

**Моделирование распространения оптического излучения  
в фантоме биологической ткани на суперэвм MBC1000/M.**

*Л.П. Басс, О.В. Николаева (ИПМ им. М.В.Келдыша РАН),\**

*В.С. Кузнецов (РНИЦ «Курчатовский институт»),\**

*А.В. Быков, А.В. Приезжев (МГУ им. М.В. Ломоносова),\**

*А.А. Дергачев (ЗАО «Флинт и К»)*

Рассматривается прямая задача о зондировании биологической ткани лазерным источником малой апертуры. Распространение излучения в ткани моделируется уравнением переноса. Представлен сеточный алгоритм его решения, опирающийся на аналитическое представление интенсивности нерассеянного света и полуаналитический алгоритм вычисления интенсивности однократно рассеянного света. Приведены результаты методических расчетов, показывающие преимущества представленного алгоритма расчета радиационных полей по сравнению с методом статистического моделирования и с упрощенным подходом, опирающимся на уравнение диффузии.

**Optical radiation propagation modeling  
in a phantom of biological tissue by the supercomputer MBC1000/M**

*L.P.Bass, O.V.Nikolaeva (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Science),\**

*V.S. Kuznetsov (Research Scientific Center "Kurchatov Institute"),\**

*A.V.Bykov, A.V.Priezzhev (Moscow State University),\**

*A.A.Dergachev (Flint&K Inc)*

The direct problem of biological tissue sounding by a laser source of small aperture is considered. Radiation propagation through tissue is modeled by the transport equation. The grid algorithm is presented to solve it. The technique relies on analytical representation of un-scattered light intensity and hemi-analytical method of once-scattered light intensity calculation. Numerical results are presented. They show advantages of considered algorithm of radiative fields calculation in comparison with the statistical modeling method and simplified approach, which leans upon the diffusion equation.

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 04-01-00404.

\*Работа финансировалась грантом Президента РФ «Поддержка научных школ» № 2071.2003.4.

## 1. Введение

В последнее десятилетие наблюдается повышенный интерес к разработкам новых оптических методов неинвазивной визуализации структуры и диагностики для медицинских приложений, в частности, к методу оптической диффузионной томографии (ОДТ) [1-5]. При реализации метода ОДТ исследуемый объект, например, орган или какой-либо участок тела человека локально зондируется одним или несколькими пучками света, а диффузно отраженное объектом излучение детектируется одним или несколькими приемниками, расположенными, как правило, на различных удалениях от источников. В диффузно отраженную компоненту вносит вклад излучение, рассеянное на расположенных внутри исследуемого объекта оптических неоднородностях (клетках, многоклеточных и субклеточных структурах, например, ядрах и митохондриях). Решение обратной задачи предполагает восстановление пространственного распределения оптических или других свойств, связанных с теми или иными структурами исследуемого объекта по характеру регистрируемого оптического отклика объекта на зондирующее излучение.

В простейшем случае применяется непрерывное зондирующее излучение. В более сложных вариантах оно может быть импульсным либо амплитудно-модулированным. Последние два варианта позволяют достичь большей глубины и чувствительности к пространственному распределению оптических свойств объекта. Однако во всех этих случаях решение задачи восстановления объемного поля оптических параметров предполагает использование как можно более корректного метода для оценки переноса оптического излучения в многослойных, как правило, тканях.

Первым шагом на этом пути является построение корректного численного алгоритма решения стационарного уравнения переноса (решение прямой задачи). Это уравнение определяет интенсивность света как функцию пяти переменных – трех пространственных и двух угловых, задающих направление движения фотонов. Задача существенно усложняется за счет большой оптической неоднородности и сильных рассеивающих свойств биологических тканей. Дополнительные трудности создают сильная анизотропия процессов рассеяния в тканях

и сингулярность источника излучения (малая апертура), которые приводят к большим градиентам решения, как по угловым, так и по пространственным переменным.

Вследствие столь серьезных трудностей вместо уравнения переноса часто используют приближенные модели, например, диффузионные. В таких моделях с помощью уравнения диффузии в каждой пространственной точке определяется интенсивность света, усредненная по всем направлениям переноса [3].

Для его решения обычно применяется один из двух методов. *Метод статистического моделирования* (Монте-Карло) [6] опирается на последовательный расчет траекторий испускаемых источником фотонов. При этом большая оптическая толщина среды приводит к необходимости учета очень большого числа траекторий, что делает метод крайне затратным по времени счета. В *методе дискретных ординат* [7] вводятся угловые и пространственные сетки и уравнение переноса аппроксимируется системой сеточных уравнений. При расчете этим методом задач с сингулярными источниками приходится использовать столь густые сетки, что задача становится непосильной даже для современных суперкомпьютеров.

Таким образом, существует неотложная необходимость разработки более эффективных алгоритмов решения уравнения переноса фотонов для рассматриваемых задач медицинской и промышленной неинвазивной диагностики. Особенность алгоритма, который предлагается в настоящей работе, состоит в точном учете вклада нерассеянных и однократно рассеянных фотонов, образующих наиболее сингулярную часть решения, в результирующую интенсивность. При этом интенсивность дважды и более рассеянных фотонов является более гладкой функцией, и для ее определения возможно использование метода дискретных ординат на не очень густых сетках, а также полиномиальное представление угловой зависимости решения в интеграле столкновений. Предложенный алгоритм для  $(x,y,z)$  и  $(r,z)$ - геометрий включен в программу РАДУГА–5.1(П) [8], ориентированную на компьютеры с параллельной архитектурой, что дает возможность использовать в расчетах многопроцессорные ЭВМ. Следует отметить также, что нам не известны другие программы, предназначенные для решения сеточным методом диффузионного уравнения или уравнения переноса, которые включали бы полуаналитический алгоритм расчета поля однократно рассеянных фотонов от

точечного источника малой апертуры. Например, алгоритм решения стационарного уравнения переноса методом дискретных ординат в задачах биомедицины представлен в [9]. Однако в этой работе рассматривается такая модель точечного источника, что даже интенсивность нерассеянного излучения не надо выделять аналитически.

Далее статья организована следующим образом. Общая математическая модель переноса излучения от лазерного источника рассматривается в разделе 2, особенности предлагаемого численного алгоритма изложены в разделе 3. Сравнение результатов методических расчетов с экспериментальными данными, а также результатами, полученными методом Монте-Карло и с помощью диффузионного приближения, выполнено в разделе 4.

## 2. Общая математическая модель

### 2.1. Уравнение переноса

Распространение излучения от лазерного источника в оптически-неоднородной среде описывается интегро-дифференциальным уравнением переноса. В моноэнергетическом приближении оно имеет следующий вид:

$$\hat{L}\Psi(\mathbf{r},\Omega) = \hat{S}\Psi(\mathbf{r},\Omega) + Q(\mathbf{r},\Omega), \quad \mathbf{r} \in G, \quad (2.1)$$

$$\hat{L}\Psi(\mathbf{r},\Omega) = \Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r},\Omega) + \Sigma_t(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},\Omega), \quad \hat{S}\Psi(\mathbf{r},\Omega) = \Sigma_s(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r},\Omega \cdot \Omega')\Psi(\mathbf{r},\Omega') d\Omega'.$$

Здесь функция  $\Psi(\mathbf{r},\Omega)$  определяет значение интенсивности излучения в точке  $\mathbf{r}$  пространственной области  $G$  в направлении вектора  $\Omega \in \Omega$ ;  $\Omega$  – единичная сфера. Вектор  $\Omega$  задается сферическими координатами  $(\gamma, \varphi)$ , см. Рис. 1, где  $\gamma = \cos \theta$ ,  $\theta$  – полярный угол,  $\varphi$  – азимутальный угол. Примеры областей  $G$  приведены ниже на Рис. 5.

Полное сечение (коэффициент экстинкции)  $\Sigma_t(\mathbf{r})$  определяет вероятность взаимодействия фотона со средой; сечение рассеяния  $\Sigma_s(\mathbf{r})$  – вероятность рассеяния фотона; индикатриса рассеяния (фазовая функция)  $\rho(\mathbf{r},\Omega \cdot \Omega')$  – вероятность изменения направления движения фотона с  $\Omega'$  на  $\Omega$ .

В сферических координатах интеграл столкновений  $\hat{S}\Psi(\mathbf{r},\Omega)$  записывается в виде

$$\hat{S}\Psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \Sigma_s(\mathbf{r}) \int_{-1}^1 d\gamma' \int_0^{2\pi} d\varphi' \rho(\mathbf{r},\chi) \Psi(\mathbf{r},\gamma',\varphi'), \quad (2.2)$$

где  $\chi = \gamma\gamma' + \sqrt{1-\gamma^2}\sqrt{1-(\gamma')^2} \cos(\varphi-\varphi')$  – значение скалярного произведения  $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}'$ .

Функция  $Q(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$  определяет интенсивность источника фотонов. В данном случае рассматривается точечный источник малой апертуры, см. Рис. 2. Отвечающая такому источнику функция  $Q(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$  может быть записана в форме

$$Q(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi} \cdot f(\kappa_0) \cdot \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \cdot \eta(\kappa_0 - \gamma_{cs}), \quad \kappa_0 = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}_{ax} = \cos\theta_0. \quad (2.3)$$

Здесь  $S_0$  – мощность источника;  $f(\kappa_0)$  – его угловое распределение;  $\eta(a) = 0$  при  $a < 0$ ,  $\eta(a) = 1$  при  $a \geq 0$ ;  $\gamma_{sc} = \cos\alpha$  – косинус угла раствора конуса источника, отсчитываемый от оси конуса, определяемой вектором  $\mathbf{\Omega}_{ax}$ , см. Рис. 2.

Краевые условия для уравнения (2.1) в данной задаче задают режим отражения фотонов от границы  $\partial G$  области  $G$

$$\Psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = A(\mathbf{r}) \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) > 0} d\mathbf{\Omega}' \Psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}') \mathfrak{R}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},\mathbf{\Omega}'), \quad \mathbf{r} \in \partial G, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) < 0. \quad (2.4)$$

Здесь  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  – внешняя нормаль к  $\partial G$ ,  $A(\mathbf{r})$  – альbedo отражения,  $\mathfrak{R}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},\mathbf{\Omega}')$  – функция отражения. При  $A(\mathbf{r}) = 0$  условие (2.4) означает, что фотоны, покинувшие область расчета  $G$  через точку  $\mathbf{r}$  границы  $\partial G$ , не возвращаются в  $G$ .

В вычислительной практике индикатриса обычно представляется разложением по полиномам Лежандра

$$\rho(\mathbf{r},\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=0}^{N(\mathbf{r})} (2\nu+1) \cdot \omega_{\nu}(\mathbf{r}) \cdot P_{\nu}(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') \quad (2.5)$$

с нормировкой

$$\int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' = \omega_0(\mathbf{r}) = 1.$$

Используя теорему сложения для полиномов Лежандра [10]

$$P_{\nu}(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') = \sum_{m=0}^{\nu} \bar{P}_{\nu}^m(\gamma) \bar{P}_{\nu}^m(\gamma') \cos(m(\varphi - \varphi')),$$

где

$$\bar{P}_{\nu}^m(\gamma) = P_{\nu}^m(\gamma) \sqrt{\frac{(\nu-m)!}{(\nu+m)!}} (2 - \delta_{m,0}),$$

а  $P_{\nu}^m(\gamma)$  – присоединенные функции Лежандра, представляем интеграл рассеяния (2.2)

следующим разложением

$$\hat{S} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\mathbf{s}} \sum_{\nu=0}^{N(\mathbf{r})} (2\nu+1) \omega_{\nu}(\mathbf{r}) \left( \sum_{m=0}^{\nu} \bar{P}_{\nu}^m(\gamma) \left( M_{\nu}^{cm}[\Psi] \cos m\varphi + M_{\nu}^{sm}[\Psi] \sin m\varphi \right) \right), \quad (2.6)$$

где величины

$$M_{\nu}^{cm}[\Psi] = \int_{-1}^1 d\gamma \int_0^{2\pi} d\varphi \cos m\varphi \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \bar{P}_{\nu}^m(\gamma), \quad M_{\nu}^{sm}[\Psi] = \int_{-1}^1 d\gamma \int_0^{2\pi} d\varphi \sin m\varphi \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \bar{P}_{\nu}^m(\gamma) \quad (2.7)$$

суть угловые моменты функции  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ .

## 2.2. Приближенные методы

Численное решение задачи (2.1)-(2.5) сопряжено со значительными трудностями. Прежде всего, искомая функция зависит от 5 координат (трех пространственных и двух угловых). Кроме того, для оптических неоднородностей, характерных для оптических тканей (клеток, клеточных ядер, митохондрий и др.), индикатрисы рассеяния в рассматриваемой задаче являются сильно вытянутыми функциями скалярного произведения  $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}'$  [1,3], и порядок  $N(\mathbf{r})$  разложения сечения (см. (2.5)) может быть очень большим. Поэтому число расчетных величин может быть очень велико, и задача может быть эффективно решена только на компьютере, обладающем большой оперативной памятью и скоростью. Поэтому часто вместо задачи (2.1)-(2.5) используют приближенные модели, например, диффузионные. Они опираются на

представление решения  $\Psi(\mathbf{r}, \Omega)$  только его нулевым угловым моментом  $M_0^{c0}[\tilde{\Psi}]$ , подчиняющимся диффузионному уравнению [11], [12].

Эта модель широко используется для получения предварительных оценок тех или иных характеристик переноса фотонов. Однако попытка использовать формулы, базирующиеся на диффузионном приближении, для решения обратной задачи восстановления пространственно зависимых оптических параметров двухслойной среды приводит к ошибке порядка 50-100%. Поэтому в численном моделировании полей излучения в рассматриваемой задаче следует все же использовать уравнение переноса.

### 3. Методы решения уравнения переноса

#### 3.1. Сеточный алгоритм

В практических задачах уравнение (2.1) обычно решается методом Монте-Карло или сеточным методом. Среди сеточных методов широкое распространение получил *метод дискретных ординат* (МДО) [7], опирающийся на введение сетки по угловым переменным  $\{\gamma_m, \phi_m\}$ , замену интегралов (2.7) квадратурными формулами, введение сеток по пространственным переменным  $\mathbf{r}$  и замену дифференциальных уравнений для функций  $\Psi(\mathbf{r}, \gamma_m, \phi_m)$  сеточными уравнениями. Однако, в задачах, где источник излучения описывается дельта-функцией (см. (2.3)), при использовании МДО возникают трудности, связанные с сингулярностью решения в окрестности источника. В этом случае приходится специальными методами искать нерассеянную и однократно рассеянную компоненты интенсивности излучения от такого источника и по ним находить пространственно- распределенный источник для дальнейшего расчета многократно рассеянного излучения с помощью МДО.

Таким образом, решение задачи (2.1)–(2.4) ищем в форме [13]:

$$\Psi(\mathbf{r}, \Omega) = \Phi_0(\mathbf{r}, \Omega) + \Phi_1(\mathbf{r}, \Omega) + \Phi(\mathbf{r}, \Omega), \quad (3.1)$$

где  $\Phi_0(\mathbf{r}, \Omega)$ ,  $\Phi_1(\mathbf{r}, \Omega)$  – нерассеянная и однократно-рассеянная компоненты излучения соответственно; функция  $\Phi(\mathbf{r}, \Omega)$  отвечает интенсивности дважды и более рассеянного

излучения. Подставляя представление (3.1) в (2.1) и используя свойство аддитивности уравнения переноса, получаем краевую задачу для каждой составляющей решения.

Для нерассеянной компоненты  $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$

$$\hat{L}\Phi_0 = Q, \quad \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})|_{\mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{n} < 0} = 0. \quad (3.2)$$

Для однократно рассеянной компоненты  $\Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$

$$\hat{L}\Phi_1 = \hat{S}\Phi_0, \quad \Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})|_{\mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{n} < 0} = 0. \quad (3.3)$$

Для компоненты, отвечающей дважды и более рассеянному излучению  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$

$$\hat{L}\Phi = \hat{S}\Phi + \hat{S}\Phi_1, \quad (3.4)$$

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})|_{\mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{n} < 0} = A(\mathbf{r}) \int_{\mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{n}(\mathbf{r}) > 0} d\mathbf{\Omega}' [\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + \Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}')] \mathfrak{R}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}').$$

Решение задач (3.2), (3.3) для точечного источника находится аналитически в классе обобщенных функций [13, 14]. Имеем

$$\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = u(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \cdot \delta\left(\mathbf{\Omega} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}\right), \quad (3.5)$$

где

$$u(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi \cdot |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} f(\kappa_0) \exp(-\tau(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})) \cdot \eta(\kappa_0 - \gamma_{cs}).$$

Величина

$$\tau(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = \int_0^{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|} \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + \xi \cdot \mathbf{\Omega}) d\xi$$

есть оптический путь между точками  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}_0$ .

Решение  $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$  как функция переменной  $\mathbf{r}$  отлична от нуля только в пределах рассматриваемого конуса (см. Рис. 2), называемого *конусом излучения*, и для каждой точки  $\mathbf{r}$



этого конуса только в одном направлении, определяемым единичным вектором  $\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}$ , см.

Рис. 2. Правая часть в задаче (3.3) находится по формуле

$$\hat{S} \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = u(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \Sigma_s(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \cdot \mathbf{\Omega}). \quad (3.6)$$

Как и  $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ , эта функция отлична от нуля только в пределах конуса излучения. Поэтому решение (3.3) отлично от нуля в каждой точке  $\mathbf{r}(x, y, z)$  области  $G$  только в направлениях  $\mathbf{\Omega}$ , попадающих в телесный угол, под которым конус виден из этой точки. Этот угол задается интервалами  $(\varphi_{\min}, \varphi_{\max})$  и  $(\gamma_{\min}(\varphi), \gamma_{\max}(\varphi))$ , которые определяются в следующем разделе.

Для точки  $\mathbf{r}$  и направлений  $\mathbf{\Omega}(\gamma, \varphi)$ , ограниченных условиями  $\varphi_{\min} < \varphi < \varphi_{\max}$ ,  $\gamma_{\min}(\varphi) < \gamma < \gamma_{\max}(\varphi)$ , функция  $\Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$  определяется соотношением

$$\Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi} \int_{-\xi_1}^{-\xi_2} f(\kappa_0) \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0))}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|^2} \cdot \Sigma_s(\mathbf{r}_1) \cdot \rho(\mathbf{r}_1, \kappa_1) \exp(-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)) d\xi. \quad (3.7)$$

Здесь интегрирование выполняется вдоль лежащего внутри конуса отрезка характеристики направления  $\mathbf{\Omega}$ , проходящей через точку  $\mathbf{r}$ . Точка  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \xi \mathbf{\Omega}$  принадлежит этому отрезку.

Величина  $\kappa_0 = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|} \cdot \mathbf{\Omega}_{ax}$  есть косинус угла  $\theta_0$  между осью конуса и вектором, проведенным

из его вершины в точку  $\mathbf{r}_1$ , см. Рис. 3. Величина  $\kappa_1 = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|} \cdot \mathbf{\Omega} = \cos \theta_1$  определяется

аналогично.

Пределы интегрирования  $\xi_1$  и  $\xi_2$  суть расстояния от расчетной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  до точек пересечения с поверхностью конуса луча, проведенного через точку  $\mathbf{r}(x, y, z)$  в направлении, противоположном  $\mathbf{\Omega}(\gamma, \varphi)$ . Отрицательные пределы интегрирования  $-\xi_1$ ,  $-\xi_2$  связаны с тем, что эти расстояния измеряются от расчетной точки в направлении, противоположном вектору  $\mathbf{\Omega}(\gamma, \varphi)$ . Подставляя (3.7) в выражения (2.7), получаем

$$M_V^{cm}[\Phi_1] = \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} d\varphi \cos m\varphi \int_{\gamma_{\min}(\varphi)}^{\gamma_{\max}(\varphi)} d\gamma \Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) P_V^m(\gamma)$$

$$M_V^{sm}[\Phi_1] = \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} d\varphi \sin m\varphi \int_{\gamma_{\min}(\varphi)}^{\gamma_{\max}(\varphi)} d\gamma \Phi_1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) P_V^m(\gamma). \quad (3.8)$$

Моменты (3.8) образуют правую часть задачи (3.4). Специально отметим, что, поскольку моменты  $M_V^{cm}[\Phi_1]$  и  $M_V^{sm}[\Phi_1]$  во всех точках области расчета  $G$  суть гладкие, отличные от нуля функции, то и правая часть в задаче (3.4) обладает таким же свойством. Поэтому к решению этой задачи можно применить сеточную схему.

### 3.2. Особенности численного алгоритма

При программной реализации вычисления моментов (3.8) с помощью соотношений (3.7) предполагалось, что на точечный источник (2.3) наложены следующие ограничения

- ось конуса источника (вектор  $\mathbf{\Omega}_{ax}$ ) параллельна оси  $z$  задачи;
- геометрические размеры конуса источника не выходят за пределы области расчета  $G$ ;
- угловое распределение излучения в источнике зависит только от полярного угла между осью источника и направлением излучения от точечного источника в расчетную точку.

1. Для каждой расчетной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$ , лежащей вне конуса, найдем величины  $\varphi_{\min}$ ,  $\varphi_{\max}$  и функции  $\gamma_{\min}(\varphi)$ ,  $\gamma_{\max}(\varphi)$ , определяющие телесный угол, под которым конус излучения виден из этой точки. С этой целью введем цилиндрическую систему координат в области расчета с осью  $z$ , параллельной оси конуса. Для точки с прямоугольными координатами  $(x, y, z)$  цилиндрические координаты  $(\varphi_c, \rho_c, z_c)$  определяются формулами

$$\rho_c = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}, \quad z_c = z,$$

$$\varphi_c = \arccos((x - x_0)/\rho_c) \text{ при } y \geq y_0, \quad \varphi_c = 2\pi - \arccos((x - x_0)/\rho_c) \text{ при } y < y_0.$$

Радиус основания конуса равен  $R = z_0 \operatorname{tg} \alpha$  (см. Рис. 3). Углы  $\varphi_{\min}$ ,  $\varphi_{\max}$  определяются как углы между положительным направлением оси  $x$  и касательными к основанию конуса, проведенными из проекции точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  на плоскость  $x, y$  (см. Рис. 3, Рис. 4). Если проекция

точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  на плоскость  $z = 0$  лежит внутри основания конуса (то есть  $\rho_c < R$ ), то, очевидно,  $\varphi_{\min} = 0$ ,  $\varphi_{\max} = 2\pi$ . При  $\rho_c \geq R$  величины  $\varphi_{\max}$  и  $\varphi_{\min}$  находим из Рис. 4.

$$\varphi_{\min} = \begin{cases} 0 & \text{при } \rho_c < R, \\ \varphi_c - \arcsin(R/\rho_c) & \text{при } \rho_c \geq R, \end{cases} \quad \varphi_{\max} = \begin{cases} 2\pi & \text{при } \rho_c < R, \\ \varphi_c + \arcsin(R/\rho_c) & \text{при } \rho_c \geq R. \end{cases}$$

2. Теперь найдем функции  $\gamma_{\min}(\varphi)$ ,  $\gamma_{\max}(\varphi)$ . При любом  $\varphi$  из интервала  $(\varphi_{\min}, \varphi_{\max})$  плоскость, проходящая через расчетную точку перпендикулярно плоскости  $(x, y)$  под углом  $\varphi$  к оси  $x$ , пересекает конус источника по гиперболе, см. Рис. 3. Косинусы углов, под которыми видна эта часть гиперболы из расчетной точки, определяют пределы интегрирования по  $\gamma$  для данного  $\varphi$  в выражениях (3.8).

Поиск этих косинусов опирается на аналитические представления конуса с вершиной в точке  $\mathbf{r}_0(x_0, y_0, z_0)$  и углом раствора  $\alpha$

$$(\tilde{x} - x_0)^2 + (\tilde{y} - y_0)^2 = (\tilde{z} - z_0)^2 \operatorname{tg}^2 \alpha \quad (3.9)$$

и прямой, проходящей через точку  $\mathbf{r}(x, y, z)$  в направлении  $\mathbf{\Omega}(\gamma, \varphi)$

$$(\tilde{x} - x)/\sin \theta \cos \varphi = (\tilde{y} - y)/\sin \theta \sin \varphi = (\tilde{z} - z)/\cos \theta. \quad (3.10)$$

Предполагая, что  $\cos \theta \neq 0$ , исключим из выражений (3.9), (3.10) координаты  $\tilde{x}$  и  $\tilde{y}$ .

Приходим к квадратному уравнению для координаты  $\tilde{z}$

$$A \tilde{z}^2 + 2B \tilde{z} + C = 0, \quad (3.11)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{tg}^2 \theta - \operatorname{tg}^2 \alpha, \quad B = z_0 \operatorname{tg}^2 \alpha - z \operatorname{tg}^2 \theta + \operatorname{tg} \theta \rho_c \cos(\varphi_c - \varphi), \\ C &= z^2 \operatorname{tg}^2 \theta + \rho_c^2 - 2z \rho_c \operatorname{tg} \theta \cos(\varphi_c - \varphi) - z_0^2 \operatorname{tg}^2 \alpha. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Найдем дискриминант уравнения (3.11)

$$D = B^2 - AC = \rho_c^2 \left[ \operatorname{tg}^2 \alpha - \operatorname{tg}^2 \theta \sin^2(\varphi_c - \varphi) \right] + 2\rho_c \cos(\varphi_c - \varphi) \operatorname{tg}^2 \alpha \operatorname{tg} \theta (z_0 - z) + (z_0 - z)^2 \operatorname{tg}^2 \alpha \operatorname{tg}^2 \theta.$$

Очевидно, что условие касания конуса прямой реализуется, когда  $D = 0$ . Введем величину  $\sin \beta = \operatorname{tg} \alpha (z_0 - z) / \rho_c$  (это возможно, так как для точек, лежащих вне конуса величина  $\operatorname{tg} \alpha (z_0 - z) / \rho_c < 1$ ). Тогда условие  $D = 0$  принимает вид

$$\operatorname{tg}^2 \theta \left( \sin^2 \beta - \sin^2 (\varphi_c - \varphi) \right) + 2 \operatorname{tg} \theta \operatorname{tg} \alpha \sin \beta \cos (\varphi_c - \varphi) + \operatorname{tg}^2 \alpha = 0.$$

Отсюда находим два значения

$$\operatorname{tg} \theta' = -\operatorname{tg} \alpha / \sin (\beta + (\varphi_c - \varphi)), \quad \operatorname{tg} \theta'' = -\operatorname{tg} \alpha / \sin (\beta - (\varphi_c - \varphi)).$$

Анализ двух значений угла для касательных показал, что возможны несколько вариантов определения  $\gamma_{\min}(\varphi)$ ,  $\gamma_{\max}(\varphi)$ .

- Существует касательная из данной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  к гиперболе в рассматриваемом сечении конуса и точка касания находится в области расчета. В этом случае пределы интегрирования в (3.8) определяются как

$$\gamma_{\min}(\varphi) = -\sin(\beta + (\varphi_c - \varphi)) / \sqrt{\sin^2(\beta + (\varphi_c - \varphi)) + \operatorname{tg}^2 \alpha},$$

$$\gamma_{\max}(\varphi) = 1 \text{ при } \rho_c \leq R, \quad \gamma_{\max}(\varphi) = z / \sqrt{z^2 + \xi_3^2} \text{ при } \rho_c > R,$$

если точка касания окажется ниже области расчета то

$$\gamma_{\min}(\varphi) = z / \sqrt{z^2 + \xi_4^2}.$$

- Не существует касательных к гиперболе. В этом случае  $\gamma_{\min}(\varphi)$  и  $\gamma_{\max}(\varphi)$  определяются выражениями

$$\gamma_{\min}(\varphi) = z / \sqrt{z^2 + \xi_4^2},$$

$$\gamma_{\max}(\varphi) = 1 \text{ при } \rho_c \leq R, \quad \gamma_{\max}(\varphi) = z / \sqrt{z^2 + \xi_3^2} \text{ при } \rho_c > R.$$

Здесь  $\xi_3$ ,  $\xi_4$  суть координаты точек пересечения основания конуса и проекции на плоскость  $z = 0$  луча, проведенного через точку  $\mathbf{r}$  в направлении, противоположном  $\mathbf{\Omega}$ , см. Рис. 3.

3. Координаты точек пересечения с поверхностью конуса луча, проведенного через точку  $\mathbf{r}(x, y, z)$  в направлении  $\mathbf{\Omega}(\gamma, \varphi)$ , найдем из соотношений (3.10), (3.11). Далее легко находятся величины расстояний  $\xi_1$  и  $\xi_2$  от расчетной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  до этих точек пересечения.

4. Установив таким образом пределы интегрирования в равенствах (3.7), (3.8), находим моменты  $M_V^{cm}[\Phi_1]$  и  $M_V^{sm}[\Phi_1]$ , образующие правую часть задачи (3.4) для двух и более раз рассеянной части излучения  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ .

Очевидно, интегралы (3.7), (3.8) нельзя найти аналитически: их приходится заменять частичными суммами. При этом используется достаточно густая сетка по  $\xi$ ,  $\gamma$  и  $\varphi$ , своя для каждой расчетной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$ . Следует отметить, что, чем дальше расчетная точка от конуса излучения, тем меньше телесный угол, под которым из этой точки виден конус, и, следовательно, тем меньшую по размерам сетку по  $\gamma$  и  $\varphi$  приходится использовать для вычисления моментов (3.8) и тем меньших временных затрат требует эта процедура. Реализован алгоритм оптимального выбора узлов сетки по  $\gamma$  и  $\varphi$  и их количества для каждой пространственной точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$ .

Важным моментом является тот факт, что полное сечение  $\Sigma_t(\mathbf{r})$  и сечение рассеяния  $\Sigma_s(\mathbf{r})$  являются функциями пространственной координаты. В алгоритме оба сечения предполагаются кусочно-постоянными, и границы их разрывов задаются граничными поверхностями простых геометрических тел (цилиндров, параллелепипедов, шаров, конусов, призм и т.д.). Такое задание позволяет с достаточно высокой точностью и в достаточно удобной для пользователя форме учесть внутреннюю структуру биологической ткани. При вычислении интегралов (3.7) в рассматриваемом алгоритме все границы (в том числе криволинейные) разрыва сечений учитываются точно.

В заключение заметим, что описанный алгоритм реализован в программе РАДУГА-5.1(П) как в  $(x, y, z)$  геометрии (трехмерная область расчета без каких-либо предположений о симметрии решения), так и в  $(r, z)$  геометрии (область расчета – осесимметричный цилиндр). В этом случае учет симметрии области расчета приводит к уменьшению числа расчетных точек.

#### 4. Численные результаты

Оба варианта алгоритма были включены в программу РАДУГА-5.1(П) [8], предназначенную для численного решения краевых задач для уравнения переноса излучения методом дискретных ординат на компьютерах с параллельной архитектурой. Была выполнена серия методических расчетов для осесимметричного цилиндра высотой  $H = 50$  мм и радиусом  $R = 40$  мм, в центр верхней грани которого помещен точечный анизотропный источник апертуры  $\alpha = 7.5^\circ$  (см. Рис. 5). Во всех случаях предполагалось, что рассеяние в цилиндре моделируется известной индикатрисой Хенли-Гринштайна [1,3] с параметром асимметрии  $g$

$$\rho(\mathbf{r}, \chi) = \frac{1-g^2}{2 \left[ 1+g^2 - 2g\chi \right]^{3/2}}, \quad g = \int_{-1}^1 d\chi \rho(\mathbf{r}, \chi) \chi. \quad (4.1)$$

Также предполагалось, что на верхней грани цилиндра задано условие полного внутреннего отражения

$$\Re(r, H, \gamma, \gamma', \varphi, \varphi') = \begin{cases} 0.06 & \text{при } \gamma' \geq \gamma_0, \\ 1 & \text{при } \gamma' < \gamma_0, \end{cases} \quad \text{при } \gamma_0 = \cos \Theta_0, \quad A(r, H) \equiv 1,$$

где  $\Theta_0$  – угол полного внутреннего отражения, определяемый в соответствии в законами геометрической оптики по формуле  $\Theta_0 = \arcsin(1/n)$ , где  $n$  – показатель преломления среды. На нижнем торце цилиндра задавалось нулевое краевое условие

$$A(r, 0) \equiv 0.$$

на его внешней поверхности – либо нулевое условие ( $A(R, z) \equiv 0$ ), либо условие бесконечности ( $A(R, z) \equiv 1$ ), определяемые соотношением

$$\Re(R, z, \gamma, \gamma', \varphi, \varphi') = A(R, z) \Psi(r_1, z, \gamma, \varphi) \left[ \Psi(r_2, z, \gamma, \varphi) / \Psi(r_1, z, \gamma, \varphi) \right]^{r-r_1} \delta(\gamma - \gamma') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (4.2)$$

Подобное условие вводится со следующей целью.

При проведении расчета мы выбираем небольшую часть подвергнутой зондированию ткани, непосредственно прилегающую к точке зондирования. Чем меньше эта часть, тем меньше вычислительных ресурсов требуется для проведения расчета. С другой стороны, чем больше эта часть, тем большую точность имеет расчет. Краевое условие (4.2) вводится с целью

уменьшения размеров рассматриваемой области при сохранении точности расчета. Оно эквивалентно требованию об экспоненциальном убывании функции  $\Psi(r,z,\gamma,\varphi)$  при увеличении  $r$  (удалении от оси цилиндра) при фиксированном значении остальных переменных. Именно экспоненциально должно убывать решение уравнения переноса на значительном удалении от точечного источника.

В первом из расчетов цилиндр предполагался однородным, а в последующих – двухслойным (см. Рис. 5). При этом предполагалось, что тонкий верхний слой имитирует кожу, а толстый нижний – подкожные слои. Толщины верхнего слоя  $z_1$ , нижнего слоя  $z_2$ , полные сечения  $(\Sigma_t)^1$  и  $(\Sigma_t)^2$  первого и второго слоя соответственно, сечения рассеяния  $(\Sigma_s)^1$  и  $(\Sigma_s)^2$  первого и второго слоя соответственно, показатели преломления  $n$ , параметры асимметрии  $g$  индикатрисы Хеньи-Гринштайна, углы  $\alpha$  раствора точечного источника и значения альбеда  $A(R,z)$  на боковой поверхности цилиндра для каждой из рассматриваемых задач приведены в Табл. 1. Все размеры даны в мм, все сечения взаимодействия – в  $\text{мм}^{-1}$ . Остальные величины являются безразмерными.

Отметим, что индикатриса Хеньи-Гринштайна (4.1) при  $g = 0.8$  является сильно вытянутой, и ее представление разложением (2.5) требует использования слишком большого числа полиномов Лежандра. Поэтому в задачах 2–4 сингулярная часть индикатрисы была представлена дельта-функцией

$$\rho(\mathbf{r}, \chi) = \kappa \delta(1 - \chi) + (1 - \kappa) \tilde{\rho}(\mathbf{r}, \chi),$$

что позволило для аппроксимации регулярной части  $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, \chi)$  использовать всего 16 полиномов Лежандра [15].

Расчеты были выполнены на достаточно густых сетках. Пространственная сетка содержала  $169 \times 100$  ячеек, а угловая квадратура  $S_{26}$  состояла из 364 узлов, равномерно распределенных по единичной полусфере. Расчеты проводились на суперкомпьютере МВС–1000М с использованием 36 процессоров. Время счета существенно зависело от оптической толщины рассматриваемой среды  $\tau^* = z_1 (\Sigma_t)^1 + z_2 (\Sigma_t)^2$  (см. Табл. 2).

В качестве расчетного результата были приняты значения отраженного вверх излучения на прямой  $z = H$  (см. Рис. 5). Полученные по программе РАДУГА–5.1(П) функции представлены на Рис. 6-Рис. 9. Там же приведены экспериментальные данные [16] и величины, найденные нами с помощью диффузионной модели и методом Монте-Карло.

Во всех случаях полученные по программе РАДУГА–5.1(П) функции хорошо согласуются с экспериментальными данными. Аналогичное утверждение справедливо и для остальных методов, кроме диффузионного приближения в задаче 1, см. Рис. 6.

Необходимо отметить отсутствие нефизических осцилляций в решении программы РАДУГА–5.1(П) и сильные осцилляции в решении Монте-Карло (см. Рис. 7, Рис. 8). Такие осцилляции могут привести к существенным погрешностям при использовании содержащей их функции для решения обратной задачи. Причина этих осцилляций – в малом числе фотонов, детектируемых на больших расстояниях от источника. Увеличение числа зондирующих фотонов привело бы к устранению осцилляций, однако потребовало бы существенного увеличения времени счета.

Следует также обратить внимание на некоторое завышение полученного по программе РАДУГА–5.1(П) результата при больших  $\tau$  в задаче 3. Это завышение является естественным следствием использования условия бесконечности (4.2) и показывает, что данное условие нуждается в усовершенствовании.

## 5. Заключение

В настоящей работе рассмотрен специальный численный алгоритм решения прямой задачи биомедицинской диагностики – задачи определения полей интенсивности света от анизотропного точечного источника малой апертуры в многомерных областях в предположении, что оптические параметры среды известны. Метод опирается на сеточное решение стационарного уравнения переноса излучения с предварительным аналитическим определением интенсивности нерассеянного излучения и вычислением интенсивности однократно–рассеянного излучения по полуаналитическим формулам. Метод реализован для



двух геометрических моделей –  $(x, y, z)$  (трехмерная область без каких-либо предположений о симметрии решения) и  $(r, z)$  (осесимметричный цилиндр).

Результаты методических расчетов показывают, что предложенный алгоритм имеет более высокую точность по сравнению с приближенными диффузионными методами при решении прямой задачи и в перспективе при решении обратной задачи восстановления объемного поля оптических параметров по измеренному полю отраженного излучения. Кроме того, в отличие от метода Монте-Карло он порождает гладкое, не содержащее нефизических осцилляций решение, что также может иметь важное значение при решении обратных задач.

Авторы выражают глубокую благодарность Т.А. Гермогеновой за полезные обсуждения данной работы.

## 6. Литература

1. *Зимняков Д.А., Тучин В.В.* Оптическая томография тканей. Кантовая электроника, Т.32, №10, с.849-867, 2002.
2. *Призжев А.В., Тучин В.В., Шубочкин Л.П.* Лазерная диагностика в биологии и медицине. М.: Наука, 1989.
3. *Тучин В.В.* Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. Саратов: Изд-во Саратовского ун-та, 1998.
4. Special Section: Diffusing photons in turbid media. Yodh A., Trombrg B., Sevick-Muraca E., Pine D. – Guest editors. J. Opt. Soc. Am. A., Vol. A14, pp.136-342, 1997.
5. *Исмару А.* Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. М.: Мир, 1981.
6. *Кандидов В.П.* Метод Монте-Карло в нелинейной статистической оптике. // УФН, 1996, Т. 166, № 12, с.1309-1338.
7. *Басс Л.П., Волощенко А.М., Гермогенова Т.А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМатем. АН СССР, 1986.
8. *Басс Л.П., Гермогенова Т.А., Кузнецов В.С., Николаева О.В.* Радуга–5.1 и Радуга–5.1(П) – программы для решения стационарного уравнения переноса в 2–х и 3–х мерных геометриях на одно– и многопроцессорных ЭВМ // Сборник докладов семинара "Алгоритмы и программы для нейтронно–физических расчетов ядерных реакторов (Нейтроника–2001)". 30 октября–2 ноября 2001. Обнинск.

9. *Klose A.D., et all.* Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer - Part I: forward model // *JQSRT*, 2002, V. 72, P.691-713.
10. *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Гос. изд-во физ.-мат- лит. 1962, 1100 стр.
11. *Habetler G, Matkowsky B.* Uniform Asymptotic Expansion in Transport Theory with Small Mean Free Paths and the Diffusion Approximation // *J. Math. Phys.*, 1975, V. 16, P. 846–854.
12. *Гермогенова Т.А.* Регулярные компоненты асимптотических приближений к решениям уравнения переноса в оптически плотных средах // *ЖВМиМФ*, 1997, Т. 37, с.464–482.
13. *Гермогенова Т.А.* Задачи с сосредоточенными источниками в стационарной теории переноса. Препринт № 23 ИПМ им. М.В.Келдыша, 1971.
14. *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1967.
15. *Landesman M., Morel J.E.* Angular Fokker–Planck Decomposition and Representation Techniques // *Nucl. Sci. Eng.*, 1989, V. 103, P. 1–11.
16. *Fawzi Y.S., Abo-Bakr M. Y, El-Batanony M.H., and Kadah Y.M.* Determination of the optical properties of a two-layer tissue model by detecting photons migrating at progressively increasing depths // *Appl. Opt.*, 2003, V. 42, № 38, P. 6398–6411.

Табл. 1. Параметры задач

Задача	$z_1$	$z_2$	$(\Sigma_t)^1$	$(\Sigma_s)^1$	$(\Sigma_t)^2$	$(\Sigma_s)^2$	n	g	$\alpha$	$A(R, z)$
1	0	50	–	–	2.007	2	1.33	0.6	0.19	0
2	5	45	7.55	7.5	4.755	4.75	1.4	0.8	0.22	0
3	10	40	7.525	7.5	17.525	17.5	1.4	0.8	0.22	1
4	2	48	7.125	7.5	2.425	2.4	1.4	0.8	0.22	0

Табл. 2. Время счета (в минутах) на 36 процессорах суперкомпьютера МВС–1000М

Задача	Время счета	Оптическая толщина $\tau^*$
1	22	100.35

2	60	251.725
3	143	776.25
4	20	130.65

Подписи к рисункам

Рис. 1. Сферическая система координат задания вектора направления переноса.

Рис. 2. Область, заполняемая нерассеянными фотонами.

Рис. 3. Схема пересечения конуса излучения точечного источника лучом, исходящим из точки  $\mathbf{r}(x, y, z)$  под углом  $\Omega(\gamma, \varphi)$

Рис. 4. Геометрические построения в плоскости  $x, y$  для определения величин  $\varphi_{\min}, \varphi_{\max}$  при  $\varphi_c \in [0, \pi/2]$ .

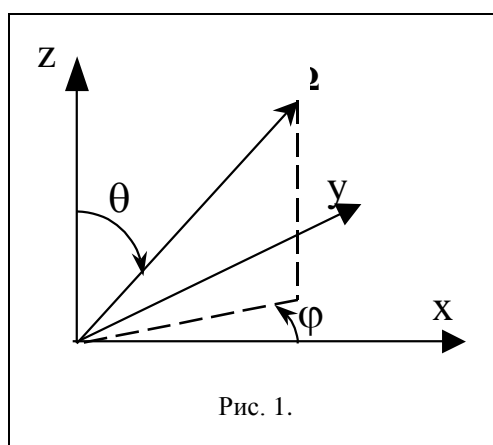
Рис. 5. Схема области расчета тестовой задачи.

Рис. 6. Отраженное излучение в задаче 1.

Рис. 7. Отраженное излучение в задаче 2.

Рис. 8. Отраженное излучение в задаче 3.

Рис. 9. Отраженное излучение в задаче 4.



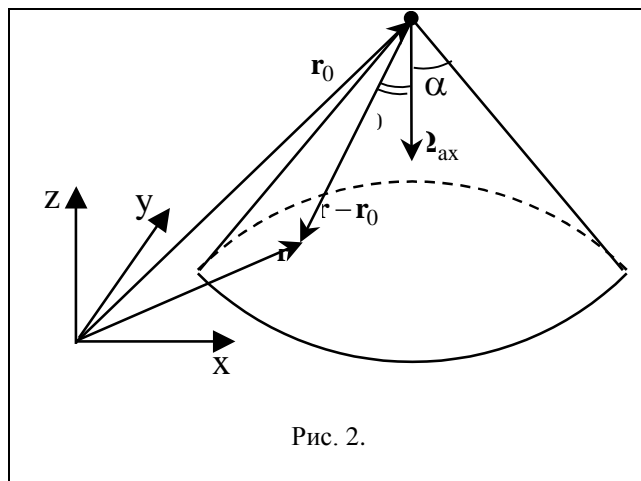


Рис. 2.

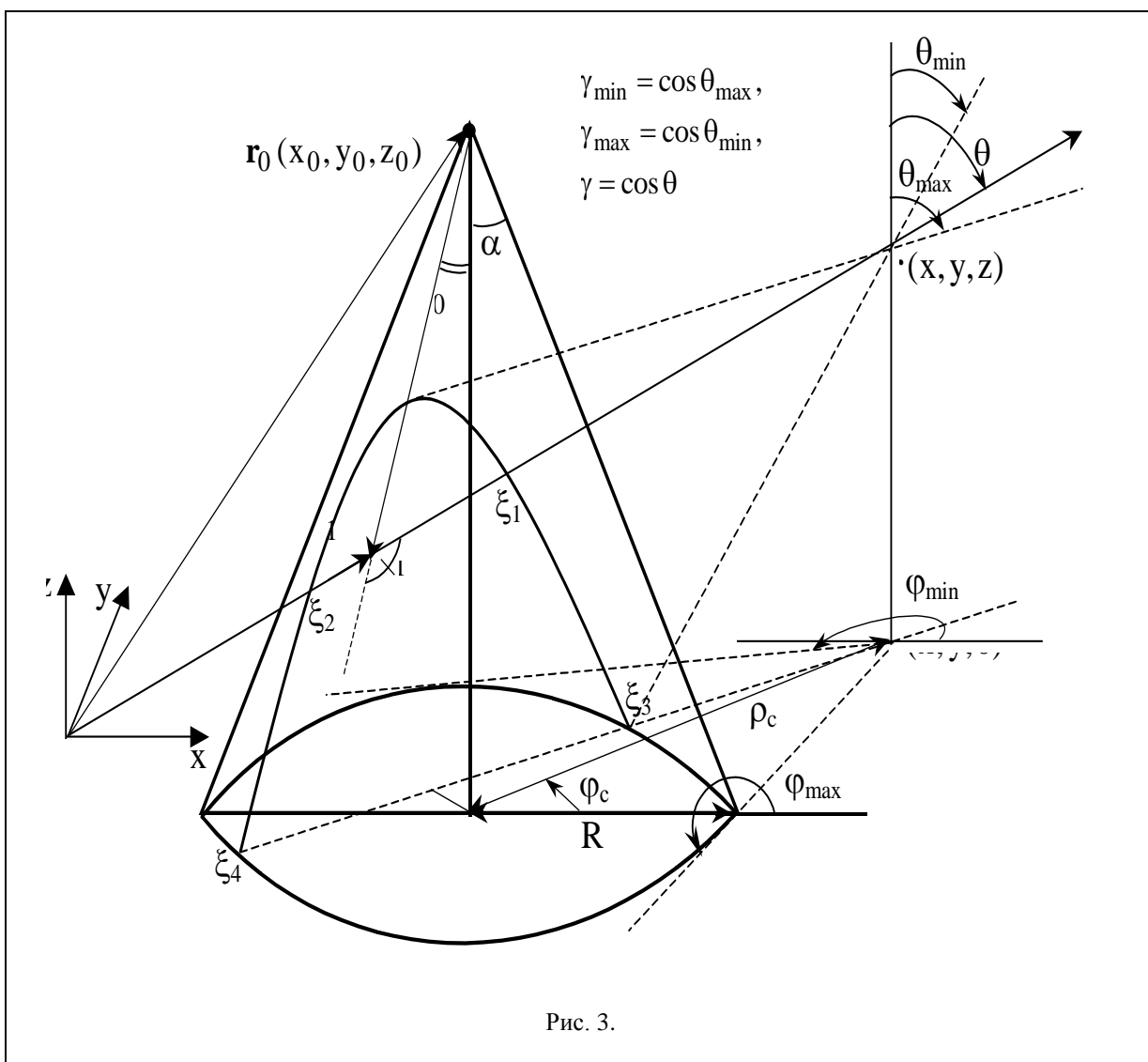


Рис. 3.

