

文章编号:1004-4213(2011)07-1117-5

辐射传输方程的三阶球谐展开(P_3)近似的有限元法求解

马文娟, 高峰, 朱芊芊, 易茜

(天津大学 精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072)

摘 要:从辐射传输方程出发,应用球谐函数方法对辐射率进行多项式展开,并利用球谐函数的正交性和递推性,在二维笛卡尔坐标下,导出了三阶展开的球谐函数微分方程组(P_3 近似),改进了以往成像文献中忽略各项异性因子的 P_3 近似,并用有限元方法对二维圆域均匀和非均匀两种情况做了数值模拟.与漫射近似模型相比较, P_3 近似能更准确地描述光源附近及吸收较强情况下边界的光辐射分布情况.

关键词:辐射传输方程;球谐函数;扩散方程;有限元方法;蒙特卡洛模拟

中图分类号: Q63

文献标识码: A

doi: 10.3788/gzxb20114007.1117

0 引言

为得到光在组织中传输时光通量的空间分布,原则上须求解光子辐射传输方程^[1-4].目前对于辐射传输方程的求解可分为统计方法和确定论方法两类,统计方法主要为蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)方法^[5-8],计算准确度高且通用,但需要跟踪大量光的行迹,因此计算量很大;确定论方法目前最常见的主要有离散纵标(S_N)方法^[9-10]和球谐函数(P_N)方法^[11-12]. S_N 方法通用直观,但对强各向异性介质问题必须通过增加方向离散密度来提高计算准确度,这必将导致计算量的急剧增加,且此方法存在“射线效应”,即由于方法本身的固有特性所导致的在强吸收介质中解的严重失真. P_N 方法能够避免“射线效应”,对于非均匀性及各项异性强的复杂介质中光子输运问题,理论上只要提高阶数 N ,即可达任意准确度.

目前广泛应用的扩散方程光子输运模型是对辐射传输方程的一阶球谐展开近似(P_1 近似)^[13-14],此理论模型主要适用于描述一些大尺寸散射均匀介质远源区的光辐射分布,如大腿、前臂和胸部肌肉组织等.对小动物体,或吸收较强的病变组织,由此模型得到的光辐射分布将与实际有很大误差,已不能满足生物医学应用特别是小动物扩散光学成像中对精

确光子输运模型的需要.相对于扩散近似来说,由于 P_3 近似采用了辐射传输方程的三阶近似,因而合理地考虑了组织内光子的各向异性输运信息,能更为有效地解决近光源附近和强吸收情况下组织边界光辐射量的求解问题,这将在小尺寸组织体、局部、浅表或吸收较强的病变组织的无创医学诊断和治疗中具有重要的应用价值.以往论文导出了二维的扩散 P_3 近似方程组,但是其推导过程采用与漫射近似类同的处理手段,把复杂的散射过程简化为各向同性的散射过程,因此过多地忽略了光子输运的各向异性特征^[15].

本文在二维笛卡尔坐标下,考虑了散射过程各向异性,导出了新的辐射传输方程三阶球谐近似方程组(P_3 近似),在此基础上应用有限元方法对二维圆域均匀和非均匀两种情况做了数值模拟.与漫射近似模型相比较,本文推导出来的 P_3 近似能更准确地描述光源附近及吸收较强情况下边界的光辐射分布情况.

1 辐射传输方程的 P_3 近似

稳态辐射传输方程为^[16]

$$\mathbf{s} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + (\mu_a + \mu_s) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \frac{\mu_s}{4\pi} \int_{4\pi} f(\mathbf{s}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}' + S(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \quad (1)$$

基金项目:国家自然科学基金(No. 30870657、No. 30970775)、国家高技术研究发展计划(No. 2009AA02Z413)和天津市自然科学基金(No. 09JCZDJC18200、No. 10JCZDJC17300)资助

第一作者:马文娟(1982-),女,博士研究生,主要研究方向为扩散光层析成像. Email: mawenjuan08@yahoo.com.cn

导师(通讯作者):高峰(1963-),男,教授,主要研究方向为生物光子学、生物医学光电成像理论、技术及应用. Email: gaofeng@tju.edu.cn

收稿日期:2010-09-26; **修回日期:**2010-12-29

式中 $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 是 \mathbf{r} 处 \mathbf{s} 方向上的辐射率, μ_a, μ_s 分别是吸收系数和散射系数, $f(\mathbf{r}, \mathbf{s}')$ 是相位函数, $S(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ 是光源所产生的辐射强度. 对于辐射传输方程的求解, 可采用球谐函数法^[17]. 球谐函数法是用球谐函数作为基函数来展开角通量 $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, 将求解方程约化为求解展开系数所满足的微分方程组的方法. 在直角坐标系下

$$\mathbf{s} \cdot \nabla = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} \quad (2)$$

对式(1)中的辐射率和相位函数用球谐函数展开

$$\Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \sum_{l=0}^N \sum_{m=0}^l (2l+1) P_l^m(\cos \theta) [\psi_{lm}(r) \cdot \cos(m\varphi) + \gamma_{lm}(r) \sin(m\varphi)] \quad (3a)$$

$$f(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_l p_l(\cos \theta_1) \quad (3b)$$

式中 θ 和 φ 是单位向量 Ω 的轴向角和方位角, $p_l^m(\cos \theta)$ 是连带勒让德多项式, $\psi_{lm}(r)$ 和 $\gamma_{lm}(r)$ 是待定系数. $p_l(\cos \theta_1)$ 是规则勒让德多项式且

$$\cos \theta_1 = \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}' = \cos \theta' \cos \theta + \sin \theta' \sin \theta \cdot \cos(\varphi - \varphi') \quad (4)$$

对于均匀散射介质, $f(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}')$ 仅是散射角 θ_1 的函数, 所以 $f(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = f(\cos \theta_1)$, g_l 是散射相函数的 l 阶数, 分别有

$$\begin{aligned} g_0 &= 1 \\ g_1 &= \int_0^\pi \cos \theta_1 f(\cos \theta_1) d\cos \theta_1 \\ g_2 &= \int_0^\pi \left[\frac{1}{2} (3\cos^2 \theta_1 - 1) f(\cos \theta_1) \right] d\cos \theta_1 \\ g_3 &= \int_0^\pi \left[\frac{1}{2} (5\cos^3 \theta_1 - 3\cos \theta_1) f(\cos \theta_1) \right] d\cos \theta_1 \end{aligned}$$

把式(3)代入式(1)并经过一系列推导可得 PN 方程组^[11]

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \psi_{l-1, m-1}}{\partial x} - \frac{\partial \gamma_{l-1, m-1}}{\partial y} - \frac{\partial \psi_{l+1, m-1}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{l+1, m-1}}{\partial y} + \\ & (l+m+2)(l+m+1) \left(\frac{\partial \psi_{l+1, m+1}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{l+1, m+1}}{\partial y} \right) - \\ & (l-m-1)(l-m) \left(\frac{\partial \psi_{l-1, m+1}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{l-1, m+1}}{\partial y} \right) + \\ & 2(2l+1)\sigma_l \psi_{lm} = 2S \end{aligned} \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \psi_{l-1, m-1}}{\partial y} - \frac{\partial \gamma_{l-1, m-1}}{\partial x} - \frac{\partial \psi_{l+1, m-1}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{l+1, m-1}}{\partial x} + \\ & (l+m+2)(l+m+1) \left(-\frac{\partial \psi_{l+1, m+1}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{l+1, m+1}}{\partial x} \right) - \\ & (l-m-1)(l-m) \left(-\frac{\partial \psi_{l-1, m+1}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{l-1, m+1}}{\partial x} \right) + \\ & 2(2l+1)\sigma_l \gamma_{lm} = 2S \end{aligned} \quad (5b)$$

式中 $\sigma_l = \mu_a + \mu_s(1 - g_l)$. 当取 $N=3$ 时, P_3 近似方

程组可以表示为

$$\frac{1}{3\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla \psi_{00}) - \frac{1}{3\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla \psi_{20}) + \frac{2}{\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla_1 \psi_{22}) + \frac{2}{\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla_2 \gamma_{22}) - \sigma_0 \psi_{00} = -S \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{3\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla \psi_{00}) + \left(\frac{1}{3\sigma_1} + \frac{6}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla \psi_{20}) - \\ & \left(\frac{2}{\sigma_1} + \frac{6}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla_1 \psi_{22}) - \left(\frac{2}{\sigma_1} + \frac{6}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla_2 \gamma_{22}) - 5\sigma_2 \psi_{20} = 0 \end{aligned} \quad (6b)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla_1 \psi_{00}) - \left(\frac{1}{3\sigma_1} + \frac{1}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla_1 \psi_{20}) + \\ & \left(\frac{2}{\sigma_1} + \frac{16}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla \psi_{22}) - 10\sigma_2 \psi_{22} = 0 \end{aligned} \quad (6c)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{6\sigma_1} \nabla \cdot (\nabla_2 \psi_{00}) - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{3\sigma_1} + \frac{1}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla_2 \psi_{20}) + \\ & \left(\frac{1}{\sigma_1} + \frac{8}{7\sigma_3} \right) \nabla \cdot (\nabla \gamma_{22}) - 5\sigma_2 \gamma_{22} = 0 \end{aligned} \quad (6d)$$

式中

$$\nabla = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_1 = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y},$$

$$\nabla_2 = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial x}$$

$\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 分别是 x 轴和 y 轴的单位向量.

理论上, 二维问题对应于无限长柱形组织体由平行无限长线源激励的情形. 本文限定为二维圆域, 边界条件近似为 $\Phi^{(k)}$ ($k=1, 2, 3, 4$ 分别为 $\psi_{00}, \psi_{20}, \psi_{22}, \gamma_{22}$)

$$D\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi^{(1)} = \frac{1-R_f}{1+R_f} \Phi^{(1)}$$

$$(D=1/(3\sigma_1), R_f \text{ 为内反射系数})$$

$$\Phi^{(2)} = \Phi^{(3)} = \Phi^{(4)} = 0$$

本文采用 Galerkin 有限元法^[18]对式(6)进行求解.

2 二维问题的数值模拟及讨论

图 1 中以半径 10 mm, 吸收系数 $\mu_a = 0.01 \text{ mm}^{-1}$, 约化散射系数 $\mu_s = 1 \text{ mm}^{-1}$ 为例, 以圆心为原点, 光源位置为 $(-10, 0)$. 由于 MC 模拟的准确性, 故以此为标准对本文算法进行验证^[16]. 图 1 为各向散射因子 g 为 0.5 和 0.9 的情况下 P_1, P_3 近似和 MC 光源附近边界值的比较. 图 2 为 $R=5 \text{ mm}, \mu_s=10 \text{ mm}^{-1}, g=0.9, \mu_a$ 分别为 0.1, 0.2, 0.5 mm^{-1} 情况下, P_3, P_1 近似和 MC 模拟结果在边界值的比较. 从这两个图可以看出, P_3 近似更接近于 MC 模拟结果, 也就是说在光源附近及吸收较强情况下 P_3 近似更能准确的描述光分布情况.

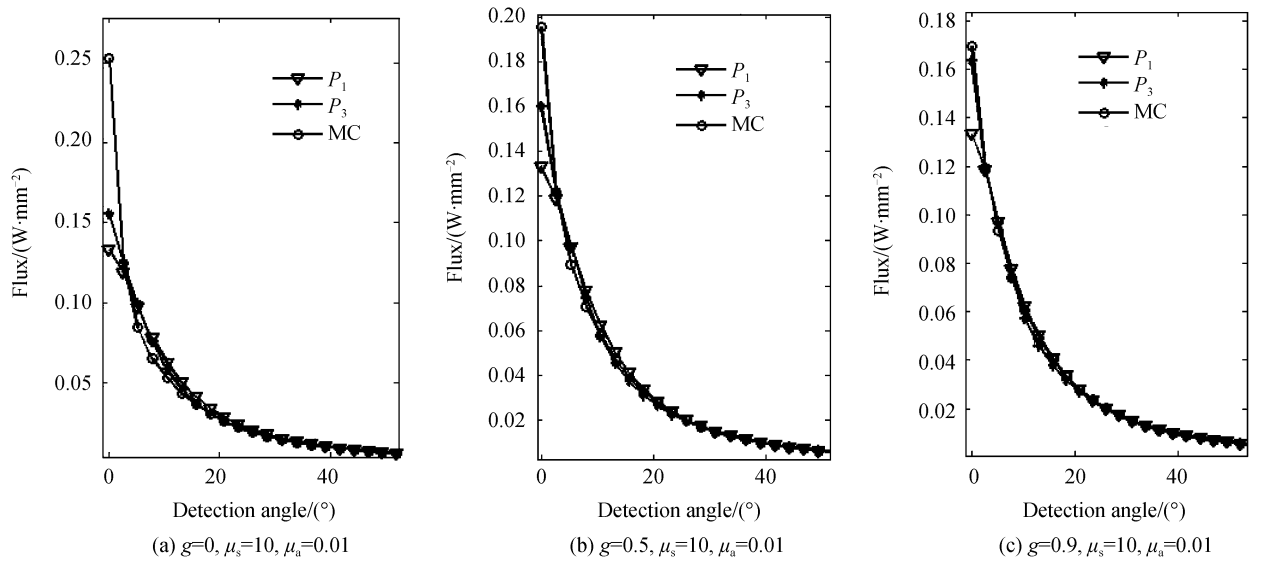


图 1 各向散射因子 g 不同时,光源处 P_1 、 P_3 近似和 MC 模型边界光流量值比较

Fig. 1 Comparison of boundary data for different anisotropic factor g

漫射近似对光源作了各向同性假设,并且由于光在生物组织中具有前向散射特性,使得漫射近似理论仅适用于光源与探测器之间的距离远大于一个输运平均自由程的情况.由式(3)中辐射强度和相函数的展开式可以看出,随着 N 的增大,光辐射分布的各向异性程度增强, P_3 近似中, $\Phi^{(0)}$ 表示总辐射通量率, $\Phi^{(k)}$ ($k=1,2,3$) 分别表示辐射强度的线性、

二次、三次各向异性,所以它较 P_1 更适于研究光源附近和吸收较强组织的辐射强度分布情况.从图 1 可以看出,随着 g 因子的增大, P_3 较 P_1 近似在光源附近更接近于 MC 模型.且从图 2 可能看出,随着 μ_a 的增加,它较 P_1 近似更能准确地描述光分布情况.

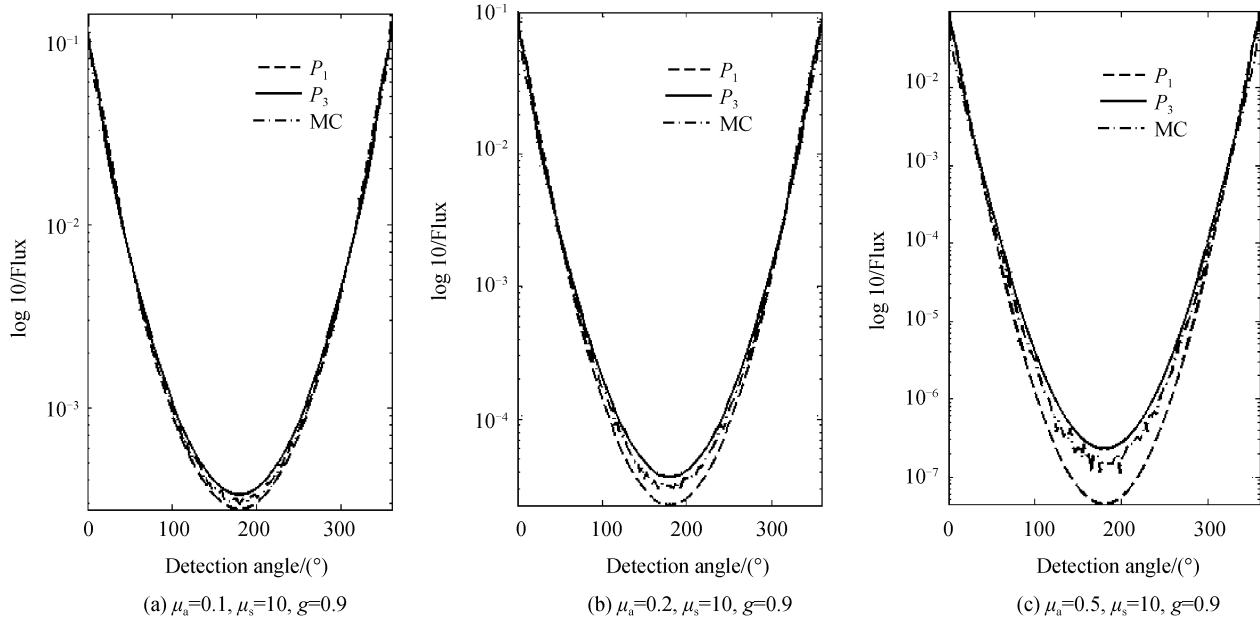


图 2 μ_a 不同时, P_1 、 P_3 和 MC 近似边界值的比较

Fig. 2 Comparison of boundary data for different absorption coefficient targets cases

在非均匀情况下,如图 3,圆半径为 10 mm,异质体大小与位置如图 3,背景的散射系数和吸收系数分别为 10 mm^{-1} 和 0.01 mm^{-1} ,异质体的分别为 30 mm^{-1} 和 0.03 mm^{-1} , g 为 0.9.图 4 和表 1 为光源在 A 点边界上 P_1 、 P_3 近似与 MC 模型的相对误

差值 $\left(\frac{|P_N - MC|}{MC} \times 100\% \right)$ 比较,可以看出, P_3 近似较 P_1 近似更接近 MC 模型,能更准确的描述非均匀组织体内的光分布情况.

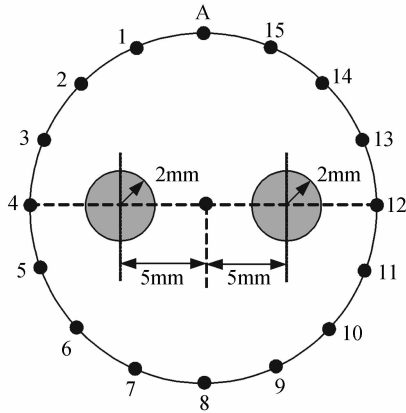


图 3 含有两个异质体的目标体
Fig. 3 Phantom geometry for two targets

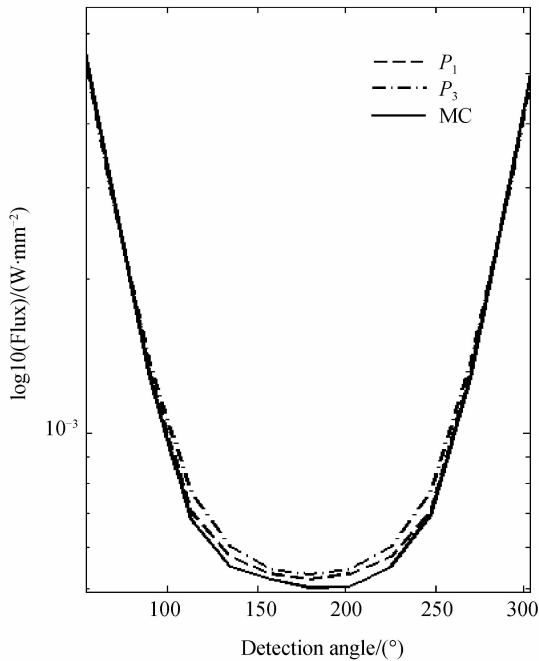


图 4 含异质体的情况下 MC 边界值比较
Fig. 4 Comparison of boundary data for inhomogeneous model of P_1 , P_3 and MC

表 1 含有异质体的情况下, P_1 近似、 P_3 近似与 MC 边界值的相对误差值比较

Table 1 Comparison of relative error of boundary data for inhomogeneous model of P_1 , P_3 and MC simulation

Detection point	Relative (P_1)	Relative (P_3)
1	10.60%	10.79%
2	5.27%	4.54%
3	1.48%	0.38%
4	1.91%	1.49%
5	5.39%	3.50%
6	5.40%	4.47%
7	2.36%	2.36%
8	3.73%	3.78%
9	6.03%	6.03%
10	5.40%	4.47%
11	3.41%	1.56%
12	1.91%	1.49%
13	1.09%	0.01%
14	5.09%	4.36%
15	10.46%	10.66%

3 结论

本文用球谐函数对辐射传输方程进行了三阶近似推导,改进了以往文献中不考虑各项异性因子的 P_3 近似方程组,并用有限元方法对其进行数值求解.由于 P_3 近似考虑了输运方程的高阶近似,含有更多组织内各成份的信息,以二维圆域均匀和非均匀两种情况为例子,可以看出在光源附近和吸收较强的情况下, P_3 近似都比 P_1 近似能更好地描述光辐射分布.接下来的工作可以以 P_3 近似作为正向模型,对小组织体、局部、浅表或吸收较强的病变组织进行吸收和散射系数重建的反演问题求解.

参考文献

[1] KENNETH M C, PAUL F Z. Linear transport theory[M]. Boston: Addison-Wesley Publishing Company, 1967: 278-300.

[2] ISHIMARU A. Wave propagation and scattering in random media Vol. 1: Single scattering and transport theory[M]. New York: Academic, 1978.

[3] STEVEN L J. Tutorial on diffuse light transport[J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2008, **13**(4): 041320.

[4] ANDRE C, JOAN B, HYUN K. An overview on recent radiation transport algorithm development for optical tomography imaging [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2008, **109**: 2743-2766.

[5] YASUO H, YUKIO Y, MAMORU T, et al. Monte-Carlo simulation of light transmission through living tissue[J]. *Appl Opt*, 1991, **30**(31): 4515-4520.

[6] TOSHIYUKI H, YOSHIHIKO K, EIJI O. Hybrid Monte Carlo-diffusion method for light propagation in tissue with a low-scattering region[J]. *Appl Opt*, 2003, **42**(16): 2888-2896.

[7] ZHANG Feng-sheng, WANG Hai-feng, ZHANG Yang. Monte carlo simulation for optical coherence tomography system[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2009, **38**(7): 1820-1825. 张凤生, 王海峰, 张阳. 光学相干层析成像系统的蒙特卡罗模拟[J]. *光子学报*, 2009, **38**(7): 1820-1825.

[8] WEI Pei-feng, ZHAO Yong-qiang, LIANG Yang, et al. Monte carlo simulations of polarized light transport in multi-layered scattering media[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2009, **38**(10): 2634-2639. 卫沛锋, 赵永强, 梁彦, 等. 偏振光在多层散射介质中传输的蒙特卡罗模拟研究[J]. *光子学报*, 2009, **38**(10): 2634-2639.

[9] CARLSON B G. Transport theory discrete ordinate quadrature over the unit sphere[R]. LANL, Rept. LA-4554, Los Alamos Nat. Lab. , 1970.

[10] JIN Meng, GAO Feng, LI Jiao, et al. A finite-difference-method solution to two-dimensional steady-state radiative transfer equation[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, **39**(9): 1594-1601. 金蒙, 高峰, 李娇, 等. 二维稳态辐射传输方程的有限差分求解法[J]. *光子学报*, 2010, **39**(9): 594-1601.

[11] FLETCHER J K. The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 1983, **84**: 33-46.

[12] ARRIDGE S R. Optical in medical imaging [J]. *Inverse Problem*, 1999, **15**: 41-93.

[13] 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.
- [14] MA Yi-wen, XU Ya-jie, GAO Feng, *et al.* Time-domain breast diffuse optical tomography based on image segmentation[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2009, **38**(9): 2423-2429.
马艺闻,徐雅洁,高峰,等.基于图像分割的时域乳腺扩散光学层析成像方法[J]. *光子学报*,2009, **38**(9): 2423-2429.
- [15] JIANG H B. Optical image reconstruction based on the third-order diffusion equation[J]. *Opt Express*, 1999, **4**(8): 241-246.
- [16] 徐可欣,高峰,赵会娟. 生物医学光子学[M]. 北京:科学出版社,2007: 51-68.
- [17] HAROLD J, BERTHA S J. *Methods of mathematical physics*[M]. 3rd ed. New York: Cambridge University Press, 1999.
- [18] MORTON K W, MAYERS D F. *Numerical solution of partial differential equations* [M]. New York: Cambridge University press, 2005.

Finite Element Method for Three-Order (P_3) Approximation of Radiative Transfer Equation

MA Wen-juan, GAO Feng, ZHU Ping-ping, YI Xi

(*School of Precision Instruments and Opto-Electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 30072, China*)

Abstract: The flux takes the form of an expansion in spherical harmonics, and the two-dimensional spherical harmonics equations to three-order for anisotropic scattering is derived. The equations is solved using finite element method and compared the solutions with the first-order diffusion equation and Monte Carlo simulation. The results show that the developed three-order model with high absorption coefficient is able to significantly improve the diffusion solution in circle geometry, and the radiance distribution close to light source is more accurate.

Key words: Radiative transfer; Spherical harmonics; Diffusion equation; Finite element method; Monte Carlo simulation