Письма в ЖЭТФ, том 103, вып. 8, с. 568 – 571

Волны фотонной плотности во временном и частотном представлении

В. Л. Кузьмин[1)]

С.-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого, 195251 С.-Петербург, Россия

С.-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 19 января 2016 г.

После переработки 9 марта 2016 г.

На основе описания переноса излучения в терминах уравнения Бете–Солпитера выполнено моделирование Монте-Карло диффузии фотонов во временном и частотном представлениях. В рамках развитого подхода рассчитаны гистограмма обратно рассеянного ультракороткого импульса во временном представлении в области типичных для биотканей параметров среды и параметры диффузных волн фотонной плотности в частотном представлении. Результаты находятся в согласии с полученными ранее экспериментальными данными. Исследована зависимость временной гистограммы от анизотропии фазовой функции.

DOI: 10.7868/S0370274X16080026

Перенос оптического излучения в сильно неоднородных средах продолжает вызывать повышенный интерес благодаря прежде всего биомедицинским приложениям (см. [1–5]). Подход, известный как спектроскопия диффузных волн фотонной плотности (ДВФП) [6, 7], состоит в зондировании биоткани модулированным лазерным излучением с частотами модуляции до сотен мегагерц в ближней инфракрасной области.

Сигналы ДВФП измеряются в частотном представлении и определяют амплитуду и фазу модулированной составляющей фотонной плотности. Интересна также задача о миграции фотонов во временном представлении [8–10], когда исследуется временная развертка, или гистограмма, рассеянного излучения источника ультракоротких импульсов.

Метод Монте-Карло широко применяется в моделировании миграции фотонов в тканях и фантомах биотканей [11–14], в основном на платформе широкоизвестного алгоритма MCML (Monte Carlo modeling of light) [13].

В настоящем сообщении, применяя развитый нами алгоритм Монте-Карло [15, 16], основанный на стохастическом вычислении итерационного ряда решения уравнения Бете–Солпитера по порядкам рассеяния, мы выполняем моделирование гистограмм ультракоротких импульсов во временном представлении и сигналов ДВФП в частотном представлении в замечательном согласии с экспериментом и асимптотическими результатами диффузионной теории. Мы численно показываем, что временная гистограмма может быть описана как серия вкладов последовательных кратностей рассеяния, подтверждая это согласием результатов моделирования с аналитическим решением диффузионного уравнения.

В [17] были выполнены измерения и моделирование сигналов ДВФП и определены приведенный коэффициент рассеяния μ_s' и коэффициент поглощения μ_a для раствора интралипида в широком интервале частот модуляции ω для двух длин волн инфра-красного излучения в частотно-доменной технике ДВФП. Полученные численные результаты оказываются в хорошем согласии с экспериментальными данными и с предсказаниями диффузионного приближения.

Уравнение Бете–Солпитера. Уравнение Бете–Солпитера для произведения комплексно-сопряженной пары полей, являющееся теоретико-полевой основой для уравнения переноса, можно представить в виде

$$\Gamma_\omega(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1\,|\,\mathbf{k}_f,\mathbf{k}_i)=\mu_s p(\mathbf{k}_f\mathbf{k}_i)\delta(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)+ \\ +\mu_s\int d\mathbf{r}_3 p(\mathbf{k}_f\mathbf{k}_{23})\Lambda_\omega(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_3)\Gamma_\omega(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_1\,|\,\mathbf{k}_{23},\mathbf{k}_i).\quad(1)$$

Пропагатор $\Gamma_\omega(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1\,|\,\mathbf{k}_f,\mathbf{k}_i)$ описывает перенос излучения из точки $\mathbf{r}_1$ в точку $\mathbf{r}_2$ с единичными волновыми векторами входа и выхода $\mathbf{k}_i$ и $\mathbf{k}_f$; $\mathbf{k}_{ij}$ – единичный вектор вдоль направления $\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j$; $p(\mathbf{k}_f\mathbf{k}_i)$ –

[1)]e-mail: kuzmin_vl@mail.ru

фазовая функция, пропагатор однократного рассеяния

$$\Lambda_\omega(r) = r^{-2}\exp(-\mu r + i\omega r/c), \quad (2)$$

$\mu = \mu_s + \mu_a$ – коэффициент экстинкции, c – скорость света в среде.

Пусть z – декартова координата, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\perp, z)$, нормальная границе полубесконечной среды, $z > 0$. Для нормального падения тонкого пучка на границу $z = 0$ в окрестности $\mathbf{r}_1 = 0$ и нормального обратного рассеяния, регистрируемого в малой окрестности σ на расстоянии ρ вдоль поверхности от источника, интенсивность осциллирующей составляющей ДВФП посредством итерирования уравнения (1) можно представить как сумму по порядкам рассеяния:

$$J_\omega(\rho) = \sum_{n\le n_{sc}} J_\omega^{(n)}(\rho) + \Delta J_\omega(\rho). \quad (3)$$

Вклад кратностей рассеяния с $n \le n_{sc}$ вычисляется как статистическое среднее в рамках метода Монте-Карло по выборке N_{ph} падающих фотонов:

$$J_\omega^{(n)}(\rho) = \frac{1}{N_{ph}}\sum_{i=1}^{N_{ph}} W_n^{(i)} \exp\left(-\mu z_n^{(i)} + i\frac{\omega}{c}R_n^{(i)}\right), \quad (4)$$

где $W_n^{(i)}/N_{ph}$ – вес, $R_n^{(i)}$ – оптический путь i-го фотона из точки источника $\mathbf{r}_s$ в точку детектора $\mathbf{r}_d$, испытавшего n актов рассеяния в точках $\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n$. Процедура Монте-Карло в рамках стандартного алгоритма MCML [13] моделирует случайную последовательность (траекторию) координат актов рассеяния. Представление интенсивности рассеяния (4) в виде среднего экспонент $\exp(-\mu z_n^{(i)})$, описывающих затухание излучения после последнего акта рассеяния на пути к границе, на порядок ускоряет вычисления в сравнении со стандартным алгоритмом MCML. Алгоритм основан на детектировании фотонов, покидающих систему, и требует больших объемов выборки даже при использовании параллельных алгоритмов [14]. В развитом нами методе [15–17] каждый фотон дает вклад в сигнал, сокращая время вычислений на порядок при том же соотношении сигнал/шум, что позволяет использовать алгоритм в реальной биомедицинской практике.

Вещественная и мнимая части $J_\omega(\rho)$ (4) определяют измеряемые сигналы ДВФП в частотном домене, ее амплитуду $A = |J_\omega(\rho)|$ и фазу $\theta = \mathrm{arctg}[\mathrm{Im}\, J_\omega(\rho)/\,\mathrm{Re}\, J_\omega(\rho)]$.

Диффузия света во временном представлении. Слагаемое $\Delta J_\omega(\rho)$ описывает вклад высших кратностей, $n > n_{sc}$. Полагая, что при высоких кратностях диффузионное приближение становится оправданным для любой геометрии, мы используем его для вычисления $\Delta J_\omega(\rho)$, отождествляя временную зависимость с зависимостью от кратностей рассеяния.

В неограниченной среде решение диффузионного уравнения для интенсивности рассеяния на расстоянии $r = |\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_s|$ в момент времени t после излучения ультракороткого импульса представляется в виде [8]

$$I^{(0)}(r,t) \sim (4\pi Dct)^{-3/2}\exp\left(-\frac{r^2}{4Dct} - \mu_a ct\right), \quad (5)$$

где параметр $D = (\mu' + \mu_a)^{-1}/3$ известен как коэффициент диффузии фотона. Пусть R_n – оптический путь, пройденный фотоном до момента n-го акта рассеяния. Тогда $t_n = R_n/c$ – время, прошедшее с момента излучения. При высоких кратностях средняя длина пути оказывается равной сумме средних длин экстинкции, $R_n = nl$. Таким образом, заменяя в (5) время на $t_n = nl/c$, можно интерпретировать (5) как вклад n-кратного рассеяния.

Используя для учета ограниченности среды метод зеркальных отображений, решение для геометрии полупространства $z > 0$ представляют в виде разности решений (5) для источника и его зеркального образа [8], выбранного так, чтобы эта разность обращалась в нуль на плоскости, экстраполированной за пределы физической границы $z = 0$ на расстояние z^*:

$$I(\mathbf{r}_d, \mathbf{r}_s, t) = I^{(0)}(|\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_s|, t) - I^{(0)}(|\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_m|, t). \quad (6)$$

В нашем эксперименте источник и приемник расположены на поверхности среды, $\mathbf{r}_s = (\mathbf{r}_{s\perp}, 0)$ и $\mathbf{r}_d = (\mathbf{r}_{d\perp}, 0)$, на расстоянии $\rho = |(\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_s)_\perp|$ друг от друга, а зеркальный источник – в $\mathbf{r}_m = (\mathbf{r}_{s\perp}, z_m)$, $z_m = -2z^*$. Мы полагаем $z^* \approx 0.71 l_{tr}$ в соответствии с решением Милна [18]. Таким образом, заменяя t на дискретный аргумент $t_n = nl/c$, вклад отдельных кратностей рассеяния можно вычислить как ряд функций (6).

На рис. 1 представлена временная развертка рассеянного ультракороткого светового импульса, полученная с помощью описанного алгоритма Монте-Карло, и проведено сравнение с результатами диффузионного приближения. Укажем на сильную зависимость величины пика от расстояния источник–приемник ρ в согласии с (5) и (6) в области оптических параметров, типичных для биообъектов в маммографии, диагностике мозга [3, 5, 19, 20], в мониторинге пролежней [21]. Мы выбрали оптические параметры $\mu_s' = 1\,\text{мм}^{-1}$ и $\mu_a = 0.001\,\text{мм}^{-1}$, полученные при моделировании однопроцентного раствора

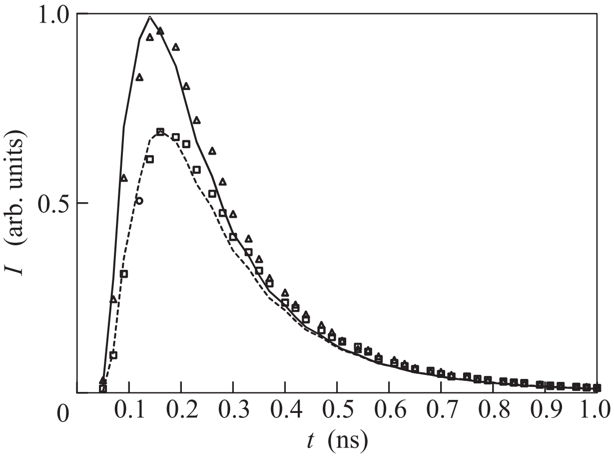

Рис. 1. Развертка по времени t обратнорассеянного импульса, рассчитанная для двух расстояний от источника: $\rho = 10\,\text{мм}^{-1}$ (треугольники) и $11\,\text{мм}^{-1}$ (квадраты). Сплошная и штриховая линии – диффузионное приближение для тех же расстояний соответственно; $\mu_s' = 1\,\text{мм}^{-1}$, $\mu_a = 0.001\,\text{мм}^{-1}$

интралипида [17], и положили в фазовой функции Хеньи–Гринштейна [18] параметр анизотропии рассеяния равным $g = 0.8$ в согласии с [17]. Укажем на хорошее согласие с диффузионным приближением.

На рис. 2 приведены гистограммы, полученные методом Монте-Карло для сред с различной анизотропией рассеяния, $g = 0.5$ и 0.8. Видно, что в

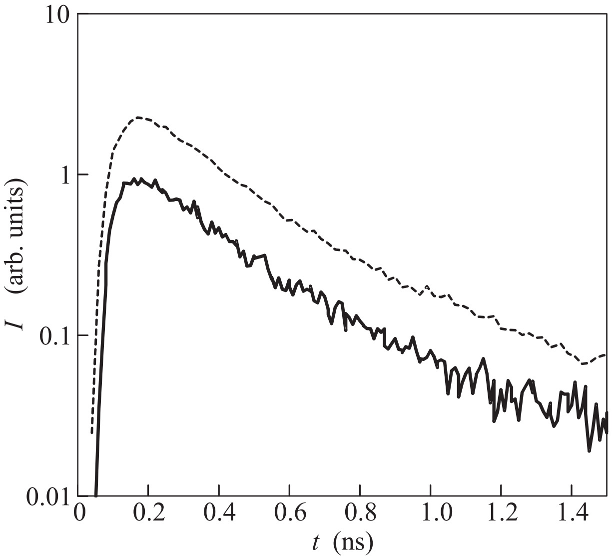

Рис. 2. Гистограмма для двух значений параметра анизотропии: $g = 0.8$ (сплошная линия) и $g = 0.5$ (штриховая линия). Оптические параметры те же, что на рис. 1

заданный момент времени интенсивность обратного рассеяния меньше в среде с большей анизотропией, что объяснимо качественно: большая вытянутость индикатрисы рассеяния вперед увеличивает время возврата излучения назад.

Измерения и моделирование ДВФП. Мы выполнили расчет сигналов ДВФП и сравнили его результат с полученными данными для растворов интралипида [17], являющегося в настоящее время распространенным оптическим аналогом биоткани.

На рис. 3 и 4 приведены результаты моделирования измеряемых параметров ДВФП – сдвига фазы

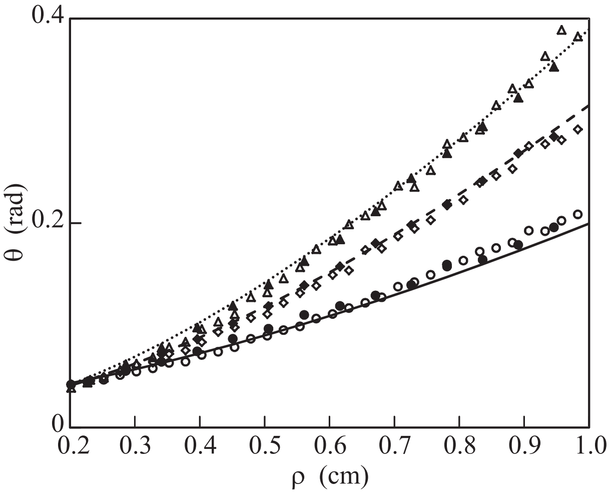

Рис. 3. Сдвиг фазы ДВФП θ в зависимости от расстояния источник–детектор для суспензий интралипида с концентрациями $c = 0.5\,\%$ (открытые кружки), $1.0\,\%$ (открытые ромбы) и $1.5\,\%$ (открытые треугольники). Моделирование Монте-Карло при $\mu_a = 0.001\,\text{мм}^{-1}$, $g = 0.8$ и трех значениях μ_s': $0.55\,\text{мм}^{-1}$ (закрытые кружки), $1.1\,\text{мм}^{-1}$ (закрытые ромбы) и $1.67\,\text{мм}^{-1}$ (закрытые треугольники). Сплошная, штриховая и пунктирная линии – диффузионное приближение при тех же значениях μ_a и μ_s' соответственно. Частота модуляции $(2\pi)^{-1}\omega = 100\,\text{МГц}$. Объем выборки $N_{ph} = 5 \cdot 10^5$, $n_{sc} = 12\,000$

и амплитудной функции $\log(\rho^2 A)$ – в зависимости от расстояния источник – приемник для длины волны $\lambda = 685\,\text{нм}$ и частоты модуляции $(2\pi)^{-1}\omega = 100\,\text{МГц}$.

В работе [17] была использована установка, позволяющая проводить измерения сигналов ДВФП, перемещая узкий падающий луч вдоль поверхности фантома. Рассеянный свет детектировался в оптоволоконном приемнике, расположенном также на поверхности раствора. Мы выполнили расчеты, варьируя коэффициент поглощения μ_a в интервале от $0.4 \cdot 10^{-3}$ до $10^{-3}\,\text{мм}^{-1}$. Для трех значений концентрации, $c = 0.5$, 1 и $1.5\,\%$, мы определили три значения приведенного коэффициента рассеяния: $\mu' = 0.55$, 1.1, $1.67\,\text{мм}^{-1}$, удовлетворяющих условию линейной

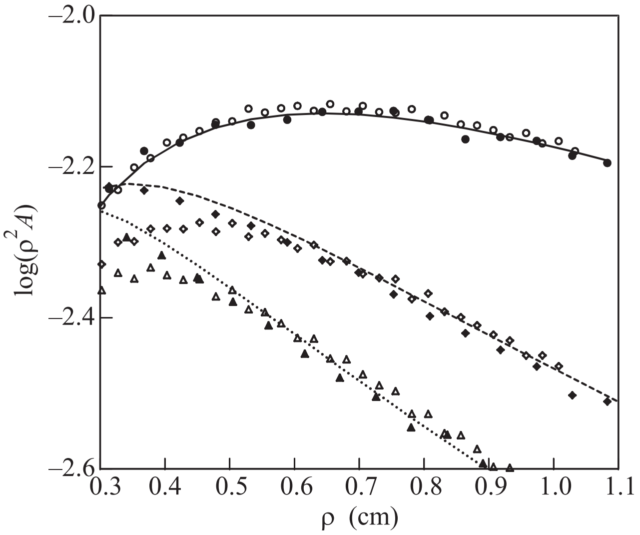

Рис. 4. То же, что на рис. 3, для функции интенсивности $\log(\rho^2 A)$

зависимости от концентрации. Видно, что результаты моделирования, выполненного с учетом френелевского отражения [22], находятся в замечательном согласии с экспериментом и с результатами, полученными на основе диффузионного приближения.

Заключение. Мы выполнили расчеты обратного рассеяния ультракороткого импульса и получили результаты, хорошо согласующиеся с диффузионной теорией в пространстве-времени.

Во временном представлении в рамках предложенного алгоритма Монте-Карло мы получили результаты, описывающие временную развертку сигналов от ультракоротких пикосекундных импульсов в хорошем согласии с литературными данными.

Отождествляя зависимость от времени с кратностью рассеяния, мы учли вклад высоких кратностей путем интегрирования по времени пропагатора рассеяния в диффузионном приближении, вычисляя вклад низших кратностей в рамках метода Монте-Карло.

Любопытно, что сумма вкладов по кратностям рассеяния слабо зависит от параметра анизотропии, в то время как вклады отдельных кратностей существенно меняются с ее изменением, так как с увеличением анизотропии, т.е. с ростом вытянутости индикатрисы, доля рассеянных назад фотонов в заданный момент времени уменьшается.

Разработанный метод позволяет сильно сократить время моделирования. В рамках предложенной процедуры достаточно выполнить стохастическое моделирование до фиксированного порядка рассеяния n_{sc}, а вклад высших кратностей учесть с помощью решения уравнения диффузии в пространстве-времени, используя данные Монте-Карло для сшивания, т.е. для нормировки решения диффузионного приближения.

Работа частично поддержана РФФИ (грант #16-02-00465). Автор выражает благодарность А.Ю. Валькову за обсуждение и критические замечания.

1. A. Yodh and B. Chance, Phys. Today **10**, 34 (1995).
2. T. Durduran, R. Choe, W. B. Baker, and A. G. Yodh, Rep. Prog. Phys. **73**, 076701 (2010).
3. *Оптическая биомедицинская диагностика*, под ред. В. В. Тучина, Физматлит, М. (2007), т. 1, 2.
4. А. Н. Башкатов, А. В. Приезжев, В. В. Тучин, Квантовая электроника **41**, 283 (2011).
5. В. В. Тучин, *Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике*, 2-е изд., Физматлит, М. (2013).
6. M. A. O'Leary, D. A. Boas, B. Chance, and A. G. Yodh, Phys. Rev. Lett. **69**, 2658 (1992).
7. B. J. Tromberg, L. O. Svaasand, T.-T. Tsay, and R. C. Haskell, Appl. Opt. **32**, 607 (1993).
8. M. S. Patterson, B. Chance, and B. C. Wilson, Appl. Opt. **28**, 2331 (1989).
9. M. Testorf, U. Osterberg, B. Pogue, and K. Paulsen, Appl. Opt. **38**, 236 (1999).
10. I. V. Yaroslavsky, A. N. Yaroslavsky, V. V. Tuchin, and H.-J. Schwarzmaier, Appl. Opt. **36**, 6529 (1997).
11. S. Fantini, M. A. Franceschini, and E. Gratton, J. Opt. Soc. Am. B **11**, 2128 (1994).
12. D. J. Durian, Phys. Rev. E **50**, 857 (1994).
13. L. H. Wang, S. L. Jacques, and L. Q. Zheng, Comput. Meth. Prog. Bio. **47**, 131 (1995).
14. Q. Fang and D. A. Boas, Opt. Express **17**, 20178 (2009).
15. В. Л. Кузьмин, И. В. Меглинский, Д. Ю. Чурмаков, ЖЭТФ **128**, 30 (2005).
16. V. L. Kuzmin and I. V. Meglinski, Optics Comm. **273**, 307 (2007).
17. V. L. Kuzmin, M. Neidrauer, D. Diaz, and L. A. Zubkov, J. Biomed. Opt. **20**, 105006 (2015).
18. А. Исимару, *Распространение и рассеяние волн в случайно неоднородных средах*, Мир, М. (1981), т. 2.
19. A. N. Bashkatov, E. A. Genina, and V. V. Tuchin J., Innovative Opt. Health Sci. **4**, 9 (2011).
20. S. L. Jacques, Phys. Med. Biol. **58**, R37 (2013).
21. E. S. Papazoglou, M. Neidrauer, L. Zubkov, M. S. Weingarten, and K. Pourrezaei, J. Biom. Opt. **14**, 064032 (2009).
22. T. H. Pham, O. Coquoz, J. B. Fishkin, E. Anderson, and B. J. Tromberg, Rev. Sci. Instrum. **71**(6), 2500 (2000).