

Влияние граничных условий на восстановление спектров поглощения и рассеяния в оптической диффузионной спектроскопии кожи: исследование *in silico*

© Е.А. Сергеева, Д.А. Куракина, А.А. Гетманская, М.Ю. Кириллин

Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова
Российской академии наук (ИПФ РАН),
Нижний Новгород, Россия
e-mail: sergeeva_ea@ipfran.ru

Поступила в редакцию 02.07.2025 г.

В окончательной редакции 20.07.2025 г.

Принята к публикации 25.11.2025 г.

Проанализирована возможность восстановления спектральных характеристик кожи в диапазоне длин волн 450–1100 nm на основе данных оптической диффузионной спектроскопии с помощью аналитической модели, учитывающей полубесконечную геометрию среды, ограниченную апертуру приемника и наличие скачка показателя преломления на границе среды. В используемом подходе на первом этапе восстанавливаются спектральные зависимости диффузионных параметров — эффективного коэффициента ослабления и транспортной длины, из которых восстанавливаются спектры коэффициента поглощения и транспортного коэффициента рассеяния. Проведено сравнение точности восстановления спектральных характеристик однородной дермы для случаев контактного зонда (показатель преломления внешней среды $n_{\text{out}} = 1.5$) и бесконтактного зондирования ($n_{\text{out}} = 1$) для различных уровней кровенаполненности и наборов расстояний источник–детектор (1.8, 2.8, 3.8 и 4.8 mm). Показано, что наиболее высокая точность восстановления (отклонение не более 10%) спектров и поглощения, и рассеяния обеспечивается для ближней тройки детекторов и контактного зондирования. Для бесконтактной регистрации с помощью тех же детекторов погрешность в восстановлении транспортной длины в ближней ИК области приводит к завышению оценки коэффициента поглощения в этой области на величину до 50%. Также проанализирован эффект влияния приповерхностного слоя (эпидермиса) на восстановление спектральных характеристик подлежащего слоя (дермы). Присутствие эпидермиса практически не влияет на точность восстановления параметров дермы при использовании контактного зондирования, тогда как бесконтактное зондирование ведет к систематическому занижению коэффициента поглощения и систематическому завышению коэффициента рассеяния.

Ключевые слова: оптическая диффузионная спектроскопия, уравнение переноса излучения, диффузионное приближение, Монте-Карло моделирование.

DOI: 10.61011/OS.2025.12.62499.44-25

1. Введение

Оптическая диффузная спектроскопия (ОДС) широко применяется для неинвазивного определения концентрации основных хромофоров биотканей, в том числе кожи, для которой интерес представляет содержание окси- и дезоксигемоглобина, а также меланина. Метод ОДС основан на регистрации спектров обратного диффузного рассеяния в диапазоне длин волн 450–1100 nm при использовании набора источников и детекторов, расположенных на поверхности или над поверхностью биоткани, с последующим использованием алгоритмов решения обратной задачи. Принципы ОДС активно используются в современных носимых медицинских и коммерческих устройствах, реализующих фотоплетизмографию на нескольких длинах волн, для измерения частоты сердечных сокращений, насыщения крови кислородом и других физиологических параметров. Современные исследовательские системы ОДС позволяют получать пространственно-разрешенную информацию за счет регистрации сигналов линейкой или матрицей

контактных волоконных детекторов, сопряженных со спектрометром (классическая оптическая диффузионная спектроскопия [1]) или с помощью бесконтактных гиперспектральных камер (оптический диффузионный имиджинг [2]). Обработка данных с целью восстановления характеристик среды требует устранения влияния инструментальных параметров системы регистрации, что осуществляется нормировкой сигналов либо с использованием калибровочных объектов, либо путем радиометрических измерений, когда сигнал для определенной пары „источник–детектор“ выбирается в качестве опорного. Компенсация инструментальных характеристик системы наиболее успешно реализуется с помощью метода „самокалиброванных измерений“ (self-calibration measurements), требующего симметричной схемы расположения источников и детекторов [3]. Отдельным преимуществом такой схемы измерений является сдвиг области чувствительности от границы среды вглубь, что снижает вклад поверхностных структур в спектры сигналов.

Применение ОДС для количественной оценки содержания хромофоров и его динамического изменения подразумевает использование аналитических моделей, позволяющих восстанавливать параметры биотканей из измеренных оптических сигналов. В задачах биофотоники биоткани характеризуются спектрами поглощения и рассеяния. Для расчета прошедших через биоткань оптических сигналов обычно используются разнообразные модели распространения света в случайно-неоднородных средах [4], однако в некоторых методах могут применяться эмпирически полученные калибровочные кривые [5]. В режиме пропускания, когда источник и детектор расположены на противоположных границах слоя биоткани, как правило, применяется модифицированный закон Ламберта–Бугера–Бера [6], который, однако, мало пригоден для измерений в режиме диффузного отражения в широком спектральном диапазоне. Для конфигурации ОДС широко используется решение уравнения переноса излучения в диффузионном приближении для бесконечной среды благодаря его простоте [7]. Для повышения точности данного подхода были предложены дальнейшие модификации этой модели, учитывающие граничные условия, такие как геометрия полубесконечной среды [8], скачок показателя преломления на границе среды [9] и ограниченная числовая апертура детектора [10]. Учет малой числовой апертуры приводит к различным результатам в моделях [9] и [10] при расчете сигналов ОДС в волоконно-оптических системах диагностики кожи, в которых расстояния между источником и детектором не превышают 5 mm [11].

Указанные аналитические модели рассматривают кожу как среду с однородным распределением оптических свойств, в то время как морфологически кожа состоит из двух слоев — эпидермиса и дермы — с существенно различными оптическими характеристиками [12,13]. Толщина верхнего слоя — эпидермиса, в который часто включают также роговой слой — составляет на разных участках кожи от 50 до 500 μm [14]. Как правило, интерес для исследования представляют участки так называемой тонкой кожи, где толщина слабопоглощающего рогового слоя не превышает 20 μm , а эпидермис имеет толщину в пределах 150 μm [15,16]. Эпидермис содержит меланин, тогда как кровеносные сосуды расположены в более глубоком слое — дерме, что указывает на неоднородное распределение хромофоров в коже. Рассеивающие свойства этих слоев также заметно различаются. В таких условиях следует ожидать, что восстанавливаемые характеристики биоткани будут представлять собой сложную комбинацию характеристик отдельных слоев, что затруднит количественную оценку содержания индивидуальных хромофоров. Тем не менее моделирование наиболее вероятных траекторий фотонов для расстояний между источником и детектором в несколько миллиметров показывает, что область измерений имеет хорошо известную „бананообразную“ (banana-shaped) форму, центральная часть которой в основном лежит в пределах дермы. В связи с этим

можно предположить, что влияние эпидермиса не столь значительно. Применение метода „самокалиброванных измерений“ также должно приводить к снижению влияния эпидермиса и к тому, что восстанавливаемые параметры кожи будут отражать оптические свойства дермы. Однако в работе [10] продемонстрировано, что, когда поверхность кожи граничит с воздухом, присутствие эпидермиса проявляется в виде занижения коэффициента поглощения и завышения транспортного коэффициента рассеяния дермы. Данный эффект объяснялся значительным вкладом полного внутреннего отражения излучения от границы раздела „биоткань–воздух“ внутрь биоткани в слой эпидермиса. Такая конфигурация характерна для отдельно расположенных контактных волокон источника и детектора, а также для бесконтактной регистрации сигналов гиперспектральной камерой с малым полем зрения. В то же время для контактных мультисканальных зондов, полностью покрывающих область исследования своей торцевой поверхностью, полное внутреннее отражение от границы раздела сред не реализуется, поскольку показатель преломления корпуса зонда близок к 1.5, в то время как у биотканей показатель преломления составляет около 1.4 [17]. По сведениям авторов, влияние неоднородной структуры кожи на восстанавливаемые спектры оптических характеристик из сигналов ОДС для контактного зонда не изучалось.

Численный метод Монте-Карло моделирования распространения излучения в рассеивающей и поглощающей среде является золотым стандартом при исследовании формирования сигналов ОДС для сложной геометрии среды и приближенной к реальной конфигурации системы регистрации [5,18–20]. В настоящей работе с помощью моделирования методом Монте-Карло выполнен анализ влияния слоя эпидермиса и граничных условий на спектры сигналов, регистрируемых волоконной системой ОДС с расстояниями между источником и детектором в пределах 5 mm и малой числовой апертурой детектора. Рассмотрены варианты регистрации сигнала ОДС контактным и бесконтактным способами. С помощью разработанной авторами аналитической модели сигналов ОДС, применимой для указанных конфигураций, проведено раздельное восстановление спектров поглощения и транспортного рассеяния кожи для однослойной среды, имитирующей дерму, и двухслойной среды, имитирующей реалистичную структуру кожи. Изучено влияние эпидермиса и граничных условий на восстановленные оптические характеристики кожи.

2. Материалы и методы

В работе рассматриваются два варианта модели кожи: 1) однородная полубесконечная среда, оптические свойства которой соответствуют дерме, 2) двухслойная плоскостроистая среда, у которой оптические свойства верхнего слоя соответствуют эпидермису, а нижнего — дерме. Толщина верхнего слоя составляет 100 μm , что

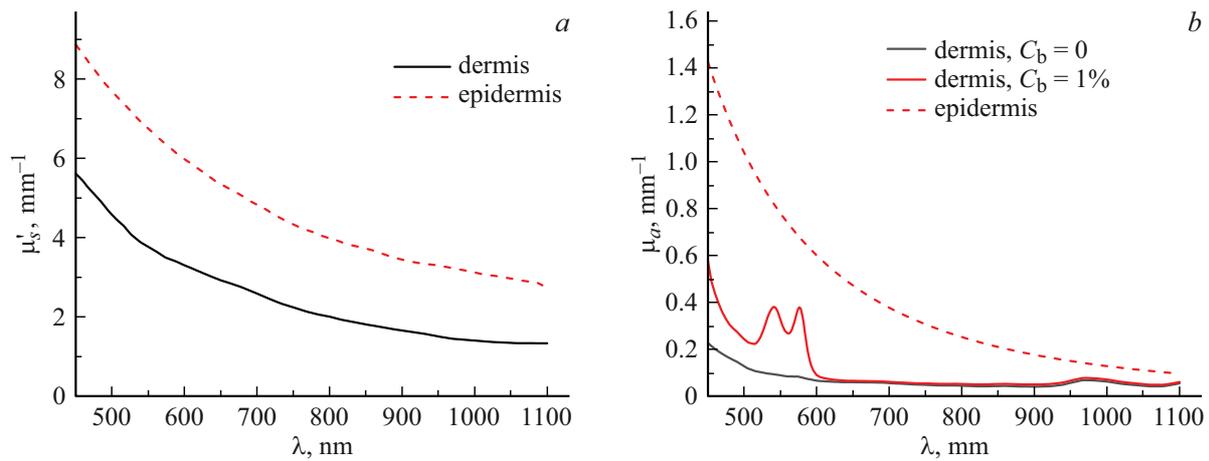


Рис. 1. Спектры транспортного коэффициента рассеяния (а) и коэффициента поглощения (б) эпидермиса и дермы для различных уровней кровенаполнения C_b .

соответствует толщине эпидермиса тонкой кожи человека [16]. Исследование выполнено для двух уровней содержания крови в дерме: обескровленная ткань, для которой объемное содержание крови в ткани $C_b = 0$, и кровенаполненная дерма с $C_b = 1\%$ [21]. Уровень насыщения крови кислородом выбран равным $StO_2 = 95\%$. Спектры транспортных коэффициентов рассеяния $\mu'_s(\lambda)$ и коэффициентов поглощения $\mu_a(\lambda)$ для эпидермиса и рассмотренных вариантов дермы, адаптированные из данных литературы [12,13], в пределах характерного для ОДС интервала длин волн λ (450–1100 nm) представлены на рис. 1, а, б. Показатель преломления обоих слоев биоткани выбран одинаковым и равным $n_t = 1.4$. Выбор в пользу двухслойной модели, а не более сложной многослойной модели, использованной ранее для реконструкции параметров кожи при бесконтактном гиперспектральном зондировании [22], связан, во-первых, с тем, что данное исследование направлено на восстановление именно оптических характеристик ткани на каждой длине волны, а не клинически значимых параметров биоткани из полных спектральных данных, а во-вторых, с тем, что концепция двух сосудистых сплетений, используемая в многослойной модели, не всегда соответствует данным о распределении концентрации гемоглобина в объеме биоткани [23].

Моделирование сигналов ОДС проводилось методом Монте-Карло с помощью ранее разработанного алгоритма, использовавшегося в работах [10,11,20]. Программная реализация алгоритма выполнена на языке C++ с оптимизацией для многоядерных процессоров, обеспечивающей параллелизацию вычислений. В нашем исследовании имитируется формирование сигналов ОДС мультисканальной волоконно-оптической системой, аналогичной разработанной в ИПФ РАН [24]. Схема зондирования, реализованная в моделируемой ОДС системе, представлена на рис. 2. Излучение осуществляется точечным однонаправленным пучком перпендикулярно

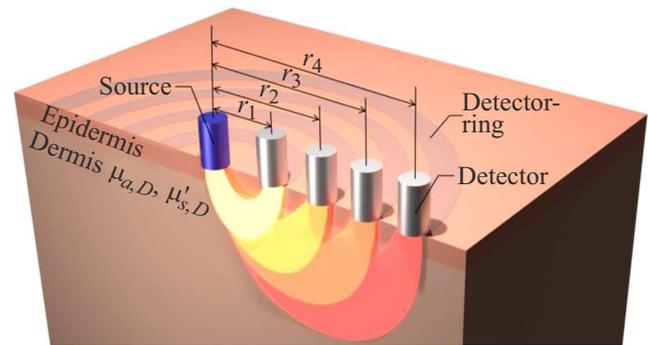


Рис. 2. Схема зондирования в системе ОДС ($r_{1,2,3,4} = 1.8, 2.8, 3.8$ и 4.8 mm).

к поверхности среды. Сигнал обратного диффузного рассеяния регистрируется с помощью линейки волоконных детекторов, каждый из которых характеризуется диаметром торца $d = 100 \mu\text{m}$ и числовой апертурой $NA = 0.3$. Центры детекторов расположены вдоль единой прямой линии на расстояниях $r_i = 1.8, 2.8, 3.8$ и 4.8 mm от центра излучающего пучка ($i = 1 \dots 4$). Для снижения шума моделирования, оказывающего заметное влияние при малой числовой апертуре детектора, фотоны регистрировались в пределах колец со средними радиусами, соответствующими r_i , и толщинами, равными d (рис. 2) с последующей нормировкой на площадь кольца $S_i = 2\pi r_i d$ и число запускаемых фотонов N . Моделирование осуществлялось в диапазоне длин волн 450–1100 nm с шагом 5 nm, а в интервале длин волн 500–600 nm, где наиболее сильно поглощение крови, моделирование осуществлялось с шагом 1 nm. Число фотонов, используемых при моделировании, составляло $N = 5 \cdot 10^9$.

В предыдущей работе нами было показано, что применение радиометрического метода в ОДС позволяет исключить влияние инструментальных факторов, в том

числе и при реализации метода самокалиброванных измерений [24]. Поэтому в настоящей работе мы анализируем спектры отношений сигналов на различных расстояниях источник–детектор, а также оцениваем точность восстановления оптических свойств среды на основании таких измерений.

Одной из задач данного исследования является изучение влияния граничных условий на восстановление оптических свойств. Для этого в работе рассмотрены два варианта внешней среды, характеризующейся показателем преломления n_{out} :

— показатель преломления внешней среды равен $n_{out} = 1.5$, что имитирует исследование кожи с помощью контактного зонда с имплементированными волоконными источниками и детекторами;

— показатель преломления внешней среды равен $n_{out} = 1$, что имитирует бесконтактное зондирование через воздушную среду, например, с помощью гиперспектральной камеры.

Результатом моделирования являются спектры нормированной интенсивности сигналов обратного рассеяния $R_{MC}(r_i, \lambda)$ для всех рассмотренных моделей кожи, расстояний r_i и двух вариантов граничных условий.

Для восстановления оптических свойств в работе использовалась аналитическая модель сигнала ОДС, основанная на решении УПИ для полубесконечной среды в диффузионном приближении с учетом граничных условий и малого телесного угла детектирования, представленная ранее в работе [10]. В основе этой модели лежит следующее выражение для нормированной интенсивности сигнала R_{RM} обратного диффузного рассеяния, регистрируемого детектором с малым углом приема Ω_{det} от однородной полубесконечной среды, в зависимости от поперечного расстояния источник–детектор r :

$$R_{RM}(r) = \frac{3T_{F0}}{4\pi l_t} \frac{\Omega_{det}}{4\pi} \left[\frac{\exp(-\mu_{ef}r)}{r} - \frac{\exp(-\mu_{ef}\sqrt{r^2 + 4l_t^2(1 + 2m/3)^2})}{\sqrt{r^2 + 4l_t^2(1 + 2m/3)^2}} \right]. \quad (1)$$

Здесь параметрами среды являются производные характеристики — эффективный диффузный коэффициент ослабления $\mu_{ef} = \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)}$ и транспортная длина $l_t = (\mu_a + \mu'_s)^{-1}$. Величина $T_{F0} = (4n_t n_{out}) / (n_t + n_{out})^2$ представляет собой френелевский коэффициент пропускания при нормальном падении. Параметр m описывает влияние границы раздела сред на величину диффузного поля в биоткани и определяется относительным показателем преломления n_t/n_{out} [9]. Для случая контактной регистрации сигналов ОДС $n_{out} = 1.5$ и $m = 1.03$, а для случая бесконтактной регистрации через воздух $n_{out} = 1$ и $m = 2.82$.

Для восстановления спектров параметров $\mu_{ef}(\lambda)$ и $l_t(\lambda)$ с помощью рациометрического подхода формируются два отношения спектров на длине волны λ :

$$\text{Ratio}_{i,j} = R_{RM}(r_i)/R_{RM}(r_j) \quad (2a)$$

и

$$\text{Ratio}_{i,k} = R_{RM}(r_i)/R_{RM}(r_k), \quad (2b)$$

$i \neq j \neq k$. Сформированные отношения зависят только от характеристик биоткани на заданной длине волны и расстояния источник–детектор. Аналогичные отношения необходимо сформировать и для сигналов $R_{MC}(r_j, \lambda)$, полученных с помощью моделирования методом Монте-Карло. Восстановление $\mu_{ef}(\lambda)$ и $l_t(\lambda)$ проводилось в среде Mathcad 14.0 путем согласованного поиска минимумов невязок относительно параметров μ_{ef}, l_t на каждой длине волны с помощью алгоритма Левенберга–Марквардта:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{R_{RM}(\mu_{ef}, l_t, r_i)}{R_{RM}(\mu_{ef}, l_t, r_j)} - \frac{R_{MC}(r_i, \lambda)}{R_{MC}(r_j, \lambda)} \right| \xrightarrow{\mu_{ef}, l_t} \min, \\ \left| \frac{R_{RM}(\mu_{ef}, l_t, r_i)}{R_{RM}(\mu_{ef}, l_t, r_k)} - \frac{R_{MC}(r_i, \lambda)}{R_{MC}(r_k, \lambda)} \right| \xrightarrow{\mu_{ef}, l_t} \min. \end{array} \right. \quad (3)$$

Первичные оптические свойства среды вычисляются из восстановленных параметров по следующим формулам:

$$\mu_a = \mu_{ef}^2 l_t / 3, \quad (4a)$$

$$\mu'_s = \frac{1}{l_t} - \mu_a. \quad (4b)$$

Обратная задача (3) решалась для двух вариантов наборов расстояний (r_i, r_j, r_k) : ближняя тройка $(r_i, r_j, r_k) = (r_1, r_2, r_3)$ и дальняя тройка $(r_i, r_j, r_k) = (r_2, r_3, r_4)$. Ранее в работе [20] было показано, что расстояние между источником и детектором определяет глубину зондирования, и от выбора расстояний может зависеть результат реконструкции оптических свойств. Поэтому в задаче выбраны наборы расстояний, обеспечивающих наиболее близкие глубины зондирования, что позволяет минимизировать эффект неоднородности распределения оптических свойств внутри среды при реальных измерениях. Вместе с тем применяемая при реконструкции модель распространения света в биоткани должна была справедлива для выбранных расстояний. Данному вопросу были посвящены предыдущие работы авторов [10,11], в которых было показано, что диффузионная модель (1) хорошо согласуется с результатами моделирования методом Монте-Карло при $r > 2$ мм для оптических характеристик кожи в широком диапазоне длин волн. Указанному требованию лучше удовлетворяет дальняя тройка расстояний. С другой стороны, на максимальном расстоянии должно обеспечиваться приемлемое для точной реконструкции соотношение сигнал–шум, что с большей уверенностью выполняется для ближней тройки расстояний. Сравнение результатов восстановления для разных наборов расстояний источник–детектор позволит продемонстрировать возможности и ограничения метода в указанном интервале значений r .

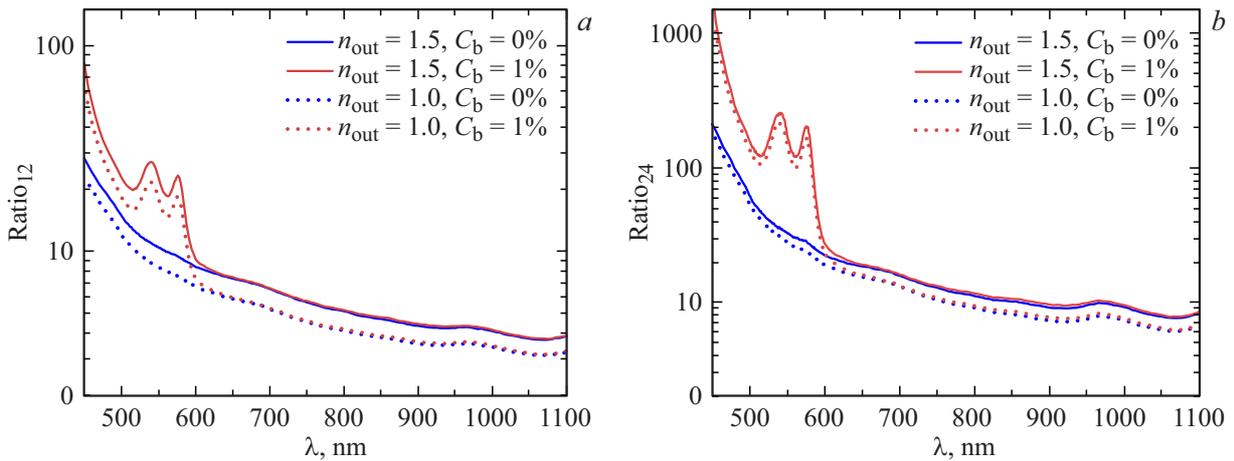


Рис. 3. Отношения спектров сигналов ОДС Ratio₁₂ (a) и Ratio₂₄ (b) для однородной дермы с разной степенью кровенаполнения и внешней среды с показателями преломления $n_{out} = 1.5$ и $n_{out} = 1$.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Характерные спектры сигналов ОДС

В рамках исследования было проведено моделирование сигналов ОДС методом Монте-Карло как для однородной среды, имитирующей дерму, так и для двухслойной среды, имитирующей слоистую структуру эпидермис + дерма. В моделировании учитывается разница в оптических свойствах эпидермиса и дермы. На рис. 3 представлены отношения спектров сигналов ОДС $Ratio_{12} = R_{MC}(r_1, \lambda) / R_{MC}(r_2, \lambda)$ и $Ratio_{24} = R_{MC}(r_2, \lambda) / R_{MC}(r_4, \lambda)$ для детекторов с $r_1 = 1.8 \text{ mm}$, $r_2 = 2.8 \text{ mm}$ и $r_4 = 4.8 \text{ mm}$ для случаев использования контактного зонда ($n_{out} = 1.5$) и бесконтактного зондирования ($n_{out} = 1$) для обескровленной дермы и дермы с кровенаполнением 1%. Можно видеть, что во всех случаях отношение сигналов ниже для случая бесконтактного зондирования, что обусловлено влиянием полного внутреннего отражения. Как было показано ранее в статье [25], наличие полного внутреннего отражения ведет к концентрации рассеянного света под поверхностью, поскольку достаточно велика доля диффузно рассеянных фотонов, которые не могут покинуть среду. Это ведет к уменьшению количества фотонов, выходящих из среды. Кроме того, отраженный от поверхности диффузный поток является дополнительным вторичным источником, что ведет к увеличению сигнала на больших расстояниях и снижению разницы между сигналами, измеренными на двух различных расстояниях. Таким образом, конфигурация с бесконтактной регистрацией сигналов ОДС ведет к более низкому уровню сигнала и потенциально к большей погрешности при определении оптических свойств среды.

Эффект усиления приповерхностного поля можно показать с помощью аналитического решения для одномерного распределения облученности $\Phi_{dif}(z)$ по глубине z

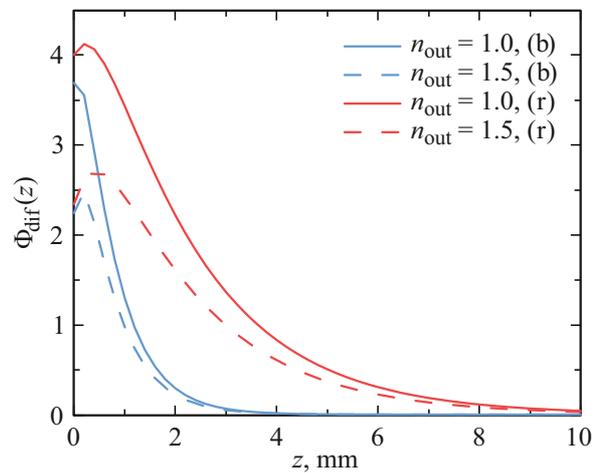


Рис. 4. Одномерное распределение облученности по глубине при засветке широким пучком, полученное в диффузионном приближении с учетом квазинепрерывной компоненты и скачка показателя преломления, для оптических свойств, типичных для синего (b^c , $\mu_{ef} = 1.5 \text{ mm}^{-1}$, $l_t = 0.2 \text{ mm}$) и красного (r^c , $\mu_{ef} = 0.5 \text{ mm}^{-1}$, $l_t = 0.5 \text{ mm}$) диапазонов длин волн: сплошная кривая для $n_{out} = 1$, $m = 2.82$, штриховая кривая для $n_{out} = 1.5$, $m = 1.03$.

в диффузионном приближении при засветке широким пучком с учетом квазинепрерывной компоненты [26] и скачка показателя преломления:

$$\Phi_{dif}(z) = \frac{3 - (\mu_{ef} l_t)^2}{1 - (\mu_{ef} l_t)^2} [1 + 2m/3] \frac{\exp(-\mu_{ef} z)}{1 + 2m\mu_{ef} l_t/3} - \frac{2}{1 - (\mu_{ef} l_t)^2} \exp(-z/l_t). \quad (5)$$

Рассчитанные с помощью этой формулы зависимости облученности от глубины для пар величин μ_{ef} , l_t , типичных для дермы в синем и красном диапазонах, показаны на рис. 4 для двух значений показателя преломления

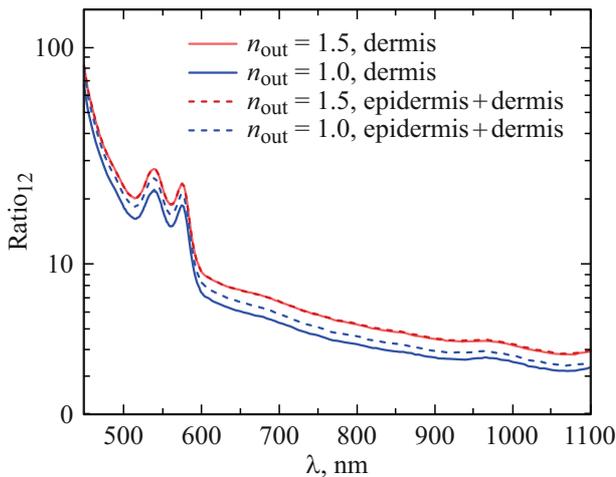


Рис. 5. Сравнение отношения $\text{Ratio}_{12} = R_{\text{MC}}(r_1, \lambda)/R_{\text{MC}}(r_2, \lambda)$ сигналов на двух детекторах для однослойной среды, имитирующей дерму, и двухслойной среды (эпидермис+дерма) для различных граничных условий: $n_{\text{out}} = 1$ и 1.5 .

внешней среды. Значение облученности у поверхности для случая $n_{\text{out}} = 1$ (что соответствует $m = 2.82$) превышает таковое для случая $n_{\text{out}} = 1.5$ (что соответствует $m = 1.03$) в 1.64 раза для красного диапазона и в 1.71 раза для синего диапазона длин волн, что позволяет судить о роли полного внутреннего отражения в формировании диффузного поля в биоткани. Соотношение между коэффициентом диффузного отражения R_{dif} и величиной облученности на границе в одномерном случае, получаемое из известного граничного условия [27],

$$R_{\text{dif}} = \Phi_{\text{dif}}(z = 0)/2m \quad (6)$$

приводит к непосредственной зависимости коэффициента диффузного отражения от параметра m , которая демонстрирует уменьшение отраженного сигнала при наличии полного внутреннего отражения:

$$R_{\text{dif}} = \frac{1 - (\mu_{\text{ef}} l_t)^2/3}{1 + \mu_{\text{ef}} l_t} \left[\frac{1}{1 + 2m\mu_{\text{ef}} l_t/3} \right]. \quad (7)$$

На рис. 5 продемонстрировано влияние эпидермиса на отношение $\text{Ratio}_{12} = R_{\text{MC}}(r_1, \lambda)/R_{\text{MC}}(r_2, \lambda)$ спектров сигналов ОДС для различных граничных условий. Качественно зависимости напоминают спектры отношений сигналов для однородной дермы, представленные на рис. 3, что говорит об определяющей роли дермы в формировании сигналов обратного рассеяния и о возможности восстанавливать ее оптические свойства. Ранее в работе [10] для случая $n_{\text{out}} = 1$ было показано, что сами спектры сигналов ОДС заметно отличаются для однородной дермы и двухслойной среды с поверхностным поглощающим слоем (эпидермис + дерма), однако отношение сигналов ОДС гораздо менее чувствительно к присутствию эпидермиса. Данный эффект объяснялся тем, что тонкий поглощающий поверхностный слой может рассматриваться как ослабляющий

фильтр, влияние которого может быть представлено в виде понижающего спектрально зависящего мультипликативного фактора (коэффициента пропускания). Как видно из рис. 5, для контактного детектирования ($n_{\text{out}} = 1.5$), когда роль полного внутреннего отражения незначительна, влияние эпидермиса максимально скомпенсировано при построении отношения сигналов, и спектры Ratio_{12} для однослойной и двухслойной моделей практически идентичны. В случае бесконтактного детектирования ($n_{\text{out}} = 1$) наблюдается некоторое различие в значениях отношений Ratio_{12} для однородной и двухслойной моделей кожи. При наличии полного внутреннего отражения взаимодействие приповерхностного диффузного поля с эпидермисом становится сложнее, что может оказывать систематическое воздействие на точность восстановления оптических свойств дермы.

3.2. Возможности восстановления спектров оптических свойств дермы из отношений сигналов ОДС

3.2.1. Однослойная модель кожи

На рис. 6 представлены результаты восстановления диффузионных оптических характеристик дермы $\mu_{\text{ef}}(\lambda)$ и $l_t(\lambda)$ в однослойной модели биоткани с помощью формул (1) и (3) на основе результатов моделирования методом Монте-Карло. На графиках также приведены спектры соответствующих параметров $\mu_{\text{ef},D}$ и $l_{t,D}$ для однородной дермы, заданные при моделировании. Результаты приведены для обескровленной дермы и дермы с объемным содержанием крови 1%, для двух наборов расстояний (r_1, r_2, r_3) и (r_2, r_3, r_4) и различных граничных условий ($n_{\text{out}} = 1.5$ и $n_{\text{out}} = 1$). Из представленных графиков видно, что спектр μ_{ef} восстанавливается с высокой точностью и незначительным уровнем шума для всех рассмотренных вариантов параметров. Некоторое занижение μ_{ef} по сравнению с $\mu_{\text{ef},D}$ в видимой области спектра, наиболее заметное в диапазоне пиков поглощения крови ($\lambda = 500\text{--}600$ nm), по-видимому, связано с ограниченной применимостью диффузионного приближения для сред с высоким поглощением. В то же время восстановленные спектры l_t характеризуются флуктуациями различной интенсивности, что приводит к флуктуациям в спектре коэффициента поглощения, восстанавливаемого по формуле (4а). Для устранения влияния флуктуаций проводится сглаживание спектров $l_t(\lambda)$ с соблюдением монотонности полученных аппроксимаций, которые представлены на графиках. Наименьший уровень флуктуаций наблюдается в восстановленном спектре $l_t(\lambda)$ для контактной регистрации ($n_{\text{out}} = 1.5$) и ближней тройки детекторов (r_1, r_2, r_3) . Для такой комбинации параметров реализуется наиболее высокий уровень регистрируемого сигнала ОДС. Для бесконтактной регистрации той же тройкой детекторов флуктуации сигнала заметны в спектральном диапазоне

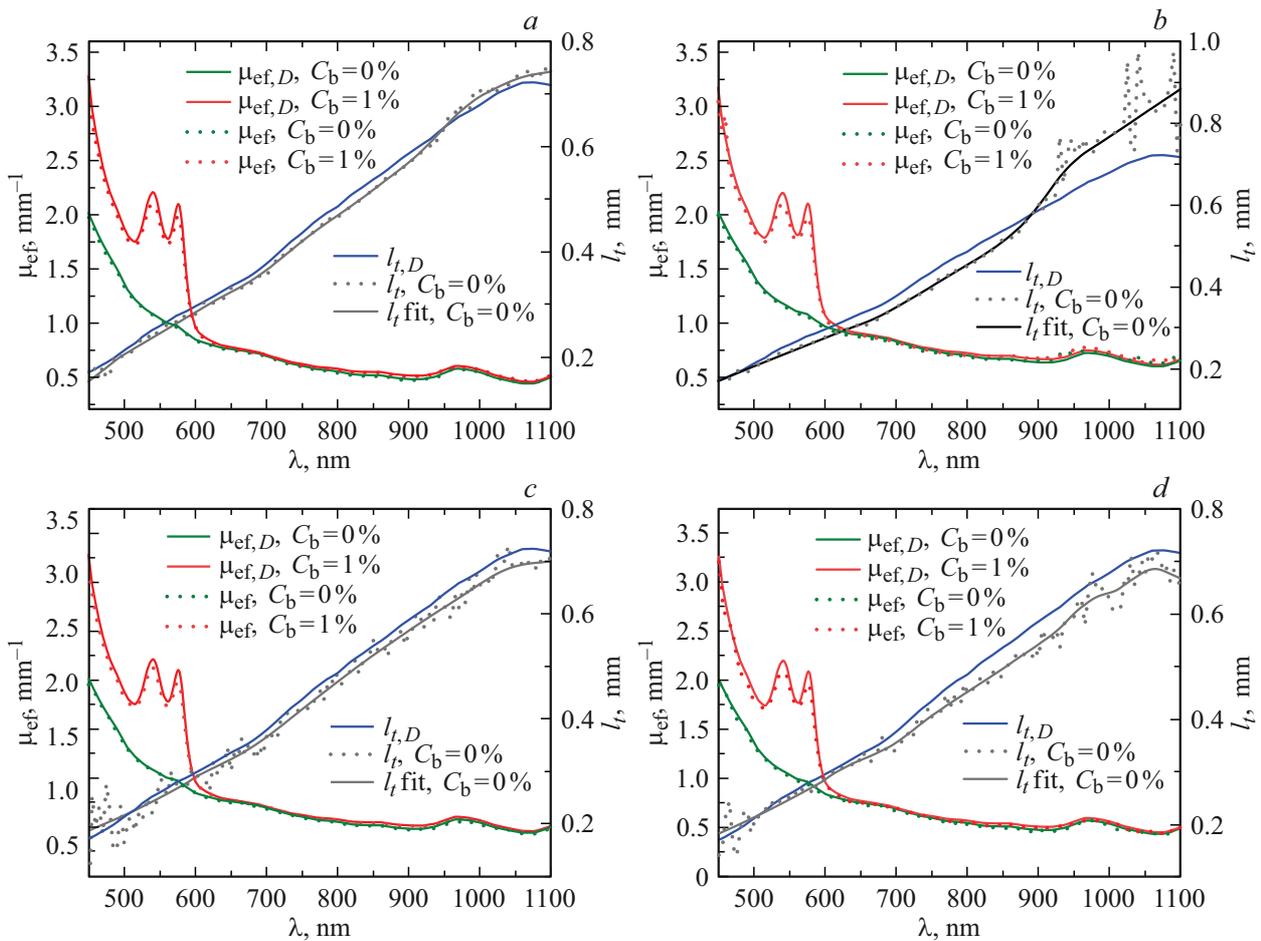


Рис. 6. Спектры диффузионных оптических характеристик μ_{ef} и l_t однородной дермы со значениями кровенаполнения $C_b = 0$ и $C_b = 1\%$, восстановленные из спектров сигналов ОДС, полученных с помощью моделирования методом Монте-Карло для ближней (*a,b*) и дальней (*c,d*) троек детекторов, а также контактной (*a,c*) и бесконтактной (*b,d*) регистрации сигналов. Точки соответствуют восстановленным параметрам, сплошные линии — параметрам однородной дермы ($\mu_{ef,D}$ и $l_{t,D}$), заданным при моделировании, а также сглаженному восстановленному спектру l_t (fit).

900–1100 nm, а сглаженные значения l_t значительно отличаются от заданных $l_{t,D}$. Отчасти данный эффект связан с несовершенством используемой модели аналитической модели сигнала ОДС в области малых значений поглощений и рассеяния, где поле не является полностью диффузным и, в частности, не удовлетворяет налагаемым граничным условиям [11]. Если для восстановления параметров дермы используется дальняя тройка детекторов (r_2, r_3, r_4), то уровень флуктуаций в спектрах $l_t(\lambda)$ возрастает для обоих вариантов граничных условий из-за снижения уровня сигналов, однако значительного отклонения сглаженных значений от заданных не наблюдается. Это говорит о лучшем соответствии применяемой для восстановления аналитической модели условиям регистрации сигналов ОДС. Отметим также, что для всех спектров, регистрируемых на дальних источниках, уровень флуктуаций самих сигналов выражен незначительно. Наиболее сильно эти флуктуации выражены в диапазоне до 500 nm, где уровень сигнала минимален благодаря высокому поглощению кожи. Разностная схе-

ма восстановления, основанная на отношениях сигналов, делает предложенный метод крайне чувствительным к отклонениям сигналов и требует принять усилия по минимизации всех видов шумов.

Результаты восстановления первичных оптических свойств однородной дермы $\mu_a(\lambda)$ и $\mu'_s(\lambda)$, полученные из спектров μ_{ef} и l_t по формулам (4а) и (4б) соответственно, показаны на рис. 7. Для всех рассмотренных конфигураций характерно занижение коэффициента поглощения, сопровождаемое некоторым завышением транспортного коэффициента рассеяния в диапазоне длин волн 450–600 nm. Данный эффект перекрестной ошибки („cross-talk“) возникает из-за погрешности в определении l_t (рис. 6), которая в дальнейшем проявляется в формулах (4). В случаях, когда невозможно восстановить транспортную длину, эффект перекрестной ошибки существенно ограничивает раздельное восстановление спектров поглощения и рассеяния из-за неопределенности их соотношения, так как они входят в спектр $\mu_{ef}(\lambda)$ в виде произведения.

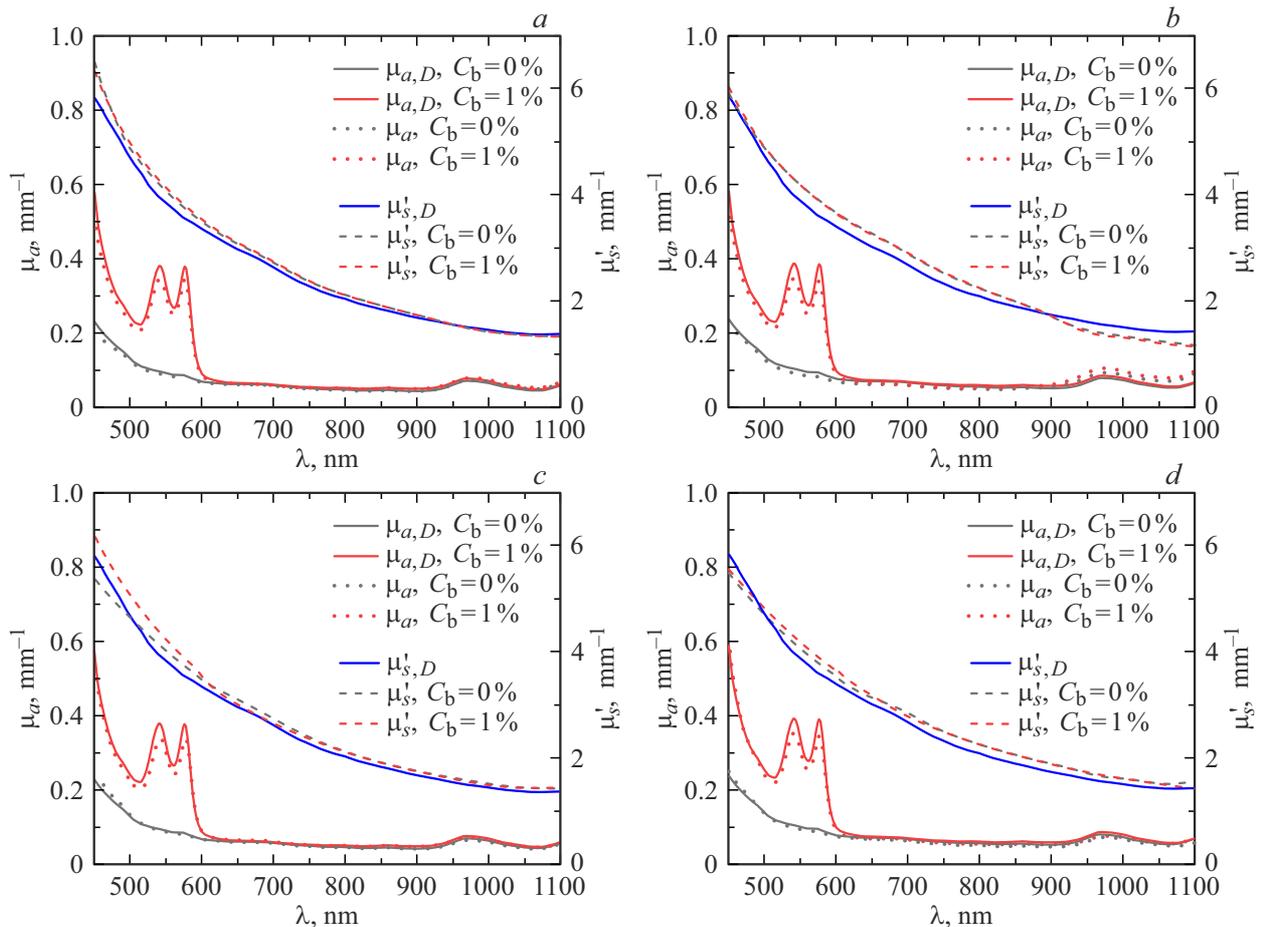


Рис. 7. Спектры коэффициента поглощения μ_a и транспортного коэффициента рассеяния μ'_s однородной дермы со значениями кровенаполнения $C_b = 0$ и $C_b = 1\%$, восстановленные из спектров сигналов ОДС, полученных с помощью моделирования методом Монте-Карло для ближней (a,b) и дальней (c,d) троек детекторов, а также контактной (a,c) и бесконтактной (b,d) регистрации сигналов. Точки соответствуют восстановленным параметрам, сплошные линии — параметрам однородной дермы, заданным при моделировании.

Наиболее высокая точность восстановления спектров и поглощения, и рассеяния обеспечивается для ближней тройки детекторов и контактной регистрации для обоих значений кровенаполнения дермы (рис. 7, a): отклонение от соответствующих заданных значений $\mu_{a,D}$ и $\mu'_{s,D}$ не превышает 10%. Для бесконтактной регистрации с помощью тех же детекторов (рис. 7, b) погрешность в восстановлении l_t в диапазоне 900–1100 nm приводит к завышенной на величину до 50% оценке поглощения в этой области. Для дальней тройки детекторов погрешность восстановления значений рассеяния и поглощения находится в пределах 12% и для контактной, и для бесконтактной регистрации (рис. 7, c и 7, d). Отметим, что, если в условиях реального эксперимента удастся реализовать высокий уровень отношения сигнал/шум, использование дальних детекторов для восстановления оптических характеристик предпочтительно из-за удовлетворения условиям применимости аналитической модели сигналов ОДС.

3.2.2. Двухслойная модель кожи

Случай двухслойной среды является более сложным с точки зрения интерпретации восстановленных по алгоритму (3) оптических свойств, поскольку основной измерительный объем занимает дерма, однако поверхностный тонкий слой эпидермиса является существенно более рассеивающим и поглощающим и может сказываться на форме обрабатываемых сигналов (рис. 5). Ранее было показано [10], что для случая $n_{out} = 1$ наличие эпидермиса приводит к завышенным восстановленным значениям транспортного коэффициента рассеяния и заниженным значениям коэффициента поглощения, тогда как эффективный коэффициент ослабления нечувствителен к присутствию эпидермиса и совпадает с таковым для однородной дермы.

На рис. 8 представлены результаты восстановления диффузионных оптических характеристик дермы $\mu_{ef}(\lambda)$ и $l_t(\lambda)$ в двухслойной модели биоткани, когда полубесконечный слой дермы с заданными параметрами $\mu_{ef,D}$ и $l_{t,D}$

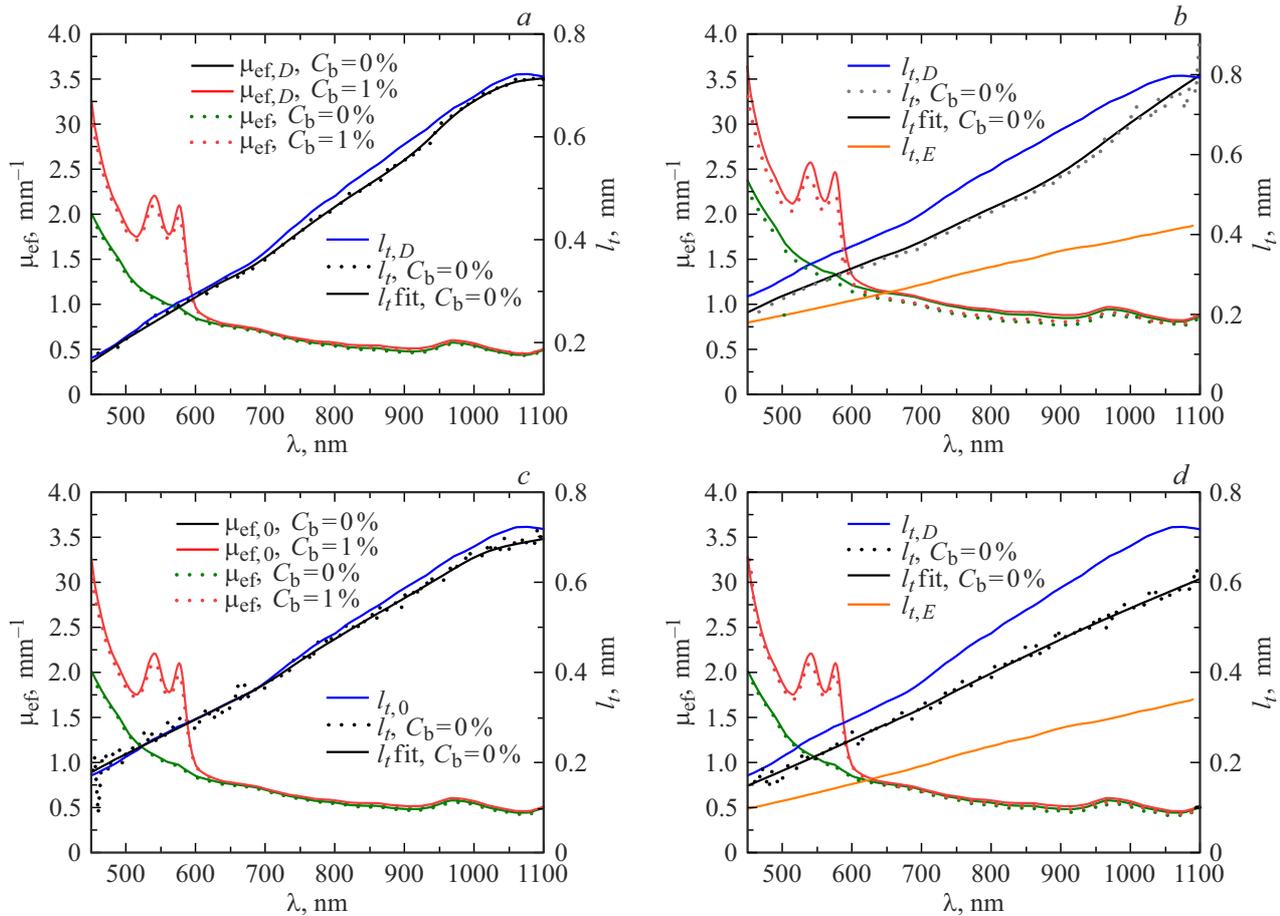


Рис. 8. Спектры диффузионных оптических характеристик μ_{ef} и l_t двухслойной модели кожи, содержащей эпидермис толщиной $100\ \mu\text{m}$ и дерму с значениями кровенаполнения $C_b = 0$ и $C_b = 1\%$, восстановленные из спектров сигналов ОДС, полученных с помощью моделирования методом Монте-Карло для ближней (a,b) и дальней (c,d) троек детекторов, а также контактной (a,c) и бесконтактной (b,d) регистрации сигналов. Точки соответствуют восстановленным параметрам, сплошные линии — параметрам, заданным при моделировании, а также сглаженному восстановленному спектру l_t (fit).

покрыт слоем эпидермиса с параметрами $\mu_{ef,E}$ и $l_{t,E}$ и толщиной $100\ \mu\text{m}$. Отметим, что присутствие эпидермиса практически не сказывается на качестве восстановления спектра μ_{ef} для всех рассмотренных конфигураций, и восстановленные значения μ_{ef} аналогичны таковым для однородной дермы. Восстановленные спектры l_t для контактной регистрации (рис. 8, a и 8, c) также соответствуют спектрам, полученным для однородной дермы (рис. 6, a и 6, c). Однако значения l_t для бесконтактной регистрации (рис. 8, b и 8, d) оказываются заметно меньше заданных и при этом характеризуются небольшим уровнем флуктуаций, т. е. систематически отличаются от истинных значений в меньшую сторону. Расхождение составляет от 5% до 40% и демонстрирует различающееся поведение для ближней (рис. 8, b) и дальней (рис. 8, d) троек детекторов. Данное систематическое отклонение, по-видимому, связано с многократным прохождением отраженных от границы фотонов через слой эпидермиса, спектр $l_{t,E}(\lambda)$ которого также представлен на графиках. В сине-зеленой области спектра восстановленные

значения l_t оказываются близки к значениям $l_{t,E}$, что связано с распространением отраженных фотонов преимущественно в эпидермисе из-за высокого поглощения. Это наиболее выражено для ближней тройки детекторов (рис. 8, b), для которых часть области чувствительности располагается в эпидермисе. Для дальней тройки детекторов занижение восстановленных значений l_t также присутствует (рис. 8, d), но все же они не так близки к значениям $l_{t,E}$, как в случае ближней тройки, поскольку в этой конфигурации область чувствительности сдвинута вглубь. С ростом длины волны восстановленные значения l_t стремятся к значениям $l_{t,D}$. В свою очередь, при контактной регистрации приповерхностный эпидермис не оказывает столь существенного влияния на формирование диффузного поля из-за отсутствия полного внутреннего отражения, и для такой конфигурации уместно уподоблять действие эпидермиса эффекту тонкого спектрального фильтра.

Рисунок 9 демонстрирует спектры первичных оптических свойств $\mu_a(\lambda)$ и $\mu'_s(\lambda)$, восстановленные по спек-

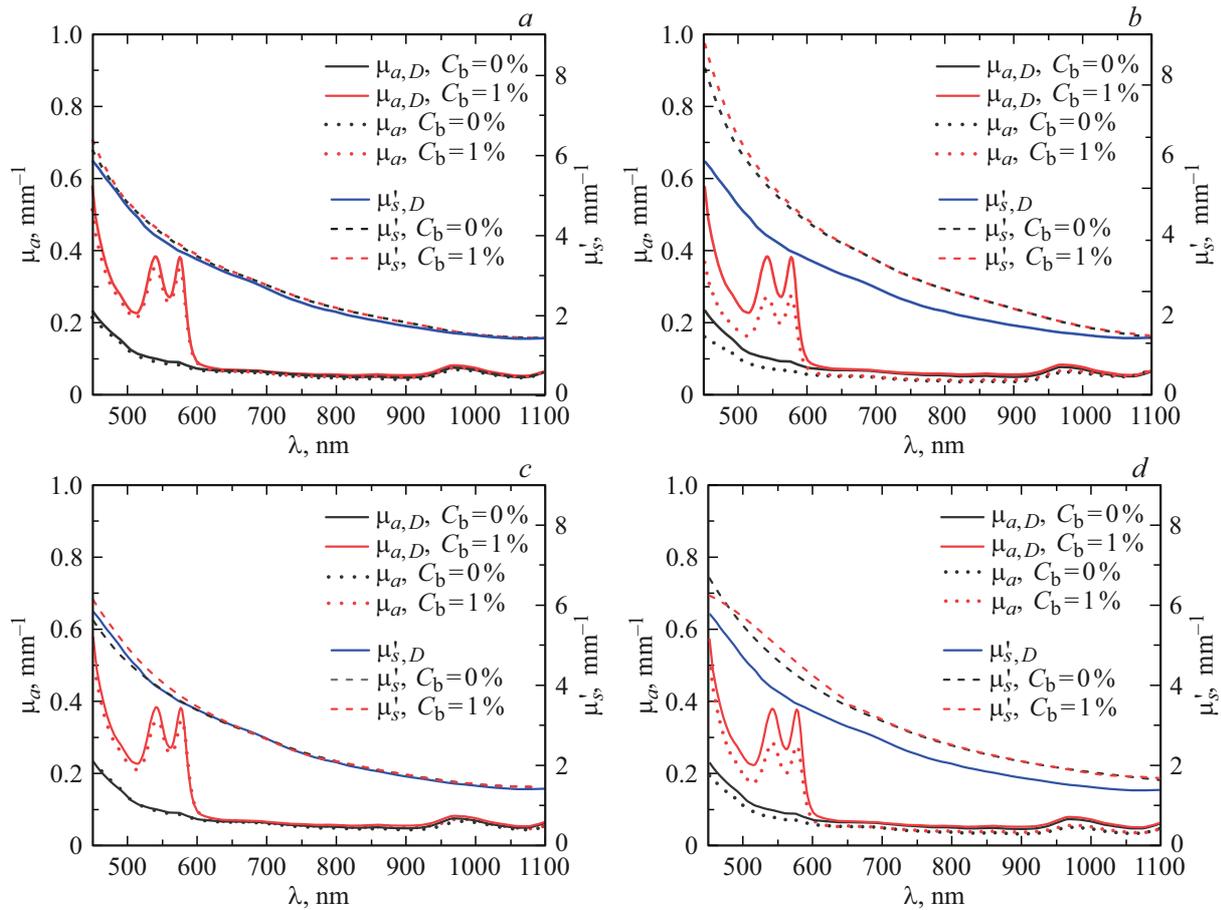


Рис. 9. Спектры коэффициента поглощения μ_a и транспортного коэффициента рассеяния μ'_s двухслойной модели кожи, содержащей эпидермис толщиной $100\ \mu\text{m}$ и дерму с значениями кровенаполнения $C_b = 0$ и $C_b = 1\%$, восстановленные из спектров сигналов ОДС, полученных с помощью моделирования методом Монте-Карло для ближней (*a,b*) и дальней (*c,d*) троек детекторов, а также контактной (*a,c*) и бесконтактной (*b,d*) регистрации сигналов. Точки соответствуют восстановленным параметрам, сплошные линии — параметрам однородной дермы, заданным при моделировании.

грам μ_{ef} и l_t двухслойной среды. Из этих зависимостей можно видеть, что при контактной регистрации сигналов ОДС и достаточном уровне сигнала восстановленные оптические свойства соответствуют таковым для дермы, причем погрешность восстановления не превышает 10–12% как для ближней, так и для дальней тройки детекторов (рис. 9, *a* и 9, *c*). Однако при бесконтактной регистрации наблюдается систематическая погрешность восстановления, составляющая до 30%: восстановленные значения μ_a оказываются меньше, а значения μ'_s больше соответствующих значений $\mu_{a,D}$ и $\mu_{s,D}$ для однородной дермы во всем исследуемом спектральном диапазоне (рис. 9, *b* и 9, *d*). Наблюдаемая систематическая погрешность несколько меньше для дальней тройки детекторов, чем для ближней тройки. Данный эффект связан с продемонстрированным на рис. 8 отклонением восстановленных значений l_t от $l_{t,D}$, которые затем используются для вычисления первичных оптических свойств по формулам (4). Ранее аналогичный эффект переоценки коэффициента рассеяния и недооценки коэффициента

поглощения был продемонстрирован и объяснен для больших значений расстояний r в работе [10]. Стоит отметить, что он также согласуется с полученными результатами в работе [28], которые не были объяснены.

В завершение следует обратить внимание, что в настоящей работе исследования проводились для фиксированных характеристик слоя эпидермиса. Однако ранее в работе [10] был продемонстрирован эффект увеличения отклонения восстановленных спектров рассеяния и поглощения от исходных спектров дермы при увеличении толщины эпидермиса (т.е. при увеличении общего содержания меланина в приповерхностном слое) при бесконтактной регистрации. Аналогичный эффект можно ожидать и при увеличении концентрации меланина в слое эпидермиса без увеличения его толщины.

4. Заключение

В работе на основе результатов моделирования методом Монте-Карло сигналов оптической диффузионной

спектроскопии продемонстрирован подход к отдельно-му восстановлению спектров поглощения и рассеяния кожи человека при контактной и бесконтактной регистрации сигналов. Рассмотрены однородная модель кожи, представляющая собой полубесконечный слой дермы, и двухслойная модель, дополнительно содержащая поверхностный слой эпидермиса толщиной $100\ \mu\text{m}$. Для восстановления оптических параметров использована оригинальная аналитическая модель сигналов, регистрируемых пространственно-разрешенной системой ОДС с узкой угловой диаграммой детектора. Спектры поглощения и рассеяния восстанавливаются из двух отношений сигналов ОДС, полученных путем численного моделирования Монте-Карло на трех расстояниях источник–детектор. Показано, что при контактной регистрации сигналов ОДС, когда торец регистрирующего зонда вплотную прилегает к поверхности кожи, восстановление оптических параметров дермы реализуется с погрешностью в пределах 10% как для однослойной модели кожи, так и в присутствии слоя эпидермиса. На погрешность в основном влияет шум сигнала, который ниже при меньших расстояниях источник–детектор. В случае бесконтактной регистрации, когда поверхность кожи контактирует с воздухом, погрешность восстановления возрастает. Для однородной модели кожи существенная погрешность наблюдается в основном на малых расстояниях источник–детектор в ближней ИК области спектра. В присутствии эпидермиса коэффициент поглощения восстанавливается с систематическим занижением, а коэффициент рассеяния — с систематическим завышением по отношению к значениям параметров для дермы, погрешность составляет около 30%. Данное расхождение связано с влиянием полного внутреннего отражения на формирование диффузных полей в приповерхностном слое, занимаемом эпидермисом. Следует отметить, что систематическое занижение восстанавливаемого коэффициента поглощения из бесконтактных измерений может привести к занижению оцениваемого содержания различных хромофоров при их реконструкции из спектра поглощения и к погрешности в оценке клинически значимых параметров кожи (например, содержания гемоглобина). Для повышения точности восстановления спектров поглощения и рассеяния подповерхностных слоев кожи в ОДС и последующего определения клинически значимых параметров следует проводить измерения спектров контактным способом с добавлением иммерсионных агентов для максимального снижения влияния скачка показателя преломления на границе кожи.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-15-00175, <https://rscf.ru/project/24-15-00175/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.J. Moy, J.W. Tunnell. In: *Imaging in Dermatology*. Ed. by M.R. Hamblin, P. Avci, G.K. Gupta (Academic Press, Boston, 2016), p. 203–215.
- [2] S.F. Bish, M. Sharma, Y. Wang, N.J. Triesault, J.S. Reichenberg, J.X. Zhang, J.W. Tunnell. *Biomed. Opt. Express*, **5** (2), 573–586 (2014). DOI: 10.1364/BOE.5.000573
- [3] G. Blaney, R. Donaldson, S. Mushtak, H. Nguyen, L. Vignale, C. Fernandez, T. Pham, A. Sassaroli, S. Fantini. *Appl. Sci.*, **11** (4), 1757 (2021). DOI: 10.3390/app11041757
- [4] R.H. Wilson, M.A. Mycek. *Technol. Cancer Res. Treat.*, **10** (2), 121–134 (2011). DOI: 10.7785/tcrt.2012.500187
- [5] R. Hennessy, S.L. Lim, M.K. Markey, J.W. Tunnell. *J. Biomed. Opt.*, **18** (3), 037003 (2013). DOI: 10.1117/1.JBO.18.3.037003
- [6] I. Oshina, J. Spigulis. *J. Biomed. Opt.*, **26** (10), 100901 (2021). DOI: 10.1117/1.JBO.26.10.100901.
- [7] M.S. Kleshnin, A.G. Orlova, M.Yu. Kirillin, G.Yu. Golubyatnikov, I.V. Turchin. *Quantum Electronics*, **47** (4), 355 (2017).
- [8] B.C. Wilson. *Proc. SPIE*, **10306**, 103060H (1990). DOI: 10.1117/12.2283679
- [9] T.J. Farrell, M.S. Patterson, B. Wilson. *Med. Phys.*, **19** (4), 879–888 (1992). DOI: 10.1118/1.596777
- [10] E. Sergeeva, D. Kurakina, I. Turchin, M. Kirillin. *J. Innovative Optical Health Sciences*, **17** (5), 2342002 (2024). DOI: 10.1142/S1793545823420026
- [11] V. Perekatova, E. Sergeeva, M. Kirillin, A. Khilov, D. Kurakina, I. Turchin. *Optics Commun.*, **579**, 131440 (2025). DOI: 10.1016/j.optcom.2024.131440
- [12] Y. Shimojo, T. Nishimura, H. Hazama, T. Ozawa, K. Awazu. *J. Biomed. Optics*, **25**, 045002 (2020). DOI: 10.1117/1.JBO.25.4.045002
- [13] E. Salomatina, B. Jiang, J. Novak, A.N. Yaroslavsky. *J. Biomed. Optics*, **11**, 064026 (2006). DOI: 10.1117/1.2398928
- [14] J.C.J. Wei, G.A. Edwards, D.J. Martin, H. Huang, M.L. Crichton, M.A.F. Kendall. *Sci. Rep.*, **7**, 15885 (2017). DOI: 10.1038/s41598-017-15830-7
- [15] J. Sandby-Møller, T. Poulsen, H.C. Wulf. *Acta Derm. Venereol.*, **83** (6), 410–413 (2003). DOI: 10.1080/00015550310015419. PMID: 14690333.
- [16] I.L. Shlivko, M.Yu. Kirillin, E.V. Donchenko, D.O. Ellinsky, O.E. Garanina, M.S. Neznakhina, P.D. Agrba, V.A. Kamensky. *Skin Research and Technology*, **21** (4), 419–425 (2015). DOI: 10.1111/srt.12209 (2015).
- [17] В.В. Тучин. *Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике* (Физматлит, М., 2013).
- [18] A. Kienle, M.S. Patterson. *Phys. Med. Biol.*, **41** (10), 2221–2227 (1996). DOI: 10.1088/0031-9155/41/10/026
- [19] T.Y. Tseng, C.Y. Chen, Y.S. Li, K.B. Sung. *Biomed. Opt. Express*, **2** (4), 901–914 (2011). DOI: 10.1364/BOE.2.000914
- [20] D. Kurakina, V. Perekatova, E. Sergeeva, A. Kostyuk, I. Turchin, M. Kirillin. *Laser Physics Lett.*, **19** (3), 035602 (2022). DOI: 10.1088/1612-202X/ac4be8
- [21] S.L. Jacques. *Phys. Med. Biol.*, **58** (11), R37-61 (2013).

- [22] E. Zherebtsov, V. Dremin, A. Popov, A. Doronin, D. Kurakina, M. Kirillin, I. Meglinski, A. Bykov. *Biomedical Optics Express*, **10** (7), 3545–3559 (2019). DOI: 10.1364/BOE.10.003545
- [23] V. Perekatova, M. Kirillin, S. Nemirova, A. Orlova, A. Kurnikov, A. Khilov, K. Pavlova, V. Kazakov, V. Vildanov, I. Turchin, P. Subochev. *Photonics*, **9** (7), 482 (2022). DOI: 10.3390/photonics9070482
- [24] V. Perekatova, A. Kostyuk, M. Kirillin, E. Sergeeva, D. Kurakina, O. Shemagina, A. Orlova, A. Khilov, I. Turchin. *Diagnostics*, **13** (3), 457 (2023). DOI: 10.3390/diagnostics13030457
- [25] S.L. Jacques. *J. Biomedical Optics*, **15** (5), 051608 (2010). DOI: 10.1117/1.3494561
- [26] А. Исмару. *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах* (Мир, М., 1981).
- [27] R.C. Haskell, L.O. Svaasand, T.T. Tsay, T.C. Feng, M.S. McAdams, B.J. Tromberg. *JOSA A*, **11** (10), 2727–2741 (1994). DOI: 10.1364/josaa.11.002727
- [28] T.J. Farrell, M.S. Patterson, M. Essenpreis. *Appl. Opt.*, **37** (10), 1958–1972 (1998). DOI: 10.1364/ao.37.001958