

文章编号:1009-3087(2003)01-0066-03

肺支气管树的 DLA 分形生长模拟

张 健,谭小苹,裴觉民

(四川大学 生物医学工程中心,四川 成都 610065)

摘 要: 将计算机仿真的实验方法引入肺器官功能动力学领域,以 Witten 和 Sander 提出的有限扩散凝聚模型(DLA—Diffusion Limited Aggregation)为基础,在肺叶边界约束下用计算机对肺支气管树的生长及其分布情况进行了模拟。实验中主要考虑分析并讨论了边界情况、运动粒子的反应几率、扩散步长、凝聚中心、凝聚距离等因素对于肺支气管树的生长及分布的影响。在大约 10000 个粒子的成功凝聚后,一侧肺支气管树的粗略形态可以得出。其结果初步揭示了肺器官功能的动力学过程与其结构的一致性。

关键词: 分形生长;肺支气管树;有限扩散凝聚模型

中图分类号: R318

文献标识码: A

DLA Simulation of Fractal Growth of Bronchial Tree

ZHANG Jian, TAN Xiao Ping, PEI Jue min

(Biomedical Eng. Center, Sichuan Univ., Chengdu 610065, China)

Abstract: The method of computer simulation in the studies of dynamics of lung function was introduced. Based on the work of Witten and Sander (1981), authors developed a modified DLA (Diffusion Limited Aggregation) model for the simulation of the growth of bronchial tree. The growth probabilities of the bronchial tree were affected by the rate of releasing random walkers from the external boundary. The present authors also considered the effects of boundary shape, the location of aggregation center, the step length of random walker, and the aggregating distance on the growth of bronchial tree. After 10,000 cyclic calculations a preliminary configuration of the bronchial tree was obtained. The calculated result reveals preliminarily the correspondence of the dynamical process of the human respiratory performance to the structure of the lung.

Key words: fractal growth; bronchial tree; diffusion limited aggregation

20 世纪 70 年代,美国学者曼德尔布罗特(Mandelbrot, B. B.)开创了与传统的欧氏几何有本质区别的分形几何(fractal geometry),用其来探讨自然界中许多无定形的复杂问题。自分形提出后,在世界上引起了广泛的重视,并在数学、物理、化学、生物等科学领域展开了分形理论研究^[1]。

自相似的分形形态在自然界中大量存在,如大树与树枝干、细枝条十分相似,小肠绒毛与绒毛上皮

细胞的纤毛在结构上惊人地相似,等等。80 年代,随着对分形认识的深入,人们开始对分形形态的形成过程进行探讨。为此人们提出了各种生长模型,如:有限扩散凝聚模型(Diffusion - Limited Aggregation),弹射凝聚模型(Ballistic Aggregation),反应控制凝聚模型(Reaction - Limited Aggregation)。其中有限扩散凝聚(DLA)模型由 Witten 和 Sander 于 1981 年共同提出,他们试图解释烟尘颗粒的分形聚集。DLA 是通过布朗运动粒子不可逆地凝聚到一个核心上使图形动态生长而成的。此种图形具有一系列向其四

收稿日期:2002-07-08

作者简介:张 健(1979-),男,硕士生,研究方向:人工器官。

周伸展的分枝结构,并具有自相似的特性,是分形的一种重要形态。许多自然现象和人们在实验室中观察到的现象,如金属沉积树、玻璃裂纹、闪电、渗流等等,尽管其生成机制不一,但所得到的图形,无论在枝状结构上,分形维数上,和 DLA 模拟生长的结果都是一致的^[2]。正因为如此,分形生长模型已被人用于研究癌细胞扩散、菌落生长、视网膜形态之中。

由于人体的肺支气管树作为一种自然产物,具有明显的分形特征——自相似性和分形维数不为整数^[1],人们也从分形的角度出发,对肺支气管树进行了探讨。曼德耳布罗特创造了一种支气管树模型,以传统的几何构图的方式,严格的自相似进行模拟研究^[1]。由于这个模型较为简单,对于肺支气管树的复杂程度而言,严格按分形几何递归得出的模型并不适用。

目前对自相似图形物理内涵的研究,以及对生长图形的研究还仅仅是开始,其分析理论还很成熟,但可以预期,这类研究对促进医学、生物学、流体力学、生物器官的模拟等有现实意义。本论文着眼于此,将 DLA 模型引入到肺气管树的研究,尝试利用它来进行支气管树的计算机模拟,探讨支气管树的微观生长机理和宏观结构的内在联系,探索肺支气管树的生长与分布情况和肺叶边界条件等诸多因素之间的关系。

1 DLA 模型的数学背景

肺泡与气管树是人体呼吸系统的基本结构。人体的主气管长度约为 15 cm,直径约为 2~3 cm,经不断分叉,到第 20 级分叉的呼吸性支气管,长度为 0.083 cm,直径为 0.045 cm,22 级分叉后与肺泡相连,整个支气管形状有如一棵倒置的树。从形态统计角度,每一级的分叉无论从分叉角度、直径比、长度比,都很接近,似乎与放大倍数无关,肺支气管树的 Hausdorff 分形维数为 2.9。人体的肺泡数量达 3 亿之多,气体通过细支气管、呼吸性支气管在肺泡进行气体交换如同气体通过不规则界面的多孔介质膜^[3]。

DLA (Diffusion Limited Aggregation) 模型建立在 Laplace 方程的基础上,由于 Laplace 方程具有标度不变性和生长概率具有的一致性,所以能揭示分形与生长之间的关系,可以很好地解释一大类客观存在的分形形态的形成过程。

可以认为,在呼吸过程中气道内的压力分布满足 Laplace 方程,在气体扩散过程中氧气、二氧化碳

的浓度在呼吸道末端也满足 Laplace 方程。血液要与外界通过呼吸膜在有限的空间里进行最有效的气体交换,必须通过不规则的分形界面。由不稳定界面的移动而产生复杂的图形是很常见的现象,而界面的扩散控制运动必定导致非常复杂的树枝状的分形体。有理由认为肺支气管树的形态模型与功能模型必然是匹配的。

扩散控制生长过程中的界面由拉普拉斯方程和相应的边界条件所确定。

$$\nabla^2 (x, t) = 0.$$

式中, x, t 为空间、时间变量。

无规扩散可以用 Fick 定律来加以描述:

$$J = -D \nabla, \quad \frac{\partial}{\partial t} = -\nabla \cdot J = D \quad (1)$$

式中, ρ 为粒子浓度, J 为扩散流量, D 为扩散系数。Witten 和 Sander 证明,DLA 生长相当在一定的边界条件或初始条件下,即:

$$\frac{\partial}{\partial t} = 0, \quad \begin{aligned} &= 0 \quad (\text{在 DLA 聚集体上}) \\ &= 1, \quad (\text{在无限远处}). \end{aligned} \quad (2)$$

式(1)的动态离散解,并且在周界上第 i 点的法向生长几率或速度为

$$u_i = |n \cdot J| = D |\nabla_n|_i. \quad (3)$$

式中, n 为周界上 i 处的法向单位向量。

式(1)在式(2)条件下变为拉普拉斯方程

$$= 0. \quad (4)$$

DLA 模型的基本思路是将种子颗粒放置于原点,从边界上随机发出粒子自由漫游,如果碰到边界则消除,如果碰到种子颗粒则和种子颗粒发生不可逆粘附。假定漫游粒子到达外部边界与生长中的凝聚体之间的某点 r ,而没访问边界或凝聚体的概率为 $P(r)$,则这个概率满足:

$$P(r) = \frac{1}{z} \cdot \sum (r+). \quad (5)$$

对于外部边界 P 恒等于 1,对于凝聚点 P 恒等于 0,则式(5)是式(4)的离散变形^[5]。这样 $P(r)$ 的大小就如同外边界与凝聚体之间的压力(或浓度)势能一样。

2 DLA 模拟中的考虑

基于以上理论,笔者根据肺的基本几何形态,在暂不考虑生长与边界的动态关系的条件下,重点考虑模拟参数设置的 2 个关键因素:1) 粒子产生区域

所对应的概率;2)凝聚体生长开始的位置。

笔者根据解剖数据近似地构造出右肺的大致形状,将其作为边界约束条件。并将从肺叶边界向内部运动第一步的一系列点值作为 DLA 模型的出发边界点,这样可以简化计算,且不会影响模拟结果的精度。

2.1 扩散粒子的反应概率

根据肺的生理结构可以看出,肺支气管树的结构并不是各向均衡的。笔者针对肺叶的上部分级较快、较短,在下部分级较慢、较长这一特点,在模拟中选用了多个数组,分别对应不同的边界区域,在每一个不同的边界区域上有不同的粒子反应概率。并在模拟中对其进行不断调整,力求寻找到一个最佳状态。

2.2 凝聚中心

在给定的边界条件下,凝聚中心的位置直接关系到凝聚体产生的形状。笔者按照解剖学上的肺形态数据^[4],给出了功能主要为气体通道的肺支气管树前两级的位置。在此基础上生长出的凝聚体,形态上较为接近实际。

2.3 步长与凝聚距离

如设大步长,如 10 个像素单位,不但得出的结果粗糙,仅能表达出肺支气管树的模糊形态,而且得出的结果稳定性不好,波动范围过大。在本模拟中,笔者采用了肉眼所能分辨到的最小单位:一个像素长,作为粒子反应的步长和凝聚距离。从结果看较为理想。

2.4 其它

就肺支气管树的模型而言,许多 DLA 中可能涉及的参数,如表面张力、表面粗糙度等,其影响机理尚未得到根本的弄清。加之在本模拟中对肺支气管树的结构影响较小,因而未加考虑。总之在 DLA 普适算法的基础上,笔者将肺的特殊影响因素考虑进来,在模拟中不断对所考虑的参数加以调整,以达到最佳效果。

3 结果及讨论

经过模拟,得出了图 1 的结果。该图形相关数据如下:反应粒子由 80 个边界关键点组成,按照右肺的上、中、下三叶分为 3 个不同区域,各个区域所对应的粒子反应概率分别为 20%,30%,50%,程序中凝聚的粒子总数约为 10000,每一次随机的步数最多为 10000,步长和凝聚半径均为 1 个单位,在颜

色上代表一个像素点。在模拟中,笔者根据模拟对象—右肺的三叶划定了粒子产生的不同区域,每个不同区域有不同概率,但在每一个具体的区域内部又设定为同样的概率。在模拟中反复调整每一区域的粒子反应概率。从计算机模拟的结果来看:DLA 凝聚生长图形具有向周围伸展的大大小小的分支,除了粒子大小和图形大小之外,不存在其它的特征长度。它具有自相似的特性。同时它的分支的形态和位置都跟实际解剖数据有某种对应关系。由上可知:采用 DLA 模型来模拟肺支气管树是可行的。



图 1 肺支气管树的 DLA 生长模拟结果

Fig.1 The simulation of bronchus tree

在分析比较后,笔者认为,在肺叶的外形轮廓和凝聚体生长起始位置给定的情况下,粒子产生区域所对应的概率对肺支气管树的结构形式起着决定性作用。肺叶的外形轮廓在模拟中扮演了边界约束的重要作用。模拟中发现,不同的凝聚中心对应的凝聚结果差异很大,突出表现在凝聚的速度,凝聚体的分岔形态等。笔者按照解剖学上的肺生理数据^[4],对凝聚体的起点位置进行了调整,给出了功能主要为气体通道的肺支气管树前两级的位置。在此基础上生长出的凝聚体,形态上较为接近实际,因此凝聚中心的选择很关键。

参考文献:

- [1] 张志三. 科学家谈物理, 第一辑: 漫谈分形[M]. 长沙: 湖南教育出版社, 1993.
- [2] 张济忠. 分形[M]. 北京: 清华大学出版社, 1995.
- [3] 中国医科大学. 人体解剖学[M]. 北京: 人民卫生出版社, 1978.
- [4] 纳恩 J F. 应用呼吸生理学[M]. 陈毓槐, 等译, 北京: 科学出版社, 1977.
- [5] Armin Bunde, Shlomo Havlin. Fractals and disordered systems [M]. Springer, 1996.

(编辑 黄小川)