

文章编号:1004-4213(2010)09-1594-8

二维稳态辐射传输方程的有限差分求解法*

金蒙, 高峰, 李娇, 赵会娟

(天津大学 精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072)

摘要:针对扩散光学层析在小动物成像中的应用问题并基于混浊介质空间光子三维散射的实际物理效应,提出的二维稳态辐射传输方程的有限差分数值求解新方法.在此基础上,研究了不同的空间剖分网格和角度离散密度对求解准确度的影响,并通过将所提方法与蒙特卡洛模拟进行对比,验证方法的正确性.研究表明:在均匀组织体内,当离散角度达到一定数量时,由辐射传输方程的有限差分分解获得的透射面和侧面的光子密度对空间网格大小并不敏感,而在反射面上光子密度计算则需要较密的空间网格才能够达到一定准确度.本研究为发展基于辐射传输方程的扩散光学层析理论奠定了基础.

关键词:辐射传输方程;有限差分方法;扩散光学层析;正向问题

中图分类号:Q63

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103909.1594

0 引言

扩散光学层析成像(Diffuse Optical Tomography, DOT)是一种新兴的无创成像方法^[1],其基本原理是:使用波长范围在 650~900 nm 的近红外光“扫描”组织体,通过测量组织体表面上的光强分布来重建组织体内部的光学参量图像. DOT 的成像对象是反映组织体功能性信息的光学参量,具有灵敏度和特异性高、安全廉价以及实时性强等多重优点^[2],因此在新生儿的脑血氧监测^[3]、乳腺肿瘤的早期检测^[4]和基于小动物疾病模型的分子成像^[5]等领域具有广泛的重要应用前景.目前扩散光学层析成像研究中主要采用基于扩散方程的正向模型,它是辐射传输方程的一阶球谐波展开近似,其适用范围有相当的局限性:仅适用于高散射、低吸收组织体的远源区光子密度场的描述^[1].因此,一方面,对于小尺寸组织体的成像应用,由于光源和探测器的分布较密,扩散方程的适用性较差,影响对近源场光学参量的重建;另一方面,人体内部的某些组织体,如高散射、高吸收的骨骼组织和低散射、低吸收的脑脊液层等,扩散方程无法实现这些区域内光子传播的准确建模.为此,国内外学者一直对基于辐射传输方程的 DOT 成像技术研究有着广泛的兴趣^[6-8]. Arridge 等人发展了辐射传输方程的有限元

求解法^[9],该方法适用于复杂形状的组织体并具有较高的准确度,但是由于有限元法需要对矩阵进行大量的操作,因此需要较大的存储空间且计算量大. Ripoll 等应用边界元法求解辐射传输方程^[10],边界元法具有降维效应,因而涉及的未知量少,计算量相对较小,但该方法需要有边界形状信息的支持且对于边界上格林函数的处理较为繁琐. Klose 等研究了稳态二维辐射传输方程的有限差分求解法^[6],有效提高了计算效率,在二维 DOT 成像模态中具有潜在的使用价值^[11],但该方法将二维辐射传输方程中散射角限制在平面内进行离散,因而违背了光在组织体传播的实际物理规律.本文针对小尺寸组织体 DOT 成像问题,发展新的二维辐射传输方程有限差分求解法,其中,对方程中散射角在三维立体角内进行离散,从而严格保持了二维辐射传输方程的实际物理意义.

1 辐射传输方程

在无限组织体空间中,精确描述光子输运过程的稳态辐射传输方程如式(1)^[12]

$$(s \cdot \nabla + \mu_a(r) + \mu_s(r))\Phi(r, s) = \mu_s(r) \int_{4\pi} p(s, s')\Phi(r, s')ds' + q(r, s) \quad (1)$$

式中, $\Phi(r, s)$ 为辐射率,表示空间某一位置 r , 在 s 方向上单位立体角内的平均功率,单位为 $\text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1}$; $q(r, s)$ 为源项; μ_a 和 μ_s 分别为吸收和散射系数,单位是 m^{-1} ; $p(s, s')$ 为相位函数,表示其它某一方向 s' 上的辐射率向方向 s 上散射的概率,本文中采用了在生物医学光子学研究中广泛使用的 Henyey-Greenstein 相位函数^[13]

*国家自然科学基金(30870657, 30978049)、国家重点基础研究发展计划(2006CB705700)、国家高技术研究发展计划(2009AA02Z413)和天津市自然科学基金(09JCYBJC06600)资助

Tel: 022-87898820 Email: kingman1980@hotmail.com

收稿日期: 2010-01-29

修回日期: 2010-04-07

$$p(s, s') = \frac{1 - g^2}{4\pi(1 + g^2 - 2g \cdot (s \cdot s'))^{3/2}} \quad (2)$$

式中 $g \in [-1, 1]$ 称为各向异性系数: $g > 0$ 表示前向散射, $g = 0$ 表示迷向散射, 而 $g < 0$ 时, 表示后向散射. 对于生物组织体而言, 一般情况下 $g \geq 0$. 对 $\Phi(r, s)$ 在某一点上对全立体角积分可以得到该点的光子密度 $\Gamma(r)$

$$\Gamma(r) = \int_{4\pi} \Phi(r, s) ds \quad (3)$$

在有限空间 ξ 内数值求解辐射传输方程, 需要设定边界条件, 本文采用内向流为零边界条件

$$\Phi(r, s) = 0 \quad s \cdot n < 0, r \in \partial\xi \quad (4)$$

n 为空间区域 ξ 的边界上的点 r 的外法向. 内向流为零边界条件也叫自由表面边界条件或者真空边界条件. 其物理意义为: 当光子一旦从有限空间区域表面 $\partial\xi$ 溢出, 就不再重新进入这一区域. 组织体表面上某点 r 处可测量的前向光子密度 $\Gamma_+(r)$ 可以表示成

$$\Gamma_+(r) = \int_{s \cdot n > 0} \Phi(r, s) ds \quad r \in \partial\xi \quad (5)$$

对于直角坐标系, 用 φ 表示方向 s 与 z 坐标轴之间的夹角, 即维角, 用 θ 表示方向 s 与 x 坐标轴之间的夹角即经角, 辐射传输方程可以写成

$$\begin{aligned} & (\cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial y} + \cos \phi \frac{\partial}{\partial z} + \\ & \mu_a(r) + \mu_s(r)) \Phi(r, \phi, \theta) = \mu_s(r) \int_{2\pi\pi} p(\varphi, \theta, \phi', \\ & \theta') \Phi(r, \phi', \theta') \sin \phi' d\phi' d\theta' + q(r, \phi, \theta) \end{aligned} \quad (6)$$

2 立体角离散

使用数值求解方法求解辐射传输方程, 首先要对立体角进行离散. 本文对常用的离散纵标方法进行了改进. 离散纵标方法最早由卡尔逊 (B. G. Carlson) 应用于输运方程的求解^[14], 也被称为离散 SN 方法. 这种方法的基本思想是: 在二维及三维情况下, 对立体角在纬角方向进行离散, 获得 N 个不同的纬角区间, 同时对于不同的纬角区间, 经角按照某一规则进行离散, 最终获得整个立体角的离散. 本

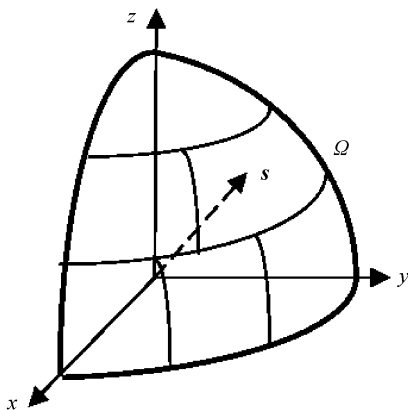


图 1 立体角离散
Fig. 1 Solid angle discretization

文所采用的立体角离散方法如图 1. 假设在某一个立体角元中, 辐射率相等, 即等于该立体角范围内的平均辐射率. 为了方便起见, 本文用 $\Phi_k(r)$ 代表 r 点处第 k 个立体角元内的平均辐射率, θ_k^+ 和 θ_k^- 分别代表第 k 个立体角元所对应的经角的上、下限, φ_k^+ 和 φ_k^- 分别代表第 k 个立体角元所对应的纬角的上、下限. 则方程 (3) 可以离散为

$$\begin{aligned} \Gamma(r) &= \int_{4\pi} \Phi(r, s) ds = \sum_k \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} [\Phi(r, \phi, \theta) \cdot \\ & \sin \varphi] d\phi d\theta = \sum_k \Phi_k(r) \cdot \Omega_k \end{aligned} \quad (7)$$

式中 Ω_k 为第 k 个立体角元所对应的单位球面的面积

$$\Omega_k = \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} (\sin \phi) d\phi d\theta \quad (8)$$

显然, 当离散角度取得足够密时, 便可得到所需要的准确度. 接下来对辐射传输方程进行角度离散. 对式 (6) 在第 k 个立体角元内积分, 则式 (6) 左边的方向导数项可以表示成

$$\begin{cases} \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} \left[\cos \theta \sin \varphi \frac{\partial \Phi(r, \phi, \theta)}{\partial x} \sin \phi \right] d\phi d\theta = \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial x} \alpha_k \\ \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} \left[\sin \theta \sin \phi \frac{\partial \Phi(r, \phi, \theta)}{\partial y} \sin \varphi \right] d\varphi d\theta = \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial y} \beta_k \\ \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} \left[\cos \phi \frac{\partial \Phi(r, \phi, \theta)}{\partial z} \sin \phi \right] d\phi d\theta = \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial z} \chi_k \end{cases} \quad (9)$$

式中,

$$\begin{cases} \alpha_k = \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} (\cos \theta \sin \varphi \sin \phi) d\phi d\theta \\ \beta_k = \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} (\sin \theta \sin \varphi \sin \phi) d\phi d\theta \\ \chi_k = \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} (\cos \phi \sin \varphi) d\phi d\theta \end{cases} \quad (10)$$

式 (10) 中的定积分可以直接求得解析式. 式 (6) 等号右边的积分项则表示为下列数值计算形式

$$\begin{aligned} & \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} \int_{-2\pi\pi} p(\varphi, \theta, \phi', \theta') \Phi(r, \phi', \theta') \sin \phi' d\phi' d\theta' \cdot \\ & \sin \phi d\phi d\theta = \sum_{k'} \Phi_{k'}(r) \cdot \zeta_{kk'} \end{aligned} \quad (11)$$

式中,

$$\begin{aligned} \zeta_{kk'} &= \int_{\theta_k^-}^{\theta_k^+} \int_{\varphi_k^-}^{\varphi_k^+} \int_{\theta_{k'}^-}^{\theta_{k'}^+} \int_{\varphi_{k'}^-}^{\varphi_{k'}^+} p(\phi, \theta, \phi', \theta') \sin \phi' d\varphi' d\theta' \cdot \\ & \sin \phi d\phi d\theta \end{aligned} \quad (12)$$

它可以看作是第 k' 个立体角元内辐射率 $\Phi_{k'}$ 向第 k 个立体角元内散射的概率. 由于式 (12) 中的四重积分很难直接求得解析解, 本文采用 4 点拉格朗日插

值求积公式对此进行数值求积. 于是, 由式(8)~(12)可以得到散射角离散下、关于空间某点 r 的 A_n 个辐射传输方程组

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial x} \alpha_k + \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial y} \beta_k + \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial z} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k \Phi_k(r) = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{k'}(r) \zeta_{kk'} + q_k(r) \\ (k=1, 2, 3, \dots, A_n) \end{aligned} \quad (13)$$

3 空间离散

如图 2, 假设模拟组织体为在 x 方向上无限长

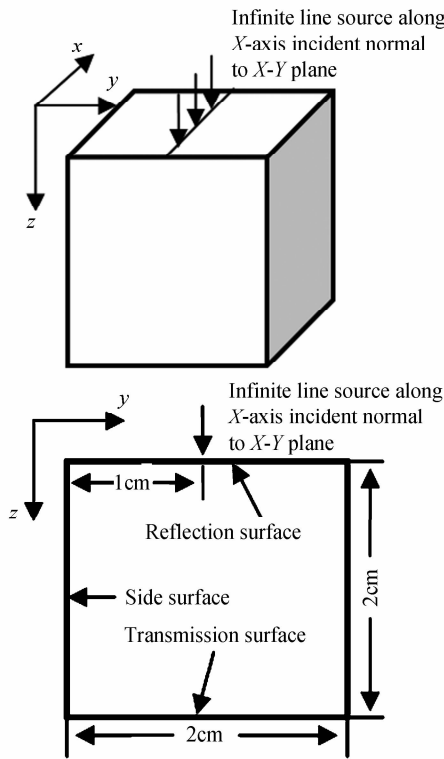


图 2 模拟组织体形状和光源位置

Fig. 2 The shape of simulated phantom and source position

的立方体, 截面边长为 2 cm, 光源为与 x 方向平行的无限长准直线光源, 准直方向垂直于 xy 平面. 在这种情况下, 组织体内部的光子辐射率在 x 方向上的变化率为零

$$\frac{\partial \Phi(r, s)}{\partial x} = 0 \quad (14)$$

散射角离散化的辐射传输方程退化为二维情形

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial y} \beta_k + \frac{\partial \Phi_k(r)}{\partial z} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \cdot \Omega_k \Phi_k(r) = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{k'}(r) \zeta_{kk'} + q_k(r) \end{aligned} \quad (15)$$

从式(15)可以看到, 二维辐射传输方程仍然考虑了光子传播过程中在立体角内的散射, 而不是仅仅在二维平面内散射, 这更符合光子传播的实际物理过程. 本文在 yz 平面内采用正方形网格, 进行二维空间离散, 空间网格在 y 方向和 z 方向上步长相等都为 h . 为了方便起见, 用 i, j 分别表示 y 方向和 z 方向上的节点标号. $\Phi_{i,j,k}$ 表示在 (i, j) 节点位置上, 第 k 个立体角元内的平均辐射率. 对于空间某一节点 (i, j) , 对于不同的 β_k, χ_k , 辐射传输方程中的偏导数项采用不同的差商近似

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi_{i,j,k}}{\partial y} \approx \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i-1,j,k}}{h} & \beta_k > 0 \\ \frac{\partial \Phi_{i,j,k}}{\partial z} \approx \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i,j-1,k}}{h} & \chi_k > 0 \\ \frac{\partial \Phi_{i,j,k}}{\partial y} \approx \frac{\Phi_{i+1,j,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} & \beta_k < 0 \\ \frac{\partial \Phi_{i,j,k}}{\partial z} \approx \frac{\Phi_{i,j+1,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} & \chi_k < 0 \end{cases} \quad (16)$$

根据式(13)~(16), 可以得到二维辐射传输方程组对于空间节点 (i, j) 上的有限差分格式

$$\begin{cases} \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i-1,j,k}}{h} \beta_k + \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i,j-1,k}}{h} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \cdot \Omega_k \cdot \Phi_{i,j,k} = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'} \zeta_{kk'} + q_{i,j,k} & \beta_k > 0, \chi_k > 0 \\ \frac{\Phi_{i+1,j,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} \beta_k + \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i,j-1,k}}{h} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k \Phi_{i,j,k} = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'} \zeta_{kk'} + q_{i,j,k} & \beta_k < 0, \chi_k > 0 \\ \frac{\Phi_{i,j+1,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} \beta_k + \frac{\Phi_{i+1,j,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k \Phi_{i,j,k} = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'} \zeta_{kk'} + q_{i,j,k} & \beta_k < 0, \chi_k < 0 \\ \frac{\Phi_{i,j,k} - \Phi_{i-1,j,k}}{h} \beta_k + \frac{\Phi_{i+1,j,k} - \Phi_{i,j,k}}{h} \chi_k + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k \Phi_{i,j,k} = \mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'} \zeta_{kk'} + q_{i,j,k} & \beta_k > 0, \chi_k < 0 \end{cases} \quad (17)$$

$(k=1, 2, 3, \dots, A_n)$

4 光源的离散

在所述二维情形下, 本文所采用的无限长定向线光源可以表示为

$$q(r, s) = \delta(y - y_0, z - z_0, s - n_{xy}^-) \quad (18)$$

式中 y_0 和 z_0 表示光源在 yz 平面中的位置, 为 xy

平面内法向. 对式(18)进行上文所采用的空间离散和立体角积分可以得到离散后的源项 $q_{i,j,k}$

$$\begin{cases} q_{i,j,k} = 1 & i = i_0, j = j_0, k = k_0 \\ q_{i,j,k} = 0 & i \neq i_0, j \neq j_0, k \neq k_0 \end{cases} \quad (19)$$

式中 i_0 和 j_0 表示了光源位置 (y_0, z_0) 所在空间网格的节点标号, k_0 表示角度离散后, 光源方向所在的第 k_0 个立体角元. 在本文所采用的空间网格和角度离散中, 光源项仅在光源所在空间节点位置上的光源方向所在的离散立体角元上有值, 其他位置上均为零, 可以得到源向量 Q . 为了充分模拟准直点光源, 本文对立体角的离散处理进行了改进: 把准直光源方向所在的立体角元取得很小, 最大程度接近准直点光源, 且这个立体角元不随离散角度数量的变化而变化. 这样, 改变角度离散的数量, 离散后的光源并不随之改变. 根据式(17)和(19)可以写出角度离散和空间离散之后的方程组, 用矩阵形式可以表

示为

$$K\Phi=Q \quad (20)$$

该方程的系数矩阵 K 为大规模稀疏矩阵且对角元素占优, 因此可以用 Gauss-Seidel 迭代方法有效地求解^[15].

5 迭代过程

设 $\phi_{i,j,k}^l$ 表示第 l 次迭代获得的 (i, j) 节点上第 k 个立体角元上的平均辐射率, 选取源项为迭代的初值

$$\Phi_{i,j,k}^0 = q_{i,j,k} \quad (21)$$

于是, 得到求解方程组(17)所需要的 Gauss-Seidel 迭代格式

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{i,j,k}^{l+1} = \frac{\mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'}^l \zeta_{kk'} + \frac{\Phi_{i-1,j,k}^l \beta_k + \frac{\Phi_{i,j-1,k}^l \chi_k}{h}}{h} + \frac{\Phi_{i-1,j,k}^l \beta_k + \frac{\Phi_{i,j-1,k}^l \chi_k}{h}}{h}}{\frac{\beta_k}{h} + \frac{\chi_k}{h} + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k} \quad (\beta_k > 0, \chi_k > 0) \\ \Phi_{i,j,k}^{l+1} = \frac{\mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'}^l \zeta_{kk'} - \frac{\Phi_{i+1,j,k}^l \beta_k + \frac{\Phi_{i,j-1,k}^l \chi_k}{h}}{h}}{-\frac{\beta_k}{h} + \frac{\chi_k}{h} + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k} \quad (\beta_k < 0, \chi_k > 0) \\ \Phi_{i,j,k}^{l+1} = \frac{\mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'}^l \zeta_{kk'} - \frac{\Phi_{i+1,j,k}^l \beta_k - \frac{\Phi_{i,j+1,k}^l \chi_k}{h}}{h}}{-\frac{\beta_k}{h} - \frac{\chi_k}{h} + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k} \quad (\beta_k < 0, \chi_k < 0) \\ \Phi_{i,j,k}^{l+1} = \frac{\mu_s(r) \sum_{k'} \Phi_{i,j,k'}^l \zeta_{kk'} + \frac{\Phi_{i-1,j,k}^l \beta_k - \frac{\Phi_{i,j+1,k}^l \chi_k}{h}}{h}}{\frac{\beta_k}{h} - \frac{\chi_k}{h} + (\mu_a(r) + \mu_s(r)) \Omega_k} \quad (\beta_k > 0, \chi_k < 0) \end{array} \right. \quad (22)$$

根据式(7), 计算每次迭代得到空间网格节点上的光子密度 Γ^l . 取下列相对误差为迭代终止判据

$$\frac{\|\Gamma^{l+1} - \Gamma^l\|}{\|\Gamma^{l+1}\|} < 10e^{-5} \quad (23)$$

由式(21)~(23), 可以首先获得在边界光源激励下, 空间区域 ξ 内各个网格点上离散方向上的平均辐射率, 再由插值方法和式(3)和(5)可得到空间区域 ξ 内任意点上的光子密度以及边界上的前向光子密度.

6 数值计算结果

为了验证算法的有效性, 本文对四组不同光学参量的边长为 2 cm 的正方形模拟组织体(如图 2)进行了数值求解辐射传输方程和蒙特卡洛模拟. 以 Lihong Wang 的蒙特卡洛模拟程序为基础进行了修改^[16]: 在无限半平面上加入了无限长长方体边界, 在准直点光源激励的情况下, 当光子溢出边界时, 记录下光子的权重和溢出位置的非无限长方向上的二维坐标同时舍弃溢出光子, 并将相同二维坐

标上的溢出光子权重进行加和, 最终可得到无限长长方形组织体在准直线源激励下表面的前向光子密度. 在不同的空间网格步长 h 和角度离散数量 A_n 的情况下, 采用前文所述方法对辐射传输方程进行有限差分求解, 并根据式(5)计算了表面前向光子密度, 并与蒙特卡洛结果进行比对. 对于不同的光学参量的模拟组织体, 比对了在扩散光学成像中常用的归一化数值, 即将所得到各个面上的前向光子密度都除以其最大值, 所得到的相对值. 图 3 和图 4 分别展示了不同角度离散数量和不同空间网格情况下, 通过数值求解辐射传输方程获得的模拟组织体三个表面上的前向光子密度和蒙特卡洛模拟结果进行的比对. 最后计算了在角度离散数 A_n 为 168 个, 空间网格步长 h 为 0.1 mm 的情况下, 在反射面上获得的光子密度, 并和蒙特卡洛模拟结果进行了比对, 如图 5. 从图 5 中可以看到在空间网格步长 h 达到 0.1 mm 时, 对辐射传输方程进行有限差分求解得到的反射面上的前向光子密度和相应的蒙特卡洛模拟的结果吻合良好.

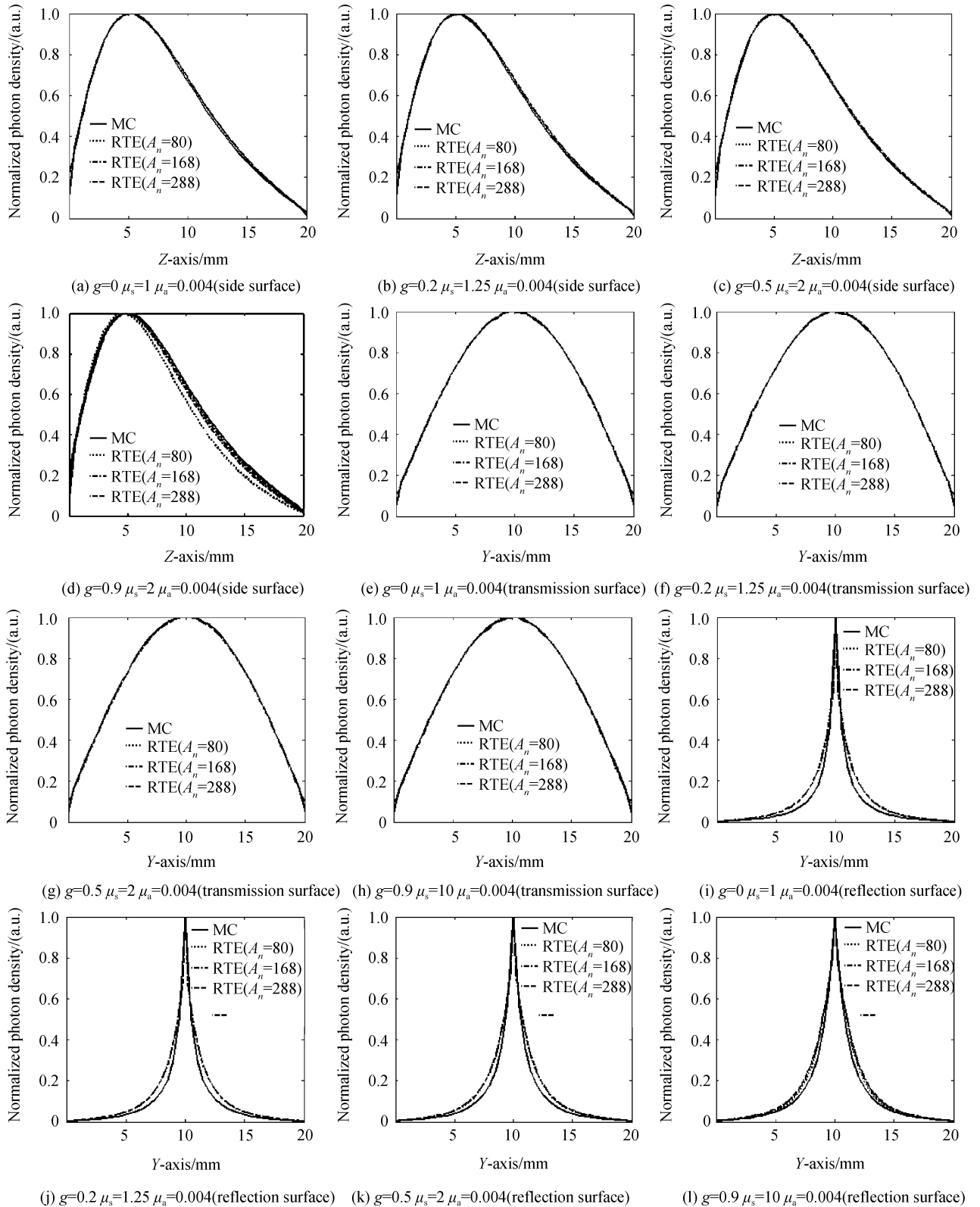


图3 相同的空间网格步长 $h=0.25$, 不同的角度离散数量 A_n 下, 数值求解辐射传输方程得到的模拟组织体各个面上的前向光子密度和相应蒙特卡罗模拟结果的归一化比对

Fig. 3 The comparisons of normalized photon density on three different surfaces acquired from the numerical solutions to RTE with different angle discretization and MC simulation

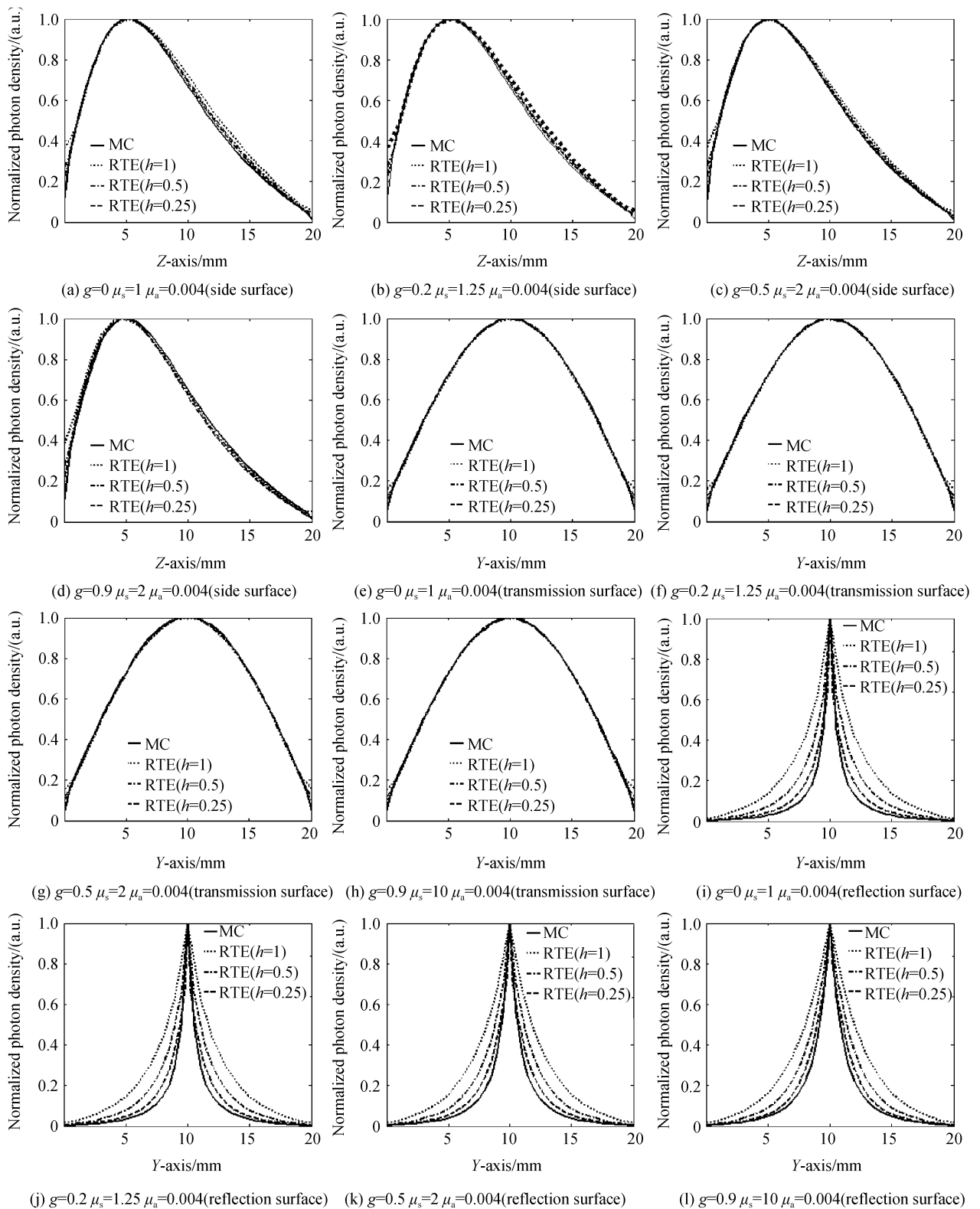


图4 相同的角度离散数量 $A_n=168$,不同的空间网格步长 h 下,数值求解辐射传输方程得到的模拟组织体各个面上的前向光子密度和相应蒙特卡罗模拟结果的归一化对比

Fig. 4 The comparisons of normalized photon density on three different surfaces acquired from the numerical solutions to RTE with different spatial step size and MC simulation

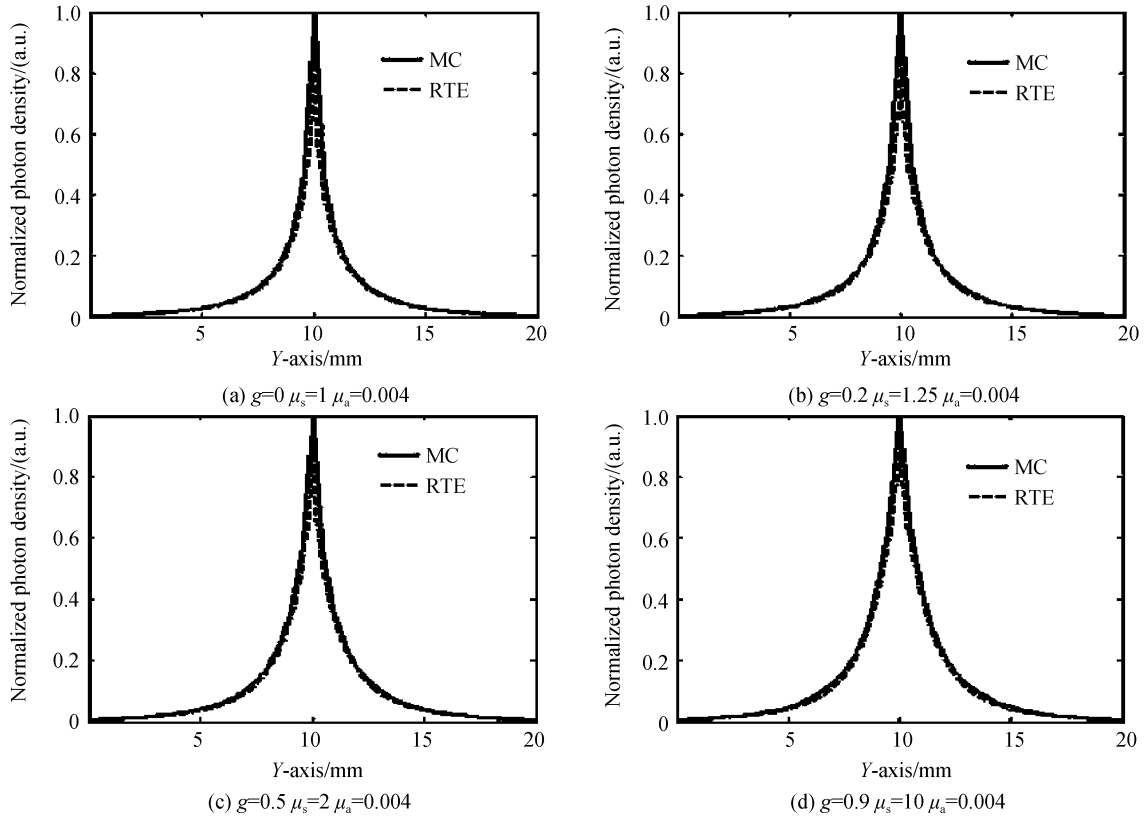


图5 离散角度数量 $A_n=168$ 、空间网格步长 $h=0.1$ mm 时,在不同光学参数条件下数值求解辐射传输方程得到的反射面上的前向光子密度和蒙特卡洛模拟结果的归一化对比

Fig. 5 The comparisons of normalized photon density on reflection acquired from the numerical solutions to RTE with spatial step size $h=0.1$ mm and MC simulations

7 结论

通过对不同光学参量、不同空间网格和角度离散数量下的辐射传输方程进行有限差分求解,可以看到:当角度离散数量达到 168,空间网格步长在 0.1 mm 左右的情况下,由辐射传输方程的有限差分分解得到的模拟组织体表面的光子密度和通过蒙特卡洛模拟得到的表面光子密度在本文所采用的不同的光学参量的条件下都符合的很好,由此说明本文所述之辐射传输方程的有限差分分解法可以很好的模拟光在均匀介质中的传播.对于非均介质,只需将有限差分网格上光学参量赋值为所在位置对应的非均光学参值,上述有限差分法即可直接推广到非均情形.由于非均匀介质的蒙特卡洛模拟较为复杂,本文未涉及非均媒质情况下的两者的比对验证.

在相同空间网格,不同角度离散的情况下,可以看到当角度离散数量超过 80 时,在各个面得到的光子密度并没有明显的改变.通常情况下,在扩散光学层析需要对正问题进行大量的计算,由于求解辐射传输方程十分耗时,因此要求在满足合理准确度的条件下,正问题的计算时间应尽可能短.对于辐射传输方程的数值求解,角度离散和空间网格的数量决定了计算时间,因此在达到必要准确度要求的条件

下,选择最少的角度离散数量和空间网格是探讨基于辐射传输理论的 DOT 方法的重要课题.本文的数值验证研究表明,在以辐射传输方程为基础的 DOT 成像中采用 80 个离散立体角即可满足准确度要求.

当角度离散数量保持确定后,本文通过求解辐射传输方程获得的在透射面和侧面的光子密度的精确度并没有因为空间网格步长的减小而有明显改善;而在反射面,在反射面获得的光子密度对空间网格步长非常敏感.这表明,在扩散光学层析成像中,如果光源和探测器距离较近,例如,对于正方形的组织体,测量量为反射面上的光子密度,需要高密度的空间网格来构建正向模型,而通过测量透射面和侧面上的前向光子密度来重建内部光学参量可以根据实际情况选择较稀疏的空间网格.透射型成像对空间网格步长无苛刻要求,按本文计算结果,应至少为 1.0 mm;反射型成像,空间网格步长则应至少为 0.25 mm.

综上所述,本文发展的符合组织体内光子物理过程的二维辐射传输方程有限差分求解技术,为进一步发展基于通用光子运输模型的扩散光学层析理论,特别是基于小动物模型的荧光扩散光学层析方法,建立必要的基础.

参考文献

- [1] GIBSON A P, HEBDEN J C, ARRIDGE S R. Recent advances in diffuse optical imaging[J]. *Phys Med Biol*, 2005, **50**(4): R1-R43.
- [2] ZHAO Hui-juan, GAO Feng, YUKARI T, *et al.* Time-resolved diffuse optical tomography and its application to in vitro and in vivo imaging[J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2007, **12**(6): 062107.
- [3] GAO Feng, ZHAO Hui-juan, YUKARI T, *et al.* Optical tomographic mapping of cerebral haemodynamics by means of time-domain detection: methodology and phantom validation [J]. *Phys Med Biol*, 2004, **49**(6): 1055-1078.
- [4] YANG Fang, GAO Feng, MA Yi-wen, *et al.* A method of improving image quality in diffuse optical tomography based on spline interpolation of measurement space[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(9): 2428-2434.
- [5] NTZIACHRISTOS V, TUNG C H, BREMER C. *et al.* Fluorescence molecular tomography resolves protease activity in vivo[J]. *Nat Med*, 2002, **8**(7): 757-761.
- [6] KLOSE A D, NETZ U, BEUTHAN J, *et al.* Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer-Part 1: forward model[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2002, **72**(5): 691-713.
- [7] KIM A D, MOSCOSO M. Light transport in two-layer tissues [J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2005, **10**(3): 034015.
- [8] KIM H K, CHARETTE A. Frequency domain optical tomography using a conjugate gradient method without line search[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2007, **104**(2): 248-256.
- [9] ARRIDGE S R, DEGHANI H, SCHWEIGER M, *et al.* The finite element model for the propagation of light in scattering media: a direct method for domains with nonscattering regions[J]. *Med Phys*, 2000, **27**(1): 252-264.
- [10] RIPOLL J, NTZIACHRISTOS V. Iterative boundary method for diffuse optical tomography[J]. *JOSA A*, 2003, **20**(6): 1103-1110.
- [11] SCHWEIGER M, ARRIDGE S R. Comparison of two-and three-dimensional reconstruction methods in optical tomography[J]. *Appl Opt*, 1998, **37**(31): 7419-7428.
- [12] DUDERSTADT J J, MARTIN W R. Transport theory[M]. New York: Wiley, 1979.
- [13] WELCH A J, van GEMERT M J C. Optical-thermal response of laser irradiated tissue[M]. New York: Plenum Press, 1995; 144-148.
- [14] CARLSON B G. Transport theory: discrete ordinate quadrature over the unit sphere[R]. LANL, Rept. LA-4554, Los Alamos Nat. Lab., 1970.
- [15] AMES W F. Numerical methods for partial differential equations[M]. New York: Academic Press, 1977.
- [16] WANG L H, JACQUES S L, ZHENG L Q. MCML-Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues[J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 1995, **47**(2): 131-146.

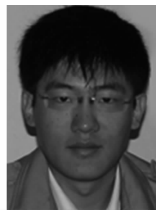
A Finite-Difference-Method Solution to Two-dimensional Steady-State Radiative Transfer Equation

JIN Meng, GAO Feng, LI Jiao, ZHAO Hui-juan

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

Abstract: A novel finite difference method (FDM) solution to the 2-dimensional time-independent radiative transfer equation (RTE) is proposed for small-animal imaging applications, which is based on the real physics of 3-dimensional scattering of a photon in turbid medium. The influences of the angular discretization and the spatially meshing grids on the accuracy of FDM-RTE solution are investigated and a comparison is made between the FDM-RTE calculations to the relevant Monte-Carlo simulation ones for a validation of the proposed method. The comparison shows that, as the number of the discretized solid angles is over 80, the accuracy of the FDM-RTE calculated forward photon density is insensitive to the spatially meshing grids on the transmission and side surfaces but on the reflection surface. This study provides a viable methodology to the development of the RTE-based Diffuse Optical Tomography (DOT) technology.

Key words: Radiative transfer equation; Finite difference method; Diffuse optical tomography; Forward model



JIN Meng was born in 1980. Now he is a Ph. D. degree candidate at Institute of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, and his current research interests focus on diffuse optical tomography.



GAO Feng was born in 1963, and received his Ph. D. degree from Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, Chinese Academy of Sciences, in 1998. Since 2004, he has been a faculty at College of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, as a professor. His current research interests focus on diffuse optical/fluorescent tomography, near-infrared tissue spectroscopy and biomedical photonic instruments.