

doi: 10.3788/gzxb20164502.0217001

无限介质中近场辐射率的 P5 近似

刘玲玲¹, 李晨曦¹, 万文博¹, 蒋景英^{1,2}, 贾梦宇¹, 张丽敏^{1,2}, 高峰^{1,2}, 赵会娟^{1,2}

(1 天津大学 精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072)

(2 天津市生物医学检测技术与仪器重点实验室, 天津 300072)

摘 要:针对辐射率的漫射近似、P3 近似等正向模型在描述小源探距离及低约化反照率介质下光子传输时存在的局限性, 推导了用于小源探距离低反照率无限媒质中各向同性稳态点光源下辐射传输方程在 P5 近似下的解析解, 并将 P3 近似、P5 近似计算的辐射率分别和蒙特卡洛模拟结果进行对比。结果表明: 在高约化反照率(0.97)条件下, P5 近似和蒙特卡洛模拟结果的最大相对误差为 13.17%, 而 P3 为 41.57%。在低约化反照率(0.69)条件下, 最大相对误差分别为 27.78%, 286.70%。在其他光学参数下, P5 近似与蒙特卡洛模拟的最大相对误差均小于 P3。在 P5 适用的范围内舍弃最大特征根相关项, 可以简化解析表达式, 提高计算速度, 且对 P5 的计算结果影响甚微。稳态辐射率测量系统仿体验证表明, 在高、低约化反照率介质中的小源探距离下, 由 P5 近似计算得到的辐射率和实验测量结果相符。

关键词:组织光学; 辐射率; 辐射传输方程; 勒让德多项式; P5 近似; 蒙特卡洛模拟; 正向模型

中图分类号: Q63

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2016)02-0217001-8

P5 Approximation for Near-field Radiance in Infinite Medium

LIU Ling-ling¹, LI Chen-xi¹, WAN Wen-bo¹, JIANG Jing-ying^{1,2}, JIA Meng-yu¹,
ZHANG Li-min^{1,2}, GAO Feng^{1,2}, ZHAO Hui-juan^{1,2}

(1 College of Precision Instruments and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

(2 Tianjin Key Laboratory of Biomedical Detecting Techniques and Instruments, Tianjin 300072, China)

Abstract: In order to describe photon migration at small source detector separation and in media with low reduced albedo where diffuse approximation and P3 approximation have limitations, the solution of radiance transfer equation in the P5 approximation for the case of an isotropic continuous-wave point source in an infinite medium was derived. The P3 and P5 were compared with Monte Carlo simulation to verify the correctness of the derived solution. Under the condition of high reduced albedo (0.97), the maximum relative error between P3 and Monte Carlo simulation is about 41.57% while that between P5 and Monte Carlo simulation is just about 13.17%. In the case of low reduced albedo (0.69), the maximum relative error is about 27.78%, 286.70%, respectively. In the situations of other optical parameters, the maximum relative errors between P5 and Monte Carlo simulation are also no more than that between P3 and Monte Carlo simulation. By abandoning the expressions related to the maximum eigenvalue which has little impact to the result of P5 calculation in the validity condition of P5, a simpler analytical expression can be obtained to accelerate the calculation of P5 approximation. Experiments on a solid phantom with a continuous-wave radiance measurement system are conducted and the results show that the radiance calculated from P5 approximation meets well with that from the experimental measuring at small source detector separation and in media with high or low albedo.

Key words: Tissue optics; Radiance; Radiance transfer equation; Legendre polynomial; P5

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 81271618, 81371602, 61475115, 61475116, 81401453)、天津市自然科学基金重点项目(Nos. 13JCZDJC28000, 14JCQNJC14400, 15JCZDJC31800)、高等学校博士学科点专项科研基金(No. 20120032110056)和高等学校学科创新引智计划(No. B07014)资助

第一作者:刘玲玲(1989-),女,博士研究生,主要研究方向为组织光学的基础理论。Email: lingling@tju.edu.cn

导师(通讯作者):赵会娟(1963-),女,教授,博士,主要研究方向为组织光学和生物医学光子学成像。Email: huijuanzhao@tju.edu.cn

收稿日期:2015-07-17; **录用日期:**2015-12-08

<http://www.photon.ac.cn>

approximation; Monte Carlo simulation; Forward model

OCIS Codes: 170.3660; 290.7075; 290.1990; 060.2390; 120.4530

0 引言

间质光学参数测量被广泛用于间质激光治疗的在线优化^[1]、内部器官如早期前列腺癌的检测^[2]和牛奶的快速检测等. 稳态光子密度测量方法需要测量多个源探距离(Source Detector Separation, SDS)下的光子密度分布^[3-4], 因此加剧了对内部器官的损伤程度. 而稳态辐射率测量方法仅需在固定的源探距离下测量不同方向的辐射率, 有利于实现微创检测, 因此引起了广泛的关注^[5]. 另外, 和光子密度测量方式相比, 辐射率测量方式对光学参数的变化更加敏感, 并且具有较强的抗噪能力^[6-7].

基于稳态辐射率测量的光学参数反构的原理为: 根据描述辐射率与组织体光学参数之间关系的光子传输正向模型, 将特定源探距离下的多角度辐射率测量值代入反构算法, 从而估算出光学参数^[8], 因此精准的光子传输正向模型对光学参数的准确评估非常重要. Barajas 等发展了用于计算辐射率的蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)模拟模型^[6], 能够准确地模拟光在组织中的传输过程, 然而其运行耗时较长且不适用于临床应用. Liemert 等推导出了点光源在无穷媒质中辐射传输方程(Radiative Transfer Equation, RTE)的解^[9], 但由于格林函数以递推的形式给出, 因此推导过程的物理意义不明确且表达式形式复杂. 作为 RTE 的一阶近似, 扩散近似(Diffuse Approximation, DA)被广泛用于近似描述光子在生物组织体中的传播过程, 然而 DA 具有较为严格的适用范围^[10]: 首先, 约化反照率需大于 0.98; 其次, 源探距离大于 10 倍约化自由程. 然而, 对于一些特殊组织(如病变的前列腺), 光学参数并不满足 DA 的适用条件. 如在 732 nm 波长下, 人体前列腺癌(Prostate Cancer, PCa)的吸收系数和约化散射系数分别为 $0.37 \pm 0.24 \text{ cm}^{-1}$ 及 $14 \pm 11 \text{ cm}^{-1}$ ^[11], 此时约化反照率为 0.97; 而人体良性前列腺增生(Benign Prostatic Hyperplasia, BPH)的吸收系数和约化散射系数分别为 5.5 cm^{-1} , 12.5 cm^{-1} , 此时约化反照率仅为 0.69^[12]. 另外, 对于双光纤稳态辐射率测量方式, 可实现的最小 SDS 约为 0.11 cm ^[13], 在该状况下, 对于 BPH 或 PCa 的光学参数, 该 SDS 对应于 1.6 及 2.0 倍约化自由程, 亦不满足 DA 条件. 为了实现稳态辐射率间质测量方法在小 SDS 及低约化反照率介质中的应用, 研究者探索了 RTE 的高阶近似来描述的光子传输. Dickey 推导了半无限媒质下的 RTE 的 P3 近似解^[14], 并且证明在 SDS 为 2.5 倍约化自由程且约化反照率为 0.79 下, 辐射率的 P3 近似值与实验测量值有较好的符合度. 但是其结果也表明, 对更小 SDS 及低约化反

照率介质下, 针对辐射率测量的 P3 近似并不可靠.

为获得针对用于辐射率测量前列腺光学参数的更为准确的正向模型, 本文推导了无限媒质中 RTE 在 P5 近似下有明确表达式的解, 并对所得到的解进行了模拟及仿体实验验证. 同时研究了 P5 近似对解的改善原因, 并且对特征根进行了讨论.

1 P5 近似下 RTE 解析解的推导

RTE 的表达式为

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{s}} \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \mu_t \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \mu_s \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') d\hat{\mathbf{s}}' + Q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \quad (1)$$

式中, $\Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 表示位于空间位置 \mathbf{r} 处沿着 $\hat{\mathbf{s}}$ 方向的辐射率, 其单位为 $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1}$; $\mu_t = \mu_a + \mu_s$ 为总衰减系数, μ_a 为吸收系数, μ_s 为散射系数, $p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}')$ 为散射相位函数, $Q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 为光源项.

为了得到各向同性稳态点光源下 RTE 的 P5 近似的解, 本文考虑较简单的平行平板光源模型, 点光源模型可视为平行平板光源模型的一种极限情况.

1.1 平行平板光源下的推导

平行平板光源与 yoz 平面平行, 沿 x 轴方向的厚度为 $2d$, 边界为 $x = \pm d$, 宽度为无穷大. 辐射率在三维空间中具有六个自由度, 为了计算方便, 需要对其进行简化. 首先, 由于媒质具有球形对称特性, 在计算时仅考虑 x 轴方向, 即将三维坐标 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 简化为一维坐标 x ; 其次, 将辐射率及光源项中的方向分量 $\hat{\mathbf{s}}$ 简化为 $\hat{\mathbf{s}}$ 与 x 轴的方向矢量 $\hat{\mathbf{x}}$ 之间的内积 $\omega = \cos\theta = \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{x}}$. 由此, RTE 中的 $\Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 及 $Q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 可分别转化为 $\Phi(x, \omega)$ 及 $Q(x, \omega)$.

对辐射率 $\Phi(x, \omega)$ 、相位函数 $p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}')$ 及光源项 $Q(x, \omega)$ 分别以勒让德多项式展开, 并取前六项, 即

$$\begin{cases} \Phi(x, \omega) = \sum_{n=0}^5 \frac{2n+1}{4\pi} \phi_n(x) P_n(\omega) \\ p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = \sum_{n=0}^5 \frac{2n+1}{4\pi} g_n P_n(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}') \\ Q(x, \omega) = \sum_{n=0}^5 \frac{2n+1}{4\pi} q_n(x) P_n(\omega) \end{cases} \quad (2)$$

式中, P_n 为 n 阶勒让德多项式, $n = 0, 1, \dots, 5$, ϕ_n 、 g_n 、 q_n 分别为 $\Phi(x, \omega)$ 、 $p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}')$ 及光源项 $Q(x, \omega)$ 的勒让德多项式展开为 n 阶后对应的各阶系数. 将 Henyey - Greenstein 相位函数代入式(2), 通过计算可得 $g_n = g^n$, g 为各向异性因子. 将式(2)代入式(1), 对公式两边同乘 $P_m(\omega)$, 并对方程两边沿全立体角进行积分, 由于勒让德多项式具有正交性, 可以得到一阶线性微分方程组为

$$\frac{1}{2n+1} \left(n \frac{d\phi_{n-1}(x)}{dx} + (n+1) \frac{d\phi_{n+1}(x)}{dx} \right) + \sigma_n \phi_n(x) = q_n \quad (3)$$

式中, $n=0, \dots, 5, \sigma_n \equiv \mu_a + \mu_s(1-g^n), \sigma_0 = \mu_a$.

首先推导无源区 ($|x| \geq d$) 辐射率的各阶展开系数. 在无源区, 各阶 q_n 均为 0, 因此辐射率符合式(3)所述微分方程组的通解, 由此求解出的辐射率的第 n 阶勒让德展开系数应当表现为 6 个指数函数之和为

$$\phi_n(x) = \sum_{i=0}^5 B_n \exp(\lambda_i x) \quad (4)$$

式中, B_n 为待定系数, λ_i 为通过式(3)所述六个微分方程求解出的第 i 个特征根. 将式(4)代入式(3), 可得到与之对应的齐次方程组为

$$\begin{pmatrix} \mu_a & \lambda & & & & & \\ \lambda & 3\sigma_1 & 2\lambda & & & & \\ & 2\lambda & 5\sigma_2 & 3\lambda & & & \\ & & 3\lambda & 7\sigma_3 & 4\lambda & & \\ & & & 4\lambda & 9\sigma_4 & 5\lambda & \\ & & & & 5\lambda & 11\sigma_5 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_n \\ B_n \\ B_n \\ B_n \\ B_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0 \quad (5)$$

特征根存在非零解的条件为: 位于式(5)左侧的 6 阶方阵的行列式为 0, 由此可得关于特征根 λ 的六次特征方程. 令 $k = \lambda^2$, 六次方程则转化为三次方程, 整理得

$$k^3 + \alpha k^2 + \beta k + \gamma = 0 \quad (6)$$

式中

$$\begin{cases} \alpha = -(675 \cdot \mu_a \cdot \sigma_1 + 700 \cdot \mu_a \cdot \sigma_3 + 704 \cdot \mu_a \cdot \sigma_5 + 875 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3 + 880 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_5 + 891 \cdot \sigma_4 \cdot \sigma_5) / 225 \\ \beta = (2625 \cdot \mu_a \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3 + 2640 \cdot \mu_a \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_4 \cdot \sigma_5 + 2772 \cdot \mu_a \cdot \sigma_3 \cdot \sigma_4 \cdot \sigma_5 + 3465 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3 \cdot \sigma_4 \cdot \sigma_5) / 225 \\ \gamma = -(231 \cdot \mu_a \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3 \cdot \sigma_4 \cdot \sigma_5) / 5 \end{cases} \quad (7)$$

利用 Cardan 公式^[15], 令

$$\begin{cases} p = \frac{1}{3} \alpha^2 - \beta \\ q = \frac{2}{27} \alpha^3 - \frac{1}{3} \alpha \beta + \gamma \end{cases} \quad (8)$$

三次方程的解为

$$\lambda_i^2 = 2 \sqrt{\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\varphi + 2(i-1) \times 180^\circ}{3}\right) - \frac{\alpha}{3} \quad (9)$$

式中

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{3q}{2p} \sqrt{\frac{p}{3}}\right) \quad (10)$$

将系数 B_n 表述为仅与 B_n 相关的形式, 即 $B_n = B_n \iota_n(\lambda_i)$, 其中 $n=0, \dots, 5, \lambda_i \in \{\pm \lambda_1, \pm \lambda_2, \pm \lambda_3\}$, 通过式(5)求解出 $\iota_n(\lambda_i)$ 为

$$\begin{cases} \iota_0(\lambda_i) \equiv 1 \\ \iota_1(\lambda_i) \equiv -\frac{\mu_a}{\lambda_i} \\ \iota_2(\lambda_i) \equiv -\frac{1}{2} + \frac{3\mu_a \sigma_1}{2\lambda_i^2} \\ \iota_3(\lambda_i) \equiv -\frac{5\mu_a \sigma_1 \sigma_2}{2\lambda_i^3} + \frac{4\mu_a + 5\sigma_2}{6\lambda_i} \\ \iota_4(\lambda_i) \equiv \frac{3(3\mu_a \sigma_1 - \lambda_i^2)}{8\lambda_i^2} - \frac{\left(\frac{7}{6} \sigma_3 (4\mu_a \lambda_i^2 + 5\sigma_2 \lambda_i^2) - \frac{35}{2} \mu_a \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3\right)}{4\lambda_i^4} \\ \iota_5(\lambda_i) \equiv \frac{15(3\mu_a \sigma_1 - \lambda_i^2)}{88\sigma_5 \lambda_i} - \frac{\left(\frac{35\sigma_3 (4\mu_a \lambda_i^2 + 5\sigma_2 \lambda_i^2)}{6} - 175\mu_a \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 / 2\right)}{44\sigma_5 \lambda_i^3} \end{cases} \quad (11)$$

在无源区 ($|x| \geq d$), 特征根仅取负值 $-\lambda_1, -\lambda_2, -\lambda_3$, 即辐射率只含有衰减项, 令其系数为 $B_0 = R, B_1 = S, B_2 = T$. 正特征根为 $B_3 = B_4 = B_5 = 0$. 将特征根及 B_n 代入式(4)可得无源区辐射率的各阶系数为

$$\begin{aligned} \phi_n(x) = & R \iota_n(\lambda_1) \exp[-\lambda_1(|x| - d)] + S \iota_n(\lambda_2) \cdot \\ & \exp[-\lambda_2(|x| - d)] + \\ & T \iota_n(\lambda_3) \exp[-\lambda_3(|x| - d)] \end{aligned} \quad (12)$$

其次推导有源区 ($|x| \leq d$), 辐射率的各阶展开系数包括式(3)所述微分方程的通解及特解. 有源区通解的求解过程与无源区相同, 但其特征根的可能取值为 $\pm \lambda_1, \pm \lambda_2, \pm \lambda_3$, 由于 $\phi_n(x)$ 关于 $x=0$ 对称, 因此令 $B_0 = B_1 = D/2, B_2 = B_3 = E/2, B_4 = B_5 = F/2$, 将特征根及 B_n 代入式(4), 可得有源区辐射率各阶展开系数的通解. 本文仅考虑各向同性光源, 因此有 $q_0 = 1, q_n = 0 (n \geq 1)$, 由此可求得式(3)中各阶非齐次微分方程的特解为

$$\phi_n^*(x, \omega) = \begin{cases} q_0 / \mu_a & n=0 \\ 0 & n=1, 2, \dots, 5 \end{cases} \quad (13)$$

由此可得有源区辐射率的各阶展开系数, 根据式(11)中 $\iota_n(\lambda_i)$ 的奇偶特性, 将结果化简为双曲函数的形式, 即

$$\phi_n(x) = \begin{cases} D \iota_n(\lambda_1) \cosh(\lambda_1 x) + E \iota_n(\lambda_2) \cosh(\lambda_2 x) + F \iota_n(\lambda_3) \cosh(\lambda_3 x) + q_0 / \mu_a & n=0 \\ D \iota_n(\lambda_1) \sinh(\lambda_1 |x|) + E \iota_n(\lambda_2) \sinh(\lambda_2 |x|) + F \iota_n(\lambda_3) \sinh(\lambda_3 |x|) & n=1, 3, 5 \\ D \iota_n(\lambda_1) \cosh(\lambda_1 x) + E \iota_n(\lambda_2) \cosh(\lambda_2 x) + F \iota_n(\lambda_3) \cosh(\lambda_3 x) & n=4, 6 \end{cases} \quad (14)$$

考虑到辐射率在光源的边界处连续, 将 $x=d$ 处边界的连续性作为边界条件, 即令此处有源区与无源区

的各阶 $\phi_n(x)$ 相等, 用于求解式(12)与式(14)中的待定系数. 引入边界条件后, 通过整理可得到

$$\begin{pmatrix} \cosh(\lambda_1 d) & \cosh(\lambda_2 d) & \cosh(\lambda_3 d) & -1 & -1 & -1 \\ t_1(\lambda_1) \sinh(\lambda_1 d) & t_1(\lambda_2) \sinh(\lambda_2 d) & t_1(\lambda_3) \sinh(\lambda_3 d) & t_1(\lambda_1) & t_1(\lambda_2) & t_1(\lambda_3) \\ t_2(\lambda_1) \cosh(\lambda_1 d) & t_2(\lambda_2) \cosh(\lambda_2 d) & t_2(\lambda_3) \cosh(\lambda_3 d) & -t_2(\lambda_1) & -t_2(\lambda_2) & -t_2(\lambda_3) \\ t_3(\lambda_1) \sinh(\lambda_1 d) & t_3(\lambda_2) \sinh(\lambda_2 d) & t_3(\lambda_3) \sinh(\lambda_3 d) & t_3(\lambda_1) & t_3(\lambda_2) & t_3(\lambda_3) \\ t_4(\lambda_1) \cosh(\lambda_1 d) & t_4(\lambda_2) \cosh(\lambda_2 d) & t_4(\lambda_3) \cosh(\lambda_3 d) & -t_4(\lambda_1) & -t_4(\lambda_2) & -t_4(\lambda_3) \\ t_5(\lambda_1) \sinh(\lambda_1 d) & t_5(\lambda_2) \sinh(\lambda_2 d) & t_5(\lambda_3) \sinh(\lambda_3 d) & t_5(\lambda_1) & t_5(\lambda_2) & t_5(\lambda_3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ E \\ F \\ R \\ S \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -q_0/\mu_a \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

将求出的相关待定系数代入式(12)、(14),并与式(2)及勒让德多项式结合,则可分别求解出平行平板光源下,有源区及无源区辐射率的 P5 近似。

1.2 各向同性点光源下的推导

各向同性点光源辐射率的 P5 近似的求解在前文的基础上得到,即令 $d \rightarrow 0, q_0 \rightarrow \infty, 2dq_0 \rightarrow 1$,可知 $\exp(-\lambda d) \rightarrow 1, q_0 \sinh(\lambda d) \rightarrow \lambda/2$ 。

此时,除光源点外所有区域均可视为无源区,可求解出

$$\begin{cases} R = \lambda_1 [t_2(\lambda_2)t_4(\lambda_3) - t_2(\lambda_3)t_4(\lambda_2)]/\epsilon \\ S = \lambda_2 [t_2(\lambda_3)t_4(\lambda_1) - t_2(\lambda_1)t_4(\lambda_3)]/\epsilon \\ T = \lambda_3 [t_2(\lambda_2)t_4(\lambda_3) - t_2(\lambda_2)t_4(\lambda_1)]/\epsilon \end{cases} \quad (16)$$

式中

$$\begin{aligned} \epsilon = & 2\mu_a (t_2(\lambda_1)t_4(\lambda_2) - t_2(\lambda_2)t_4(\lambda_1) - \\ & t_2(\lambda_1)t_4(\lambda_3) + t_2(\lambda_3)t_4(\lambda_1) + \\ & t_2(\lambda_2)t_4(\lambda_3) - t_2(\lambda_3)t_4(\lambda_2)) \end{aligned} \quad (17)$$

代入式(12),在无限媒质下,光子密度的 P5 近似及其他各阶 $\phi_n(x)$ 为

$$\begin{cases} \phi_0(x) = R \exp(-\lambda_1 x) + S \exp(-\lambda_2 x) + \\ \quad T \exp(-\lambda_3 x) \\ \phi_n(x) = R t_n(\lambda_1) \exp(-\lambda_1 x) + \\ \quad S t_n(\lambda_2) \exp(-\lambda_2 x) + T t_n(\lambda_3) \exp(-\lambda_3 x) \end{cases} \quad (18)$$

式中, $n=1, 2, \dots, 5$ 。

由此已经推导出点光源模型下沿 x 轴方向的辐射率的各阶展开系数.利用以下关系^[9],将结果推广至任意距离光源为 $r=|r|$ 的辐射率的各阶展开系数。

$$\phi_0(r) = -\frac{1}{2\pi r} \frac{d}{dx} \phi_0(x) \Big|_{x=r} = D' \kappa_0(-\lambda_1 r) + E' \kappa_0(-\lambda_2 r) + F' \kappa_0(-\lambda_3 r) \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \phi_n(r) = & D' t_n(\lambda_1) \kappa_n(\lambda_1 r) + E' t_n(\lambda_2) \kappa_n(\lambda_2 r) + \\ & F' t_n(\lambda_3) \kappa_n(\lambda_3 r) \end{aligned} \quad (20)$$

式中

$$\begin{cases} D' = \left[\frac{-D\lambda_1^2}{2\pi} \right], E' = \left[\frac{-E\lambda_2^2}{2\pi} \right], F' = \left[\frac{-F\lambda_3^2}{2\pi} \right] \\ \kappa_0(x) = \frac{\exp(x)}{x} \\ \kappa_1(x) = \left(1 - \frac{1}{x} \right) \frac{\exp(x)}{x} \\ \kappa_n(x) = \kappa_{n-2}(x) - \frac{2n-1}{x} \kappa_{n-1}(x) \quad n > 2 \end{cases} \quad (21)$$

综合勒让德多项式、式(2)、(19)、(20)、(21),可得

到无限媒质中点光源下辐射率的 P5 近似为

$$\begin{aligned} \Phi(\hat{r}, \hat{s}) = & \sum_{n=0}^5 \frac{2n+1}{4\pi} [D' t_n(-\lambda_1) \kappa_n(-\lambda_1 r) + \\ & E' t_n(-\lambda_2) \kappa_n(-\lambda_2 r) + F' t_n(-\lambda_3) \kappa_n(-\lambda_3 r)] \cdot \\ & P_n(\hat{r}, \hat{s}) \end{aligned} \quad (22)$$

2 小源探距离下 P5 近似的模拟验证

作为黄金标准,本文利用 MC 模拟分别产生辐射率“真实值”,把点光源全无限媒质下辐射率的 P3^[10]、P5 近似和 MC 模拟在相同测量角度下对比.为了方便对比,辐射率在 0° 处进行归一化处理。

针对引言所提及的前列腺组织,在小 SDS = 0.11 cm,高 $a' = 0.97$,低 $a' = 0.69$ 下对所发展的解进行验证,其中 $a' = \mu'_s / (\mu'_s + \mu_a)$ 为约化反照率, $\mu'_s = \mu_s(1-g)$ 为约化散射系数。

针对各向同性点光源照射下全无限均匀媒质中辐射率的求解问题,通过改进 Wang Lihong 提出的 MCML 算法,发展了相对应的 MC 模拟方法,具体改进如下:

对于各项同性点光源的模拟是通过将初始光子在光源点位置进行一次各向同性散射实现的.对于位置为 r 、方向为 \hat{s} 的辐射率 $\Phi(r, \hat{s})$ 的模拟,通过收集满足以下三个条件的光子实现:

- ① $\|u - r\| < R_d$;
- ② $v \cdot \hat{s} < \cos\left(\arcsin\left(\frac{NA}{n}\right)\right)$.

其中, $u = (u_x, u_y, u_z)$ 为光子位置, $v = (v_x, v_y, v_z)$ 为光子方向, R_d 为探测区域的半径、NA 为探测器的数值孔径, n 为介质的折射率。

本文在进行 MC 模拟时,组织体的厚度设置为 100 cm,各向异性因子为 0.9,所用光子数为 1×10^8 , $R_d = 0.01$ cm, NA = 0.08, $n = 1.4$ 。

2.1 高 a' 下的验证

为了验证高 a' 下 P3、P5 近似和 MC 的对比,设 SDS = 0.11 cm,光学参数 $\mu_a = 0.37$ cm⁻¹, $\mu_s = 140$ cm⁻¹, $g = 0.9$,此时 $a' = 0.97$.图 1 给出了 P3、P5 及 MC 的对比,并给出了 P3、P5 与 MC 之间的相对误差.考虑到 $180^\circ \sim 360^\circ$ 与 $0^\circ \sim 180^\circ$ 是对称的,这里只展示了 $0^\circ \sim 180^\circ$ 的结果.可见, P5 和 MC 模拟的结果符合得很好,之间的相对误差小于 13.17%,而 P3 和 MC 模

拟之间相差比较大,尤其是在 120° 至 180° 之间,相对误差最大可达41.57%。

考虑到前述的BPH和PCa的光学参数,分别考查光学参数 $\mu_s = 14.0 \text{ cm}^{-1}$ 和 $\mu_s = 125 \text{ cm}^{-1}$,而 $\mu_a = 0.37 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.9$ 的情况.由MC模拟出的此两组光学参数下 $0^\circ \sim 180^\circ$ 内辐射率的最大差异为19.10%,最大差异在 162° 处.结合图1中的相对误差结果可以推断,当P3和P5作为正向模型分别用于前列腺癌早期检测时,基于P5模型进行光学参数测量有可能分辨BPH和PCa,而基于辐射率测量及P3的光学参数重构不足以分辨BPH和PCa.

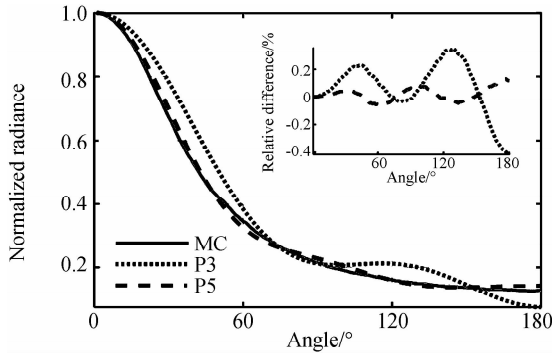


图1 在 $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$ 且 $a'=0.97$ 下,P3、P5近似下的辐射率和MC的对比.插图为相对误差

Fig. 1 Comparison of the radiance calculated from P3 and P5 approximation with that from MC under the conditions: $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$, $a'=0.97$. The inset indicates the relative difference

2.2 低 a' 下的验证

对小SDS低 a' 下P5近似作为正向模型的正确性进行验证,光学参数设 $\mu_a = 5.5 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s = 125 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.9$ 即 $a' = 0.69$.图2为 $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$ 下P3近似、P5近似和MC的对比及对应的相对误差.P5和MC模拟之间的相对误差均小于27.78%,然而P3和MC模拟之间的相对误差最大可达286.70%.图2的

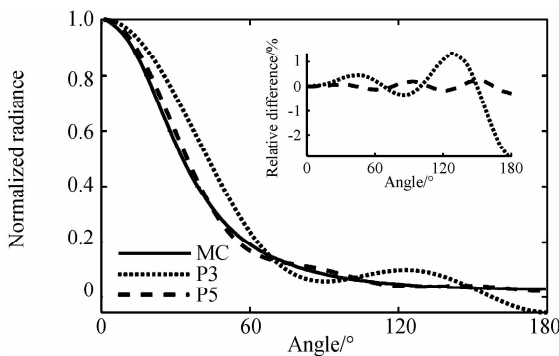


图2 在 $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$ 且 $a'=0.69$ 下,P3、P5近似下的辐射率和MC的对比.插图为相对误差

Fig. 2 Comparison of the radiance calculated from P3 and P5 approximation with that from MC under the conditions: $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$, $a'=0.69$. The inset indicates the relative difference

结果显示出在小SDS及低 a' 情况下,和P3近似相比,P5近似的结果和MC模拟的结果更加接近。

2.3 不同光学参数下的验证

为了进一步验证P5作为辐射率的正确性,在小源探距离 $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$ 及不同光学参数下,将P3、P5近似分别和MC对比,所考察的 μ_a 为 1.0 cm^{-1} 、 1.5 cm^{-1} 、 2.5 cm^{-1} 、 3.5 cm^{-1} 、 4.5 cm^{-1} , μ_s 、 g 分别固定在 125 cm^{-1} 、 0.9 ,即 a' 为 0.74 至 0.93 .图3给出了此时P3、P5近似分别和MC模拟的相对误差.结果显示在小SDS及不同光学参数下,P5近似的结果比P3近似均更加接近MC计算结果.由图3可看出在 a' 在 $0.74 \sim 0.93$ 之间内,相对误差没有突变. $a' = 0.97$ (2.1节中)、 $a' = 0.93$ 、 $a' = 0.69$ (2.2节中)及 $a' = 0.74$ 下,P5比P3近似结果均更加接近MC计算结果.因此, $a' = 0.93 \sim 0.97$ 、 $a' = 0.69 \sim 0.74$ 范围内,P5近似的计算结果均优于P3近似.

从图1至图3的结果可以推断出,和P3近似相比,在小SDS及 $0.69 \leq a' \leq 0.97$ 的情况下,P5近似作为正向模型均能够更加精确描述光子在无限媒质下的传输.

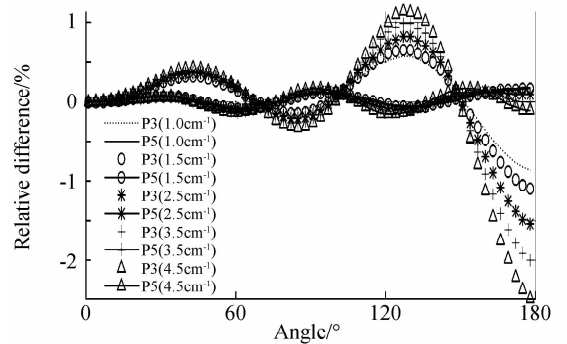


图3 在 $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$, $\mu_s = 125 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.9$, $\mu_a = 1.0 \text{ cm}^{-1} \sim 4.5 \text{ cm}^{-1}$ 下,P3、P5近似和MC模拟对比的相对误差

Fig. 3 Relative difference between the radiance calculated from P3 and P5 approximation and that from MC, respectively under the conditions: $\text{SDS}=0.11 \text{ cm}$, $\mu_s = 125 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.9$, μ_a from 1.0 cm^{-1} to 4.5 cm^{-1}

2.4 高阶项勒让德矩的讨论

通过将式(22)和文献[9]中P3近似的表达式相对比,可以认为P5近似对解的改善主要源于表达式中的第四阶和第五阶勒让德矩.

图4为P3、仅含有前四阶勒让德矩的P5近似(以下简称残缺P5)和MC的对比,光学参数及源探距离与图2相同.结果表明,和P3近似相比,第四阶勒让德矩对解有所改善.其原因是:由图1及图2可以看出P3近似在 180° 有极小值.而 $P_4(\hat{r}, \hat{s})$ 在 180° 有极大值^[16],因此第四阶勒让德矩会对解有改善.

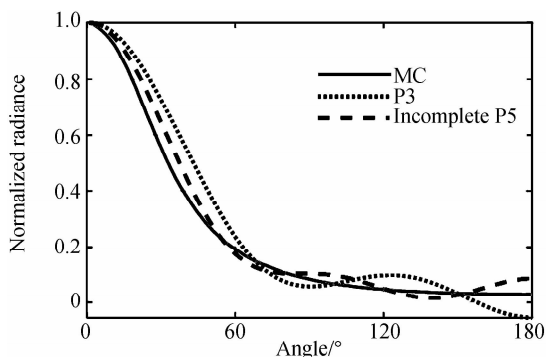


图4 SDS=0.11 cm, 且 $a'=0.69$ 下, P3、残缺 P5 近似下的辐射率和 MC 模拟的对比

Fig. 4 Comparison of the radiance calculated from P3 and incomplete P5 approximation with that from MC under the conditions: SDS=0.11 cm, $a'=0.69$

由图4和图2的P5近似对比还可以看出,第五阶勒让德矩对解也有很大的改善,其原因为:第五阶勒让德矩能够体现出光子散射前向和后向的不对称性,不对称性在低 a' 、近场区域非常重要^[16].首先,奇数阶勒让德矩的周期为 2π ,在 0° 处取到极大值,在 180° 处取到极小值,这和组织体具有前向散射性吻合.其次,在第五阶勒让德矩中包含 $\sigma_5 = \mu_a + \mu_s(1-g^5)$, g^5 能够很灵敏地反映出光子散射的各向异性程度.在小 SDS = $1.6l_t' \sim 2.0l_t'$ 下,光子没有被完全散射成迷向,仍保持较强的前向散射性.因此第五阶勒让德矩通过 g^5 对解有改善.

2.5 特征根 λ 的讨论

如式(9)所示,在P5近似中, λ_i^2 的大小取决于 $\cos(\frac{\varphi + 2(i-1) \times 180^\circ}{3})$ 项中 i 的不同取值.当 $0.69 \leq a' \leq 0.97$ 时, $18.9^\circ \leq \varphi \leq 19.8^\circ$. 本文取其平均值 19.4° 作为特例进行讨论.当 $i=1, 2, 3$ 时, $\frac{\varphi + 2(i-1) \times 180^\circ}{3}$ 分别为 $6.5^\circ, 126.5^\circ, 246.5^\circ$, 通过式(9)推出 $\lambda_1^2 \geq \lambda_3^2 \geq \lambda_2^2$. 以光学参数 $\mu_a = 0.37 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s = 140 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.9$ 为例, $\lambda_1 = 137.5549$, $\lambda_2 = 3.9720$, $\lambda_3 = 48.7861$. 为了研究不同特征根对P5近似下辐射率的影响,本文将研究仅去掉 λ_1 或 λ_3 的相关项的P5近似,并分别简称为 D_{λ_1} _P5 及 D_{λ_3} _P5. 图5为去掉式(22)中的 $D'l_n(-\lambda_1)\kappa_n(-\lambda_1 r)$ 项的 D_{λ_1} _P5、P5 近似和 MC 的对比,及其相对差异 $((D_{\lambda_1}$ _P5 - P5)/P5), 其中 SDS=0.11 cm.

图5中,最大相对差异为 0.003 103%, 因此在高约化反照率 ($a'=0.97$) 下仅去掉 λ_1 相关项对P5近似下辐射率影响甚微.此外,本文也计算了低约化反照率情况 ($a'=0.69$, SDS=0.11 cm) 下不同特征根对P5近似的影响.在此状况下, D_{λ_1} _P5 与 P5 的最大差异为 0.013 578%, 因此可以推断去掉 λ_1 相关项对P5近似几乎没有影响.但发现 D_{λ_1} _P5 与 P5 在低约化反照率情况 ($a'=0.69$, SDS=0.11 cm) 下的最大差异可达

81.52%, 在高约化反照率情况 ($a'=0.97$, SDS=0.11 cm) 下, D_{λ_3} _P5 与 MC 之间的相对误差最大差异为 19.73%. 但 2.1 中 $\mu_s = 140 \text{ cm}^{-1}, 125 \text{ cm}^{-1}$, 而 $\mu_a = 0.37 \text{ cm}^{-1}, g = 0.9$ 用于 MC 模拟, 计算结果最大相对误差为 19.10%, 小于 19.73%, 可知 D_{λ_3} _P5 不足以分辨 BPH 和 PCa. 因此, 去掉 λ_3 相关项将在辐射率的计算中引入很大的误差. 其原因为: λ_2 为最小的特征根, 称作渐进衰减系数, 对应 DA 中的有效衰减系数, 描述的是扩散光的衰减^[17]; 而 λ_1, λ_3 均为瞬时衰减系数, 描述的是小 SDS 下弹道光线的衰减. λ_3 已经足够描述 SDS = $1.6l_t' \sim 2.0l_t'$ 下弹道光线的衰减, 因此不需要更大的衰减系数 λ_1 . 本文还计算了更小的源探距离 (例如 SDS = 0.055 cm) 时, 发现 λ_1 具有很大的作用, 但因为此时 P5 已不再适用, 本文不做讨论.

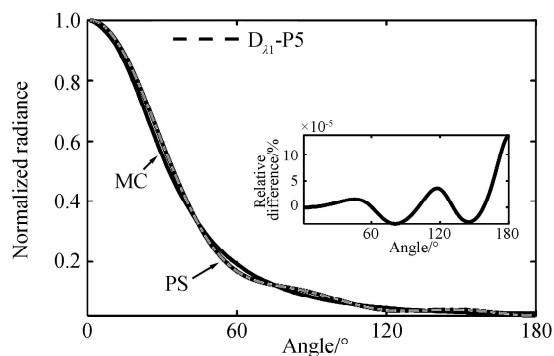


图5 在 SDS=0.11 cm 且 $a'=0.97$ 下, P3、 D_{λ_1} _P5 近似下的辐射率和 MC 的对比. 插图为相对误差

Fig. 5 Comparison of the radiance calculated from P3 and D_{λ_1} _P5 approximation with that from MC under the conditions: SDS=0.11 cm, $a'=0.97$. The inset indicates the relative difference

综合以上, 可以得出结论: 在P5适用的范围内, 若去除 λ_1 的相关项, 对P5的计算结果几乎没有影响. 而去掉 λ_3 相关项将在辐射率的计算中引入很大的误差. 分别计算 P3 近似、P5 近似及 D_{λ_1} _P5 近似 10000 次, P5 近似所用时间较 P3 近似所用时间增加了 58.15%, 而 D_{λ_1} _P5 增加了 41.20%, 速度提高了 16.95%. 但残缺 λ_1 P5 近似计算精度几乎没有改变, 解析式简单, 计算时间减短, 可望应用于成份的在线快速光学检测.

3 小源探距离下 P5 近似的实验验证

仿体验证采用的稳态辐射率测量系统原理如图6. 其中点光源通过将卤钨灯 (HL-2000, Ocean Optics, USA) 耦合至球形光纤 (IP85, Medlight, Switzerland) 实现, 侧照光纤实现光收集, 再经与侧照光纤耦合的光谱仪 (HR2000, Ocean Optics, USA) 实现辐射率的测量. 使用印度墨水及 Intraplid 配制高低两种约化反照率的液态仿体, 光学参数分别为高 a' 组: $a' = 0.97$, $\mu_a = 0.37 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s' = 14.0 \text{ cm}^{-1}$; 低 a' 组: $a' = 0.69$,

$\mu_a = 5.5 \text{ cm}^{-1}$, $\mu'_s = 12.5 \text{ cm}^{-1}$. 实验中,步进电机控制球形光纤的水平平移及侧照光纤的旋转,实现对特定 SDS 下特定角度的辐射率的探测.

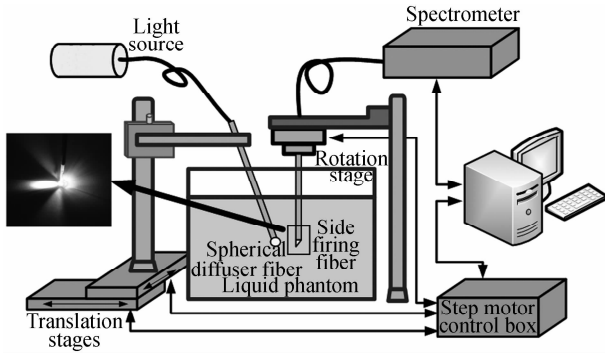


图 6 稳态辐射率测量系统

Fig. 6 The continuous-wave radiance measurement system

图 7 为基于前述两个液态仿体在 $\text{SDS} = 0.11 \text{ cm}$ 时的辐射率测量值及 P5 近似值的对比结果. 结果表明,本文发展的辐射率的 P5 近似与实际测量结果整体符合程度较高,但因为部分光子在经过侧照光纤外壁时,被侧照光纤的外侧包层再次折射与反射进入液态仿体,因此辐射率 P5 近似的平均水平大于实验测量结果,这与 GRABTCHAK 等人的研究结论基本一致^[13]. 根据图 2、3 中的 MC 可知在 $0^\circ \sim 180^\circ$ 辐射率随着角度的增大而平滑下降,但在 $70^\circ, 180^\circ$ 及 300° 左右的辐射率测量值中出现局部上升. 产生此种情况的原因是该侧照光纤除 0° 主探测角度外,在上述三个角度处存在另外多个次极大探测方向,导致收集的光子增多. 图 6 的插图是对该侧照光纤上述问题的验证结果,当把该侧照光纤与光源相连接,可发现在 $70^\circ, 180^\circ$ 及 300° 左右的次极大发射,根据光的可逆性,可以推论该侧照光纤在上述三个角度处具有更强的光接收能力. 目前实验系统还在进一步优化中,相关研究成果将在后续发表.

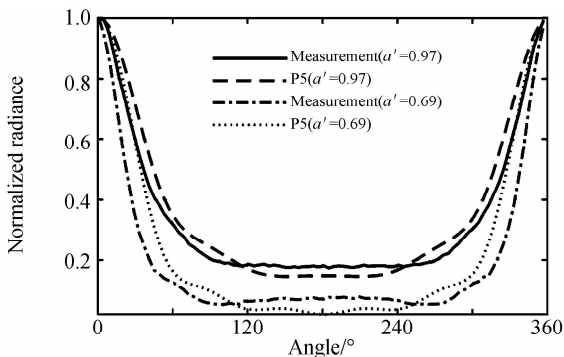


图 7 $\text{SDS} = 0.11 \text{ cm}$, 且 $a' = 0.69$ 及 $a' = 0.97$ 下, P5 近似下的辐射率和实验测量值的对比

Fig. 7 Comparison of the radiance calculated by P5 approximation with that from experimental measuring values under the conditions: $\text{SDS} = 0.11 \text{ cm}$, $a' = 0.69$ and 0.97

4 结论

本文推导了用于描述点光源及无限媒质下光子传输的针对辐射率的 P5 近似,并将该 P5 近似分别和 P3 近似及 MC 进行对比. 结果表明在小间质测量的典型最小 SDS 下 (0.11 cm), 高约化反照率 ($a' = 0.97$)、低约化反照率 ($a' = 0.69$) 及其他光学参数下 ($a' = 0.69 \sim 0.97$), P5 近似和 MC 模拟的结果很接近,证明了该 P5 近似下 RTE 解的正确性. 其次,本文讨论了勒让德高阶矩对解的改善作用. 第四阶勒让德矩由于其在 180° 处为极大值,因此对 P3 近似在 180° 的极小值有所改善,第五阶勒让德矩能够体现光子前向和后向散射的不对称性,二者共同作用得到比较稳定 RTE 的 P5 近似的解.

最后,本文研究了 P5 近似的特征方程三个特征根的作用,发现仅使用 λ_2, λ_3 即可在 P5 使用的范围内有效地描述光子的衰减系数,即舍弃 λ_1 相关项带来的误差可以忽略,令计算速度有所提高. 此外本文采用稳态辐射率测量系统在高、低约化反照率介质中的小 SDS 下的辐射率测量验证了 P5 近似的准确性.

参考文献

- [1] ZHU T C, FINLAY J C, HAHN S M. Determination of the distribution of light, optical properties, drug concentration, and tissue oxygenation in-vivo in human prostate during motexafin lutetium-mediated photodynamic therapy [J]. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 2005, **79**(3): 231-241.
- [2] GRABTCHAK S, MONTGOMERY L G, WHELAN W M. Feasibility of interstitial near-infrared radiance spectroscopy platform for ex vivo canine prostate studies; optical properties extraction, hemoglobin and water concentration, and gold nanoparticles detection [J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2014, **19**(5): 057003.
- [3] ZHAO Hui-juan, JIA Meng-yu, WANG Wei-ya, et al. A cervical cancer screening system based on an opto-electrical joint measurement [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2015, **44**(10): 0417001.
赵会娟, 贾梦宇, 王微雅, 等. 用于宫颈癌筛查的光电联合检测系统 [J]. *光子学报*, 2015, **44**(10): 0417001.
- [4] ZHAO Hui-juan, WANG Qian, ZHOU Xiao-qing, et al. Fluorescence tomographical system and a novel data-extraction-extension-method for small animal imaging [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, **43**(10): 1011002.
赵会娟, 王倩, 周晓青, 等. 小鼠荧光层析成像系统级数据提取扩展方法 [J]. *光子学报*, 2014, **43**(10): 1011002.
- [5] CHIN L C L, WHELAN W M, VITKIN I A. Information content of point radiance measurements in turbid media: implications for interstitial optical property quantification [J]. *Applied Optics*, 2006, **45**(9): 2101-2114.
- [6] BARAJAS O, BALLANGRUD A M, MILLER G G, et al. Monte Carlo modeling of angular radiance in tissue phantoms and human prostate; PDT light dosimetry [J]. *Physics in Medicine and Biology*, 1997, **42**(9): 1675 - 1687.
- [7] CHIN L C L, LLOYD B, WHELAN W M, et al. Interstitial point radiance spectroscopy of turbid media [J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, **105**(10): 102025.

- [8] SHI Zhen-zhi, ZHAO Hui-juan, CHEN Wen-liang, *et al.* Derivation of optical properties from steady-state spatially resolved diffuse reflectance measurement at small source-detector separations [J]. *Journal of Tianjin University*, 2012, **45**(6): 552-559.
史振志, 赵会娟, 陈文亮, 等. 近光源下基于稳态空间分辨漫反射测量的光学参数反构[J]. 天津大学学报, 2012, **45**(6): 552-559.
- [9] LIEMERT A, KIENLE A. Analytical Green's function of the radiative transfer radiance for the infinite medium [J]. *Physical Review*, 2011, **83**(3): 036605.
- [10] HULL E L, FOSTER T H. Steady-state reflectance spectroscopy in the P3 approximation [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2001, **18**(3): 584-599.
- [11] ZHU T C, DIMOFTE A, FINLAY J C, *et al.* Optical properties of human prostate at 732nm measured in-vivo during motexafin lutetium mediated photodynamic therapy [J]. *Photochem. Photobiol.*, 2005, **81**(1): 96-105.
- [12] WEI Hua-jiang, XING Da, HE Bo-hua, *et al.* Absorption and scattering characteristics of human benign prostatic hyperplasia tissue with Ti:Sapphire laser irradiation *in vitro* [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, **28**(1): 10-13.
魏华江, 邢达, 何博华, 等. 良性前列腺增生组织对钛宝石激光的吸收和散射特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, **28**(1): 10-13.
- [13] GRABTCHAK S, PALMER T J, FOSCHUM F, *et al.* Experimental spectro-angular mapping of light distribution in turbid media [J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2011, **17**(6): 067007.
- [14] DICKEY D, BARAJAS O, *et al.* Radiance modelling using the P3 approximation [J]. *Physics in Medicine and Biology*, 1998, **43**(12): 3559-3570.
- [15] LIEMERT A, KIENLE A. Analytical solutions of the simplified spherical harmonics equations [J]. *Optics Letters*, 2010, **35**(20): 3507-3509.
- [16] FARIS G W. PN approximation for frequency-domain measurements in scattering media [J]. *Applied Optics*, 2005, **44**(11): 2058-2071.
- [17] CHAI C G, LUO Q M, LIU Q. Analytical solution of P3 approximation to radiative transfer equation for an infinite homogenous media and its validity [J]. *Journal of Modern Optics*, 2008, **55**(21): 3611 - 3624.