

NUMERIČKO MODELOVANJE U PODRUČJU INTERAKCIJE LASERSKOG ZRAČENJA SA BIO-MATERIJALOM PRIMENOM MESLESS, RBF COLLOCATION METODA OD INTERESA ZA MEDICINU

Radovan Gospavić¹, Goran Todorović¹, Biljana Đokić²,
1. Građevinski fakultet, Beograd, 2. ETŠ "Rade Končar", Beograd

Sadržaj – Predstavljen je termalni model interakcije laserskog snopa sa materijalima, koji su od interesa u medicini. Analizirano je nestacionarno temperatirsko polje u jednodimenzionom slučaju. Predpostavljeno je da optički i termalni parametri materijala ne zavise od temperature, tako da je razmatran linearni model interakcije. Pri analizi je predpostavljeno da su intenziteti upadnog zračenja manji od kritičnih, odnosno analizirani su samo termalni efekt zagrevanja bez strukturnih promena u materijalu. Pri numeričkom modelovanju je korišćen RBF kolokacioni metod, koji spada u grupu meshless metode. Kao interpolacione funkcije korišćene su multi-kvadratne funkcije sa shape parametrom. Dobijeni numerički rezultati su poređeni sa analitičkim rezultatima za različite vrednosti shape parametra. Analiziran je uticaj shape parametra na numeričku grešku pri modelovanju interakcije.

1. UVOD

Laserski izvori zbog svojih specifičnih osobina u pogledu velikih gustina emitovane snage, usmerenosti i koherentnosti imaju široku primenu u različitim oblastima medicine, kako pri obradi materijala od interesa za medicinu, tako i u tretmanu tkiva. [1,2]. U radu su razmatrani različiti aspekti numeričkog modelovanja i simulacije interakcije laserskog zračenja sa materijalima, koji su od interesa u medicini. Primenjen je termalni model interakcije u ravnotežnom slučaju. Usvojena je pretpostavka da prečnik upadnog snopa zadovoljava sledeći uslov $d \gg (\alpha\tau)^{1/2}$, gde je a –termalna difuzivnost materijala i τ vreme trajanja impulsa, tako da se problem zagrevanja materijala svodi na jednodimenzioni slučaj [3].

Takođe je usvojena i pretpostavka da su dimenzije materijala mnogo veće od dimenzija snopa, pa je posmatrani materijal aproksimiran beskonačnim poluprosorom.

U skladu sa ovom pretpostavkom usvojeno je da termalni efekti interakcije (porast temperature) iščezavaju na graničnim površinama materijala. Razmatrane su upadne snage, koje su mnogo manje od kritičnih vrednosti, tako da je usvojena pretpostavka da optički i termalni parametri materijala ne zavise od temperature, odnosno razmatran je linearni model interakcije.

Interakcija sa materijalom je modelovana ekvivalentnim površinskim toplotnim izvorom, odnosno usvojena je pretpostavka da je materijal netransparentan i da se apsorpcija odvija u tankom površinskom sloju [5].

Pri numeričkom modelovanju je korišten RBG kolokacioni metod, koji se zasniva na interpolaciji rešenja polazne parcijalne diferencijalne jednačine, sa korespondentnim početnim i graničnim uslovima, radijalnim baznim funkcijama (RBF). Kao RBF funkcije su korištene

multi kvadratne funkcije (MQ) sa shape parametrom, koje imaju dobre osobine u pogledu konvergencije rešenja [6,7].

2. NUMERIČKI MODEL

U skladu sa usvojenim pretpostavkama zagrevanje materijala se može opisati jednodimenzionom, linearnom Fourier-ovom jednačinom provođenja toplote. Takođe je usvojena pretpostavka da je dužina trajanja laserskog snopa mnogo veća od relaksacionih vremena pri termalnim procesima u materijalu tako da se može pretpostaviti da su svi termalni procesi u materijalu ravnotežni[8]. Takođe razmatraćemo samo slučajeve interakcije kada su upadni intenzitet laserskog snopa manji od kritičnih vrednosti za dati materijal, odnosno pretpostavićemo da tokom interakcije dolazi samo do zagrevanja materijala bez strukturnih promena u samom materijalu kao što su topljenje, fazni prelazi, dezintegracija, isparavanje itd. U jednodimenzionom slučaju polazna jednačina provođenja toplote sa korespondentnim graničnim i početnim uslovima ima sledeći oblik [3]

$$\begin{aligned} \frac{1}{a} \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \\ -\lambda \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= A \cdot I(t) \\ T(x,t) \Big|_{x=0} &= T_0 \end{aligned} \quad (1)$$

gde je $a=\lambda/\rho c$, termalna difuzivnost, ρ -gustina materijala, λ -termalna provodnost, c -specifična toplota, A -koeficijent apsorbcije svetlosti, $I(t)$ –upadni intenzitet laserskog snopa, $T(x,t)$ -temperaturska raspodela unutar materijala, T_0 -početna temperatura. U slučaju konstantnog intenziteta laserskog snopa rešenje gornje jednačine uz korespondentne početne i granične uslove se može izraziti u sledećoj analitičkoj formi: [3]

$$\begin{aligned} T(z,t) &= \frac{2I_0 \sqrt{a \cdot t}}{\lambda} \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}} \right) \\ \operatorname{ierfc}(x) &= \int_x^{+\infty} \operatorname{erfc}(y) dy \end{aligned} \quad (2)$$

gde je $\operatorname{erfc}(y)$ -funkcije greške.

Gornja polazna jednačinu sa odgovarajućim graničnim i početnim uslovima je rešena numerički, korišćenjem RBF collocation metoda uz upotrebu multi kvadratnih funkcija. Interpolacija radijalnim baznim funkcijama (RBF) vrlo je rasprostranjen i uobičajen postupak pri interpolaciji multi

parametrskih podataka, pri čemu su nezavisno promenljive koordinate (parametri) stohastički raspoređeni (multivariante scattered data approximation problems), ovakav pristup ima niz prednosti u odnosu na uobičajene numeričke metode metode koje se koriste pri rešavanju parcijalnih diferencijalnih jednačina (PDE) ili pri interpolaciji funkcija od više promenljivih parametara. Glavna prednost korišćenja RBF pri rešavanju PDE (RBF-collocation method) se sastoji u redukciji prostorne diskretizacije (mešovanja), dok je pri korišćenju klasičnih numeričkih metoda kao što su Finite Element Method (FEM) ili Boundary Element Method (BEM) neophodno vršiti prostornu diskretizaciju celog domena (FEM) ili pak diskretizaciju granične površi domena (BEM) u slučaju RBF-collocation metoda nije neophodno vršiti prostornu diskretizaciju domena nego se umesto toga koriste čvorovi koji su stohastički raspoređeni unutar domena [4].

Ako polazna PDE u opštem slučaju u R^3 zajedno sa početnim i graničnim uslovima Neuman-ovog i Dirichlet-ovog tipa ima sledeći oblik

$$\begin{aligned} L(u) &= f(x); \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega \subset R^3 \\ D(u) &= g(x) \Big|_{x \in \Gamma} \\ N(u) &= h(x) \Big|_{x \in \Gamma} \end{aligned} \quad (3)$$

gde je L-diferencijalni operator, D,N-operatori koji daju Dirichlet-ove i Neuman-ove granične uslove na graničnim površinama Γ_D i Γ_N respektivno.

Ako pretpostavimo da se rešenja gornjeg problema može aproksimirati RBF, tada se ono može predstaviti u sledećem obliku :

$$\begin{aligned} u &\approx \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i(\|x - x_i\|) \\ \Phi_i &= \sqrt{\varepsilon \cdot \|x - x_i\|^2 + 1} \end{aligned} \quad (4a)$$

gde je Φ -multi kvadratna funkcija, α_i nepoznati koeficijenti koje treba odrediti, ε -shape parametar, x_i -stohastički raspoređeni čvorovi unutar domena Ω i

$$\begin{aligned} x &\in D \subset R^3 \\ \|x - x_i\| &= \sqrt{(x_1 - x_{i1})^2 + (x_2 - x_{i2})^2 + (x_3 - x_{i3})^2} \end{aligned} \quad (4b)$$

Ako interpolacioni izraz za nepoznatu funkciju u izrazu 4a uvrstimo u polaznu PDE i korespondentne granične uslove dobijamo linearni sistem jednačina po nepoznatim koeficijentima α_i . Predstavljeni metod rešavanja PDE se naziva direktni kolokacioni RBF metod ili Kansa metod i spada u širu grupu takozvanih meshless metoda. Pored ovog metod postoji celi niz drugih meshless metoda kao što su: Boundary knot method (BKM), simetrični BKM, metod fundamentalnih rešenja (MFS), boundary particle methods, modifikovani Kansa metod (MKM) itd. Pored meshless metoda, koji koriste RBF funkcije koje nisu lokalizovane i spadaju u global supported funkcije, razvili su se i numerički metodi za rešavanje PDE koji koriste lokalizovane funkcije tzv. local supported funkcije, kao što su wavelets funkcije,

koje obezbeđuju bolju uslovljenost linearnog sistema jednačina (manji kondicioni broj), ali su numeričke greške veće [9].

Ako u polaznoj jednačini 1 izvršimo diskretizaciju u vremenu tako da važi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &\approx \frac{T_m - T_{m-1}}{\Delta t} \\ \frac{d^2 T_m}{dx^2} - \frac{1}{a \cdot \Delta t} T_m &= \frac{-T_{m-1}}{a \cdot \Delta t} \\ -\lambda \frac{\partial T_m}{\partial x} \Big|_{x=0} &= A \cdot I(m \cdot \Delta t) \end{aligned} \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} T(x)_m &= T(x, m \cdot \Delta t); \quad \Delta t = \frac{T}{M} \\ m &= 0, 1, 2, \dots, M \\ T(x)_{m=0} &= 0 \quad x \in D \end{aligned} \quad (5b)$$

gde je Δt vremenski korak diskretizacije, T-vremenski period u kome se vrši diskretizacija i M-broj vremenskih koraka, T_m -vrednost temperaturske razlike između temperature unutar materijala u m-tom trenutku i početne temperature T_0 .

Takođe ćemo predpostaviti da je temperatura daleko od površine uzorka na mestu x približno jednaka 0.

Ako promenimo numeričku proceduru datu u jednačinama (4a) i (4b) na jednačine (5a) i (5b) dobijamo sledeći linearni sistem jednačina:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i^m \left[\frac{\varepsilon^2}{((\varepsilon \cdot (x_k - x_i))^2 + 1)^{3/2}} - \frac{1}{a \cdot \Delta t} \sqrt{(\varepsilon \cdot (x_k - x_i))^2 + 1} \right] &= \\ \frac{-T_{m-1}(x_k)}{a \cdot \Delta t} \\ \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i^m \sqrt{(\varepsilon(x_g - x_i))^2 + 1} &= 0 \end{aligned} \quad (6b)$$

$$\sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i^m \frac{\varepsilon^2 \cdot x_i}{\sqrt{\varepsilon^2 \cdot x_i^2 + 1}} = \frac{Q}{\lambda}; \quad k = 1, 2, \dots, N; \quad L = 2$$

koji predstavlja sistem od N linearnih jednačina sa N nepoznatih parametara α_i . Gornji sistem jednačina se može prikazati u sledećem ekvivalentnom matricnom obliku:

$$\begin{aligned} X \cdot C &= B \Rightarrow \\ X &= B \cdot C^{-1} \\ X &= [\alpha_1, \dots, \alpha_2] \end{aligned} \quad (7)$$

gde je

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{T_{m-1}(x_1)}{a \cdot \Delta t} & \dots & -\frac{T_{m-1}(x_N)}{a \cdot \Delta t} & 0 & \frac{Q}{\lambda} \end{bmatrix}; \quad C = [c_{ki}]$$

$$c_{ki} = \frac{\varepsilon^2}{\left((\varepsilon \cdot (x_k - x_i))^2 + 1 \right)^{3/2}} - \frac{1}{a \cdot \Delta t} \sqrt{(\varepsilon \cdot (x_k - x_i))^2 + 1} \quad (8)$$

$$k = 1, \dots, N; \quad i = 1, \dots, N + L$$

$$c_{N+1,i} = \sqrt{(\varepsilon(x_g - x_i))^2 + 1}; \quad c_{N+2,i} = \frac{\varepsilon^2 \cdot x_i}{\sqrt{\varepsilon^2 \cdot x_i^2 + 1}}$$

Rešavanjem gornjeg sistema jednačina dobijamo nepoznate parametre α_i . Temperaturna raspodela u materijalu u nekom trenutku t_m se može odrediti na osnovu sledećeg interpolacionog izraza:

$$T_m(x) \approx \sum_{i=1}^N \alpha_{mi} \Phi_\varepsilon(\|x - x_i\|) \quad (6a)$$

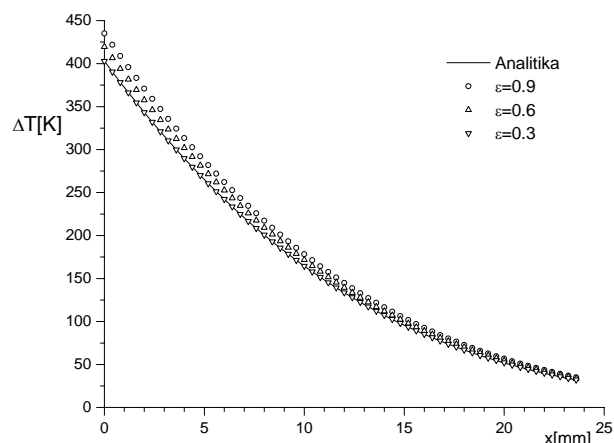
Vrednost parametra ε je principijelno proizvoljna. Pokazalo se da se numerička greška sa jedne strane smanjuje smanjivanjem parametra ε ali sa druge strane linearni sistem dat relacijom (7), koji je neophodno rešiti da bismo dobili nepoznate parametre α_i , postaje nestabilan odnosno kondicioni broj matrice C se povećava. U граничном slučaju $\varepsilon \rightarrow 0$ kondicioni broj matrice C divergira, odnosno sistem je loše uslovljen i ne može se rešiti. Teorijskim razmatranjem je pokazano da u граничном slučaju $\varepsilon \rightarrow 0$ rešenje sistema (7) ipak postoji i da u slučaju aproksimacije zadate funkcije, aproksimacioni izraz (6a) prerasta u Lagrange-ov aproksimacioni polinom [10]. Slaba uslovljenost sistema (7) je uslovljena numeričkim greškama koje nastaju pri zaokruživanju u slučaju malih vrednosti shape parametra. Pomenute teškoće u rešavanju linearnog sistema se za mali broj čvorova prevažilaze korištenjem Cauchy-ovog integralnog metoda gde se koriste kompleksne vrednosti shape parametra ε . [11] Nedostatak ovog metoda se sastoji u tome što se praktično može koristiti samo za relativno male brojeve čvorova (<100), tako da je samo od teorijskog značaja. [11] U slučaju velikog broja čvorova linearni sistem takođe postaje nestabilan, pa se koriste drugi metodi kao što je metod prekondicioniranja ili dekompozicija domena koji poboljšava uslovljenost linearnog sistema odnosno smanjuje kondicioni broj matrice C [12].

3. NUMERIČKI REZULTATI

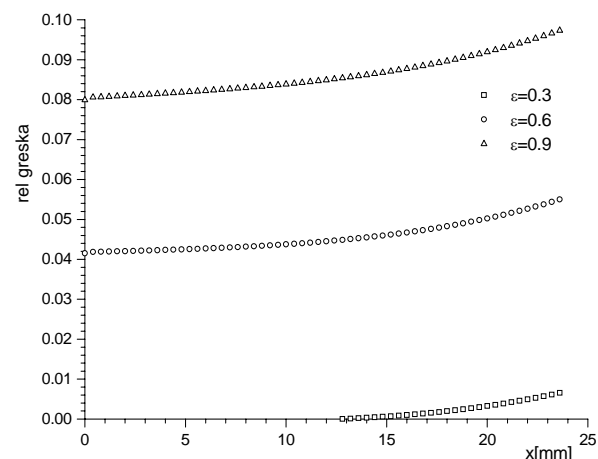
Na slici 1. je prikazana raspodela priraštaja temperaturnog polja unutar utorka od zlata dobijena numerički metodom direktne RBF kolokacije za tri različite vrednosti shape parametra $\varepsilon=0,3$; 0,6 i 0,9 i na osnovu analitičkog izraza (2). Na slici 2 je prikazana relativna greška u odnosu na analitička rešenja. Upadni intenzitet zračenja je $I_0=101,91 \cdot 10^5 \text{ W/m}^2$, a vreme trajanja laserskog impulsa je 1s. Numerički metod je primenjen na 300 ekvidistantnih čvorova, гранични uslovi su useti za $x_g=120\text{mm}$ i dobijeni

linearni sistem 300×300 je rešavan korištenjem programskog paketa LAPACK. Iz dobijenih rezultata se vidi da se relativna greška smanjuje sa smanjivanjem shape parametra, za vrednosti shape parametra manje od 0,25 sistem postaje nestabilan i ne može se rešavati direktnom metodom.

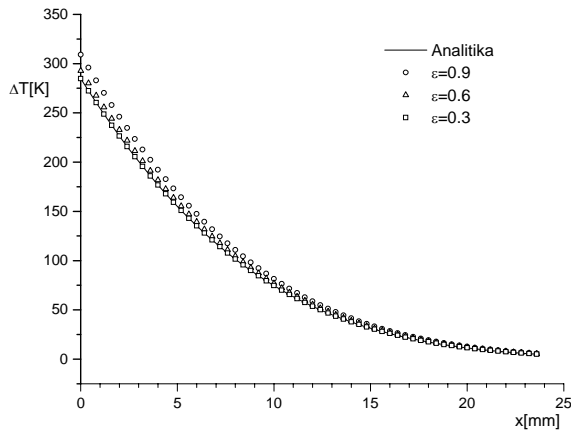
Na slikama 3 i 4 su prikazane numeričke vrednosti dobijene za priraštaj temperaturnog polja i relativne greške za različite vrednosti shape parametra respektivno za slučaj laserskog impulsa trajanja 0.5 s.



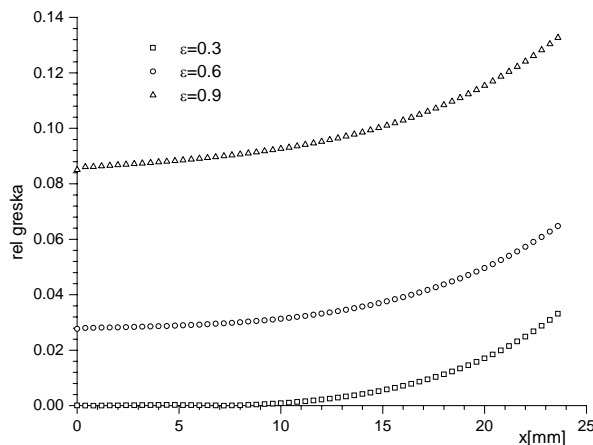
Slika 1. Raspodela priraštaja temperaturnog polja u slučaju uzorka od zlata za različite vrednosti shape parametra, trajanje laserskog impulsa 1s



Slika 2. Relativna greška u odnosu na analitičko rešenje za različite vrednosti shape parametra, uzorak od zlata, trajanje laserskog impulsa 1s



Slika 3. Raspodela priraštaja temperaturskog polja u slučaju uzorka od zlata za različite vrednosti shape parametra, trajanje laserskog impulsa 0.5s



Slika 4. Relativna greška u odnosu na analitičko rešenje za različite vrednosti shape parametra, uzorak od zlata, trajanje laserskog impulsa 0.5s

4. ZAKLJUČAK

U radu je razmatrana interakcija laserskog zračenja sa materijalima od interesa u medicini. Korišten je termalni model interakcije i pretpostavljeno je da su svi parametri materijala nezavisni od temperature i konstantni. Pri analizi je takođe pretpostavljeno da su upadni intenziteti laserskog zračenja ispod kritičnih vrednosti. Pri numeričkom modelovanju je korišćen RBF kolokacioni metod ili Kansa metod. Korišćene su multikvadratne funkcije sa shape parametrom. Dobijeni numeričke vrednosti temperaturske raspodele su porešene sa analitičkim rezultatima. Dobijeni vrednosti relativne greške pokazuju da se tačnost metoda poboljšava za smanjivanjem shape parametra. Za vrednosti shape parametra manje od 0.25 linearni sistem jednačina postaje nestabilan i neophodna je primena drugih numeričkih tehnika kao što su Cauchy-evog integralnog metoda, metoda dekompozicije domena, prekondicioniranja i sl.

LITERATURA

- [1] Experimental and Clinical Investigation with the Twinlight Dental Laser, Fotona, Medical laser report, Vol.D 2.4
- [2] R. Gospavić, V. Šijački, "Modeli interakcije laserskog zračenja sa materijalima od interesa u medicini", *Zbornik radova XLVII Konf za Etran*, 2003, pp. 338-341
- [3] R. Gospavić, "Merenje i modelovanje efekata dejstva laserskog zračenja na materijala", Magistarski rad, Beograd: ETF, 2002.
- [4] C. A. Berbbia, J. C. F. Tells, L.C. Wrobel, *Boundary Element Techniques*, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, Springer-Verlag, 1984
- [5] N. Rikalin, A. Uglov, A. Kokora, *Laser Machining and Welding*, Moscow, Mir Publishers, 1978
- [6] Nam Mai-Duy, Thanh Tran-Cong, "Numerical solution of differential equations using multiquadric radial basis function networks", *Neural Networks*, vol.14, pp. 185-199, 2001
- [7] M.D. Buhmann "Radial Basis functions", *Acta Numerica*, pp. 1-38, 2000
- [8] A. N. Smith, J. L. Hostetler and P. M. Norris, "Nonequilibrium heating in metal films: an analytical and numerical analysis", *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol.35, pp.859-873, 1999
- [9] X. Zang, K. Z. Song, M. W. Lu, X. Liu. "Meshless methods based on collocation with radial basis functions", *Computational Mathematics* vol.26, pp. 333-343, 2000
- [10] E. Larsson, B. Fronberg, "Theoretical and Computational Aspects of multivariate Interpolation with Increasingly Flat Radial Basis Functions", *Computers and Mathematics with Applications*, 2005
- [11] B. Fronberg G. Wright, "Stable Computation of Multiquadric Interpolants for all values of the shape parameter", *Computers & mathematics with applications*, vol.48, pp. 853-867, 2004
- [12] E. J. Kansa, Y. C. Hon, "Circumventing the ill-conditioning problem with multiquadric radial basis functions: applications to elliptic partial differential equations", *Computers & mathematics with applications*, vol.39, pp. 123-137, 2000

Abstract – Thermal model of laser material interaction with applications in medicine was presented. Non-stationary temperature field in 1D case was analyzed. Temperature independence of optical and thermal parameter were assumed and linear model was considered. Heating of the material by laser beam was considered at incident intensity of laser beam under critical value, without structural changes inside of the material. RBF collocation meshless method was used. Multiquadric function with shape parameter was employed for approximation. Obtained numerical results were compared with analytical one for different value of the shape parameter. Influence of the shape parameter on accuracy of numerical method was analyzed.

MODELING IN LASER INTERACTION WITH BIOMATERIAL APPLICATING MESLESS, RBF COLLOCATION METHODS OF INTERES FOR BIOMEDICINE

Radovan Gospavić, Goran Todorović, Biljana Đokić