac{\mu_s}{\mu_a + \mu_s} \quad (1.3)$$

Точність і детальність роблять метод надзвичайно цінним для теорії в медичних застосувань, зокрема для моделювання оптики тканин у широкому спектральному діапазоні, оскільки параметри легко змінюються. [8]

Недоліками є насамперед значні обчислювальні витрати. Для отримання результатів зі зниженою статистичною похибкою необхідно моделювати дуже велику кількість фотонів, оскільки шум зменшується повільно, пропорційно. Через це навіть сучасна техніка, тобто, процесори та графічні прискорювачі потребують хвилин для моделювання простих структур і годин для складних тривимірних моделей. Нажаль природа методу призводить до неминучої наявності не малого рівню шуму в результатах, що не дозволяє одразу отримати абсолютно гладкі розподіли інтенсивності. До недоліків також відносять складність застосування для зворотних задач, де потрібно швидко визначити оптичні властивості тканини за вимірними даними, оскільки одна симуляція може бути дорогою за часом. У випадку моделей зі складною геометрією й різними показниками заломлення обчислювальне навантаження додатково зростає, що робить метод менш ефективним порівняно з наближеними детерміністичними підходами. [5, 9]

1.5. Аналіз існуючих програмних реалізацій

1.5.1 Сучасні застосування та короткий огляд аналогів

Однією з найважливіших сфер застосування методу є біомедична оптика та медична фізика. Завдяки високій точності він вважається одним із найбільш надійних інструментів дослідження переносу оптичного випромінювання в біологічних середовищах [8].

Крім того, метод широко застосовується в медичній візуалізації та дозиметрії, зокрема в комп'ютерній томографії, позитронно-емісійній та однофотонній емісійній томографії. Його використання дозволяє підвищити точність моделювання взаємодії випромінювання, оптимізувати параметри діагностичних систем і оцінювати дозове навантаження на пацієнта [5].

Для моделювання поширення світла у біологічних тканинах сьогодні широко застосовуються програми, засновані на методі Монте-Карло. Однією

з найвідоміших моделей є MCML, що дає змогу виконувати моделювання багатошарових середовищ із заданими параметрами. Програма забезпечує розрахунок поглинутої енергії та глибини проникнення світла в тканину але знайти програму в реальності дуже складно. Ще був проведений огляд поширеного програмного рішення є Mesh-based Monte Carlo, в наведеній реалізації використовується тривимірна сіткова модель середовища. Такий підхід дозволяє моделювати складну геометрію біологічних об'єктів та підвищує точність розрахунків для неоднорідних тканин. В нашому випадку це рішення не надає потрібних результатів в потрібному для роботи вигляді. Також застосовуються GPU-орієнтовані моделі, наприклад Monte Carlo eXtreme, що дають значне прискорення обчислень за рахунок паралельної обробки великої кількості фотонів. Це особливо важливо при статистично достовірному моделюванні з великою кількістю запусків. Незважаючи на ефективність існуючих програм, більшість із них не підходять для реалізації задачі. Методи мають обмеження у візуалізації результатів або орієнтовані на спеціалізовані задачі. Тому прийшлося розробляти власну програмну модель, адаптованої до дослідження впливу різних довжин хвиль. [6, 9]

1.5.2. Постановка задачі дипломної роботи

Задачою дипломної роботи є моделювання розподілу поглинутої енергії у шарах багатошарового біологічного середовища під час поширення світлового випромінювання методом Монте-Карло для довжин хвиль 605 нм, 868 нм та 1000 нм. Вибрані довжини хвиль є характерними для різної глибини проникнення та інтенсивності взаємодії світла з біологічними тканинами. Для досягнення поставленої мети необхідно розробити математичну та програмну модель поширення фотонів у середовищі з урахуванням поглинання, розсіювання та відбиття світла. У моделі повинна бути можливість задання оптичних параметрів окремих шарів тканини. У межах роботи необхідно реалізувати алгоритм статистичного моделювання руху фотонів та

забезпечити проведення серії чисельних експериментів для різних довжин хвиль. Для підвищення статистичної достовірності результатів для кожного випадку передбачається виконання 20 незалежних запусків із кількістю фотонів 10^7 . Результатом роботи має стати програмна модель, яка дозволяє досліджувати особливості поширення світла у багат шарових біологічних середовищах та оцінювати вплив довжини хвилі на характер поглинання і проникнення випромінювання у кожному моделюванні.

2. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ТА ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МОДЕЛІ МОНТЕ-КАРЛО

2.1. Теоретичні основи методу Монте-Карло

2.1.1. Історія методу Монте-Карло

Метод Монте-Карло виник у середині XX століття як відповідь на потребу розв'язання складних фізичних та інженерних задач, які не можливо було розв'язати аналітичним описом або вимагали надмірних обчислювальних ресурсів. Найбільшу складність становили задачі статистичної фізики, ядерних процесів, дифузії частинок та обчислення багатовимірних інтегралів, де поведінка систем визначалася великою кількістю випадкових факторів [10].

Практичний розвиток методу розпочався під час реалізації Манхеттенського проєкту в Лос-Аламоській національній лабораторії. Станіслав Улам, Джон фон Нейман та їхні колеги запропонували використовувати випадкові числа для моделювання складних фізичних процесів, що мають стохастичний характер. Офіційний опис методу було опубліковано у 1949 році в роботі «The Monte Carlo Method» [4].

Назва методу походить від міста Монте-Карло в Монако, відомого своїми казино, що підкреслює використання випадковості як основного інструменту моделювання. Першими практичними застосуваннями методу стали задачі ядерної фізики, пов'язані з моделюванням переносу нейтронів та розрахунком параметрів ядерних реакторів.

Завдяки появі електронних машин метод почав демонструвати високу ефективність для дослідження та аналізу багатовимірних систем і швидко поширився на інші галузі науки. Сьогодні метод широко використовується у фізиці, математиці, економіці, біомедичній оптиці та комп'ютерному моделюванні, де залишається одним із найточніших інструментів дослідження складних процесів [11].

2.1.2. Моделювання траєкторії фотона

У методі Монте-Карло фотон розглядається як елементарна частинка з певною початковою позицією, вагою та напрямом руху, які визначають його подальшу траєкторію в тканині. Початкова позиція фотона задається координатами які зазвичай розташовані на поверхні. Початкова вага фотона описує кількість енергії, яку він переносить, і на початку моделювання береться рівною $W_0 = 1$. [6]

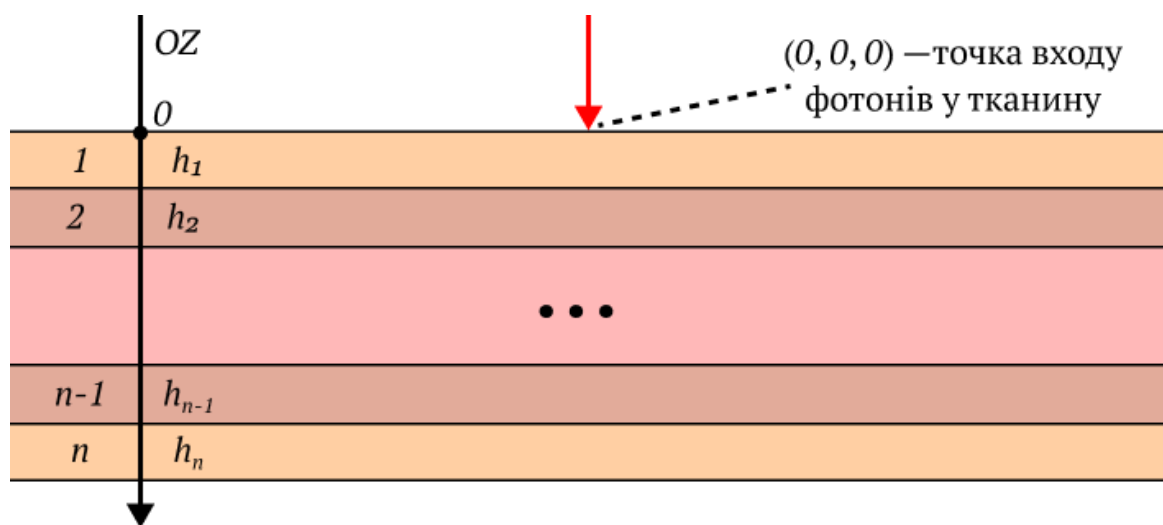


Рис. 2.1 – Точка входу фотонів у тканину

Після чого зменшується при кожному поглинанні відповідно до частки енергії, втраченої у взаємодіях. Напрямок руху фотона задається одиничним вектором.

$$u_0 = (u_x, u_y, u_z) \quad (2.1)$$

Який визначає, у який бік фотон стартує. У випадку перпендикулярного падіння на поверхню найчастіше використовують

$$u_0 = (0, 0, 1) \quad (2.2)$$

що означає рух углиб середовища. Така модель дозволяє однозначно визначити початковий стан фотона і надалі обчислювати нові координати,

зміну напрямку та оновлення ваги під час кожної взаємодії з тканиною, формуючи основу моделювання його поведінки. [9, 11]

2.1.3. Статистична достовірність результатів

Кожне окреме моделювання містить випадкові флуктуації, Точність результатів визначається статистичною похибкою, яка зменшується зі збільшенням кількості змодельованих фотонів. Залежність похибки від числа випробувань описується співвідношенням: [11]

$$\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (2.3)$$

де N - кількість фотонів, а σ - середньоквадратична статистична похибка.

У межах роботи для кожної довжини хвилі використовується велика кількість фотонів у межах одного запуску. Такий підхід дозволяє суттєво зменшити вплив випадкових відхилень та отримати надійні результати. Для оцінки достовірності як правило використовують середні значення, стандартне відхилення та довірчі інтервали. Усереднення результатів запусків забезпечує більш точне визначення розподілу поглинутої енергії та глибини проникнення випромінювання для різних довжин хвиль. [9]

2.2. Математична модель поширення фотонів

2.2.1. Опис багат шарового біологічного середовища

Для моделювання поширення світла біологічна тканина розглядається як багат шарова структура, що складається з кількох послідовно розташованих шарів таких як: роговий шар, епідерміс, папілярна та ретикулярна дерма, підшкірний та глибокий жировий шар, м'язова тканина, судинний шар із різними оптичними властивостями. Кожний шар характеризується власними значеннями коефіцієнта поглинання, коефіцієнта розсіювання, фактора анізотропії, показника заломлення та товщини шару. [7]

Такий підхід дозволяє більш точно відтворити реальну структуру біологічних тканин, оскільки окремі шари організму суттєво відрізняються за своїми фізичними характеристиками. Наприклад, шкіра може бути представлена епідермісом, дермою та підшкірною жировою клітковиною, кожна з яких має власні оптичні параметри. [4]

У процесі моделювання фотон рухається всередині багатошарового середовища та взаємодіє з кожним шаром відповідно до його властивостей. При досягненні межі між шарами додатково враховуються процеси відбиття та заломлення, що впливають на подальшу траєкторію руху. Модель багатошарового середовища є основою для визначення розподілу поглинутої енергії та оцінки глибини проникнення випромінювання для різних довжин хвиль.[12]

2.2.2 Механізми взаємодії фотона і тканини

Взаємодія фотона з біологічною тканиною в методі описується набором фізичних механізмів, кожен з яких знаходить подальшу траєкторію та стан енергії фотона. Поглинання дає змогу визначити втрату частини енергії фотона внаслідок взаємодії з хромофорами тканини, і його ймовірність задається співвідношенням [13]

$$P_a = \frac{\mu_a}{\mu_t} \quad P_s = \frac{\mu_s}{\mu_t} \quad (2.4)$$

де μ_a , μ_s - коефіцієнти поглинання, та розсіяння. Розсіяння змінює напрямок руху фотона і описується фазовою функцією, найпоширенішою з яких є модель Хенсьє-Грінстейна. За допомогою випадкового числа $\xi \in (0,1)$ визначається кут розсіяння. [6]

$$\cos\theta = \frac{1}{2g} \left(1 + g^2 - \left(\frac{1-g^2}{1-g+2g\xi} \right)^2 \right) \quad g \neq 0 \quad (2.5)$$

де g - коефіцієнт анізотропії, а при $g = 0$ вона спрощується. Ці рівняння задають базову стохастичну поведінку фотона у середовищі. азимутальний кут

випадковим чином визначають як

$$\phi = 2\pi\xi \quad (2.6)$$

На межах між шарами тканини відбувається часткове відбиття та заломлення, що визначається зміною показників заломлення n_1 та n_2 . Кут заломлення обчислюється за законом Снеліуса [10]

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (2.7)$$

а коефіцієнт відбиття визначається через рівняння Френеля

$$R = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\sin(Q_2 - Q_1)}{\sin(Q_2 + Q_1)} \right)^2 + \left(\frac{\tan(Q_2 - Q_1)}{\tan(Q_2 + Q_1)} \right)^2 \right] \quad (2.8)$$

Якщо фотон не відбивається, він має переходити у наступний шар за законом заломлення. Вільний рух фотона між взаємодіями визначається числовою випадковістю та повним коефіцієнтом ослаблення:

$$s = - \frac{\ln(\xi)}{\mu t} \quad (2.9)$$

що дає можливість дізнатись довжину стрибка до наступної події. Після руху яким би він не був та в яку сторону обчислюються нові координати фотона, і процес продовжується доки не буде виконана хочаб одна з умов завершення руху. Це нам дає змогу коректно враховувати внесок кожного фотона у розподіл поглинутої енергії та оптимізувати процес. [12]

Першим критерієм завершення є вихід фотона за межі моделі. Якщо після проходження певної ділянки траєкторії фотон залишає середовище через верхню або нижню межу, його подальший рух не розглядається, а моделювання для цього фотона припиняється. Другим критерієм є повне поглинання енергії фотона. У процесі багаторазових взаємодій вага фотона поступово зменшується внаслідок передачі енергії середовищу. Коли залишкова вага стає меншою за встановлене порогове значення, фотон вважається поглинутим. [14]

Формули дозволяють відтворювати випадкові події відповідно до законів. Хоча шлях окремого фотона є непередбачуваним, статистична достовірність результатів досягається за рахунок великої кількості реалізацій. При збільшенні числа фотонів N похибка моделювання зменшується приблизно як

$$\varepsilon \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (2.10)$$

що робить стохастичний підхід надзвичайно точним для складних біологічних середовищ, де детерміновані аналітичні методи або не працюють, або дають значні похибки. [11]

2.2.3. Модель збору результатів

Результати моделювання формуються через облік поглинутої енергії, внутрішнього відбиття та пропускання фотонів. Поглинута енергія накопичується у кожному шарі за правилом

$$\Delta w = w \frac{\mu_a}{\mu_t}, \quad (2.11)$$

де w - вага фотона в момент розрахунку. [4]

Внутрішнє відбиття враховується при взаємодії з межами шарів, а пропускання - як сума ваги фотонів, які виходять із нижньої поверхні моделі. Також реєструються кутові та просторові профілі розсіяння, що дозволяє будувати карти інтенсивності, карти поглинання та аналізувати проходження світла всередині багатошарової тканини. Ця модель збору результатів використовується для отримання достовірної картини взаємодії світла з середовищем. [9]

2.2.4. Блок-схема методу

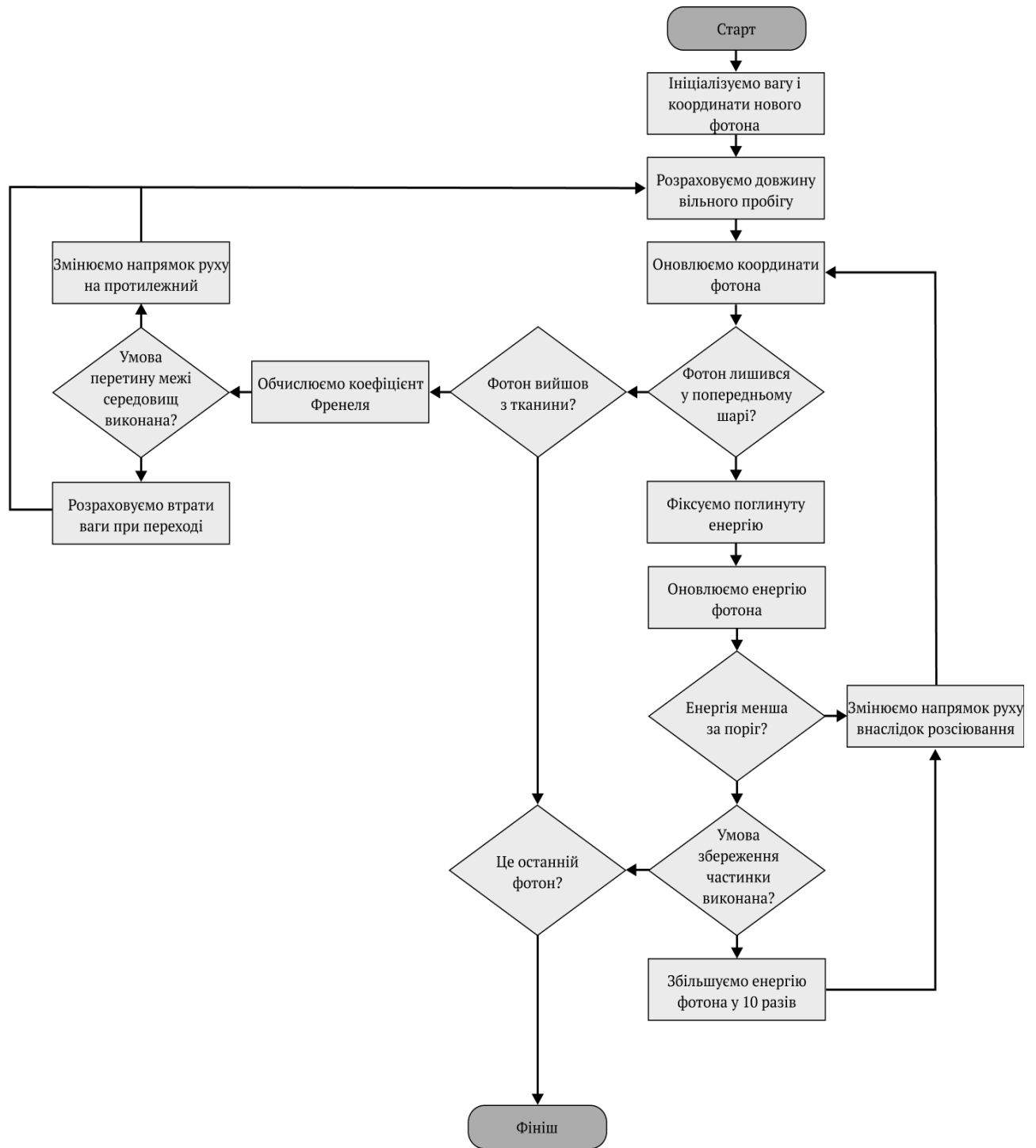


Рис.2.2 – Блок-схема методу

2.3. Розробка програмної моделі

2.3.1. Вибір середовища програмування

Для реалізації моделі поширення світла було обрано мову програмування C#. Даний вибір обумовлений простотою розробки, наявністю великої кількості бібліотек для наукових обчислень, знанням та можливістю зручної та швидкої візуалізації результатів моделювання. Дана мова програмування широко використовується у задачах моделювання, обробки даних та наукових досліджень. Для реалізації алгоритму Монте-Карло використовувалися стандартні засоби генерації випадкових чисел, а також бібліотеки для виконання чисельних розрахунків, побудови графіків та візуалізації результатів. Перевагами використання C# є кросплатформеність, зрозумілий синтаксис, висока швидкість розробки програмного забезпечення та можливість подальшого розширення функціоналу моделі. Крім того, C# забезпечує ефективну роботу з великими масивами даних, що є важливим при моделюванні руху великої кількості фотонів. Тобто, обране середовище програмування дозволяє реалізувати алгоритм та забезпечити зручний аналіз отриманих результатів. [16]

2.3.2. Покроковий опис алгоритму

Алгоритм починається з генерації фотона, коли задаються його початкові координати, початкова вага та напрям руху. Після цього визначається довжина кроку, яку фотон проходить у середовищі до наступної взаємодії, із врахуванням оптичних властивостей шару, в якому він знаходиться.

Коли фотон досягає кінця кроку, частина його енергії поглинається середовищем, і вага фотона відповідно зменшується. Якщо фотон не поглинений повністю, відбувається розсіяння, під час якого змінюється напрям його руху залежно від анізотропії середовища. [13]

Якщо фотон наближається до межі між шарами, алгоритм перевіряє можливість його переходу в наступний шар або відбиття назад що не можливо для біологічних тканин, враховуючи різницю показників заломлення між шарами. Після кожного кроку оновлюються координати фотона, такі як напрям і вага, а результати взаємодії зберігаються для формування статистики, зокрема облік поглинутої енергії, внутрішнього відбиття, пропускання та кутових профілів розсіяння. [10]

Тобто У процесі роботи алгоритму для кожного фотона послідовно виконуються такі етапи:

1. Генерація випадкової довжини пробігу.
2. Переміщення фотона до точки взаємодії.
3. Розрахунок поглинутої частини енергії.
4. Зменшення ваги фотона.
5. Визначення нового напрямку руху після розсіювання.
6. Перевірка переходу між шарами середовища.
7. Перевірка умов завершення траєкторії.

Цикл повторюється поки фотон не буде повністю поглинутий або не залишить межі середовища. Коли моделювання всіх фотонів завершується здійснюється накопичення статистичних даних та формування поглинутої енергії. [13, 17]

2.3.3. Організація вхідних параметрів моделювання

Для забезпечення гнучкості програмної моделі передбачена можливість налаштування основних параметрів чисельного експерименту. Усі вхідні дані задаються користувачем перед початком моделювання.

До основних параметрів належать:

- товщина кожного шару;
- коефіцієнт поглинання μ_a ;
- коефіцієнт розсіювання μ_s ;
- фактор анізотропії g ;
- показник заломлення n ;
- довжина хвилі випромінювання;
- кількість фотонів;
- кількість незалежних запусків.

Організація параметрів у вигляді таких структур даних дозволяє легко змінювати умови моделювання та проводити серії експериментів для різних наборів характеристик середовища. [12]

2.3.5. Формування вихідних даних

Результатом роботи програми є набір числових та графічних даних, що характеризують поширення світла. Після завершення моделювання для кожного запуску визначаються:

- кількість поглинутої енергії в кожному шарі;
- розподіл енергії за глибиною середовища;
- частка відбитого випромінювання;
- частка пропущеного випромінювання;
- середня глибина проникнення фотонів.

На основі отриманих даних програма формує графіки та карти розподілу поглинутої енергії автоматично. Візуалізація результатів дозволяє наочно оцінити вплив довжини хвилі на характер поширення випромінювання та глибину його проникнення у біологічне середовище. [18]

2.4. Параметри моделювання

2.4.1. Параметри випромінювання

У моделі джерело випромінювання задається набором параметрів, які визначають початкові умови поширення світла у середовищі. До основних параметрів належать хвилі, початкова енергія фотонів, напрямок поширення та кількість змодельованих частинок. Фотони на початку моделювання мають однакову початкову вагу, що відповідає нормованій одиничній енергії. Початковий напрямок руху задається перпендикулярно до поверхні тканини, що відповідає нормальному падінню пучка світла. Параметри випромінювання обираються так, щоб забезпечити можливість порівняння впливу різних довжин хвиль на процеси поглинання та розсіювання в середовищі. При цьому всі інші умови моделювання залишаються незмінними. Зміна довжини хвилі призводить до зміни оптичних характеристик тканини, що безпосередньо впливає на глибину проникнення фотонів та просторовий розподіл поглинутої енергії. [7]

2.4.2. Вибір довжин хвиль 605 нм, 868 нм та 1000 нм

Для дослідження було обрано три довжини хвиль: 605 нм, 868 нм та 1000 нм. Вибір цих значень обумовлений потребами аналізу поширення світла в різних ділянках оптичного спектра та оцінки впливу довжини хвилі на характер взаємодії випромінювання з біологічними тканинами. [17]

Довжина хвилі 605 нм належить до видимого червоного діапазону та характеризується відносно високими коефіцієнтами поглинання і розсіювання. Унаслідок цього більша частина енергії поглинається у поверхневих шарах тканини. Довжина хвилі 868 нм розташована в межах ближнього інфрачервоного діапазону та належить до так званого оптичного вікна біологічних тканин. Для цієї області спектра характерне зменшення поглинання гемоглобіном і зниження розсіювання, що забезпечує глибше

проникнення випромінювання. Довжина хвилі 1000 нм також належить до ближнього інфрачервоного діапазону та забезпечує значну глибину проникнення світла. При цьому починає зростати вплив поглинання водою, що є важливим фактором при аналізі розподілу енергії в тканині. Використання трьох різних довжин хвиль дозволяє провести порівняльний аналіз та визначити особливості проникнення світла в біологічне середовище залежно від спектрального діапазону. [18, 14]

2.4.3. Кількість фотонів у моделюванні

Одним із найважливіших параметрів методу є фотонна кількість. Від параметра залежить точність отриманих результатів та рівень шумів. Використання десяти мільйонів фотонів дозволяє отримати детальний розподіл та мінімізувати випадкові статистичні відхилення. При меншій кількості фотонів результати можуть та як показує практика колег містити значний шум, що ускладнює аналіз процесів поширення світла. [10]

Збільшення кількості фотонів підвищує точність, проте одночасно призводить до зростання часу обчислень. Значення було обрано як компроміс між точністю результатів та обчислювальними витратами. [14]

Оскільки метод статистичний, результати окремих запусків дещо відрізняються через випадковий характер генерації фотонів. Для підвищення достовірності даних роботи використовується серія незалежних запусків моделювання. Після завершення серії експериментів результати усереднюються, що дозволяє зменшити вплив статистичних флуктуацій та отримати більш стабільний розподіл поглинутої енергії. Такий підхід забезпечує високу статистичну надійність і дозволяє коректно порівнювати особливості поширення випромінювання для довжин хвиль. Отримані усереднені дані використовуються для подальшого аналізу впливу спектральних характеристик випромінювання на глибину проникнення та розподіл енергії у багат шаровому біологічному середовищі. [4,15]

3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ МОДЕЛЮВАННЯ

3.1. Організація чисельного експерименту

3.1.1. Умови проведення моделювання

Моделювання поширення світлового випромінювання у багатошаровому біологічному середовищі. Розрахунки проводилися для трьох довжин хвиль. Біологічне середовище представлялося у вигляді восьмишарової моделі, кожен шар якої характеризувався власними оптичними параметрами: основними для роботи коефіцієнтом поглинання та розсіювання, фактором анізотропії та показником заломлення також сильно залежали від товщини кожного шару.

Для достовірності результатів кожної довжини хвилі буде проведено багато незалежних запусків моделювання. Отримані результати усереднювалися, що давало змогу мінімізувати вплив випадкових статистичних відхилень та підвищити точність розрахунків. Усі розрахунки виконувалися за однакових умов, що забезпечувало коректність порівняння результатів для різних довжин хвиль.

3.1.2. Початкові параметри експерименту

Початкові параметри моделювання задавалися перед запуском програми та визначали умови поширення фотонів у середовищі, що наведені в таблиці 3.1, таблиці 3.2 та таблиці 3.3.

Таблиця 3.1. Параметри поширення світла для $\lambda = 605$ нм

Шар	Товщина (мм)	μ_a (1/мм)	μ_s (1/мм)	g	n
1	0.02	0.20	20	0.85	1.55
2	0.08	0.15	15	0.90	1.40
3	0.20	0.05	12	0.90	1.40
4	1.00	0.03	10	0.90	1.40
5	2.00	0.02	8	0.90	1.44
6	3.00	0.015	7	0.90	1.44
7	10.00	0.04	9	0.90	1.37
8	2.00	0.30	15	0.98	1.40

Таблиця 3.2. Параметри поширення світла для $\lambda = 868$ нм

Шар	Товщина (мм)	μ_a (1/мм)	μ_s (1/мм)	g	n
1	0.02	0.12	15	0.88	1.55
2	0.08	0.10	11	0.92	1.40
3	0.20	0.03	8	0.92	1.40
4	1.00	0.02	7	0.92	1.40
5	2.00	0.01	5	0.92	1.44
6	3.00	0.008	4	0.92	1.44
7	10.00	0.02	5	0.92	1.37
8	2.00	0.15	10	0.99	1.40

Таблиця 3.3. Параметри поширення світла для $\lambda = 1000$ нм

Шар	Товщина (мм)	μ_a (1/мм)	μ_s (1/мм)	g	n
1	0.02	0.10	12	0.90	1.55
2	0.08	0.08	9	0.93	1.40
3	0.20	0.025	6	0.93	1.40
4	1.00	0.018	5	0.93	1.40
5	2.00	0.015	4	0.93	1.44
6	3.00	0.012	3.5	0.93	1.44
7	10.00	0.025	4	0.94	1.37
8	2.00	0.18	8	0.99	1.40

Початкові координати фотонів розташовувалися на поверхні біологічного середовища. Усі фотони послідовно запускалися та незалежно один від одного. Для кожного фотона визначався шлях пробігу та кути розсіювання відповідно до параметрів що наведені в таблицях для поточного шару.

3.1.3. Особливості обчислювального процесу та алгоритму

Реалізація данного алгоритму моделювання розповсюдження світла починається з вибору середовища та його параметрів, тобто визначення багатошарової структури тканини, товщини кожного шару, коефіцієнтів поглинання та розсіювання, а також показників заломлення як показано на Рис.3.1.

```
// створюємо колонки для параметрів
dataGridView1.Columns.Add("Thickness", "Thickness (mm)");
dataGridView1.Columns.Add("MuA", "ua (1/mm)");
dataGridView1.Columns.Add("MuS", "μs (1/mm)");
dataGridView1.Columns.Add("Anisotropy", "g");
dataGridView1.Columns.Add("RefrIndex", "n");
```

Рис. 3.1 - Частина коду параметрів

Це дозволяє легко додавати нові шари або змінювати їхні властивості. Структура програми побудована модульно: окремі методи відповідають за генерацію фотона, обчислення довжини кроку, поглинання енергії, розсіяння та накопичення результатів.

```
double[] A = new double[nLayers]; // поглинута вага в кожному шарі
double Rd = 0.0; // відбитість (вихід назад в повітря)
double Td = 0.0; // пропуск (вихід вниз з останнього шару)

double x = 0.0, y = 0.0, z = 0.001; // старт майже на поверхні (щоб не бути точно на межі)
double ux = 0.0, uy = 0.0, uz = 1.0; // напрямок (вглиб)

Normalize(ref ux, ref uy, ref uz);

double W = 1;
```

Рис. 3.2 - Частина коду стартових значень

Всі стохастичні події реалізуються через генерацію випадкових чисел. Наприклад, довжина кроку фотона обчислюється за експоненціальним законом випадковості:

```
double xi = rand.NextDouble();
double step = -Math.Log(xi) / layer.MuT;
```

Рис. 3.3 - Генератор випадкових чисел

Після кроку фотон може поглинути частину своєї енергії або розсіюватися, а його напрям оновлюється відповідно до функції Рис.3.4:

```
double phi = 2 * Math.PI * rand.NextDouble();
double theta = ComputeScatteringAngle(layer.G, rand.NextDouble());
photon.Direction = UpdateDirection(photon.Direction, theta, phi);
```

Рис. 3.4 - Фазова функція

Якщо фотон досягає межі шару, перевіряється можливість переходу або відбиття [19]

```

if (photon.Z >= layer.Thickness)
{
    double R = ComputeFresnelReflectance(layer.RefractiveIndex, nextLayer.RefractiveIndex, photon.
    if (rand.NextDouble() < R)
        photon.Direction.Z *= -1; // відбивання
    else
        photon.Position.Z = layer.Thickness; // перехід у наступний шар
}

```

Рис. 3.5 - Перехід або відбиття

Через використання великої кількості фотонів та багаторазових запусків обчислення потребували значних ресурсів обчислювальної техніки. Тобто сучасному комп'ютеру для використання такої кількості незалежних процесів знадобилось приблизно 20 хв. Все залежить від кількості шарів та коефіцієнтів моделі. Для зменшення статистичних шумів результати кожного запуску накопичувалися окремо, після чого виконувалося усереднення отриманих даних.

Після завершення моделювання формувалися масиви даних, які містили інформацію про розподіл поглинутої енергії в шарах середовища. На основі цих даних будувалися графіки та візуалізації, що використовувалися для подальшого аналізу глибини проникнення світла та порівняння ефективності різних довжин хвиль.

3.2 Програмна реалізація моделі

3.2.1. Загальна структура програмного забезпечення

Для реалізації моделі було розроблено програмний комплекс із графічним інтерфейсом користувача. Програма забезпечує введення параметрів середовища, запуск моделювання методом Монте-Карло та візуалізацію отриманих результатів.

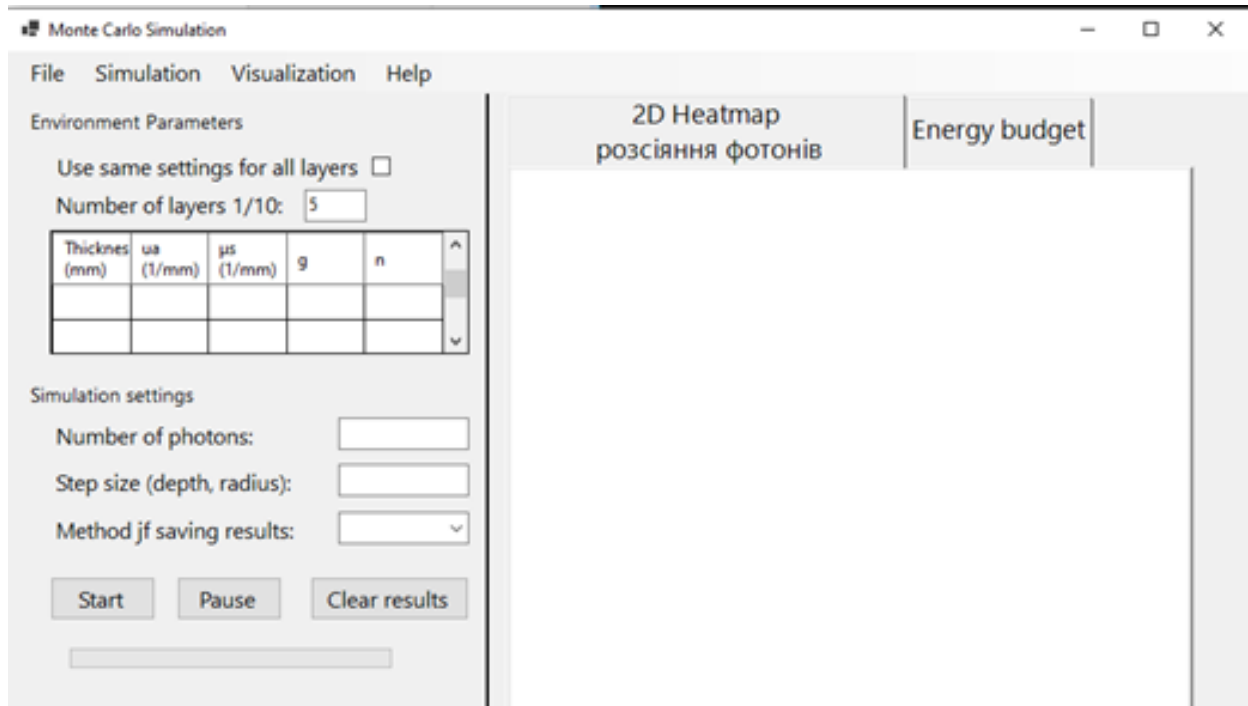


Рис. 3.6 – Інтерфейс програмного забезпечення

Архітектура програмного забезпечення складається з декількох функціональних модулів:

- модуль введення параметрів середовища;
- модуль генерації випадкових величин;
- модуль моделювання руху фотонів;
- модуль обробки статистичних результатів;
- модуль візуалізації даних;
- модуль збереження результатів.

Така структура забезпечує незалежність окремих компонентів та спрощує подальшу модернізацію програмного забезпечення. Вікно програми Monte Carlo Simulation, що зображено на рис. 3.6 моделює проходження та розсіяння фотонів. Ліва частина інтерфейсу містить параметри середовища, де задаються фізичні властивості шару: його товщина, коефіцієнт поглинання, коефіцієнт розсіяння, анізотропія розсіяння, а також показник заломлення. У параметрах також видно, що можна використати модель з будь-якою кількістю шарів від 1 до

10. Нижче розташовані налаштування симуляції: кількість фотонів, а також є поля для кроку моделювання і вибору методу збереження результатів. Кнопки Start, Pause та Clear Results керують запуском, паузою та очищенням симуляції. Також програма надає підказки щоб користувачу який не дуже знайомий з методом при вводі кількості фотонів очікував що виконання займе досить не малу кількість часу або навпаки виконається бистро але буде дуже багато шумів. Тобто точність результату буде не велика. Приклад підказки зображено на Рис.3.7.

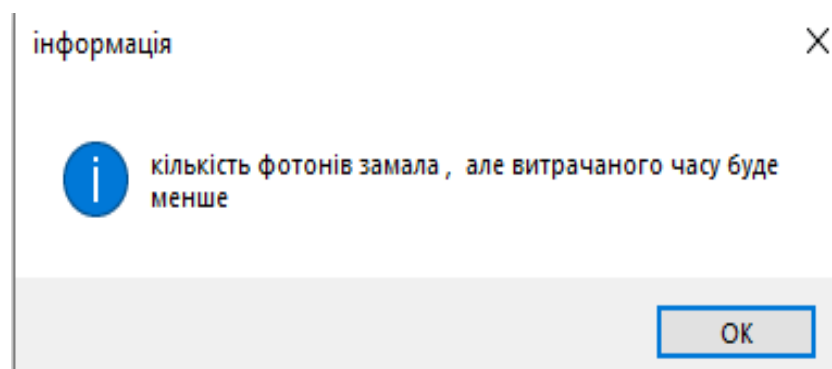


Рис. 3.7 - Реалізація підказки

Програма також дає можливість змінити поріг мінімальної ваги в налаштуваннях або множник ймовірності виживання фотона Рис. 3.8. Якщо виникли проблема з налаштуваннями їх можна повернути до заводських.

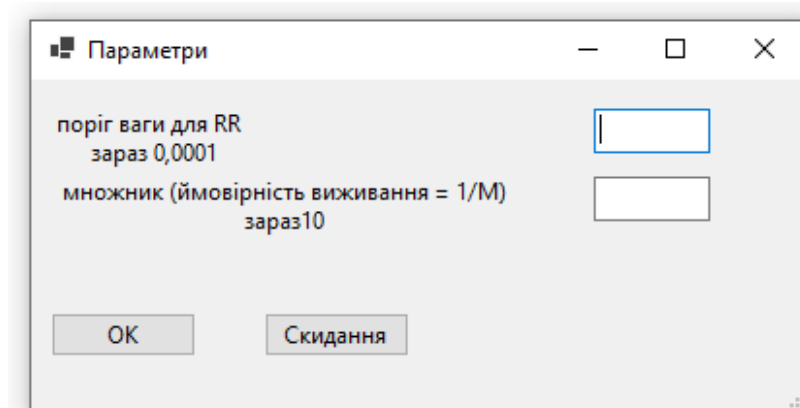


Рис. 3.8 - Інтерфейс налаштування

3.2.2. Візуалізація результатів моделювання

Для аналізу отриманих результатів у програмі реалізовано декілька режимів візуалізації. Основним режимом є двовимірний теплова карта (**2D Heatmap**), яка відображає просторовий розподіл фотонів приклад зображений на Рис. 3.9 та поглинутої енергії в тканині.

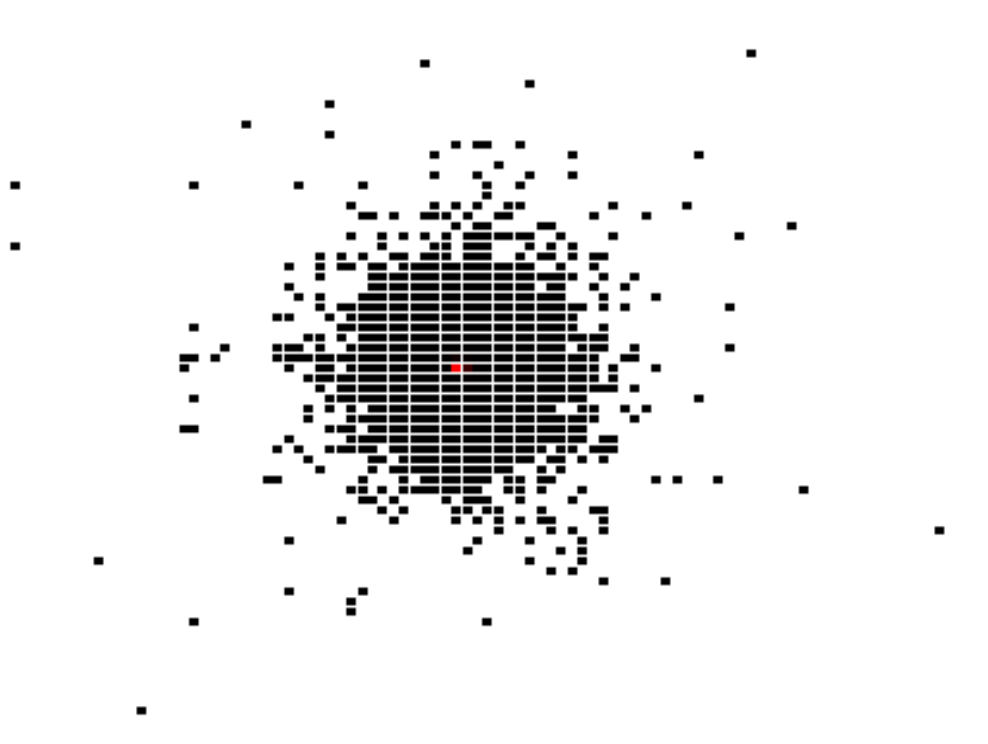


Рис. 3.9 Карта горизонтальної траєкторії фотонів

Крім того, реалізовано вкладку **Energy Budget**, яка дозволяє аналізувати: поглинуту, відбиту та пропущену енергію, а також енергетичний баланс моделі. Візуалізація результатів забезпечує швидке порівняння особливостей поширення світла для різних довжин хвиль та параметрів середовища.

3.3. Результати моделювання розподілу поглинутої енергії

3.3.1. Розподіл поглинутої енергії для довжини хвилі 605 нм

Для дослідження особливостей поширення світлового випромінювання з довжиною хвилі 605 нм, 868 нм, 1000 нм було проведено серію моделювань методом Монте-Карло. За результатами розрахунків визначено кількість

енергії, поглинутої в кожному шарі багатошарового біологічного середовища. Отримані результати наведено на рисунку Рис. 3.10, Рис. 3.11, Рис. 3.12.

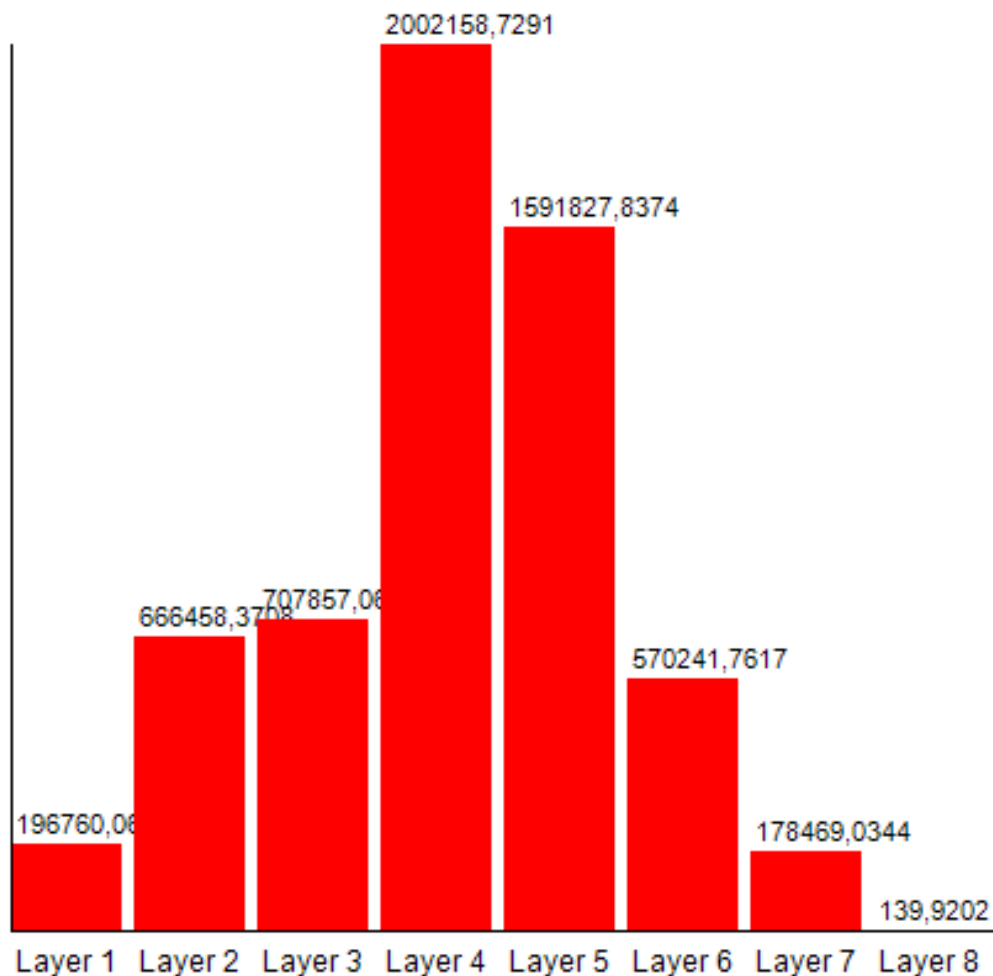


Рис. 3.10 - Усереднений розподіл поглинутої енергії в шарах біологічного середовища для довжини хвилі 605 нм

Як видно з рис. 3.10 поглинута енергія є нерівномірною по товщині біологічного середовища. Максимальне поглинання спостерігається у четвертому шарі, де значення поглинутої енергії становить приблизно $2 \cdot 10^6$ умовних одиниць. Значні величини поглинання також спостерігаються у п'ятому шарі.

У перших трьох шарах рівень поглинання є меншим, оскільки частина фотонів проходить крізь них без значних втрат енергії. Після досягнення максимуму у п'ятому шарі спостерігається поступове зменшення поглинутої

енергії в напрямку поширення випромінювання. Це пояснюється тим, що зі збільшенням глибини кількість фотонів зменшується внаслідок попереднього поглинання та розсіювання. У шостому та сьомому шарі поглинання значно знижується, а в восьмому шарі енергія практично відсутня. Це свідчить про те, що для довжини хвилі 605 нм основна частина енергії поглинається в середніх шарах моделі, а глибина проникнення випромінювання є обмеженою. Отримані результати узгоджуються з фізичними властивостями випромінювання даного спектрального діапазону, для якого характерні відносно високі втрати енергії під час поширення в біологічних тканинах.

3.3.2. Розподіл поглинутої енергії для довжини хвилі 868 нм

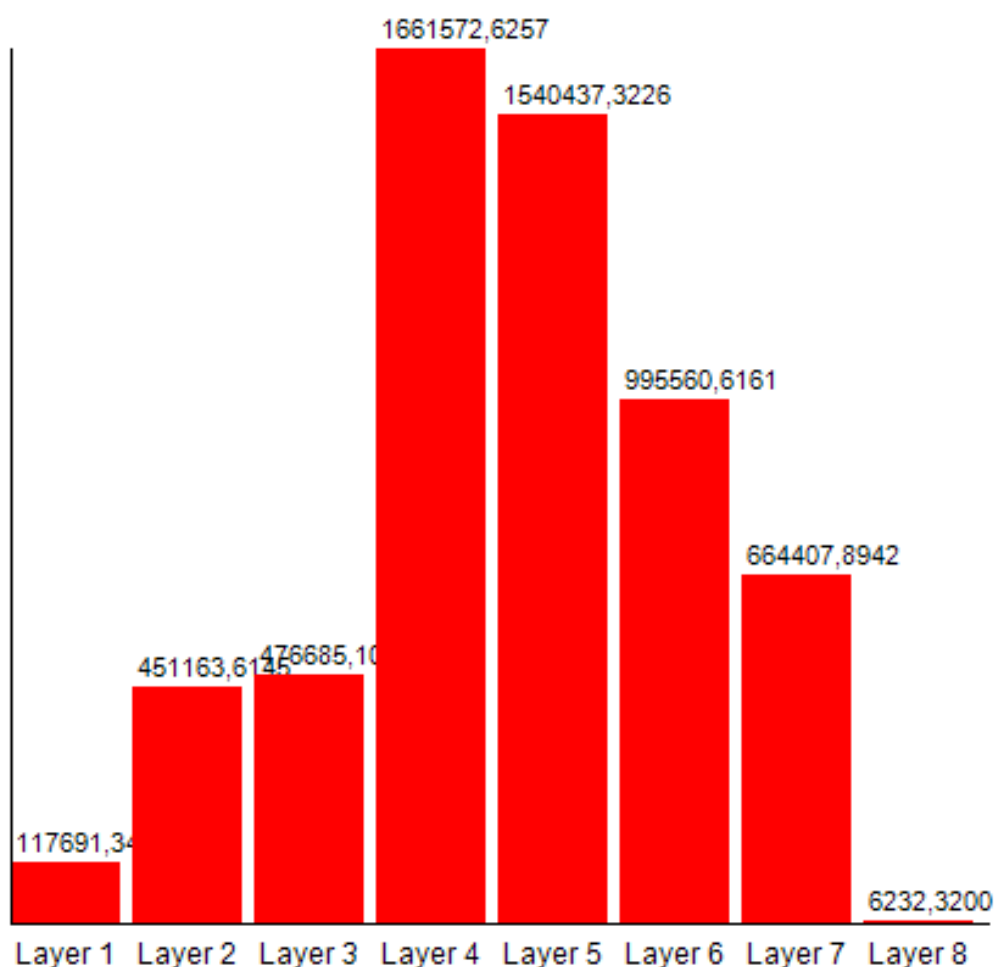


Рис. 3.11 - Усереднений розподіл поглинутої енергії в шарах біологічного середовища для довжини хвилі 868 нм

Як видно з рис. 3.11, найбільше поглинання спостерігається у четвертому шарі, де величина поглинутої енергії становить приблизно $1,66 \cdot 10^6$ умовних одиниць. Значне поглинання також спостерігається у п'ятому шарі, для якого отримано значення близько $1,54 \cdot 10^6$. У перших трьох шарах величина поглинутої енергії поступово зростає від $1,18 \cdot 10^5$ до $4,77 \cdot 10^5$ умовних одиниць, що свідчить про накопичення енергії під час проходження фотонів через поверхневі шари середовища.

Після досягнення максимуму в четвертому шарі спостерігається поступове зменшення енергії. Для шостого шару вона становить близько $9,96 \cdot 10^5$ умовних одиниць, а для сьомого - $6,64 \cdot 10^5$. Тенденція пояснюється зменшенням кількості фотонів унаслідок їх попереднього поглинання та розсіювання. У восьмому шарі зафіксовано найменше значення поглинутої енергії близько $6,23 \cdot 10^3$ умовних одиниць. Це свідчить про те, що лише незначна частина фотонів досягає максимальної глибини досліджуваного середовища.

Отримані результати підтверджують, що основна частина енергії випромінювання поглинається в центральних шарах моделі, тоді як у глибоких шарах спостерігається поступове зменшення рівня поглинання.

3.3.3. Розподіл поглинутої енергії для довжини хвилі 1000 нм

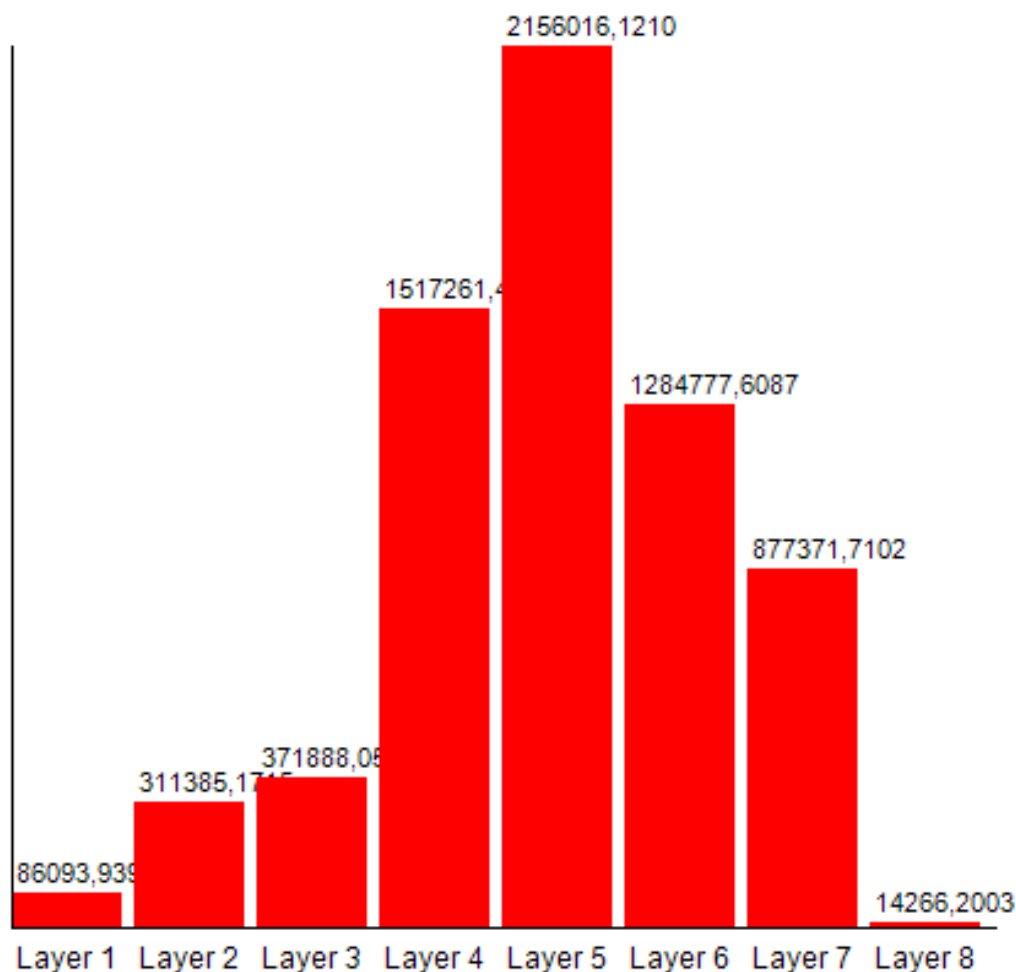


Рис. 3.12 - Усереднений розподіл поглинутої енергії в шарах біологічного середовища для довжини хвилі 1000 нм

На рис 3.12, розподіл має виражений максимум у центральній частині моделі. Найбільше значення поглинутої енергії спостерігається у п'ятому шарі та становить приблизно $2,16 \cdot 10^6$ умовних одиниць. У перших трьох шарах рівень поглинання є порівняно невеликим і змінюється від $8,61 \cdot 10^4$ до $3,71 \cdot 10^5$ умовних одиниць. У четвертому шарі спостерігається різке зростання поглинутої енергії до $1,52 \cdot 10^6$ умовних одиниць, що свідчить про інтенсивну взаємодію фотонів із середовищем на цій глибині.

Після досягнення максимуму в п'ятому шарі величина поглинутої енергії поступово зменшується. Для шостого шару вона становить близько $1,28 \cdot 10^6$

умовних одиниць, а для сьомого $8,77 \cdot 10^5$. Незважаючи на спад, у цих шарах зберігається значний рівень поглинання, що свідчить про проходження суттєвої частини фотонів на значну глибину. У восьмому шарі поглинута енергія становить близько $1,43 \cdot 10^4$ умовних одиниць. Це найбільше значення серед усіх шарів, однак воно підтверджує досягнення фотонами максимальної глибини досліджуваної моделі. Основна частина енергії випромінювання концентрується в четвертому-сьомому шарах середовища, тоді як у поверхневих рівень поглинання є значно меншим.

3.3.4. Аналіз поглинання енергії біологічним середовищем

У результаті моделювання було отримано діаграму поглинутої енергії для різних довжин хвиль випромінювання, яка наведена на рис. 3.13. Діаграма відображає відносний внесок кожної досліджуваної довжини хвилі в загальне поглинання енергії середовищем.

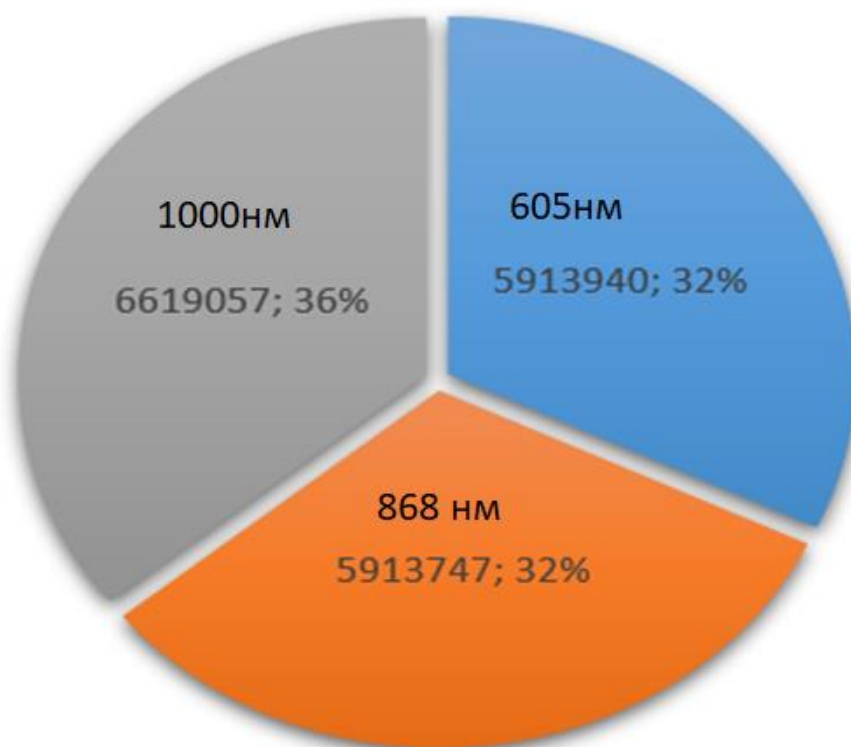


Рис. 3.13 - Розподіл поглинутої енергії біологічним середовищем для довжин хвиль 605 нм, 868 нм та 1000 нм.

З отриманих результатів видно, що найбільша кількість енергії була поглинута при довжині хвилі 1000 нм і становить 6 619 057 умовних одиниць, що відповідає 36 % від сумарного поглинання. Для довжин хвиль 605 нм та 868 нм отримано близькі значення 5 913 940 та 5 913 747 умовних одиниць відповідно, що становить по 32 % від загальної поглинутої енергії.

Результати свідчать про те, що в межах досліджуваної моделі тканини випромінювання з довжиною хвилі 1000 нм взаємодіє із середовищем більш інтенсивно порівняно з іншими досліджуваними хвилями. Це пояснюється особливостями оптичних характеристик тканини, зокрема коефіцієнтами поглинання та розсіювання, які визначають частку енергії фотонів, що передається середовищу під час поширення. Аналіз результатів моделювання показав, що довжина хвилі 1000 нм забезпечує найбільше поглинання енергії в досліджуваному біологічному середовищі, тоді як для довжин хвиль 605 нм та 868 нм спостерігається практично однакова ефективність поглинання. Статистична похибка методу Монте-Карло оцінювалася співвідношенням $\sigma \approx \frac{1}{\sqrt{N}}$. Для одного запуску 10^7 фотонів вона становить приблизно 0.032%. Оскільки для кожної довжини хвилі виконувалося 20 незалежних запусків із подальшим усередненням результатів, ефективна статистична похибка зменшувалася до близько 0.007%, що забезпечує високу достовірність отриманих результатів.

ВИСНОВКИ:

У межах роботи розроблено математичну модель та програмну реалізацію алгоритму Монте-Карло для розподілу поглинутої енергії в багатошаровій тканині. Створена програма дозволяє задавати параметри окремих шарів середовища, характеристики випромінювання та виконувати статистичне моделювання великої кількості фотонів з подальшою візуалізацією отриманих результатів.

Для дослідження було обрано три довжини хвиль світлового випромінювання 605 нм, 868 нм та 1000 нм. Для кожного випадку виконано по 20 незалежних запусків моделювання з кількістю 10^7 фотонів у кожному запуску, що забезпечило зменшення похибки до близько 0.007%, що забезпечує високу достовірність отриманих результатів.

У результаті проведених чисельних експериментів встановлено, що характер розподілу поглинутої енергії істотно залежить від довжини хвилі випромінювання. Для довжини хвилі 605 нм основна частина енергії поглинається в середніх шарах біологічного середовища, що свідчить про відносно невелику глибину проникнення випромінювання. Для довжини хвилі 868 нм спостерігається більш рівномірний розподіл енергії та збільшення глибини поширення фотонів. Найбільшу глибину проникнення продемонструвало випромінювання з довжиною хвилі 1000 нм, для якого максимум поглинутої енергії зміщується у глибші шари середовища.

Отримані результати підтверджують залежність між довжиною хвилі випромінювання та глибиною його проникнення в біологічні тканини. Встановлено, що зі збільшенням довжини хвилі від 605 нм до 1000 нм зменшується вплив розсіювання та зростає ефективність проникнення фотонів у внутрішні шари середовища.

Встановлено, що довжини хвиль 605 нм та 868 нм характеризуються практично однаковим сумарним поглинанням енергії, а найбільше сумарне поглинання спостерігається при довжині хвилі 1000 нм.

Розроблена програмна модель може бути використана для дослідження взаємодії світла з біологічними та не тільки тканинами, оцінювання розподілу поглинутої енергії, підбору параметрів лазерного випромінювання та подальших досліджень у галузі біомедичної оптики, фототерапії та оптичної діагностики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Jacques S. L. Optical properties of biological tissues: a review // *Physics in Medicine and Biology*. 2013. Vol. 58, № 11. P. R37–R61.
2. Lambrou G. I., Tagka A., Kotoulas A., Chatziioannou A. Physical and Methodological Perspectives on the Optical Properties of Biological Samples: A Review // *Photonics*. 2021. Vol. 8, № 12. Art. 540
3. Metropolis N., Ulam S. *The Monte Carlo Method* // *Journal of the American Statistical Association*. 1949. Vol. 44, №247. P. 335–341
4. *Optical Imaging Modalities for Biomedical Applications*. Boca Raton : CRC Press, 2013.
5. Wang L. H. Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues in Standard C. Houston : University of Texas M. D. Anderson Cancer Center, 1992.
6. Wang L., Jacques S. L., Zheng L. MCML: Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues // *Computer Methods and Programs in Biomedicine*. 1995. Vol. 47, № 2. P. 131–146.
7. Welch A. J., Van Gemert M. J. C. Monte Carlo Modeling of Light Transport in Tissues. New York : Springer, 2011. 850 p.
8. Jacques S. L. Optical Properties of Biological Tissues: A Review // *Physics in Medicine and Biology*. 2013. Vol. 58, № 11. P. R37-R61.
9. Accurate Simulation of Light Propagation in Complex Skin Tissues Using an Improved Tetrahedron-Based Monte Carlo Method // *Applied Sciences*. 2021. Vol. 11.
10. Kaewboonrueng G., Özmen Y. та ін. Monte Carlo Simulation of Photon-Skeletal Muscle Interaction in Human Tissue Model // *Advanced Materials Research*.
11. LaRochelle E. P. M., Arce P., Pogue B. W. Monte Carlo Modeling Photon-Tissue Interaction Using On-Demand Cloud Infrastructure // *arXiv*. 2020. arXiv:2005.01108.
12. Ровира Р. У., Павлов С. В. Імітаційне моделювання Монте-Карло для вивчення поширення поляризованого світла в біологічній тканині // *Вісник Вінницького національного технічного університету*.
13. Kiymik M. K. A Study on 3D Monte Carlo Modeling of Photon Propagation Through Tissue // *Journal of Medical Systems*. 1995. Vol. 19, № 4. P. 313–322.
14. Swartling J., Pifferi A., Enejder A. M. K., Andersson-Engels S. Accelerated Monte Carlo Models to Simulate Fluorescence Spectra from Layered Tissues // *Journal of the Optical Society of America A*. 2003. Vol. 20, № 4. P. 714–727.
15. Zhu C., Liu Q. Review of Monte Carlo Modeling of Light Transport in Tissues // *Journal of Biomedical Optics*. 2013. Vol. 18, № 5.

16. Yuan Y., Yan S., Fang Q. et al. Light Transport Modeling in Highly Complex Tissues Using the Implicit Mesh-Based Monte Carlo Algorithm // *Biomedical Optics Express*. 2020. Vol. 11, № 2. P. 1105–1123.
17. Accurate Simulation of Light Propagation in Complex Skin Tissues Using an Improved Tetrahedron-Based Monte Carlo Method // *Applied Sciences*. 2021. Vol. 11, № 9.
18. A New Monte Carlo Code for Light Transport in Biological Tissue (MCLTmx) // *Computer Methods and Programs in Biomedicine*.
19. Hamdy O. Simulating Light Diffusion in Human Brain Tissues Using Monte Carlo Simulation and Diffusion Equation // *Advances in Applied Sciences*. 2018. Vol. 3, № 4. P. 95–102.
20. Vinckenbosch L., Lacaux C., Tindel S., Thomassin M., Obara T. Monte Carlo Methods for Light Propagation in Biological Tissues // *Mathematical Biosciences*. 2015. Vol. 269. P. 48–60. DOI: 10.1016/j.mbs.2015.08.017.