

# Быстрое интегрирование по путям при моделировании распространения света через сильно рассеивающие объекты

А.В.Воронов, Е.В.Третьяков, В.В.Шувалов

*В рамках техники интегрирования по путям с использованием метода Метрополиса реализована оригинальная схема решения задачи распространения света через сильно рассеивающие объекты. Устранение временных затрат на моделирование «ненужных» реализаций и феноменологическое описание процессов многократного малоуглового рассеяния обеспечили резкий (девять и более порядков) рост скорости расчета при сохранении специфики задачи (учет пространственных неоднородностей, граничных условий и др.). Схема позволяет проводить верификацию других быстрых алгоритмов расчета, а также получать информацию, необходимую для восстановления внутренней структуры сильно рассеивающих (размеры  $\sim 1000$  длин рассеяния и более) объектов с использованием метода диффузионной оптической томографии.*

**Ключевые слова:** сильно рассеивающие среды, многократное малоугловое рассеяние, алгоритм интегрирования по путям, метод Метрополиса.

## 1. Введение

В последние годы интенсивно развивается новое направление диагностики сильно рассеивающих объектов – оптическая томография (ОТ) [1–3]. Методы ОТ предполагают возможность корректного описания процессов распространения оптического излучения в таких объектах. Сложность решения этой, на первый взгляд, вполне стандартной проблемы привела к формированию самостоятельного направления [4–8]. Хотя описание процессов взаимодействия излучения с веществом всегда основано на системе уравнений Максвелла, прямое использование последней в случае сильно рассеивающих сред невозможно. Применение методов статистики и аппарата корреляционных функций позволяет перейти к уравнениям Дайсона для средних значений и Бете–Солпитера для вторых моментов [9]. Однако на практике и эти уравнения обычно не решаются, а используются лишь для обоснования перехода к уравнениям переноса, которые стали общепринятой основой решения задач такого типа [10–12]. При этом среда описывается коэффициентами (обратными длинами) поглощения и рассеяния, а также индикатрисой рассеяния по углу [4–8].

Поскольку в общем случае уравнения переноса также не имеют аналитического решения, часто переходят к еще более простым моделям, основанным на некоторых дополнительных предположениях, например к диффузионному приближению [4–8]. Отметим, правда, что корректность последнего подвергается определенным сомнениям [13]. Как правило, и в этих моделях рассеиваю-

щий объект описывается теми же макроскопическими характеристиками, что и в уравнениях переноса. К моделям такого рода можно отнести стационарную двухпоточную модель Кубелки–Мунка [11, 14] и ее обобщения [15], метод конечных элементов [16] и интегральных преобразований (в частности преобразований Меллина и Лапласа) [17]. Определенные перспективы связаны с нестационарной двухпоточной моделью [18, 19], сохраняющей традиционную лучевую идеологию. Для верификации результатов любого приближенного расчета почти всегда используется численное решение уравнений переноса [20] либо моделирование методом Монте-Карло [21–24]. При этом в модель сразу закладываются все ее основные макроскопические характеристики (статистические закономерности), описывающие процессы распространения света [21].

К сожалению, в ситуациях, когда объект имеет характерные размеры порядка 1000 длин рассеяния, прямое использование метода Монте-Карло, в котором основное время уходит на моделирование «ненужных» реализаций, невозможно. При этом в апертуру фотоприемника попадает лишь  $10^{-14} - 10^{-15}$  от полного числа инжектированных фотонов, тогда как для достижения точности в 1 % их должно быть зарегистрировано не менее  $10^4$ . В то же время диагностика именно таких объектов и является целью диффузионной ОТ [3–6], в которой восстановление внутренней структуры проводится с использованием данных о пространственных распределениях потоков регистрируемых фотонов [25–27].

В настоящей работе описана новая схема решения задачи распространения света через сильно рассеивающие объекты, реализованная в рамках техники интегрирования по путям с использованием метода Метрополиса [28] и позволяющая обойти указанную проблему. Основным преимуществом этой схемы является кардинальный (9–10 порядков для объектов с размерами примерно 1000 длин рассеяния) выигрыш во времени рас-

А.В.Воронов, Е.В.Третьяков, В.В.Шувалов. Международный учебно-научный лазерный центр МГУ им. М.В.Ломоносова, Россия, 119992 Москва, Воробьевы горы

Поступила в редакцию 31 октября 2003 г., после доработки – 20 февраля 2004 г.

чета. Подчеркнем, что с точки зрения диффузионной ОТ это не просто ускорение расчета, а качественный прорыв, поскольку такой расчет становится возможным.

Аппарат интегрирования по путям был предложен Р.Фейнманом для квантовой механики [29]. Позднее этот подход применялся для решения задач распространения света через турбулентность [30, 31]. Режим многократного рассеяния с использованием аппарата интегрирования по путям впервые был рассмотрен Л.Перельманом [32], который, как впоследствии и целый ряд других авторов [33, 34], использовал аналитическое описание средних траекторий и вторых моментов. Отметим, что этот подход, эффективный при относительно «слабом» рассеянии, нельзя применить в интересующих нас ситуациях. В рамках схем численного расчета метод интегрирования по путям был впервые реализован в модели случайного блуждания по трехмерной дискретной сетке [35–37]. Описанный ниже подход за счет более аккуратного описания процессов многократного малоуглового рассеяния лучше учитывает роль пространственных неоднородностей, граничных условий и др.

## 2. Определение статистического «веса» траекторий через их вероятности

Как и многие другие авторы [4–8], мы не будем рассматривать здесь фазу и поляризацию светового поля, считая, что в условиях многократного рассеяния их роль несущественна. Отметим только, что учет поляризационных эффектов сравнительно легко может быть введен в описываемый ниже алгоритм. Аппроксимируем любую траекторию фотона серией последовательных достаточно коротких (относительно как длины самой траектории, так и всех пространственных масштабов задачи) прямолинейных отрезков  $\Delta r_i = r_{i+1} - r_i$ , где  $r_i - i$ -я ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) точка излома траектории. Точки  $r_i$  и  $r_{N+1}$  описывают начало и конец траектории. Ориентацию каждого отрезка в пространстве опишем азимутальным ( $\theta_i$ ) и полярным ( $\varphi_i$ ) углами, введя соответствующий ей двумерный угол  $\theta_i = (\theta_i, \varphi_i)$ . Как обычно, будем считать, что вероятность «успешного» (без поглощения) прохождения фотоном  $i$ -го отрезка  $P_{ai}(\Delta r_i) = \exp(-\mu_a \Delta r_i)$  определяется только его длиной  $\Delta r_i = |\Delta r_i|$  и коэффициентом поглощения  $\mu_a$ , а вероятность процесса рассеяния  $P_{si}(\Delta r_i) = 1 - \exp(-\mu_s \Delta r_i)$  – коэффициентом (обратной длиной) рассеяния  $\mu_s$  [22].

Оценим вероятность  $P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i)$  изменения направления распространения фотона на угол  $\Delta \theta_i = \theta_{i+1} - \theta_i$  при переходе с отрезка траектории  $\Delta r_i$  на отрезок  $\Delta r_{i+1}$  на пути  $\Delta r_i$ . При этом будем считать, что в однородной (в смысле постоянства  $\mu_a$  и  $\mu_s$ ) среде каждый акт рассеяния описывается индикатрисой  $P_s(\Delta \theta, \Delta \theta_s)$ , которая при соответствующей нормировке представляет собой просто распределение плотности вероятности рассеяния на двумерный угол  $\Delta \theta = (\Delta \theta, \Delta \varphi)$ , имеющее ширину  $\Delta \theta_s = (\Delta \theta_s, \Delta \varphi_s)$  [11]. Здесь  $\Delta \theta$  и  $\Delta \varphi$  описывают изменение азимутального и полярного углов распространения при рассеянии. При оценке вероятности  $P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i)$  учтем, что по всем промежуточным направлениям распространения на отрезке  $\Delta r_i$  нужно провести интегрирование. Поэтому в тех случаях, когда вероятность поворота направления распространения на угол  $\Delta \theta_i$  в каждом акте рассеяния мала ( $P_s(\Delta \theta, \Delta \theta_s) \ll 1$ , «малоугловое» рассеяние) [11], вероятность  $P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i)$  поворота на тот же

угол на отрезке длиной  $\Delta r_i$  зависит от числа  $k$  актов рассеяния. Строго говоря, нам надо ввести индикатрису многократного рассеяния, которую приближенно можно описать как

$$P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i) \simeq \sum_{k=0}^{\infty} P^{(k)}(\Delta r_i) P_s^{(k)}(\Delta \theta_i). \quad (1)$$

Здесь

$$P^{(k)}(\Delta r_i) \simeq \frac{(\mu_s \Delta r_i)^k}{k!} \exp(-\mu_s \Delta r_i) \quad (2)$$

– вероятность  $k$ -кратного рассеяния на отрезке траектории длиной  $\Delta r_i$ , которую можно считать заданной стандартным распределением Пуассона со средним числом актов рассеяния  $\langle k \rangle = N_{si} = \mu_s \Delta r_i$ ;

$$P_s^{(k)}(\Delta \theta_i) \simeq \int d\Delta \theta' P_s^{(k-1)}(\Delta \theta') P_s(\Delta \theta_i - \Delta \theta', \Delta \theta_s) \quad (3)$$

– плотность вероятности  $k$ -кратного рассеяния на угол  $\Delta \theta_i$ ;  $P_s^{(0)}(\theta) \equiv \delta(\theta)$ . Тогда полная вероятность прохождения фотона по каждому  $i$ -му отрезку рассматриваемой конкретной траектории может быть записана в виде

$$P_i(\Delta \theta_i, \Delta r_i) = \exp(-\mu_a \Delta r_i) P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i), \quad (4)$$

а вероятность прохождения фотона по всей этой траектории определяется выражением

$$P(r_1; \dots; r_i; \dots; r_{N+1}) = \prod_{i=1}^N P_i(\Delta \theta_i, \Delta r_i) = \exp\left(-\mu_a \sum_i \Delta r_i\right) \prod_{i=1}^N P_{si}(\Delta \theta_i, \Delta r_i). \quad (5)$$

## 3. Феноменологическое описание процессов многократного рассеяния

В общем случае рассчитать все необходимые угловые распределения  $P_s^{(k)}(\Delta \theta_i)$ , пользуясь (3), практически невозможно. Поэтому дальнейший приближенный расчет можно провести двумя способами. В первом из них все траектории разбиваются на столь короткие отрезки ( $N_{si} = \mu_s \Delta r_i < 1$ ), что на каждом из них достаточно удерживать два первых члена суммы (1) с известными угловыми распределениями  $P_s^{(0)}(\theta) \equiv \delta(\theta)$  ( $k = 0$ , отсутствие рассеяния) и  $P_s^{(1)}(\Delta \theta_i) \equiv P_s(\Delta \theta_i, \Delta \theta_s)$  ( $k = 1$ , однократное рассеяние). Всеми остальными членами суммы при этом пренебрегается, поскольку  $P^{(k)}(\Delta r_i) \ll 1$  при  $k \geq 2$ .

За счет исключения затрат на моделирование ненужных реализаций (см. выше) уже в этом простейшем варианте должен быть получен значительный выигрыш во времени расчета по сравнению со стандартной схемой метода Монте-Карло. Однако временные затраты на расчет процесса распространения излучения через трехмерный объект с характерными размерами порядка 1000 длин рассеяния при этом останутся слишком велики. Поэтому мы воспользуемся альтернативным феноменологическим подходом и будем считать отрезки, на которых разбиты траектории, достаточно длинными ( $N_{si} = \mu_s \Delta r_i \gg 1$ ). При этом мы полагаем, что функциональный

характер распределения вероятности рассеяния по углу на каждом  $i$ -м отрезке остается тем же, что и при однократном рассеянии,  $P_{si}(\Delta\theta_i, \Delta r_i) \simeq P_s(\Delta\theta_i, \Delta\theta_{si})$ , но его ширина  $\Delta\theta_{si}$  теперь явно зависит от  $\Delta r_i$ . Последнее предположение выглядит вполне разумным, т. к. при  $\langle k \rangle \gg 1$  длины всех отрезков  $\Delta r_i$  становятся столь велики, что максимум функции распределения  $P^{(k)}(\Delta r_i)$  (2) выделяет из суммы (1) члены с номерами  $k \sim N_{si} \gg 1$ . Угловые распределения этих членов должны быть весьма широкими ( $\Delta\theta_{si} \gg \Delta\theta_s$ ) и примерно одинаковыми, поскольку при  $k \sim N_{si} \gg 1$  последовательное интегрирование (3) можно провести, рассматривая  $P_s(\Delta\theta_i, \Delta\theta_s)$  как  $\delta$ -функцию. Поэтому при расчете  $P_s(\Delta\theta_i, \Delta r_i)$  угловые распределения  $P^{(k)}(\Delta\theta_i)$  могут быть вынесены из под знака суммирования в (1), что сразу даст

$$P_{si}(\Delta\theta_i, \Delta r_i) \simeq P_s^{(k)}(\Delta\theta_i) \Big|_{k=N_{si}} \sum_{k=0}^{\infty} P^{(k)}(\Delta r_i) \equiv P_s^{(k)}(\Delta\theta_i) \Big|_{k=N_{si}}. \quad (6)$$

Собственно именно эту индикатрису многократного ( $k \simeq N_{si}$ ) рассеяния (6) мы и должны теперь определить в рамках неких стандартных моделей  $P_s^{(k)}(\Delta\theta_i) \Big|_{k=N_{si}} \simeq P_s(\Delta\theta_i, \Delta\theta_{si})$ .

Хотя дальнейший расчет можно было бы провести для любой конкретной модели индикатрисы рассеяния, воспользуемся здесь моделью Хени–Гринштейна [11], для которой  $P_s(\Delta\theta, \Delta\theta_s)$  задано выражением

$$P_s(\Delta\theta, \Delta\theta_s) \equiv P_s^{(g)}(\Delta\theta, g_s) = \frac{1 + g_s}{4\pi} \times E^{-1} \left[ -\frac{4g_s}{(1 - g_s)^2} \right] \frac{1 - g_s^2}{(1 + g_s^2 - 2g_s \cos \Delta\theta)^{3/2}}, \quad (7)$$

где  $E[x] = \int_0^{\pi/2} (1 - x \sin^2 y)^{1/2} dy$  – полный нормальный эллиптический интеграл Лежандра второго рода;  $g_s = \langle \cos \Delta\theta \rangle$  – параметр анизотропии, определенный как средний косинус угла рассеяния и меняющийся от нуля (изотропное рассеяние) до единицы (рассеяние вперед). При записи (7) учтена однозначность связи  $\Delta\theta_s$  и  $g_s$ , первые два сомножителя обеспечивают требуемую нормировку вероятности на единицу. В диапазоне  $1 \geq g_s \geq 0$  удобно воспользоваться аппроксимирующим выражением

$$E^{-1} \left[ -\frac{4g_s}{(1 - g_s)^2} \right] \simeq \frac{2}{\pi} (1 - g_s), \quad (8)$$

с учетом которого можно окончательно записать:

$$P_s^{(g)}(\Delta\theta, g_s) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(1 - g_s^2)^2}{(1 + g_s^2 - 2g_s \cos \Delta\theta)^{3/2}}. \quad (9)$$

Расчет зависимости  $g_{si}(\Delta r_i)$  проведем в предположении, что все четные моменты распределения угла рассеяния  $\Delta\theta$  «расцепляются» на произведения моментов второго порядка. При этом связь ширины  $\Delta\theta_s \equiv (\langle \Delta\theta^2 \rangle)^{1/2}$  распределения  $P_s^{(g)}(\Delta\theta, g_s)$  с параметром анизотропии  $g_s$  можно найти, воспользовавшись стандартным разложением

$$g_s = \langle \cos \Delta\theta \rangle = \left\langle \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(\Delta\theta^2)^k}{(2k)!} \right\rangle =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(\langle \Delta\theta^2 \rangle^{1/2})^k}{(2k)!} = \cos(\Delta\theta_s), \quad (10)$$

из которого следует, что

$$\Delta\theta_s = \arccos g_s. \quad (11)$$

Поскольку  $1 \geq g_s \geq 0$ , область изменения  $\Delta\theta_s$  должна быть задана соотношением

$$0 \leq \Delta\theta_s \leq \frac{\pi}{2}. \quad (12)$$

При малоугловом рассеянии ( $g_s \geq 0.9$ ) можно использовать приближенное равенство

$$\Delta\theta_s = [2(1 - g_s)]^{1/2}. \quad (13)$$

В используемом нами предположении  $P_{si}(\Delta\theta_i, \Delta r_i) \simeq P_s(\Delta\theta_i, \Delta\theta_{si})$  связь  $\Delta\theta_{si}$  с параметром анизотропии  $g_{si}$  должна быть аналогичной (11),

$$\Delta\theta_{si} = \arccos g_{si}, \quad 1 \geq g_{si} \geq 0, \quad 0 \leq \Delta\theta_{si} \leq \frac{\pi}{2}, \quad (14)$$

однако даже при  $g_s \geq 0.9$  рассеяние уже не обязательно является малоугловым. С учетом независимости отдельных актов взаимодействия из центральной предельной теоремы [38] следует, что на отрезках траекторий не слишком большой длины имеем

$$\Delta\theta_{si}^2 \simeq N_{si} \Delta\theta_s^2 = \mu_s \Delta r_i \Delta\theta_s^2. \quad (15)$$

В то же время на длинных отрезках рассеяние должно становиться изотропным [11], и

$$\Delta\theta_{si} \rightarrow \infty \text{ при } N_{si} = \mu_s \Delta r_i \rightarrow \infty. \quad (16)$$

Воспользуемся теперь простым интерполирующим выражением

$$\Delta\theta_{si}^2 \simeq \frac{\pi^2}{4} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{4}{\pi^2} \mu_s \Delta r_i \Delta\theta_s^2 \right) \right], \quad (17)$$

которое полностью удовлетворяет перечисленным выше асимптотикам. Из (17) следует, что во всех дальнейших расчетах мы должны положить, что

$$g_{si} \simeq \cos \left\{ \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{4}{\pi^2} \mu_s \Delta r_i \Delta\theta_s^2 \right) \right]^{1/2} \right\}, \quad (18)$$

а в интересующем нас случае малоуглового однократного рассеяния

$$g_{si} \simeq \cos \left\{ \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{8}{\pi^2} \mu'_s \Delta r_i \right) \right]^{1/2} \right\}. \quad (19)$$

Здесь  $\mu'_s = (1 - g_s)\mu_s$  – транспортный коэффициент рассеяния [11]. С учетом (6), (9) и (19) выражение (5) можно переписать в форме

$$P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_i; \dots; \mathbf{r}_{N+1}) \simeq \exp \left( -\mu_a \sum_i \Delta r_i \right) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \prod_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2\pi^2} \sin^4 \left[ \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{8}{\pi^2} \mu'_s \Delta r_i \right) \right]^{1/2} \right] \right. \\ & \times \left. \left\{ 1 + \cos^2 \left[ \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{8}{\pi^2} \mu'_s \Delta r_i \right) \right]^{1/2} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. - 2 \cos \left[ \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{8}{\pi^2} \mu'_s \Delta r_i \right) \right]^{1/2} \right] \cos \Delta \theta_i \right\}^{-3/2} \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

которая в рамках нашей модели и определяет вероятность прохождения фотона по любой траектории через положение точек ее излома  $r_i$ , заданных переменными  $\Delta r_i$  и  $\Delta \theta_i$ .

#### 4. Статистический расчет и механическая аналогия

Очевидно, что полную вероятность прохождения фотона от источника (точка  $r_s = r_1$ ) к приемнику (точка  $r_d = r_{N+1}$ ) можно теперь описать выражением

$$P(r_s \rightarrow r_d) = \int_V dr_2 \dots dr_i \dots dr_N P(r_1; \dots; r_i; \dots r_{N+1}). \quad (21)$$

Здесь интегрирование проводится по всему фазовому (конфигурационному) пространству траекторий, соединяющих точки  $r_s$  и  $r_d$ , а вероятности  $P(r_1; \dots; r_i; \dots r_{N+1})$  траекторий заданы (20). Легко убедиться, что, несмотря на некогерентный характер суперпозиции «весов» последних (следствие многократности процессов рассеяния), используемый нами подход приводит к выражению, типичному для квантовой механики Р.Фейнмана [29]. Задача сводится к расчету континуального интеграла (21) – процедуре, методы которой достаточно хорошо отработаны [39].

В квантовой статистике расчет интегралов вида (21) обычно проводится численно. При этом весьма часто возникает неустойчивость, требующая введения определенных ограничений на область интегрирования. В дальнейшем длины отрезков всех траекторий считались сравнительно небольшими и примерно одинаковыми ( $\mu_s^{-1} \ll \Delta r_i \simeq \Delta r_0 < (\mu'_s)^{-1}$ ), а полное число узлов  $N$  – переменным. С учетом этого после замены переменных,

$$\{r_1; \dots; r_i; \dots; r_{N+1}\} \xrightarrow{\Delta r_i = \Delta r_0} \{r_1, \theta_1; \Delta \theta_1; \dots; \Delta \theta_i; \dots; \Delta \theta_N\}, \quad (22)$$

и ряда несложных алгебраических преобразований выражение (21) приводится к виду

$$P(r_s \rightarrow r_d) = \int_0^\infty dN \int \Delta \theta_1 \dots \Delta \theta_i \dots \Delta \theta_N \quad (23)$$

$$\times P(N; \Delta \theta_1; \dots; \Delta \theta_i; \dots; \Delta \theta_N) \delta \left( \theta_{N+1} - \theta_1 - \sum_{i=1}^N \Delta \theta_i \right),$$

$$P(N; \Delta \theta_1; \dots; \Delta \theta_i; \dots; \Delta \theta_N) = \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^N \Delta \theta_i^2}{2/3 (\mu'_s \Delta r_0)^2} \right.$$

$$\left. - N \ln \left\{ \frac{\pi^2}{2} (\mu'_s \Delta r_0) \left[ 1 + \frac{5}{6} (\mu'_s \Delta r_0) \right]^{3/5} \right\} - N (\mu_a \Delta r_0) \right\}. \quad (24)$$

Входящая в (23)  $\delta$ -функция ограничивает область интегрирования пространством связанных траекторий ( $\theta_{N+1} = \theta_1 + \sum_{i=1}^N \Delta \theta_i$ ), при записи выражения (24) в (20) удержано несколько первых членов стандартных степенных разложений, а результат опять свернут в экспоненту. Использованное ограничение фазового пространства оправданно только в тех ситуациях, когда фотон испытывает достаточно большое и примерно одинаковое число ( $N_{si} = \mu_s \Delta r_0 \gg 1$ ) актов рассеяния при переходе с одного узла траектории на другой. Если же кратность рассеяния мала, значительную роль должны играть интерференционные эффекты, и применимость даже стандартной версии метода Монте-Карло ограничена.

Легко убедиться, что (как и в задачах квантовой механики с переменным числом частиц – бозонов [39]) полное число переменных интегрирования в (23) не фиксировано. В рамках квантово-механической аналогии первое слагаемое в показателе экспоненты (24) описывает «энергию упругой связи» между соседними узлами траекторий – «бозонами», а два других задают их «химический потенциал». Отметим, что даже в пространственно однородной рассеивающей среде (в смысле постоянства  $\mu_a$ ,  $\mu_s$  и  $g_s$ ) эти два члена не могут быть отброшены, т. к. полное число узлов на траекториях («бозонов») может изменяться. Лишь в тех ситуациях, когда дисперсия длин траекторий сравнительно невелика (случай слабого рассеяния либо учет только «почти» баллистических фотонов [4–8]), число узлов  $N$  на траекториях можно считать постоянным, а дальнейший расчет свести к задаче, решенной ранее Л.Перельманом [32].

Расчет континуальных интегралов типа (23) обычно проводится статистическими методами, например методом Метрополиса [28]. В этом методе в конфигурационном пространстве  $s \in \{s_1, s_2, \dots, s_j, \dots\}$ , где  $s_j = \{N_j; r_1; \dots; r_i; \dots; r_{N+1}\}$ , конструируется случайный марковский процесс. Вероятность перехода от одной конфигурации к другой  $P(s \rightarrow s')$  считается зависящей от начального ( $s$ ) и конечного ( $s'$ ) состояний и определяется так, чтобы распределение  $\{s_n\}$  сходилось к заданному распределению  $\pi(s)$ . В том случае, если выполнены условия эргодичности и детального баланса

$$\pi(s)P(s \rightarrow s') = \pi(s')P(s' \rightarrow s), \quad (25)$$

это распределение сходится к равновесному распределению

$$\sum_s \pi(s)P(s' \rightarrow s) = \pi(s'). \quad (26)$$

Вероятность перехода  $P(s \rightarrow s')$  можно представить в виде произведения:

$$P(s \rightarrow s') = T(s \rightarrow s')A(s \rightarrow s'), \quad (27)$$

где  $T(s \rightarrow s')$  и  $A(s \rightarrow s')$  – вероятности выбора и принятия состояния  $s'$  при переходе из состояния  $s$ . Детальный баланс достигается при

$$A(s \rightarrow s') = \min \left\{ 1, \frac{T(s' \rightarrow s)\pi(s')}{T(s \rightarrow s')\pi(s)} \right\}. \quad (28)$$

При реализации метода Метрополиса считалось, что все узлы равноправны и вероятность  $T(s \rightarrow s')$  не зависит

от их положения. В этом случае достаточно определить отношение вероятностей для двух траекторий: старой –  $P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_i; \dots; \mathbf{r}_{N+1})$  (положения узлов  $\{\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_i; \dots; \mathbf{r}_{N+1}\}$ ) и новой –  $P(\mathbf{r}'_1; \dots; \mathbf{r}'_i; \dots; \mathbf{r}'_{N+1})$  (положения узлов  $\{\mathbf{r}'_1; \dots; \mathbf{r}'_i; \dots; \mathbf{r}'_{N+1}\}$ ). В использованной процедуре каждая новая траектория строилась посредством модификации положения одного из узлов старой траектории, номер  $i$  которого выбирался случайно. Поскольку любой узел «взаимодействует» только с двумя ближайшими соседями (24), то в первом приближении это отношение может быть представлено в форме

$$\begin{aligned} & \frac{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}'_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})}{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \frac{\Delta r_i + \Delta r_{i-1}}{\Delta r_0} \left\{ \frac{\Delta \theta_{i+1}^2 + \Delta \theta_i^2 + \Delta \theta_{i-1}^2}{2/3(\mu'_s \Delta r_0)^2} \right. \right. \\ &+ 2 \ln \left[ \frac{\pi^2}{2} (\mu'_s \Delta r_0) \left[ 1 + \frac{5}{6} (\mu'_s \Delta r_0) \right]^{3/5} \right] + 2\mu_a \Delta r_0 \left. \right\} \\ &- \frac{1}{2} \frac{\Delta r'_i + \Delta r'_{i-1}}{\Delta r_0} \left\{ \frac{(\Delta \theta'_{i+1})^2 + (\Delta \theta'_i)^2 + (\Delta \theta'_{i-1})^2}{2/3(\mu'_s \Delta r_0)^2} \right. \\ &\left. \left. + 2 \ln \left[ \frac{\pi^2}{2} (\mu'_s \Delta r_0) \left[ 1 + \frac{5}{6} (\mu'_s \Delta r_0) \right]^{3/5} \right] + 2\mu_a \Delta r_0 \right\} \right\}. \quad (29) \end{aligned}$$

Здесь штрих обозначает подстановку значения параметра для новой траектории.

При модификациях  $\mathbf{r}_i$  допустимыми считались лишь небольшие относительные изменения длин отрезков  $\Delta r_{i-1}$  и  $\Delta r_i$ . В случае нарушения условия  $|\Delta r'_i + \Delta r'_{i-1}| \times (2\Delta r_0)^{-1} - 1| < 0.05$  узлы заново равномерно перераспределялись по траектории с использованием ее параболической аппроксимации и (при необходимости) менялось значение  $N$ . При этом как кривизна траектории, так и ее длина оставались прежними, т. е. не менялись и ее общая вероятность. В тех случаях, когда оказывалось, что

$$\frac{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}'_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})}{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})} \geq \mathcal{R}$$

( $\mathcal{R}$  – случайное число в интервале  $[0, 1]$ ), согласно (28) новая траектория «принималась». При этом обновлялась плотность потока фотонов ( $D(\mathbf{r}'_i) \rightarrow D(\mathbf{r}_i) + 1$ ) в окрестности  $\mathbf{r}'_i$ . Если же оказывалось, что

$$\frac{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}'_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})}{P(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_{i-1}; \mathbf{r}_i; \mathbf{r}_{i+1}; \dots; \mathbf{r}_{N+1})} < \mathcal{R},$$

то новая траектория «отвергалась» и плотность потока фотонов корректировалась ( $D(\mathbf{r}_i) \rightarrow D(\mathbf{r}_i) + 1$ ) уже в окрестности  $\mathbf{r}_i$ . Размер этой окрестности определялся объемом памяти, отведенной для записи массива  $D(\mathbf{r})$ , т. е. размером ячеек сетки, на которой отображалось искомое распределение плотности потока фотонов.

После обновления на траектории снова случайным образом выбирался новый узел, для которого процедура модификации повторялась. Расчет продолжался до тех пор, пока массив  $D(\mathbf{r})$  не описывался с необходимой точностью. Отметим, что, хотя в отличие от многих других процедур в описанной выше схеме сетка используется

лишь для записи информации, т. е. для сохранения выходного распределения  $D(\mathbf{r})$ , улучшить пространственное разрешение в алгоритме можно только уменьшая размер ячейки и соответственно увеличивая полное время расчета при той же статистической погрешности на ячейку.

Пространственная неоднородность задачи (наличие границ, включений и т. д.) в описанном выше алгоритме легко учитывается введением пространственной модуляции (зависимости от  $\mathbf{r}$ ) двух стандартных параметров –  $\mu_a$  и  $\mu'_s$ , использованных в (24) для описания свойств рассеивающей среды. Хотя их зависимость от  $\mathbf{r}$  при этом задается функционально (непрерывно), учет изменений  $\mu_a$  и  $\mu'_s$  на пространственных масштабах, меньших чем  $\Delta r_0$ , нерационален, т. к. приводит к существенному увеличению времени расчета. Отметим также, что в соответствии с (24) любая абсолютно поглощающая граница играет для узлов роль бесконечно высокого потенциального барьера. Это означает, что если в процессе модификации траектории один из ее узлов уходит за такой барьер, то ее вероятность обращается в нуль и соответствующая реализация должна быть сразу отвергнута. Отсюда следуют определенные ограничения. Дело в том, что в описанной версии алгоритма новая траектория всегда генерируется путем модификации старой. Наличие высоких потенциальных барьеров, которые практически не могут быть преодолены при небольших (см. выше) изменениях положения только одного из узлов (например, в случае сильно поглощающих включений, пересекающих весь объект), неизбежно приводит к разбиению конфигурационного пространства траекторий на два (или более) несвязанных множества. Поскольку переход из одного множества в другое невозможен, часть траекторий теряется. Избежать этого можно с помощью более сложных алгоритмов, реализующих метод Метрополиса.

Легко убедиться, что описанный выше алгоритм позволяет рассчитывать как распределения, так и средние значения практически любого важного с точки зрения эксперимента параметра. При этом все средние значения определяются как средние по реализациям при фиксированных точках  $\mathbf{r}_s$  и  $\mathbf{r}_d$ . Так, например, среднее время  $\langle \tau \rangle$  прохождения фотона от излучателя к приемнику и средняя длина  $\langle L \rangle$  соответствующих траекторий рассчитываются как

$$\langle \tau \rangle = \frac{1}{c} \langle L \rangle = \frac{\Delta r_0}{c} \langle N \rangle = \frac{\Delta r_0}{cm} \sum_{l=1}^m N_l. \quad (30)$$

Здесь  $c$  – скорость света в среде;  $\langle N \rangle$  – среднее число отрезков на таких траекториях;  $m$  – общее число реализаций в процедуре;  $N_l$  – число узлов в  $l$ -й реализации процедуры.

Необходимо также сказать, что после использованной нами замены (22) начальный угол распространения  $\theta_1$  играет роль независимой переменной. Никаких ограничений на величину этого угла, как и на величину конечного угла  $\theta_{N+1}$ , в описанной выше процедуре не накладывалось. Поэтому приведенные выражения отвечают ситуациям с изотропным (в смысле угловой апертуры) источником и аналогичным приемником. Для учета конечности угловых апертур нужно либо в (29) ввести члены, описывающие «упругое» взаимодействие с узлами, расположенными в двух дополнительных точках (за пределами объекта), либо в (23) ввести ограничения на область интегрирования.

## 5. Апробация алгоритма расчета

Результат апробации описанного выше алгоритма расчета иллюстрируют рис.1–4. На рис.1–3 показаны карты изолиний распределений  $I(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} dz D(r)$  для фотонов, регистрируемых приемником в нескольких геометриях задачи. Для отображения  $I(x, y)$  использована линейная шкала градаций серого цвета. Во всех реализациях считалось, что сильно рассеивающая ( $\mu_s = 14 \text{ мм}^{-1}$ ,  $g = 0.9$  и  $\mu'_s = 1.4 \text{ мм}^{-1}$ ) и слабо поглощающая ( $\mu_a = 0.01 \text{ мм}^{-1}$ ) среда размещена в неограниченном (по оси  $z$ ) цилиндре с идеально поглощающими ( $\mu_a \rightarrow \infty$ ) стенками. Источник и приемник считались изотропными (см. выше) и располагались в плоскости, ортогональной  $z$ , под центральными углами  $180^\circ$  (рис.1,*a* и 3,*a*) и  $90^\circ$  (рис.2,*a*) на поверхности цилиндра. Диаметр последнего выбирался сравнительно небольшим ( $2R = 35 \text{ мм}$ ), что позволило сравнить полученные результаты с данными аналогичных расчетов (рис.1,*б*, 2,*б*, 3,*б*), проведенных в рамках стандартной версии метода Монте-Карло. Отметим здесь, правда, что в этих расчетах [27] угловая апертура излучателя составляла  $10^\circ$  при площади приемной площадки  $1 \text{ мм}^2$ .

Легко убедиться, что распределения, полученные обоими методами, очень похожи, хотя статистика, набранная методом Монте-Карло при времени счета около 10 суток на IBM PC AMD XP-1800+, явно недостаточна. Рис.3,*a* иллюстрирует трансформацию распределения

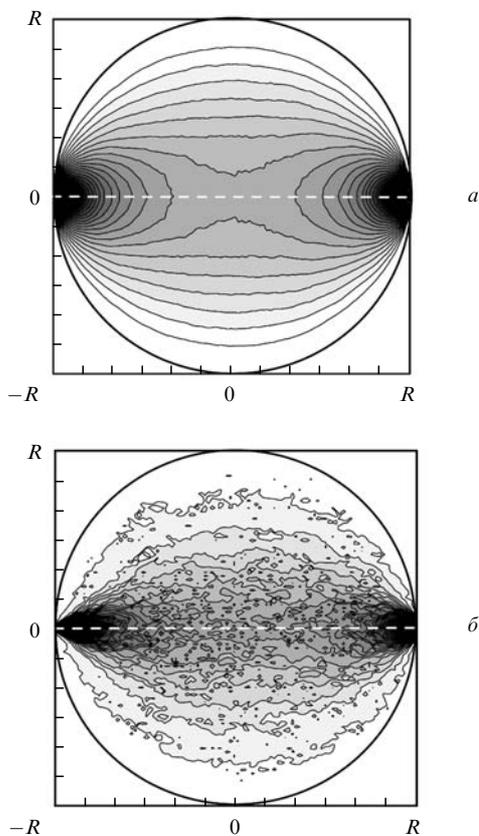


Рис.1. Карта распределения  $I(x, y)$  в линейной шкале градаций серого цвета для цилиндра с сильно поглощающими стенками при использовании быстрого алгоритма расчета (*a*) и метода Монте-Карло (*б*). Источник и приемник расположены в плоскости, ортогональной оси  $z$ , под углом  $180^\circ$ ,  $2R = 35 \text{ мм}$ ,  $\mu_s = 14 \text{ мм}^{-1}$ ,  $g = 0.9$ ,  $\mu_a = 0.01 \text{ мм}^{-1}$ .

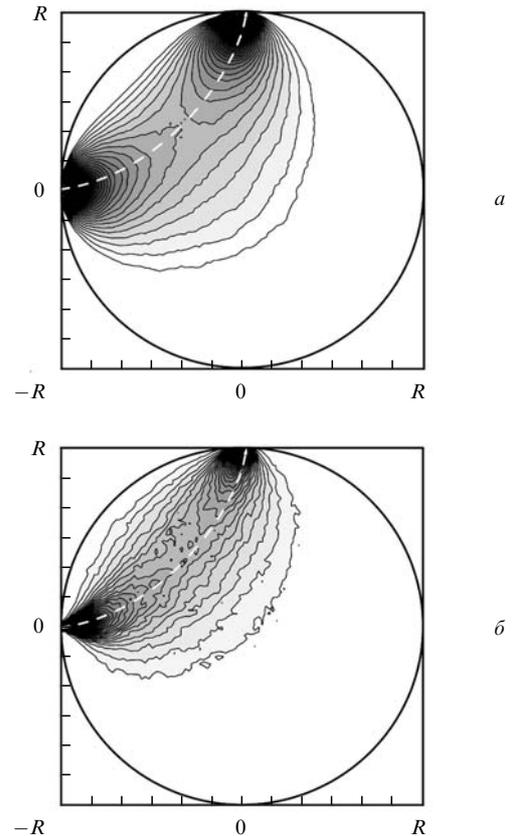


Рис.2. Карта распределения  $I(x, y)$  в линейной шкале градаций серого цвета для цилиндра с сильно поглощающими стенками при использовании быстрого алгоритма расчета (*a*) и метода Монте-Карло (*б*). Источник и приемник расположены в плоскости, ортогональной оси  $z$ , под углом  $90^\circ$ ,  $2R = 35 \text{ мм}$ ,  $\mu_s = 14 \text{ мм}^{-1}$ ,  $g = 0.9$ ,  $\mu_a = 0.01 \text{ мм}^{-1}$ .

$I(x, y)$  при появлении на оси цилиндра сильно поглощающего ( $\mu_a \rightarrow \infty$ ) включения той же формы диаметром  $2r = 12 \text{ мм}$ . К сожалению, аналогичный расчет в [27] проведен для немного другой реализации: сильно поглощающее включение имеет диаметр  $2r = 3 \text{ мм}$  и смещено по направлению к источнику (рис.3,*б*). Отметим, что, несмотря на те же временные затраты (10 суток), статистика, полученная методом Монте-Карло, в этом случае оказывается еще хуже, чем в двух предыдущих. На рис.4 показана рассчитанная с использованием быстрого алгоритма так называемая времяпролетная характеристика, т.е. распределение времени прохождения регистрируемыми фотонами пути от источника к приемнику. Ось времени нормирована на  $\tau_0$  – время баллистического (без рассеяния) пролета.

## 6. Заключение

Итак, нами описан алгоритм быстрого решения задач распространения света через сильно рассеивающие объекты большого размера, основанный на технике интегрирования по путям и методе Метрополиса. Этот алгоритм, во-первых, исключает моделирование бесполезных («фотон поглотился» и «фотон не попал в фотоприемник») реализаций (выигрыш в скорости на шесть и более порядков для объектов с размерами  $\sim 1000$  длин рассеяния) и, во-вторых, резко (три и более порядков) снижает затраты времени на расчет полезных («фотон не

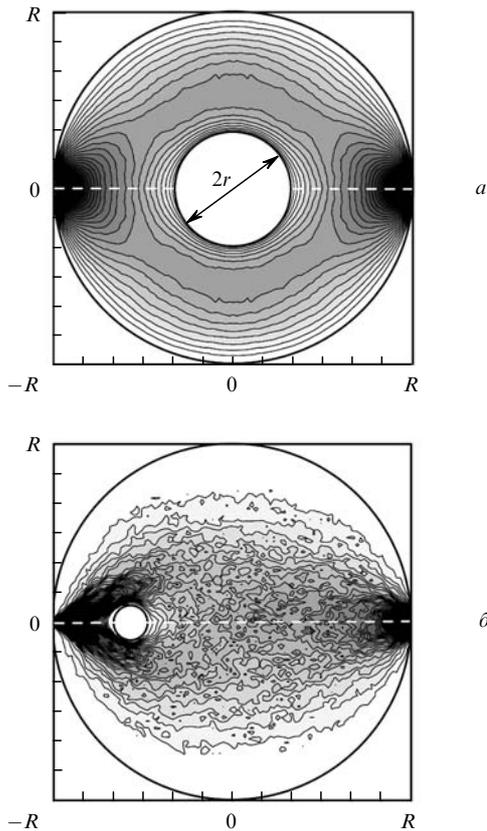


Рис.3. Карта распределения  $I(x, y)$  в линейной шкале градаций серого цвета для цилиндра с сильно поглощающими стенками и включением в случае использования быстрого алгоритма расчета при  $2r = 12$  мм (а) и метода Монте-Карло при  $2r = 3$  мм (б). Источник и приемник расположены в плоскости, ортогональной оси  $z$ , под углом  $180^\circ$ ,  $2R = 35$  мм,  $\mu_s = 14$  мм $^{-1}$ ,  $g = 0.9$ ,  $\mu_a = 0.01$  мм $^{-1}$ .

поглотился и попал в фотоприемник»). Второе достигается за счет мотивированного (центральная предельная теорема) феноменологического описания процессов многократного малоуглового рассеяния. В рамках стандартных параметров  $\mu_a$  и  $\mu_s'$  учитываются пространственные неоднородности, граничные условия и т.д. С помощью этого алгоритма можно проводить верифи-



Рис.4. Расчетная времяпролетная характеристика: ось времени нормирована на  $\tau_0$  – время баллистического (без рассеяния) пролета; быстрый алгоритм расчета.

кацию других приближенных методов расчета (метод «средних» траекторий [33, 34], метод «масштабирования» [27] и т.д.) и получать достоверную опорную информацию, необходимую для восстановления внутренней структуры сильно рассеивающих (размеры  $\sim 1000$  длин рассеяния и более) объектов в диффузионной оптической томографии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-02-17305) и Программы поддержки ведущих научных школ России Президента РФ (грант НШ-1583.2003.2).

1. Тучин В.В. *УФН*, **167**, 517 (1997); Зимняков Д.А., Тучин В.В. *Квантовая электроника*, **32**, 849 (2002).
2. Minet O., Mueller G.J., Beuthan J. (Eds). *Selected Papers on Optical Tomography: Fundamentals and Applications in Medicine* (Bellingham: SPIE, 1998, v. MS-147).
3. Andersson-Engels S., Fujimoto J.G. (Eds). *Photon Migration, Diffuse Spectroscopy, and Optical Coherence Tomography: Imaging and Functional Assessment* (SPIE, 2000, v. 4160).
4. Chance B. (Ed.). *Photon Migration in Tissues* (New York: Plenum Press, 1989).
5. Chance B., Delpy D.T., Muller G.J. (Eds). *Photon Propagation in Tissues* (SPIE, 1996, v. 2626).
6. Benaron D.A., Chance B., Muller G.J. (Eds). *Proc. of Photon Propagation in Tissues II* (SPIE, 1996, v. 2925).
7. Benaron D.A., Chance B., Ferrari M. (Eds). *Proc. of Photon Propagation in Tissues III* (SPIE, 1998, v. 3194).
8. Benaron D.A. et al. (Eds). *Proc. of Photon Propagation in Tissues IV* (SPIE, 1998, v. 3566).
9. Барабаненков Ю.Н. и др. *УФН*, **102**, 3 (1970).
10. Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. *Введение в теорию прохождения частиц через вещество* (М.: Атомиздат, 1978).
11. *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах*. Под ред. А. Исмаиру (М.: Мир, 1981, т. 1, 2).
12. Апресян Л.А., Кравцов Ю.А. *Теория переноса излучения* (М.: Наука, 1983).
13. Терещенко С.А. *Изв. вузов. Сер. Электроника*, **6**, 101 (1997).
14. Moon J.A., Reinjes J. *Opt. Lett.*, **19**, 521 (1994).
15. Селищев С.В., Терещенко С.А. *Письма в ЖТФ*, **21**, 24 (1995).
16. Yoon G. et al. *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-23**, 1721 (1987).
17. Arridge S.R., Schweiger M. *Appl. Opt.*, **34**, 8026 (1995).
18. Schweiger M., Arridge S.R. *Appl. Opt.*, **36**, 9042 (1997).
19. Терещенко С.А. и др. *Квантовая электроника*, **23**, 265 (1996).
20. Селищев С.В., Терещенко С.А. *ЖТФ*, **67**, 61 (1997).
21. Hielscher A.H., Alcouffe R.E. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **2925**, 22 (1996).
22. Feng S.C., Zeng F.-A., Chance B. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **1888**, 78 (1993).
23. Hiraoka M. et al. *Physics in Medicine and Biology*, **38**, 1859 (1993).
24. Pifferi A. et al. *Appl. Opt.*, **37**, 2774 (1998).
25. Savchenko E.P., Tuchin V.V. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **4001**, 317 (2000).
26. Маликов Е.В., Петникова В.М., Чурсин Д.А., Шувалов В.В., Шутов И.В. *Квантовая электроника*, **30**, 78 (2000).
27. Третьяков Е.В., Шувалов В.В., Шутов И.В. *Квантовая электроника*, **31**, 1095 (2001); **32**, 941 (2002).
28. Metropolis N. et al. *J. Chem. Phys.*, **21** 1087 (1953).
29. Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York: McGraw-Hill Higher Education, 1965).
30. Gross E.P. *J. Math. Phys.*, **24**, 399 (1983).
31. Tessoroff J. *Phys. Rev. A*, **35**, 872 (1987).
32. Perelman L.T. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 1341 (1994).
33. Кравченко О.В., Любимов В.В. *Оптика и спектроскопия*, **88**, 670 (2000).
34. Kalintsev A.G. et al. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **4242**, 275 (2001).
35. Bonner R.F. et al. *J. Opt. Soc. Am. A*, **4**, 423 (1987).
36. Hebden J.C., Hall D.J., Delpy D.T. *Medical Phys.*, **22**, 201 (1995).
37. Gandjbakhche A.H. et al. *Appl. Opt.*, **37**, 1973 (1998).
38. Ахманов С.А., Дьяков Ю.Е., Чиркин А.С. *Введение в статистическую радиофизику и оптику* (М.: Наука, 1981).
39. Kleinert H. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, and Polymer Physics* (Singapore: World Scientific, 1995).