МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТА В МНОГОСЛОЙНОЙ СРЕДЕ С ПРОИЗВОЛЬНЫМИ ГРАНИЦАМИ

Т.А. Багаутдинов[1], В.П. Гергель[1], А.В. Горшков[1], И.И. Фикс[1,2], М.Ю. Кириллин[1,2]

[1]Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского
[2]Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород

Введение

В настоящее время методы оптической биомедицинской диагностики претерпевают бурное развитие. Эти методы основаны на зондировании биологических объектов излучением оптического видимого и ближнего инфракрасного диапазона и анализе распределения мощности рассеянного детектированного излучения. Среди преимуществ методов оптической диагностики в сравнении с традиционными рентгеновскими методами, магнитно-резонансной томографией и УЗИ можно выделить неинвазивность (эти методы не требуют проникновения через естественные внешние барьеры организма), безопасность, экономичность, высокое пространственное разрешение.

Для развития данных методов требуется современное программное обеспечение как для разработки и усовершенствования новых методов оптической диагностики, так и для интерпретации и обработки диагностических данных, полученных уже существующими методами. В основе такого программного обеспечения должны находиться адекватные модели распространения света в биологических объектах и визуализации результатов. Решение этой задачи аналитически затруднено вследствие сложной геометрической структуры биотканей и неоднородности распределения их оптических свойств. В этой связи удобно использовать численные решения задачи распространения излучения в оптически неоднородных средах. Численное решение поставленной задачи может осуществляться двумя классами методов – сеточными и статистическими. Применение первого класса методов для задач биомедицинской оптики реализовано в пакете NIRFAST [7]. Однако традиционно в задачах биомедицинской оптики применяется второй класс методов, поскольку он более прост в реализации.

Постановка задачи

Актуальная на сегодняшний день классическая модель (проект MCML [1]) имеет ряд ограничений: слои ткани бесконечно широкие; слои плоскопараллельные.

Первое ограничение говорит о том, что для получения адекватного результата необходимо рассматривать область распространения света гораздо меньшую, чем общий объем биологической ткани. Второе ограничение является более критичным, так как реально исследуемые биологические ткани имеют существенно более сложную геометрию границ (рис. 1).

Таким образом, в рамках данной работы ставится задача моделирования распространения света в многослойной среде с произвольными границами. При этом считаем, что задача решается в трехмерном пространстве, а среда состоит из набора слоев. Каждый слой описывается рядом оптических характеристик: коэффициентами рассеяния и поглощения, фактором анизотропии рассеяния и показателем преломления.

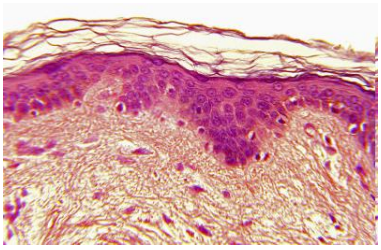

Рис. 1. Гистологическое изображение структуры кожи человека (слои кожи сверху вниз: роговой слой, эпидермис, дерма)

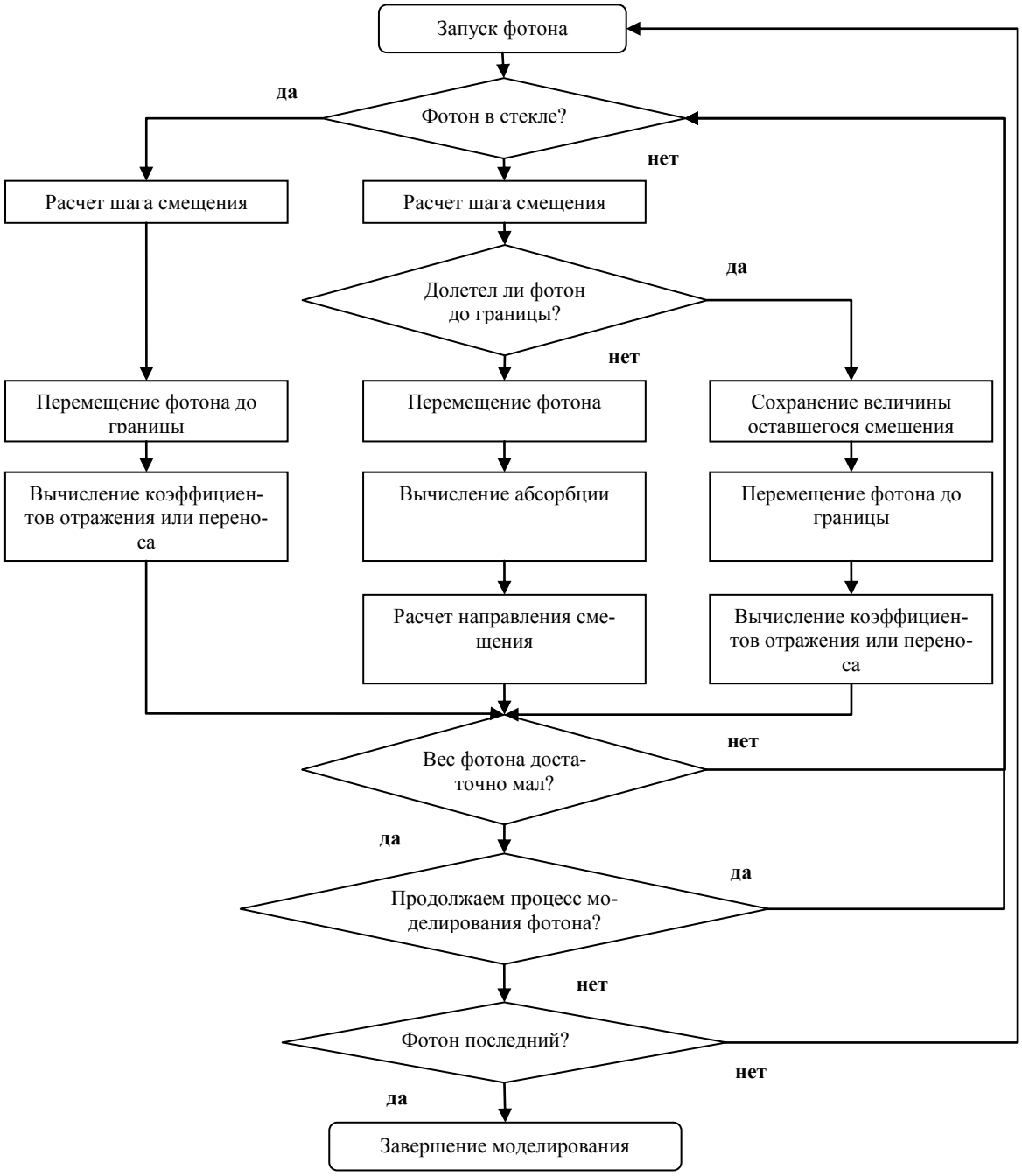

Рис. 2. Алгоритм моделирования распространения света в многослойной среде методом Монте-Карло

Результатами моделирования являются значения следующих физических величин:

- объемное распределение поглощенной интенсивности светового поля в среде;
- пространственное распределение интенсивности рассеянного излучения на границе среды.

Общее описание алгоритма решения задачи

Одним из подходов к решению задачи распространения света в многослойных средах является метод статистического моделирования Монте-Карло [1, 4].

Применительно к задаче распространения излучения в многослойной среде метод Монте-Карло заключается в многократном повторении расчета траектории движения фотона в среде, исходя из задаваемых параметров среды.

Общий алгоритм решения задачи представлен на схеме [1] (рис. 2).

Для каждого фотона указанные выше действия выполняются независимо. Число фотонов в реальных экспериментах может быть достаточно большим ($10^8 – 10^{10}$), из чего можно предположить, что данная задача может быть эффективно реализована с использованием технологий параллельного программирования.

В работах группы Боаса было предложено применять вокселизацию для моделирования распространения света в биологических объектах со сложной структурой [8, 9], однако такой подход не позволяет корректно описать преломление света на границах слоев. В предыдущей версии алгоритма авторами была реализована возможность задания кривизны границы по одной координате (поверхность задавалась набором прямоугольных полос) [10]. В новом разработанном алгоритме для моделирования произвольных границ применен один из самых распространенных подходов в компьютерной графике – триангуляция поверхности с использованием общеизвестной структуры TRIANGLE STRIP [5]. Считаем, что каждая поверхность будет задаваться набором треугольников.

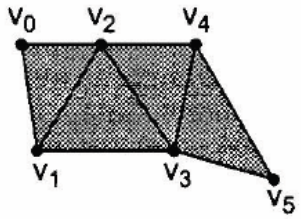

Рис. 3. Пример триангуляции поверхности

Каждый следующий треугольник будет иметь общую сторону с предыдущим треугольником (рис. 3). Таким образом, мы экономим память для двух лишних вершин.

Сразу необходимо выделить некоторые ограничения новой модели:

- трехмерная модель биологической ткани будет ограничена фиктивным кубом, который будет использоваться при моделировании движения фотона. Если фотон выходит за этот куб, тогда он перестает дальше трассироваться;
- в данной модели не должно быть границы, соответствующей более чем двум слоям.

При применении модели с учетом произвольных границ необходимо внести изменения в исходный алгоритм распространения света в многослойной среде.

1. В новой модели у нас отсутствует цилиндрическая симметрия и для учета абсорбции нам придется использовать полноценную трехмерную сетку. Таким образом, потребуется большой размер дополнительной памяти. Например, для сетки 100x100x100 необходимо выделить несколько мегабайт оперативной памяти.
2. На каждом шаге придется перебирать большое количество треугольников для поиска пересечения с границей слоя.

3. На каждом шаге проверять, не вышел ли фотон за границу ограничивающего куба. В случае вылета необходимо прекратить трассировку.
4. Рассчитывать нормали к треугольникам, а также отраженные и преломленные траектории движения фотона при достижении им границы слоя.

Результаты

На текущий момент выполнена реализация библиотеки моделирования распространения света в биологических средах с произвольной геометрией слоев. Эта библиотека позволяет получить траектории движения фотонов в среде, а так же предоставляет возможность задания детекторов на поверхности среды. Детекторы накапливают информацию о том, какое количество фотонов вылетело за границы среды в данной области.

Ранее был разработан и реализован алгоритм моделирования распространения света в средах с плоскопараллельной геометрией слоев, который является частным случаем текущего алгоритма [6]. Следует отметить, что при переходе к моделированию произвольных границ время работы алгоритма существенно возрастает.

В таблице 1 представлено сравнение времени работы алгоритмов для моделирования в средах с плоскопараллельной и произвольной геометрией. Тестовая среда состоит из двух плоскопараллельных слоев, которые в случае алгоритма с произвольной геометрией приближаются набором треугольников.

Характеристики тестового оборудования:

- процессор Intel Core i5 2410M, 2,30GHz, 2 ядра, 4 потока;
- оперативная память 4 Gb;
- операционная система Microsoft Windows 7.

Таблица 1. Время работы алгоритмов моделирования распространения света в средах с плоскопараллельной и произвольной геометрией (сек), число фотонов – 10^4

Алгоритм	Число треугольников в описании границ слоев			
	6	30	300	3000
Плоскопараллельная геометрия (без триангуляции поверхностей)	0.42	0.42	0.42	0.42
Произвольная геометрия	1.22	2.95	22.07	214.03

Результаты экспериментов показывают, что время работы алгоритма, рассчитанного на случай произвольной геометрии среды, существенно больше времени работы алгоритма для случая плоскопараллельной геометрии. Более того, для моделирования движения достаточного количества фотонов (минимум 10^8) в среде со сложной геометрией (требующей несколько десятков тысяч треугольников) необходимо несколько месяцев компьютерного времени.

Дополнительно можно отметить линейный рост времени работы алгоритма в зависимости от числа используемых треугольников. Это объясняется тем, что в текущей версии алгоритма для поиска пересечений используется простой перебор. Этот метод является, очевидно, неэффективным и впоследствии будет заменен. При этом можно получить существенное ускорение алгоритма.

Дополнительной возможностью получить ускорение являются параллельные вычисления. Для оценки потенциального ускорения при использовании нескольких процессоров был реализован параллельный алгоритм моделирования, предназначенный для работы на SMP-системах [3] (табл. 2).

Таким образом, на современном двухъядерном процессоре с поддержкой технологии HyperTreading можно получить ускорение алгоритма более чем в 3 раза.

Таблица 2. Время работы алгоритма моделирования распространения света в средах с произвольной геометрией (сек), число фотонов – 10^4, число треугольников – 300

Алгоритм	Количество потоков			
	1	2	3	4
Произвольная геометрия	22.07	13.04	10.89	9.06

Еще одним способом ускорения алгоритма является использование современных графических процессоров. Перенос кода на GPU для алгоритма моделирования в плоскопараллельной среде позволил уменьшить время его работы более чем в 100 раз по сравнению с последовательной CPU-версией [6]. В силу сходства принципов распараллеливания рассматриваемых алгоритмов можно предположить, что перенос на GPU алгоритма моделирования для случая произвольной геометрии также позволит получить существенный выигрыш по производительности.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», проект № 02.740.11.0839, а также проекта РФФИ 11-02-97062-р_поволжье_а и гранта МК-1127.2010.2.

Работа выполнена в лаборатории ITLab факультета ВМК ННГУ.

Литература

1. Lihong Wang, Steven L. Jacques. Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues in Standard C, 1992.
2. Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. Издательство «ДМК Пресс», 2010.
3. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. М.: Интернет-Университет Информационных Технологий, Бином, 2007.
4. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
5. Френсис Хилл. OpenGL. Программирование компьютерной графики. СПб.: Питер, 2002.
6. Багаутдинов Т.А., Гергель А.В, Гошков А.В., Кириллин М.Ю., Фикс И.И. Программирование для нескольких GPU на примере задачи распространения света в многослойной среде // Всероссийская научно-практическая конференция "Применение гибридных высокопроизводительных вычислительных систем для решения научных и инженерных задач". Пленарные доклады, 9-14, 2011.
7. Dehghani H., Eames M.E., Yalavarthy P.K., Davis S.C., Srinivasan S., Carpenter C.M., Pogue B.W. and Paulsen K.D. Near infrared optical tomography using NIRFAST: Algorithm for numerical model and image reconstruction. Commun. Numer. Methods Eng. 25(6), 711-732 (2009).
8. Boas D.A., Culver J.P., Stott J.J. and Dunn A.K. Three dimensional Monte Carlo code for photon migration through complex heterogeneous media including the adult human head. Opt. Express 10(3), 159-170 (2002).
9. Fang Q.Q., Boas D.A. Monte Carlo Simulation of Photon Migration in 3D Turbid Media Accelerated by Graphics Processing Units. Opt. Express 17(22), 20178-20190 (2009).
10. Кириллин М.Ю., Приезжев А.В., Мюллюля Р. Роль многократного рассеяния при формировании ОКТ изображений кожи // Квантовая Электроника, 38(6), 570-575 (2008).