

# Анализ применимости классических вероятностных параметров алгоритма Монте-Карло для задач переноса света в мутных биологических средах с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием

А.П.Тарасов, С.Першеев, Д.А.Рогаткин

*Моделирование распространения света статистическим методом Монте-Карло (МК) широко используется во многих областях, особенно в астрофизике, атмосферной оптике, оптике океанов и ядерной медицине. В оптике биотканей с помощью метода МК моделируется световой поток внутри биоткани и на ее поверхности, формируемый во время проведения различных медицинских процедур – лечебных или диагностических. В подобных вычислениях метод МК принято считать эталонным, гарантирующим получение сколь угодно большой точности при увеличении числа «фотонов». Между тем можно показать, что это не всегда так. В данной статье в методическом плане рассматриваются идеализированные одномерные задачи теории переноса для мутной среды с непрерывными поглощением и рассеянием и мутной среды с дискретными рассеивателями внутри непрерывно поглощающей среды. Представлены их точные аналитические решения, которые сравниваются с результатами статистического моделирования методом МК. Установлено, что применение классических вероятностных параметров для среды с непрерывными поглощением и рассеянием в алгоритме МК приводит к систематической методической погрешности в определении значений потоков излучения для биологических сред с дискретным рассеянием, вплоть до 10% для потоков на границе в некоторых случаях. Обсуждаются причины возникновения погрешности и показано, как нужно модифицировать вероятностные параметры алгоритма МК для ее устранения.*

**Ключевые слова:** распространение света, мутная среда, биологическая ткань, теория переноса, метод Монте-Карло, коэффициент рассеяния, коэффициент поглощения, альбеда.

## 1. Введение

Как правило, любые томографические или спектрофотометрические диагностические задачи в биологии и медицине связаны с решением обратных задач [1, 2]. Точность же решения обратных задач в первую очередь определяется точностью постановки и решения прямой задачи. Для спектрофотометрических задач наиболее используемой сегодня аналитической теорией, описывающей распространение света в мутных (светорассеивающих) средах на макроуровне, является фотометрическая (кинетическая) теория переноса (ТП), идеологически базирующаяся на кинетическом уравнении Больцмана. Она была обоснована и развита в XX веке в классических работах Хвольсона, Кубелки–Мунка, Гуревича, Милна, Чандрассекара, Амбарцумяна, Исимару и многих других авторов (см., напр., [3–6]). Однако точного аналитического решения общего интегрально-дифференциального

уравнения переноса излучения (УПИ) в замкнутой форме в ТП так и не появилось. Поэтому в конце XX века с созданием мощных вычислительных машин основное внимание исследователей переключилось на статистический численный метод вычислений оптических полей – метод Монте-Карло (МК) (см., напр., [7–10]). В оптике биотканей под методом МК в подавляющем большинстве случаев понимается сегодня статистическое моделирование вероятностного блуждания внутри биоткани условного «фотона» – классического, не квантового, объекта (аналог безразмерной молекулы газа) или сразу пакета таких фотонов. При этом случайные длины свободного пробега фотонов, вероятности их рассеяния и поглощения в среде тесно связаны с ТП и определяются детерминированными коэффициентом поглощения излучения в рассматриваемой среде, альбедо однократного рассеяния (ОР) и фазовой функцией рассеяния (для пространственных задач) [9, 10].

Здесь важно отметить, что классическое фотометрическое УПИ исходно формулируется для макроизотропной среды в предположении, что она априори имеет некие усредненные и не зависящие друг от друга коэффициенты поглощения ( $\mu_a$ ) и рассеяния ( $\mu_s$ ) (их размерность  $\text{см}^{-1}$ ). Микроструктура среды и методология получения данных коэффициентов обычно не рассматриваются в основах теории [4–6]. Коэффициенты считаются заданными. Математически это эквивалентно описанию идеализированной ситуации сплошной среды, непрерывно поглощающей и рассеивающей свет по мере его распространения на любом бесконечно малом отрезке  $dx$  пути в среде, что позволяет получать уравнения для гладкой

**А.П.Тарасов.** Московский областной научно-исследовательский клинический институт им. М.Ф.Владимирского, Россия, 129110 Москва, ул. Щепкина, 61/2; Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова, Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Россия, 119333 Москва, Ленинский просп., 59; e-mail: tarandrew17@gmail.com  
**S.Persheyev.** School of Physics and Astronomy, St Andrews University, UK, Scotland, KY16 9AJ, St Andrews, College Gate  
**Д.А.Рогаткин.** Московский областной научно-исследовательский клинический институт им. М.Ф.Владимирского, Россия, 129110 Москва, ул. Щепкина, 61/2; e-mail: d.rogatkin@monikiweb.ru

функции яркости. Позже (или параллельно) в физике ионизирующих излучений УПИ стало успешно применяться для описания рассеяния на частицах – атомах, электронах, протонах, – дискретных в пространстве рассеивающих и поглощающих свет структурах (центрах). Сегодня такие задачи рассеяния на частицах, например в радиационной медицине, – рутинна. Однако в оптическом диапазоне спектра биологические ткани и среды являются средами с непрерывным поглощением, но дискретным рассеянием [10, 11]. Можно принять, что поглощение света в них происходит непрерывно по всей толщ биоткани в соответствии с экспоненциальным законом Бугера, а рассеяние реализуется принципиально лишь на неоднородностях ее клеточной структуры, которые разнесены в пространстве внутри поглощающей среды. Тогда закономерен вопрос о том, насколько корректно задание в алгоритме МК общепринятых в биомедицинской оптике вероятностных параметров сплошной среды при решении задач для сред с непрерывным поглощением, но дискретным рассеянием. Похоже, что этот вопрос до последнего времени не попадал в поле зрения исследователей.

Недавно в [12, 13] мы на частных примерах показали наличие расхождений результатов численного моделирования методом МК с классическими вероятностными параметрами сплошной среды и точных аналитических решений дифференциальных уравнений ТП для тех же исходных задач, но для среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием. Цель настоящей работы – показать методические различия в постановке задач и в определении вероятностных параметров для метода МК в случае сред с непрерывным и дискретным рассеяниями и с непрерывным поглощением излучения.

## 2. Предварительные замечания к формулировке модельных задач

Поскольку мы рассматриваем методический вопрос о расхождениях в постановке задач и в их решениях для сред с непрерывным и дискретным рассеяниями, то проще всего это сделать на примере простейших одномерных (1D) задач, для которых есть точные и наглядные аналитические решения в замкнутом виде [3, 5, 11, 12, 14]. Хотя 1D задачи кажутся далекими от реального физического мира, они являются основой для феноменологического обоснования экспоненциального закона Бугера в фотометрии [15] и неоднократно использовались в работах Шустера, Шварцшильда, Гуревича, Кубелки, Мунка и других авторов [5, 6]. Поэтому в методическом плане 1D задачи достаточно хорошо обоснованы в ТП и, более того, обладают рядом преимуществ. Эти задачи не только имеют точные аналитические решения, легко поддающиеся анализу, но и снимают проблему учета в ТП волновых свойств электромагнитного излучения, о которых часто спорят, т.к. поперечная волна нереализуема в 1D пространстве. Остается лишь базовая фотометрическая формулировка лучевой задачи. Из рассмотрения исключается также фазовая функция рассеяния. Она выражается в 1D задаче в единственное значение коэффициента обратного отражения (рассеяния) излучения от границ неоднородностей внутри среды. При этом важно подчеркнуть, что сказанное относится лишь к истинно 1D задачам, в которых свет распространяется в виде бесконечно тонкого луча вдоль одной единственной оси  $X$ . Именно такие задачи мы и будем рассматривать.

Иногда в ТП под 1D задачами понимают и задачи распространения широкого коллимированного пучка света (в электродинамике – плоской электромагнитной волны), как, например, в классической задаче Милна [4, 6], либо задачу проецирования 3D распространения света на одну ось, которую решали Кубелка и Мунк, с формулировкой дополнительного замыкающего условия [5]. Указанные задачи сводятся к решению 1D задач. Однако здесь мы тоже не будем их рассматривать, т.к. решение данных задач более сложно и не так наглядно. Нас интересует лишь простейшая феноменологическая формулировка лучевой энергетической (фотометрической) стационарной задачи переноса мощности (энергии) излучения бесконечно тонким лучом вдоль одной единственной оси  $X$  (других осей нет, углового рассеяния нет). Метод МК также легко может быть реализован и обоснован для таких 1D задач. Это упрощает проблему. Если имеется принципиальное методическое различие в постановке и решении задач для рассматриваемых нами сред со сплошным и дискретным рассеяниями, оно должно проявляться сразу же при анализе таких идеализированных 1D задач, без усложнения их другими направлениями распространения излучения, фазовыми функциями рассеяния и т.д. Нестационарность тоже будет лишним усложнением, и ее учет не должен приводить к принципиально иным результатам.

## 3. Модельные задачи в приближении ОР

### 3.1. Сплошная среда с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием

Первой рассмотрим классическую задачу ТП о распространении света в сплошной среде с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием в приближении ОР (рис. 1). Приближение ОР также упрощает постановку и решение задачи и означает, что луч света с мощностью  $F_0$ , проникающий извне в мутную среду, по мере распространения в положительном направлении оси  $X$  внутри среды постоянно и безвозвратно теряет на каждом элементарном отрезке пути  $dx$  часть своей мощности за счет поглощения и рассеяния. Поток света внутри среды  $F_+(x)$  будет, таким образом, некоторой функцией координаты, которую требуется найти. Образующийся в результате рассеяния потока  $F_+(x)$  обратный поток в среде  $F_-(x)$  распространяется в противоположном направлении оси  $X$ , но уже не рассеиваясь. Он может терять мощность только за счет поглощения. Одним словом, любой фотон в потоке  $F_+(x)$ , один раз упруго рассеявшись и сменив свое направление на противоположное, в обратном потоке  $F_-(x)$  уже не испытывает рассеяния и может только поглотиться. Среда же распространения излучения характеризуется общепринятыми детерминированными оптическими свойствами – независимыми друг от друга и считающимися известными коэффициентами поглоще-

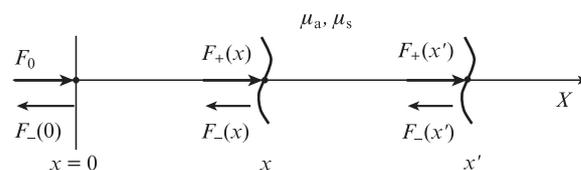


Рис. 1. Постановка 1D задачи в приближении ОР для сплошной среды с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием.

ния и рассеяния  $\mu_a$  и  $\mu_s$  соответственно, не обязательно совпадающими с таковыми для реальных 3D сред\*.

Точное решение такой задачи давно известно (см., напр., [16]). Решается система дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dF_+(x)}{dx} &= -(\mu_a + \mu_s)F_+(x), \\ \frac{dF_-(x)}{dx} &= \mu_a F_-(x) - \mu_s F_+(x), \end{aligned} \tag{1}$$

которая феноменологически «выводится» в ТП (на самом деле постулируется), исходя из тех простых логических соображений, что прямой поток  $F_+(x)$  по мере его распространения поглощается и рассеивается на отрезке пути  $dx$ , откуда следует первое уравнение системы (если принять независимость актов рассеяния и поглощения), а обратный поток  $F_-(x)$ , образовавшись без потерь при рассеянии потока  $F_+(x)$  (второе слагаемое в правой части второго уравнения), далее только поглощается (первое слагаемое в правой части второго уравнения). Приведем решение системы (1) с простейшими граничными условиями для полубесконечной среды без учета отражения на внешней границе:  $F_+(x) = F_0$ ,  $F_-(\infty) = 0$  [16]. Искомый прямой поток при таких граничных условиях имеет вид экспоненциально затухающей функции аналогично закону Бугера:

$$F_+(x) = F_0 \exp[-(\mu_a + \mu_s)x], \tag{2}$$

а обратный поток находится путем интегрирования:

$$F_-(x) = \int_x^\infty \exp[-\mu_a(x' - x)] \mu_s F_+(x') dx'. \tag{3}$$

Поток  $F_-(x)$  тоже экспоненциально затухает с ростом  $x$ :

$$F_-(x) = F_0 \frac{\mu_s}{2\mu_a + \mu_s} \exp[-(\mu_a + \mu_s)x], \tag{4}$$

но, распространяясь назад к освещаемой «поверхности», имеет тенденцию к возрастанию по мере своего распространения за счет вклада рассеянной компоненты потока  $F_+(x)$ .

Применение классического метода МК для такой задачи дает решение, идеально совпадающее с точными аналитическими решениями (2) и (4). При построении имитационного алгоритма МК основная сложность – выразить вероятностные параметры модели через физические оптические свойства мутной среды. Для 1D задачи и приближения ОР таких параметров три: две длины свободного пробега фотона в прямом и обратном направлениях ( $l_+$  и  $l_-$  соответственно) и вероятность рассеяния фотона  $P_s$ . Они задаются обычно в биомедицинской оптике в алгоритме МК следующим («классическим») образом. Классическая вероятность рассеяния  $P_s^{cl}$  приравнивается к альбедо ОР [7, 17]:

$$P_s^{cl} = \frac{\mu_s}{\mu_a + \mu_s}. \tag{5}$$

\* При получении замыкающего условия Кубелка и Мунк, например, показали, что может существовать различие в трактовке таких коэффициентов для 3D и 1D задач [5].

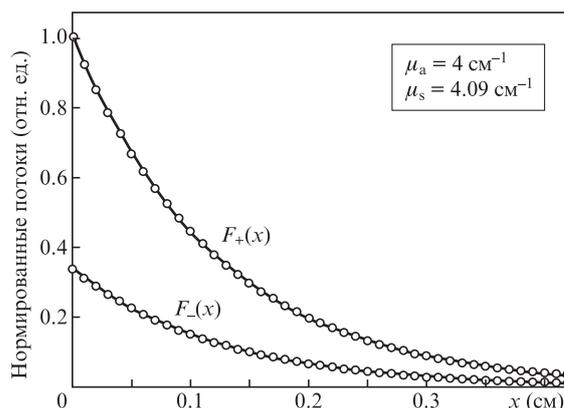


Рис.2. Численные решения методом МК (кружки) и аналитические решения (сплошные кривые) 1D задачи в приближении ОР для сплошной среды с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием. Значения потоков  $F_+(x)$  и  $F_-(x)$  нормированы на величину  $F_0$ .

При этом связь выражения (5) с формулами (1)–(4) в статьях обычно не поясняется, а считается априори понятной. Случайная величина длины  $l_+^{cl}$  свободного пробега фотона из потока  $F_+(x)$  вычисляется на каждом шаге итераций генерацией случайного числа  $\xi_1$ , равномерно распределенного на отрезке  $[0; 1]$ , с учетом экспоненциальной функции распределения вероятности для  $l_+^{cl}$  по формуле

$$l_+^{cl} = -\frac{\ln \xi_1}{\mu_a + \mu_s}. \tag{6}$$

Для понимания дальнейших выводов методически важно подчеркнуть, что вид функции распределения вероятности для  $l_+^{cl}$  (экспонента, как следует из (2)) должен быть известен для получения и обоснования (6). Для обратного потока (для  $l_-$ ) нужна другая формула. Различие между ними определяется логикой приближения ОР. Поток  $F_-(x)$  в приближении ОР не рассеивается, поэтому для него  $\mu_s = 0$ . Тогда, по аналогии с (6), используем выражение

$$l_-^{cl} = -\frac{\ln \xi_2}{\mu_a}, \tag{7}$$

где  $\xi_2$  – генерируемое случайное число, равномерно распределенное на отрезке  $[0; 1]$ , как и  $\xi_1$ .

Сравнение точного аналитического и численного, полученного методом МК, решений для потоков внутри и на поверхности такой сплошной 1D среды представлено на рис.2. Полное совпадение решений здесь очевидно. Оно описано во многих базовых учебниках.

### 3.2. Среда с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием

При рассмотрении дискретных рассеивателей внутри непрерывно поглощающей 1D среды аналитическое решение задачи не так очевидно, хотя тоже известно [11, 14]. Первая сложность здесь возникает с определением величины  $\mu_s$ . Каждый единичный  $i$ -й рассеиватель (неоднородность) внутри такой мутной среды рассеивает (отражает) назад некую долю падающего на него излучения  $R_i \leq 1$  (например, это аналог коэффициента отражения

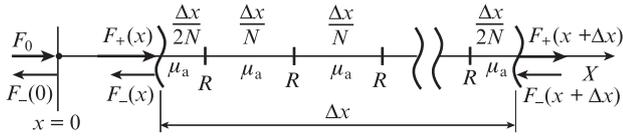


Рис.3. Постановка 1D задачи в приближении ОР для среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием.

Френеля  $R$ ). Как найти  $\mu_s$ , если известна концентрация неоднородностей в среде  $\mu_\rho$ ? Классическая монография [5] дает интуитивное выражение  $\mu_s = \mu_\rho R$ . Однако можно показать, что это не совсем верно.

Рассмотрим, следуя [14], интервал  $\Delta x$  внутри такой 1D среды, который содержит  $N$  одинаковых неоднородностей-рассеивателей (рис.3). Пусть расстояние между ними одинаково и равно  $\Delta x/N$ . Не уменьшая общности, положим также, что все  $R_i = \text{const} = R$ , а расстояния от крайних неоднородностей до границ  $\Delta x$  составляют  $\Delta x/(2N)$ . Такая постановка задачи и структура интервала  $\Delta x$  упрощают конечные аналитические решения и их вывод. В частности, для вывода дифференциального уравнения для потока  $F_+(x)$  достаточно рассмотреть предел

$$\frac{dF_+(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta F_+(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{F_+(x + \Delta x) - F_+(x)}{\Delta x}. \quad (8)$$

Замечая, что

$$F_+(x + \Delta x) = F_+(x) \exp(-\mu_a \Delta x) (1 - R)^N, \quad (9)$$

используя для концентрации неоднородностей определение [11, 14]

$$\mu_\rho = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{N}{\Delta x} \quad (10)$$

и раскрывая неопределенность вида  $0/0$  в (8), легко приходим к дифференциальному уравнению, идентичному первому уравнению системы (1), если ввести обозначение

$$\mu_s = -\mu_\rho \ln(1 - R). \quad (11)$$

Отметим, что (11) отличается от предложенного Исимару выражения  $\mu_s = \mu_\rho R$  и стремится к нему только при  $R \ll 1$ . Однако, если подставить  $\mu_s$  (11) в первое уравнение системы (1), то дифференциальные уравнения для  $F_+(x)$  окажутся в обоих случаях идентичными.

Вывод дифференциального уравнения для  $F_-(x)$  несколько сложнее. Поток  $F_-(x)$  складывается из двух частей. Первая часть есть поток  $F_{\Sigma \Delta x}(\Delta x)$ , обратный рассеянный на отрезке  $\Delta x$ , тогда как вторая часть – поток  $F_-(x + \Delta x)$ , прошедший справа налево через отрезок  $\Delta x$  и ослабленный за счет поглощения на нем. Математически это можно представить в виде

$$F_-(x) = F_{\Sigma \Delta x}(\Delta x) + F_-(x + \Delta x) \exp(-\mu_a \Delta x). \quad (12)$$

Чтобы найти  $F_{\Sigma \Delta x}(\Delta x)$ , необходимо учесть рассеяния на отрезке  $\Delta x$  от всех неоднородностей. Для первой неоднородности можно записать выражение

$$F_1^-(\Delta x) = F_+(x) \exp(-\mu_a \Delta x/N) R, \quad (13)$$

для второй –

$$\begin{aligned} F_2^-(\Delta x) &= F_+(x) \exp(-\mu_a \Delta x/N) (1 - R) \exp(-2\mu_a \Delta x/N) R \\ &= F_1^-(\Delta x) \exp(-2\mu_a \Delta x/N) (1 - R). \end{aligned} \quad (14)$$

Тогда для  $N$ -й неоднородности будем иметь соотношение

$$F_N^-(\Delta x) = F_1^-(\Delta x) \exp[-2\mu_a (N - 1) \Delta x/N] (1 - R)^{N-1}. \quad (15)$$

Сумма всех  $F_i^-(\Delta x)$  образует геометрическую прогрессию, поэтому  $F_{\Sigma \Delta x}(\Delta x)$  можно без труда найти в явном виде:

$$\begin{aligned} F_{\Sigma \Delta x}(\Delta x) &= \sum_{i=1}^N F_i^-(\Delta x) = F_1^-(\Delta x) \\ &\times \frac{1 - [\exp(-2\mu_a \Delta x/N) (1 - R)]^N}{1 - \exp(-2\mu_a \Delta x/N) (1 - R)} = F_+(x) R \exp(-\mu_a \Delta x/N) \\ &\times \frac{1 - \exp(-2\mu_a \Delta x) (1 - R)^N}{1 - \exp(-2\mu_a \Delta x/N) (1 - R)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Это позволяет при нахождении предела «приращения»  $F_-(x)$  на отрезке  $\Delta x$  по отношению к  $\Delta x$  при  $\Delta x \rightarrow 0$  получить дифференциальное уравнение для  $F_-(x)$  [14]:

$$\frac{dF_-(x)}{dx} = \mu_a F_-(x) - \beta_2^+ F_+(x), \quad (17)$$

где

$$\beta_2^+ = (2\mu_a + \mu_s) \frac{R \exp(-\mu_a/\mu_\rho)}{1 - \exp[-(2\mu_a + \mu_s)/\mu_\rho]} \quad (18)$$

– коэффициент обратного рассеяния для потока  $F_+(x)$ . При этом, как видим,  $\beta_2^+ \neq \mu_s$ .

Таким образом, решаемая в приближении ОР система дифференциальных уравнений для среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием будет иметь вид

$$\frac{dF_+(x)}{dx} = -\beta_1^+ F_+(x), \quad (19)$$

$$\frac{dF_-(x)}{dx} = \mu_a F_-(x) - \beta_2^+ F_+(x),$$

где для коэффициента ослабления потока  $F_+(x)$  введено обозначение

$$\beta_1^+ = \mu_a + \mu_s. \quad (20)$$

При всей внешней схожести система (19) принципиально отличается от системы (1) тем, что в общем случае  $\beta_2^+ < \mu_s$ . Только при  $\mu_a = 0$  (т. е. в пределе  $\mu_a \rightarrow 0$ )  $\beta_2^+ = \mu_s$ , а это означает, что не все рассеянные фотоны потока  $F_+(x)$  преобразуются на отрезке  $\Delta x$  в фотоны потока  $F_-(x)$ . Часть их теряется из-за поглощения сразу внутри отрезка  $\Delta x$ . Таким образом, в присутствии дискретных рассеивателей внутри сплошной поглощающей среды при  $\mu_a \neq 0$  значения  $F_-(x)$  будут отличны от полученных по формуле (4).

\* Несложно показать, что и случайные расстояния, например с нормальным распределением вокруг  $\Delta x/N$ , дадут в статистически среднем аналогичный конечный результат.

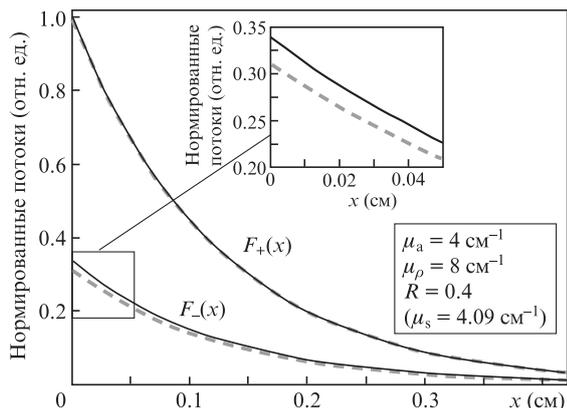


Рис.4. Аналитические решения 1D задач в приближении ОР для сплошной среды с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием (сплошные кривые) и среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием (штриховые кривые). Значения потоков  $F_+(x)$  и  $F_-(x)$  нормированы на величину  $F_0$ .

Система (19) для тех же граничных условий, что указаны в п.3.1, имеет решения

$$F_+(x) = F_0 \exp(-\beta_1^+ x), \tag{21}$$

$$F_-(x) = F_0 \frac{\beta_2^+}{2\mu_a + \mu_s} \exp(-\beta_1^+ x). \tag{22}$$

Численное сравнение этих решений и решений, приведенных в п.3.1, продемонстрировано на рис.4 для тех же значений  $\mu_a$  и  $\mu_s$ , что и для рис.2. Видно, что значения потоков  $F_+(x)$  в указанных двух случаях не различаются, т.к. величина  $\beta_1^+$  остается неизменной. Однако различия в потоках  $F_-(x)$  вблизи внешней границы среды четко проявляются.

Очевидно, что численный расчет методом МК с классическими вероятностными параметрами для среды с непрерывным рассеянием в данном случае дискретных рассеивателей также даст значение  $F_-(x)$ , отличающееся от точного решения (22), как и аналитическое решение в п.3.1. Тогда правомерен вопрос о том, как надо изменить вероятностные параметры алгоритма МК, чтобы численно получить результат, соответствующий (22). Осмелимся предложить простой способ.

Согласно (21), функция

$$B_+(x') = 1 - \exp(-\beta_1^+ x') \tag{23}$$

определяет долю фотонов, «потерянных» потоком  $F_+(x)$  за счет рассеяния и поглощения на отрезке пути  $[0; x']$ :  $0 \leq B_+(x') \leq 1$ . При переходе к вероятностной модели она заменяется на моделирующую ее функцию распределения вероятности  $D_{l_+}(x')$  случайной величины  $l_+$ :

$$B_+(x') = D_{l_+}(x') \equiv P \{l_+ \leq x'\}, \tag{24}$$

определяющую вероятность того, что  $l_+ \leq x'$ , и также определенную в интервале  $[0; 1]$ . Далее, согласно методу обратного преобразования, для нахождения случайной величины  $l_+$  с заданным распределением  $D_{l_+}(x')$  можно взять равномерно распределенную на отрезке  $[0; 1]$  случайную величину  $\xi_1$ , найти обратную функцию  $D_{l_+}^{-1}(\xi_1)$  и использовать ее для вычисления  $l_+$  [7, 18]. Полученная случайная величина  $l_+$  будет иметь распределение  $D_{l_+}(x')$ .

Разыгрывая разные  $\xi_1$  и принимая во внимание, что случайные величины  $1 - \xi_1$  и  $\xi_1$  имеют одинаковое равномерное распределение на отрезке  $[0; 1]$ , симметрично относительно значения  $\xi_1 = 0.5$ , получаем искомый набор  $l_+$  при генерации  $\xi_1$ :

$$l_+ = D_{l_+}^{-1}(\xi_1) = -\frac{\ln \xi_1}{\beta_1^+} = -\frac{\ln \xi_1}{\mu_a + \mu_s}. \tag{25}$$

Здесь  $l_+$  совпадает с  $l_+^{cl}$  (6).

Для потока фотонов  $F_-(x)$  в приближении ОР

$$B_-(x') = 1 - \exp(-\mu_a x'). \tag{26}$$

По аналогии с  $l_+$  в этом случае мы приходим к выражению

$$l_- = -\frac{\ln \xi_2}{\mu_a}. \tag{27}$$

Вероятность рассеяния  $P_s$  на любом бесконечно малом отрезке  $\Delta x$  внутри среды, исходя из эмпирического (частотного) определения вероятности как частоты появления искомого события на фоне всех возможных событий, должна определяться подгруппой (долей) рассеянных фотонов потока  $F_+(x)$ , которые образуют поток  $F_-(x)$ , на фоне всех потерянных потоком  $F_+(x)$  фотонов. Эта доля определяется при выводе системы уравнений (19) и равна  $\beta_2^+ F_+(x) \Delta x$ . При этом полной группой событий в данном случае являются все фотоны, потерянные потоком  $F_+(x)$  на отрезке  $\Delta x$ , т.е. величина  $\beta_1^+ F_+(x) \Delta x$ . Отношение этих величин и будет искомой вероятностью рассеяния  $P_s$ :

$$P_s = \frac{\beta_2^+}{\beta_1^+}. \tag{28}$$

Таким образом, полный набор вероятностных параметров метода МК в приближении ОР для 1D задачи с дискретными рассеивателями должен выглядеть следующим образом:

$$l_+ = -\frac{\ln \xi_1}{\beta_1^+}, P_s = \frac{\beta_2^+}{\beta_1^+}, l_- = -\frac{\ln \xi_2}{\mu_a}. \tag{29}$$

Сравнивая (29) с (5)–(7), можно заметить, что вероятности  $P_s^{cl}$  и  $P_s$  различны, поскольку в общем случае  $\beta_2^+ \neq \mu_s$ . Как показано на рис.5, решение методом МК с вероятностными параметрами (29) идеально совпадает с

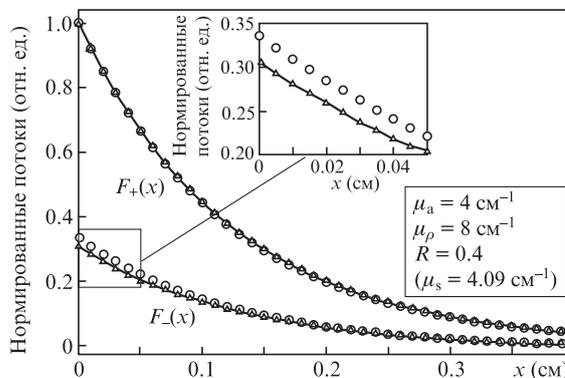


Рис.5. Аналитические решения (сплошные кривые) и численные решения методом МК с разными вероятностными параметрами 1D задачи в приближении ОР для среды с дискретным рассеянием (треугольники) и среды с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием (кружки). Значения потоков  $F_+(x)$  и  $F_-(x)$  нормированы на величину  $F_0$ .

аналитическим решением (22) для потока  $F_-(x)$ , в то время как классический метод МК дает решение с систематической погрешностью за счет того, что  $P_s^{cl} \neq P_s$ . Одним словом, использование альбеда ОР для вычисления вероятности рассеяния  $P_s$  в данной задаче уже не корректно.

#### 4. Модельная задача для многократного рассеяния

Задача о многократном рассеянии внутри 1D среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием также весьма показательна. Хотя ранее мы уже докладывали о полученных для нее результатах [12], здесь интересно привести решение этой задачи и дать его сравнительный анализ с численным решением методом МК для формулировки обоснованных выводов, сделанных по результатам исследования. При многократном рассеянии для среды с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием должна решаться система модифицированных уравнений Кубелки–Мунка [11, 14]

$$\frac{dF_+(x)}{dx} = -\beta_1 F_+(x) + \beta_2 F_-(x), \tag{30}$$

$$\frac{dF_-(x)}{dx} = \beta_1 F_-(x) - \beta_2 F_+(x),$$

где

$$\beta_1 = \omega \times \tag{31}$$

$$\frac{\mu_a - \mu_\rho \ln(1 - R) + \mu_\rho \ln \left[ 1 - \omega + \sqrt{\omega^2 - R^2 \exp(-2\mu_a/\mu_\rho)} \right]}{\sqrt{\omega^2 - R^2 \exp(-2\mu_a/\mu_\rho)}},$$

$$\beta_2 = R \exp(-\mu_a/\mu_\rho) \times \tag{32}$$

$$\frac{\mu_a - \mu_\rho \ln(1 - R) + \mu_\rho \ln \left[ 1 - \omega + \sqrt{\omega^2 - R^2 \exp(-2\mu_a/\mu_\rho)} \right]}{\sqrt{\omega^2 - R^2 \exp(-2\mu_a/\mu_\rho)}},$$

$$\omega = \frac{1 - (1 - 2R) \exp(-\mu_a/\mu_\rho)}{2}. \tag{33}$$

Здесь уже не только  $\beta_2 \neq \mu_s$ , но и  $\beta_1 \neq \mu_a + \mu_s$ . Решение системы (30) известно и имеет вид [5]

$$F_+(x) = C_1 \exp(-\alpha x) + C_2 \exp(\alpha x), \tag{34}$$

$$F_-(x) = C_1 A_- \exp(-\alpha x) + C_2 A_+ \exp(\alpha x),$$

где  $C_1$  и  $C_2$  – константы интегрирования, определяемые из граничных условий (см. п.3.1);

$$\alpha = \sqrt{\beta_1^2 - \beta_2^2}; \quad A_+ = \frac{\beta_2}{\beta_1 - \alpha}; \quad A_- = \frac{1}{A_+}.$$

Поскольку в среде реализуется режим многократного рассеяния, фотоны одинаково рассеиваются и поглощаются по пути своего распространения и в потоке  $F_+(x)$ , и в потоке  $F_-(x)$ . Поэтому при численном моделировании методом МК обосновано использование одной единственной длины свободного пробега фотонов

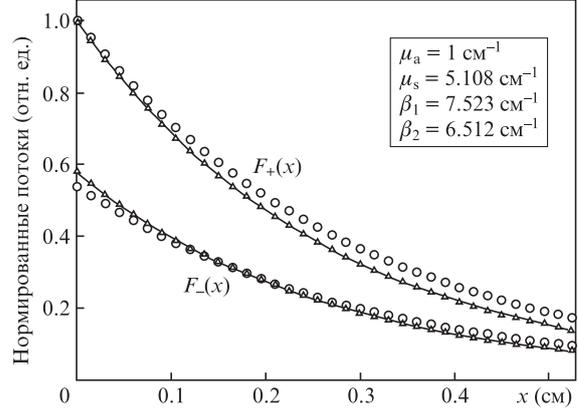


Рис.6. Аналитические решения (сплошные кривые) и численные решения методом МК с разными вероятностными параметрами 1D задачи при многократном рассеянии для среды с дискретным рассеянием (треугольники) и среды с непрерывным поглощением и непрерывным рассеянием (кружки). Значения потоков  $F_+(x)$  и  $F_-(x)$  нормированы на величину  $F_0$ .

$$l = -\frac{\ln \xi}{\beta_1}. \tag{35}$$

Как было показано в [12], с учетом (35) соответствие аналитических результатов численным результатам моделирования методом МК как для потока  $F_+(x)$ , так и для потока  $F_-(x)$  достигается при задании вероятности рассеяния в виде, аналогичном (28):

$$P_s = \frac{\beta_2}{\beta_1}. \tag{36}$$

Наглядно результаты сравнения аналитического решения (34) с учетом (31) и (32) и численного решения методом МК с разными вероятностными параметрами для многократного рассеяния представлены на рис.6. В качестве классических вероятностных параметров в алгоритме МК использовались в данном случае параметры (35) и (36) с  $\beta_1 = \mu_a + \mu_s$  и  $\beta_2 = \mu_s$ . Видно, что расхождение в результатах для потоков достигает 10% на границе среды. Важно, что при многократном рассеянии расхождение результатов классического моделирования методом МК с точными аналитическими результатами (34) наблюдается уже и для потока  $F_+(x)$ . Чтобы устранить это расхождение, необходимо использовать вероятностные параметры  $\beta_1$  (31) и  $\beta_2$  (32).

#### 5. Выводы

Мы провели анализ применимости общепринятых в биомедицинской оптике вероятностных параметров численного алгоритма МК для задач переноса света в мутных средах с непрерывным поглощением и дискретным рассеянием. Для этого мы получили точные аналитические решения ряда модельных 1D задач для таких сред и сравнили их с численными результатами моделирования методом МК. Как показало сравнение, использование общепринятых (классических) вероятностных параметров алгоритма МК обуславливает систематическую погрешность численного счета для рассматриваемых мутных сред, которая не устраняется увеличением числа разыгрываемых фотонов. Дополнительно, мы обосновали необходимые уточненные вероятностные параметры для

численного моделирования методом МК в случае сред с дискретным рассеянием и показали, что их применение приводит к идеальному совпадению результатов. Таким образом, одним из основных выводов, сформулированных по результатам исследования, является вывод о необходимости для каждой конкретной задачи выбирать обоснованные значения вероятностных параметров алгоритма МК, которые в общем случае могут отличаться от общепринятых.

Другой важный вывод заключается в том, что выбор адекватных вероятностных параметров, исходя из априорных феноменологических представлений, скорее всего, невозможен. Вряд ли можно угадать вид формул (35) и (36). Следовательно, для грамотного обоснования вероятностных параметров необходимо иметь точный вид выражений для коэффициентов исходных уравнений, который можно получить лишь аналитически на основе представлений о внутренней структуре среды, как это было сделано, например, для  $\beta_2^+$  (18). Строго говоря (см. замечание после формулы (6)), все классические вероятностные параметры также опираются на известные аналитические решения, например на выражение (2), в котором коэффициенты системы (1) заданы априори. Метод МК позволяет лишь найти численное решение системы исходных уравнений в том виде, в котором они сформулированы. Если исходная система сформулирована с неправильными коэффициентами, то ее решение методом МК также будет ошибочным, и наоборот. Другое дело, что полученные в настоящей работе расхождения в результатах при использовании классических вероятностных параметров алгоритма МК оказываются пока для 1D задач не очень большими: примерно 10% и менее. Если они не возрастают в 2D и 3D задачах, что требует дополнительного исследования, этого может быть достаточно и для многих практических задач, для которых аналитическое решение неизвестно. В частности, при по-

иске неизвестного аналитического решения и неизвестных точных выражений для коэффициентов исходных уравнений любой задачи в ТП классический вариант метода МК сразу дает некий ориентир при решении с точностью не хуже 90% (по нашим данным), и в этом его несомненный плюс.

1. Ramm A.G. *Multidimensional Inverse Scattering Problems* (New York: Longman – Wiley, 1992).
2. Rogatkin D.A. *Biomed. Eng.*, **38** (2), 61 (2004).
3. Гуревич М.М. *Введение в фотометрию* (Л.: Энергия, 1968).
4. Chandrasekhar S. *Radiative Transfer* (New York: Dover Publications, 1960).
5. Ishimaru A. *Wave Propagation and Scattering in Random Media* (New York: Academic Press, 1978).
6. Соболев В.В. *Курс теоретической астрофизики* (М.: Наука, 1985).
7. Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazareliev M.A., et al. *The Monte Carlo Methods in Atmospheric Optics* (New York: Springer, 2013).
8. Lux I., Koblinger L. *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations* (Boca Raton: CRC Press, 1991).
9. Meglinski I., Doronin A., in *Advanced Biophotonics: Tissue Optical Sectioning* (Boca Raton: CRC Press, 2016).
10. Tuchin V.V. (Ed.) *Handbook of Optical Biomedical Diagnostics* (Bellingham: SPIE Press, 2016).
11. Rogatkin D.A. *Biomed. Eng.*, **41** (2), 59 (2007).
12. Tarasov A.P., Guseva I.A., Rogatkin D.A. *Proc. 2016 Int. Conf. Laser Optics* (St Petersburg, IEEE Xplore, 2016, S2-24).
13. Tarasov A.P., Raznitsyna I.A., Rogatkin D.A. *Proc. 2018 Int. Conf. Laser Optics* (St Petersburg, IEEE Xplore, 2018, p. 515).
14. Першеев С., Рогаткин Д.А. *Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. Сер. Естественные науки*, № 6, 65 (2017) [*Her. Bauman Moscow State Tech. Univer. Ser. Natural Sci.*, No. 6, 65 (2017)].
15. McCluney W.R. *Introduction to Radiometry and Photometry* (Norwood: Artech House, 2014).
16. Rybicki G.B., Lightman A.P. *Radiative Processes in Astrophysics* (Weinheim: Wiley–VCH, 2004).
17. Sobol' I.M. *The Monte Carlo Method* (Chicago: The University of Chicago Press, 1974).
18. Wang L., Jacques S.L., Zheng L. *Comput. Meth. Programs Biomed.*, **47**, 131 (1995).