ОБ ОДНОЙ ОСОБЕННОСТИ В ОПРЕДЕЛЕНИИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МУТНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ И СРЕД В РАСЧЕТНЫХ ЗАДАЧАХ МЕДИЦИНСКОЙ НЕИНВАЗИВНОЙ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Д.А. Рогаткин

МОНИКИ им. М.Ф. Владимирского 129110, г. Москва, ул. Щепкина 61/2, email: laserrog@mtu-net.ru

АННОТАЦИЯ

В статье рассматриваются вопросы точности и достоверности определения погонных оптических свойств светорассеивающих биологических тканей и сред на основе двухпотоковой модели Кубелки-Мунка (КМ) применительно к задачам медицинской неинвазивной спектрофотометрии. Дается формулировка простой одномерной модельной задачи, точное фотометрическое решение которой сравнивается с решением этой же задачи методом КМ в разных приближениях. Показано, что в общем случае светорассеивающей и поглощающей среды в классической модели КМ неправомерно принято разделение оптических свойств среды на два независимых транспортных коэффициента - рассеяния и поглощения. Это приводит к ошибкам уже в прямых расчетах обратно рассеянного и прошедшего биоткань насквозь потоков излучений. Более обоснованные и точные выражения для транспортных коэффициентов уравнений могут быть получены на основе частного решения задачи для элементарного участка модельной среды, фотометрические свойства которого известны. Такой подход позволяет получать методом КМ точное значение для потоков излучения на внешних границах среды. Решение обратной задачи в этой формулировке, соответственно, теоретически позволяет надеяться на точное восстановление оптических свойств биотканей по данным эксперимента.

ВВЕДЕНИЕ

В современном медицинском приборостроении при создании методов, приборов и устройств, реализующих принципы оптической спектроскопии биологических тканей, одной из ключевых задач является разработка эффективных вычислительных алгоритмов, позволяющих, по возможности, максимально точно и достоверно определять исходные оптические свойства изучаемого объекта по данным эксперимента [15, 18]. Для определения оптических свойств биотканей по регистрируемым в эксперименте потокам излучения в общем случае используются те или иные методы решения обратных задач рассеяния [11], которые сильно разнятся в зависимости от постановки задачи и способа модельного описания среды распространения излучения. Если биологическая ткань представляет собой оптически мутную (светорассеивающую) среду, а подавляющее большинство биотканей именно таковыми и являются [22], для получения окончательного результата приходится обращаться к расчетным моделям теории переноса и рассеяния света в мутных средах [8, 20]. Эти модели в настоящее время имеют весьма ограниченный круг замкнутых решений, поэтому в практических задачах фотометрии мутных сред часто используют те или иные приближения. В частности, большое распространение в практике неинвазивной спектрофотометрии получили потоковые модели Кубелки-Мунка (КМ) ввиду их хорошей наглядности и возможности получения с их помощью простых конечных расчетных формул в явной аналитической форме [8, 12, 17, 18, 21-24]. В терминах теории переноса и моделей КМ внутренние оптические свойства мутных сред полностью характеризуются погонными оптическими коэффициентами поглощения и рассеяния излучения, которые являются детерминированными коэффициентами дифференциальных уравнений в физико-математической постановке задачи.

Исходно модели КМ являются в оптике чисто фотометрическими и феноменологическими моделями, основанными на эвристических предположениях о возможности разделения поля излучения в среде на ряд дискретных прямолинейных потоков, а также о справедливости линейного уравнения баланса энергии для каждого из потоков в выделенном элементе объема среды [2, 4-8, 24]. В простейшем случае рассматривается одномерная двухпотоковая модель КМ, которая представляет собой одномерную среду распространения излучения с двумя разнонаправленными потоками $F_+(x)$ и F(x) внутри нее

2

[8, 13, 24]. Никакие волновые свойства излучения в данной модели в виду ее фотометрической (энергетической) формулировки и одномерности расчетной схемы во внимание не принимаются. В такой формулировке классическая система уравнений КМ записывается в виде двух связанных линейных дифференциальных уравнений 1-го порядка [8]:

$$\begin{cases} dF_{+}(x)/dx = -(K+S)F_{+}(x) + SF_{-}(x) \\ dF_{-}(x)/dx = (K+S)F_{-}(x) - SF_{+}(x) \end{cases},$$
(1)

которая в общем случае при *К*≠0 имеет решение:

$$F_{+}(x) = C_{1}e^{-\alpha x} + C_{2}e^{\alpha x} \quad ; \qquad F_{-}(x) = C_{1}A_{-}e^{-\alpha x} + C_{2}A_{+}e^{\alpha x} \quad , \tag{2}$$

где: C_1 и C_2 – константы интегрирования, определяемые из граничных условий; K и S – погонные (транспортные) коэффициенты поглощения и рассеяния излучения элементом среды dx соответственно; $\alpha = \sqrt{K(K+2S)}$; $A_+ = (K+2S+\alpha)/(K+2S-\alpha)$; $A_- = 1/A_+$. Именно определение этих транспортных коэффициентов уравнений и представляет собой основную обратную задачу биомедицинской оптики, особенно в практике неинвазивной медицинской спектрофотометрии [15].

По достаточно распространенному мнению, к существенным недостаткам описываемой модели КМ можно отнести слабую обоснованность области ее применимости и невысокую точность [8]. Последний недостаток является, очевидно, наиболее значимым в свете проблемы разработки и создания вычислительных алгоритмов реальных медицинских диагностических приборов для спектрофотометрии. Например, одним из разделов современной неинвазивной спектрофотометрии является оптическая оксигемометрия (тканевая оксиметрия) – метод определения процентного содержания в крови различных фракций гемоглобина по их оптическим спектрам поглощения [9]. Измерения проводятся без взятия проб крови, трансдермально, путем регистрации обратно рассеянного биотканью или прошедшего ткань насквозь излучения с последующим вычислением по зарегистрированным сигналам коэффициентов поглощения света кровью в разных спектральных диапазонах длин волн. Вычисленные значения сравниваются далее с табличными значениями спектральных коэффициентов поглощения различных модельных растворов цельной гемолизованной крови, которые, в свою очередь, получают уже на основе более точных методов лабораторной спектрофотометрии [28]. В этих методах, как известно, растворы слабой молярной концентрации помещаются в фотометрическую кювету, и по результатам измерений оценивается показатель поглощения света в экспоненциальном законе Бугера:

$$F(x) = F_0 \cdot e^{-\mu_a x} , \qquad (3)$$

где: F_0 – исходный, освещающий кювету поток излучения; F(x) – регистрируемый поток излучения, прошедший кювету; μ_a – показатель поглощения света раствором крови (растворами фракций гемоглобина), x - длина пути света в кювете (как правило, 1 см).

Следует особо подчеркнуть, что в лабораторной спектрофотометрии за счет малых концентраций растворов крови в кювете рассеянием света в крови пренебрегают. Это дает возможность непосредственно использовать (3) для определения μ_a раствора. При неинвазивных методах оксиметрии пренебрегать рассеянием света в биоткани принципиально нельзя. Соответственно, усложняется процедура восстановления μ_a и возникает необходимость использовать более сложные расчетные алгоритмы, например, на основе уравнений (1). В связи с этим остро встает вопрос о соответствии транспортного коэффициента поглощения *K*, определяемого в диагностических приборах на основе обратных алгоритмов по модели KM, параметру μ_a в законе Бугера.

Вопрос в свое время широко дискутировался, например, в работах [4, 8, 12, 13, 16]. А в [25] было даже получено некое примерное соотношение

$$K \approx 2\mu_a$$
 , (4)

повсеместно теперь эксплуатируемое в литературе по биомедицинской оптике. При этом точность стандартной двухпотоковой модели КМ оценивалась не выше 80-85% [12]. Однако, по мнению автора статьи, детальный анализ последних работ в этой области ([5, 7,

13, 16] и др.) позволяет серьезно полагать, что эти вопросы остаются, на самом деле, достаточно спорными. Так, недавно, в серии наших работ [7, 13, 23, 26], было показано, что точность потоковых моделей КМ, по крайней мере, для ряда частных случаев (идеального рассеяния, однократного рассеяния) может быть существенно повышена за счет более корректного определения транспортных коэффициентов уравнений (1) через реальные оптико-физические свойства элемента среды Δx . В частности, в приближении однократного рассеяния удалось показать, что строгое и точное решение задачи приводит к логически более понятному соотношению

$$K=\mu_a \quad , \tag{5}$$

которое интуитивно и напрашивается, как минимум, в пределе исчезающе малого рассеяния. Это позволяет предположить (совместно с [5]), что и в других случаях точность одномерных потоковых моделей может быть существенно выше, если адекватно выразить транспортные коэффициенты в (1) через реальные оптико-физические свойства среды. Поэтому, в данной работе применительно к задачам медицинской неинвазивной спектрофотометрии рассматривается вопрос вывода явных и точных выражений для транспортных коэффициентов уравнений двухпотоковой модели КМ в общем случае модельной одномерной светорассеивающей и поглощающей среды и, соответственно, вопрос о взаимосвязи коэффициента *K* модели КМ с параметром μ_a закона Бугера.

ОСНОВНАЯ МОДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА И ЕЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим модельное представление одномерной светорассеивающей среды в виде слоя среды толщиной H_0 с не отражающими излучение (рыхлыми) внешними границами, который освещен слева внешним потоком излучения F_0 (рис.1). Пусть вещество среды обладает погонным коэффициентом поглощения излучения μ_a . Рассеивающие свойства среды будем моделировать включением в нее бесконечно тонких плоских отражающих границ - неоднородностей - г₁, г₂, ... г_n, которые отражают падающее на них излучение с коэффициентом отражения R и пропускают сквозь себя с коэффициентом 1-R. Пусть также, для простоты расчетов, все неоднородности распределены в среде равномерно на расстоянии h друг от друга, а первая и последняя неоднородности находятся на расстояниях h/2 от внешних границ всего слоя. При большом числе отражающих неоднородностей такая модельная среда будет являться достаточно хорошей моделью биоткани, в которой реализуется режим многократного рассеяния и которая моделирует любые микронеоднородности биоткани, рассеивающие свет за счет скачкообразного изменения коэффициента преломления излучения на границах неоднородностей.



Рис.1. Модельное представление одномерной светорассеивающей среды.

Подобные модели, вообще говоря, известны в оптике и физике давно и носят обобщенное название моделей стопы [27]. В отличие, правда, от задачи Стокса для стопы из толстых пластинок мы для упрощения расчетов будем оперировать «бесконечно тонкими» отражающими неоднородностями внутри одной сплошной «толстой» среды. Также,

6

в отличие от задачи Стокса, мы пренебрегаем несущественным внешним отражением от внешних границ среды, называя, условно, эти границы «рыхлыми»¹.

Выбор такой модельной среды в виде модифицированной модели стопы в нашем случае обусловлен тем, что распределение поля излучения в n-слойной стопе может быть найдено строго и точно простейшими фотометрическими расчетами. Достаточно рассмотреть простое экспоненциальное затухание потоков $F_+(x)$ и $F_-(x)$ по пути их распространения внутри стопы между неоднородностями и законы отражения и пропускания излучения на границах этих неоднородностей. Найденное в результате таких расчетов точное распределение поля излучения внутри и на внешних границах стопы можно в дальнейшем использовать для тестирования любой модели КМ.

Для получения точного решения задачи этим методом для нашей модели стопы введем на каждом интервале *i* для x > h/2 между неоднородностями внутри среды местную систему координат z_i ($z_i \in [0,h]$), где i=1;2;3...n означает, по сути, количество оставшихся неоднородностей слева от рассматриваемого интервала (рис. 2). Тогда на каждом *i*-ом интервале между неоднородностями потоки $F_+^i(z_i)$ и $F_-^i(z_i)$ могут быть вычислены с учетом (3) как:

$$F_{+}^{i}(z_{i}) = F_{+}^{i}(0) \cdot e^{-\mu_{a} z_{i}}; \quad F_{-}^{i}(z_{i}) = F_{-}^{i}(0) \cdot e^{\mu_{a} z_{i}}, \quad (6)$$

где $F_{+}^{i}(0)$ и $F_{-}^{i}(0)$ – неизвестные пока значения потоков на левой границе интервала. Они определяются из условий сопряжения потоков излучения на неоднородностях (границах интервалов). При общем количестве неоднородностей и интервалов n=N необходимо, таким образом, дополнительно найти 2N неизвестных граничных значений потоков $F_{+}^{i}(0)$ и $F^{i}(0)$.

¹ Рыхлые внешние границы вполне соответствуют грубо шероховатой поверхности биоткани [14] или поверхности порошковых материалов [5], для которых можно, в первом приближении, пренебречь несущественным поверхностным отражением в сравнении с выходящим из среды потоком обратно рассеянного излучения, формирующегося за счет многократных переотражений света на границах внутренних неоднородностей среды, хотя, конечно, при одномерной постановке задачи, понятие «рыхлой» внешней границы полностью условно, а этот термин использован здесь лишь для большей выразительности.



Рис.2. Местная система координат и определение потоков в і-ом слое стопы.

Условия сопряжения запишем исходя из законов отражения и пропускания излучения на границе раздела сред и принципа сложения для потоков, имеющих одинаковые направления (рис. 2):

$$F_{+}^{i}(0) = F_{+}^{i-1}(h) \cdot (1-R) + F_{-}^{i}(0) \cdot R$$
$$F_{-}^{i-1}(h) = F_{+}^{i-1}(h) \cdot R + F_{-}^{i}(0) \cdot (1-R),$$
(7)

где: $F_{-}^{i-1}(h) = F_{-}^{i-1}(0) \cdot e^{\mu_a z_i}$ при 1< $i \le N$;

$$F_{+}^{i-1}(h) = \begin{cases} F_{+}^{i-1}(0) \cdot e^{-\mu_{a}h} & \text{при } i > 1 \\ \\ F_{0} \cdot e^{-\mu_{a}h/2} & \text{при } i = 1 (1-я неоднородность) \end{cases}$$

Поскольку справа на среду внешнего потока нет, замыкающее условие для $F_{-}^{i=N}(0)$ будет иметь вид:

$$F_{-}^{i=N}(0) = F_{+}^{i=N}(h) \cdot R \cdot e^{-\mu_{a}h} .$$
(8)

Совместное решение уравнений (7)-(8) относительно 2N неизвестных значений потоков $F_{+}^{i}(0)$ и $F_{-}^{i}(0)$ сводится далее к обычному решению системы 2N линейных алгебраических уравнений [19] и не представляет каких-либо сложностей. Значения потоков на внешних (рыхлых) границах стопы – общий обратно рассеянный поток F_{bs} и поток F_{τ} , прошедший среду насквозь, - после определения всех $F_{+}^{i}(z_{i})$ и $F^{i}(z_{i})$ по (6) могут быть дополнительно определены из соотношений:

$$F_{bs} = F_{-}(0) = F_{0} \cdot R \cdot e^{-\mu_{a}h} + F_{-}^{i=1}(0) \cdot (1-R) \cdot e^{-\mu_{a}h/2}$$

$$F_{\tau} = F_{+}(H_{0}) = F_{+}^{i=N}(h) \cdot (1-R) \cdot e^{-\mu_{a}h/2} \quad . \tag{9}$$

где *F*₀ – внешний поток излучения, освещающий всю модель стопы слева.

При решении этой же задачи методом КМ основную сложность представляет поиск явных выражений для транспортных коэффициентов уравнений (1) через реальные оптико-физические свойства представленной модели - μ_a , R, N и H_0 . Чисто феноменологически получить эти выражения, видимо, не представляется возможным, т.к. даже если предположить, что справедливо уравнение (4) или (5), априори сформулировать выражение для *S* весьма проблематично [13]. Поэтому требуется более строгий подход, опирающийся на точный и формальный вывод всех необходимых соотношений.

Рассмотрим наиболее простой путь вывода этих соотношений. С целью поиска самого общего решения поставленной задачи запишем систему уравнений (1) в виде:

$$\begin{cases} dF_{+}(x)/dx = -\beta_{1}F_{+}(x) + \beta_{2}F_{-}(x) \\ dF_{-}(x)/dx = \beta_{1}F_{-}(x) - \beta_{2}F_{+}(x) \end{cases}$$
(10)

Нас будут интересовать явные выражения для коэффициентов преобразования излучения β_1 и β_2 через параметры μ_a , R, N и H_0 нашей модели стопы, а также общее решение задачи на основе полученных формул по (10) в сравнении с решением по (6)-(9), особенно для потоков F_{bs} и F_{τ} . Чтобы избежать длинных и рутинных выкладок воспользуемся сразу соотношениями Гуревича [6] для F_{bs} и F_{τ} в двухпотоковом приближении²:

² Строго говоря, эти соотношения Гуревич получил на основе несколько отличающихся от (1) и (10) исходных дифференциальных уравнений. Однако с помощью простых выкладок легко можно убедиться, что (11) полностью идентичны соответствующим решениям, которые могут быть получены для потоков F_{bs} и F_{τ} на основе решения общей системы потоковых уравнений (10).

$$F_{bs} = F_0 \cdot P \cdot \frac{1 - e^{-2LH_0}}{1 - P^2 e^{-2LH_0}} ; \quad F_\tau = F_0 \cdot e^{-LH_0} \cdot \frac{1 - P^2}{1 - P^2 e^{-2LH_0}} , \quad (11)$$

где для нашей задачи: $L = \sqrt{\beta_1^2 - \beta_2^2}$; $P = (\beta_1 - L)/\beta_2$. Причем, как было доказано в цитируемом первоисточнике, вне зависимости от толщины рассматриваемого слоя (H_0) и величины внешнего потока (F_0) параметр:

$$\frac{1 + (F_{bs} / F_0)^2 - (F_\tau / F_0)^2}{2(F_{bs} / F_0)} = J = const \quad , \tag{12}$$

т.е. представляет собой некий фотометрический инвариант, характеризующий только оптические свойства элемента Δx среды. Поскольку (11) и (12) справедливы для слоя любой толщины любой светорассеивающей среды, можно предположить, что они справедливы и для нашей модельной среды с $H_0=h$, когда на этом интервале содержится внутри среды лишь одна неоднородность. Для слоя такой толщины с одной неоднородностью посередине (рис.3) можно независимо, из общих фотометрических соображений получить явные выражения для F_{bs} и F_{τ} через параметры μ_a , R, N и H_0 .



Рис.3. Слой среды с одной неоднородностью посередине.

Так, вводя среднюю плотность неоднородностей внутри среды:

$$\mu_{\rho} = N/H_0 \quad , \tag{13}$$

замечая, что $h=1/\mu_{\rho}$, и используя общие фотометрические представления о распространении потоков излучения в одном слое с одной неоднородностью, получим:

$$F_{bs} = F_0 \cdot R \cdot e^{-\mu_a / \mu_\rho} ; \quad F_\tau = F_0 (1 - R) \cdot e^{-\mu_a / \mu_\rho} . \tag{14}$$

Далее, приравнивая (11) и (14) для одноименных потоков излучения, заменяя в (11) H_0 на $h=1/\mu_\rho$ и сокращая F_0 в левой и правой частях уравнений, получим систему из двух алгебраических уравнений с двумя неизвестными β_1 и β_2 . Нахождение интересующих нас выражений для β_1 и β_2 теперь не представляет особого труда. Окончательный вид этих выражений может быть записан следующим образом:

$$\beta_{1} = \omega \cdot \frac{\mu_{a} - \mu_{\rho} \ln(1 - R) + \mu_{\rho} \ln(1 - \omega + \sqrt{\omega^{2} - R^{2} e^{-2\mu_{a}/\mu_{\rho}}})}{\sqrt{\omega^{2} - R^{2} e^{-2\mu_{a}/\mu_{\rho}}}}$$
$$\beta_{2} = R \cdot e^{-\mu_{a}/\mu_{\rho}} \cdot \frac{\mu_{a} - \mu_{\rho} \ln(1 - R) + \mu_{\rho} \ln(1 - \omega + \sqrt{\omega^{2} - R^{2} e^{-2\mu_{a}/\mu_{\rho}}})}{\sqrt{\omega^{2} - R^{2} e^{-2\mu_{a}/\mu_{\rho}}}}, \quad (15)$$

где: $\omega = \frac{1 - (1 - 2R) \cdot e^{-2\mu_a/\mu_\rho}}{2}.$

Как видно, зависимость транспортных коэффициентов системы (10) от реальных оптических свойств среды оказывается, на самом деле, довольно сложной и далеко не очевидной априори. Для β_l , например, эта зависимость в общем случае не может быть произвольно выражена по аналогии с $\beta_l = (K+S)$ в (1) в виде

$$\beta_1 = k\mu_a + \beta_2 \, ,$$

где *k* – любой числовой коэффициент, т.к. из (15)

$$\beta_1 = \frac{\omega \cdot e^{\mu_a / \mu_\rho}}{R} \cdot \beta_2 \quad .$$

Интересно сравнить (15) и с рядом ранее полученных результатов [7, 13, 23, 26]. Так, для среды без поглощения ($\mu_a=0$) ранее было получено точное соотношение [26]:

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_m = \frac{\mu_{\rho} R}{1 - R} .$$
 (16)

Нетрудно убедиться, что и для выражений (15)

$$\lim_{\mu_a\to 0}\beta_1 = \lim_{\mu_a\to 0}\beta_2 = \beta_m ,$$

т.е. в пределе отсутствия поглощения (15) строго сходится к (16). Для приближения однократного рассеяния полученные ранее соотношения [7] имеют вид:

$$\beta_{1} = \mu_{a} - \mu_{\rho} \cdot \ln(1 - R)$$

$$\beta_{2} = \frac{R \cdot e^{-\mu_{a}/\mu_{\rho}}}{1 - R \cdot e^{-2\mu_{a}/\mu_{\rho}}} \cdot (2\mu_{a} - \mu_{\rho}\ln(1 - R)) , \qquad (17)$$

что также хорошо согласуется с (15) в пределе малого рассеяния.

На заключительном этапе решение общей системы (10) с использованием (15) может быть записано аналогично решению (2) для системы (1), но с параметрами:

$$\alpha = L = \sqrt{\beta_1^2 - \beta_2^2} ; \quad A_+ = \frac{\beta_1 + \beta_2 + \alpha}{\beta_1 + \beta_2 - \alpha} \quad \text{if } A_- = \frac{1}{A_+} \quad . \tag{18}$$

Константы интегрирования C_1 и C_2 в (2) определяются из общих граничных условий, сформулированных нами для всей нашей модельной среды в виде:

$$F_{+}(0) = F_{0} \quad \text{i} \quad F_{-}(H_{0}) = 0 \quad . \tag{19}$$

Теперь, использование (10) совместно с ее решением в форме (2) с учетом (15), (18) и (19) позволяет полностью решить поставленную задачу и вычислить распределение поля излучения внутри и на границах рассматриваемой модельной среды.

ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим результаты численных расчетов. На рис.4 представлены результаты расчетов распределения поля единичного излучения ($F_0=1$) для модельной среды с пара-

метрами: N=3, $H_0=1.5$ см; R=0.4; $\mu_a=0.5$ см⁻¹. Расчеты выполнены как с помощью точных расчетных формул (6)-(9), так и методом КМ по (10) с использованием (15), (18) и (19). Для сравнения там же приведены результаты расчета в приближении однократного рассеяния (OP) на основе (10) и (17) и результаты для классической модели КМ с учетом многократного рассеяния, когда используются априорные сводные соотношения:



$$\beta_1 = \mu_a + \beta_2 \; ; \qquad \beta_2 = \beta_m = \frac{\mu_\rho R}{1 - R} \; . \tag{20}$$

 Рис.4. Поле единичного излучения (F₀=1) для модельной среды с параметрами: N=3, H₀=1.5см; R=0.4; µ_a=0.5см⁻¹.
 ______точное решение; ______модельное решение по (10) с (15);
 ______приближение ОР по (10) и (17); _____классический метод КМ по (10) и (20).

Для наглядности вертикальные линии на графике характеризуют локализацию трех неоднородностей внутри среды. Нетрудно видеть, что точное распределение потоков излучения в такой модели стопы, как это неоднократно отмечалось и в работах других авторов, представляет собой кусочно-непрерывную (ступенчатую) функцию для каждого из потоков, не имеющую производной в точках скачка функции (точках разрыва 1-го рода). В этом смысле решение задачи методом КМ никак не может быть точным, какие бы значения для параметров среды мы ни выбирали, т.к. этот метод оперирует понятиями функций для потоков, имеющих непрерывные первые и вторые производные внутри среды. Другое дело, что в пределе большого N (в пределе $N \rightarrow \infty$) и при общем уменьшении величины скачков функции, согласно известным теоремам математического анализа [3], любая аналогичная ступенчато-непрерывная функция будет стремиться к некоторой гладкой аналитической кривой. Следовательно, функции метода КМ и описывают, видимо, эту гладкую аппроксимирующую кривую. Однако для нас более важно, что расчет на основе (15) дает точное значение для обратно рассеянного и прошедшего насквозь среду потоков излучения, т.е. для потоков F_{bs} и F_{τ} , которые и измеряются диагностической аппаратурой. Причем различие в результатах для разных приближений максимально именно для F_{bs}. А это, в свою очередь, означает, что реконструкция оптических свойств среды по данным измерений F_{bs} в случае неправильно выбранного приближения и/или модельного описания среды распространения излучения будет выполнена с максимальной ошибкой.

Интересно проанализировать, как меняется ошибка в расчетах F_{bs} для разных приближений в зависимости от изменения оптических свойств модельной среды. Рис. 5 демонстрирует результаты вычислений F_{bs} в разных приближениях для полубесконечного слоя (в пределе $H_0 \rightarrow \infty$). На графике представлено отношение рассчитанного значения F_{bs} по (10) с использованием (15), а также по (10) с (17) и (20), к значению F_{bs} , полученному на основе точных расчетных формул (6)-(9). Как и следовало ожидать, отношение результата по (10) с (15) к результату точного фотометрического расчета для любых параметров среды всегда равно 1 (ошибки нет). Для других приближений хорошо прослеживается увеличение ошибки с ростом R, μ_a и уменьшением μ_ρ . В общем случае ошибка может быть весьма существенной – до 20-30% и более.



Рис.5. Отношение потоков F_{bs} для разных приближений к точному значению F_{bs} в зависимости от изменения оптических свойств модельной среды. Расчет для полубесконечного слоя. ------ приближение ОР по (10) и (17), — классический метод КМ по (10) и (20).

Таким образом, только решение системы (10) с использованием (15) дает точные значения для потока F_{bs} для выбранной модельной среды во всем диапазоне изменения параметров μ_a , R, N и H_0 . Следовательно, в общем случае любой модельной среды принятое априорное разделение β_1 на два независимых друг от друга коэффициента K и S в исходной феноменологической формулировке (1) потоковых моделей КМ *не вполне правомерно*. Это же, видимо, можно сказать и об общем уравнении переноса. Известно, что первое слагаемое в правой части классического уравнения переноса также *априори* [1, 2, 8] приято в виде двух разделенных параметров μ_a и μ_s , где μ_s является погонным коэффициентом рассеяния, аналогичным S модели КМ. Это является следствием исходной эвристической посылки о существовании в каждом элементарном объеме рассматриваемой среды распространения излучения двух независимых друг от друга процессов – рассеяния и поглощения. На слабую обоснованность такого подхода неоднократно указывалось в литературе. В [2], например, вопрос об истинных оптических свойствах элементарного объема среды просто позиционируется как ключевой вопрос точности и справедливости всей линейной теории переноса. Теперь, на основе (15) и предложенной модели стопы, можно легко убедиться, что существуют такие практические задачи, в которых процессы рассеяния и поглощения излучения в элементарном объеме среды тесно взаимосвязаны между собой и не могут быть произвольно разделены на два независимых процесса. Соотношения (15), например, только в предельном случае $R < \mu_a/\mu_{\rho} < 1$ для коэффициента β_I позволяют разделить его на два независимых параметра:

$$\beta_1 = \mu_a + R\mu_\rho \approx \mu_a - \mu_\rho \ln(1-R), \qquad (21)$$

что примерно соответствует приближению (17). И уж тем более спорным в свете полученных результатов можно считать соотношение (4). Авторы [25], на самом деле, не сравнивали решение какой-либо задачи на основе полного уравнения переноса с решением этой же задачи на основе системы (1). Сравнение решений для системы (1) проводилось с результатами расчетов по авторской 22-х потоковой модели (некая пространственная задача) и соотношение (4) было получено в этой работе лишь как приблизительное. Кроме того, очевидно, что и уравнение переноса, и модель КМ (1) в пределе отсутствия рассеяния (в нашей терминологии в пределе $R \rightarrow 0$ или $\mu_{\rho} \rightarrow 0$) должны сходится к закону Бугера (3). Выражения (15) действительно дают в пределе отсутствия рассеяния результат:

$$\beta_1 = \mu_a \quad ; \quad \beta_2 = 0 \quad . \tag{22}$$

Если же принять независимо от параметров рассеяния среды справедливым соотношение (4), то в отсутствие рассеяния модель КМ (1) при одних и тех же исходных феноменоло-

гических посылках даст вдвое больший, чем уравнение переноса, коэффициент в показателе экспоненты закона Бугера (3), что весьма сомнительно.

Таким образом, во всех рассмотренных выше случаях использование системы (10) совместно с выражениями (15) более обосновано. Коэффициенты преобразования потоков β_1 и β_2 в (10) выступают в задаче, на самом деле, в виде некоторых эффективных оптических параметров, которые зависят как от истинных оптико-физических свойств среды, так и от модельной постановки задачи (приближение однократного рассеяния (17), приближение отсутствия рассеяния (22), приближение (16) и т.п.). Поэтому, для реконструкции реальных оптических свойств среды по результатам измерений F_{bs} в расчетных алгоритмах диагностических приборов помимо стандартной обратной задачи для определения β_1 и β_2 , необходимо также решать систему уравнений типа (15) относительно оптических свойств выбранной модельной среды распространения излучения. Причем для разных моделей среды уравнения (15) могут иметь разный вид.

Надо сказать, что уравнения типа (15), вообще говоря, в литературе по биомедицинской оптике известны. Похожие соотношения приведены в [12, 18, 21, 22 и др.]. Правда, в подавляющем большинстве случаев, они сформулированы не в явном виде, аналогичном (15), а на основе инварианта (12). Используя связь между коэффициентами

$$\beta_1 = \beta_2 \cdot J \quad , \tag{23}$$

которую легко получить и из (15), т.к.³

$$J = \frac{\omega \cdot e^{\mu_a / \mu_\rho}}{R} , \qquad (24)$$

авторы [18, 21, 22 и др.] далее делают, опираясь на (1), подстановку в (23) значений

$$\beta_1 = K + S \quad ; \quad \beta_2 = S \, ,$$

что приводит, как мы теперь видим, в общем случае к ошибочному выражению

³ Поскольку инвариант *J* не зависит от толщины выбранной среды, (24) легко получить на основе (12) простой подстановкой туда величин потоков по (14) для слоя толщиной h с одной неоднородностью.

$$K = S(J-1),$$

18

верному для нашей модельной среды лишь в приближении (21) и при условии (5).

И последнее, что интересно упомянуть, касается соотношения (23). Похожее выражение является основой так называемого приближения «пропорциональной среды» [10], которое для задач оптической томографии упрощает вычислительные алгоритмы и сводит обратную задачу к нахождению одной независимой переменной. Опираясь на (23), логично предположить, что это приближение может иметь и более глубокое обоснование, нежели просто предположение, которым оперируют сегодня его авторы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в теории переноса и, в частности, в потоковых моделях КМ при эвристической формулировке исходных дифференциальных уравнений в общем случае любой модельной среды не вполне корректно постулируется первый коэффициент ослабления потоков в правой части уравнений в виде разделенных параметров μ_a и μ_s (*K* и *S*). Это приводит к ошибкам в расчетах уже для прямых задач, особенно к ошибкам в определении потока обратно рассеянного света, и, соответственно, к ошибкам восстановления (реконструкции) оптических свойств среды по данным эксперимента. Более корректная формулировка коэффициентов преобразования потоков по (15) с учетом реальной выбранной оптико-физической структуры среды (биоткани) позволяет даже для моделей КМ получать точные выражения для потоков обратно рассеянного и прошедшего среду излучений. Решение обратной задачи в этой формулировке, соответственно, теоретически позволяет надеяться на более точное восстановление оптических свойств биотканей по данным эксперимента, что принципиально важно при разработке вычислительных алгоритмов реальных приборов и устройств неинвазивной спектрофотометрии. Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №05-08-33354а. Автор выражает, также, свою признательность к.ф.-м.н. Л.П. Бассу и д.ф.-м.н. Ю.Н. Барабанен-кову за полезные замечания при обсуждении начального варианта текста статьи.

ЛИТЕРАТУРА

- Апресян Л.А., Кравцов Ю.А. Теория переноса излучения. Статистические и волновые аспекты. - М.: Наука. - 1983.
- 2. Барабаненков Ю.Н. // Успехи физ. наук 1975. Т.117, вып. 1 С.49-78.
- 3. *Бронштейн И.Н., Семендяев К.А.* Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. - М.: Наука. - 1980.
- 4. Гершун А.А. Избранные труды по фотометрии. М.: Физ.-мат. лит. 1958.
- 5. Гринько Е.С., Шкуратов Ю.Г. // Оптика и спект. 2003. Т.95, №6. С.1003-1009.
- 6. Гуревич М.М. Введение в фотометрию. Л.: Энергия. 1968.
- Дмитриев М.А., Рогаткин Д.А. и др. // В сб. Проблемы опт. физики. Кн. 1. 2003.
 Саратов: ГосУНЦ «Колледж». С.157-167.
- Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах.
 Т.1. М.: Мир. 1981.
- 9. Крепс Е. Оксигемометрия. М.: Медицина. 1978.
- 10. Потапов Д.А., Терещенко С.А. // Мед. техника. 2004. №3. С.6-8.
- 11. Рамм А.Г. Многомерные обратные задачи рассеяния. М.: Мир. 1994.
- Рвачев В.П. Методы оптики светорассеивающих сред в физике и биологии. Минск: БГУ. - 1978.
- 13. Рогаткин Д.А. // Оптика и спектр. 1999. Т.87, №1. С.109-113.
- 14. Рогаткин Д.А. // Оптика и спектр. 2004. Т.97, №3. С.484-493.
- 15. Рогаткин Д.А., Лапаева Л.Г. // Мед. техника. 2003. №4. С.31-36.
- 16. Середенко М.М. // Опт. Журнал. 1999. Т.66, №1. С.29-31.

- 17. Терещенко С.А., Подгаецкий В.М. и др. // Кв. электроника. 1996. Т. 23 С.265.
- Тучин В.В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. Саратов: СГУ. - 1998.
- 19. Хачатурян Г.В., Рогаткин Д.А. // Оптика и спектр. 1999. Т.87, №2. С.258-265.
- 20. Чандрассекар С. Перенос лучистой энергии. М.: Иностр. Лит. 1953.
- 21. Anderson R.R., Parrish B.B. // J. of Inv. Dermatology. 1981. V.77(1). P.13-19.
- 22. Cheong W-F., Prahl S.A., Welch A.J. // IEEE J. of Quant. Electronics. 1990. V.26(12).
 P. 2166-2185.
- 23. Dmitriev M.A., Rogatkin D.A. et. al. // SPIE Proc. 2004. V.5475. P.331-338.
- 24. Kubelka P., Munk F. // Zs. Tech. Phys. 1931. № 12. P.593-601.
- 25. Mudget P.S., Richards L.W. // Appl. Opt. 1971. V.10. P.1485-1502.
- 26. Rogatkin D.A., Tchernyi V.V. // SPIE Proc. 2004. V.5319. P.385-390.
- 27. Stokes G. // J. Matem. And Phys. Papers. 1954. V.4. P.145.
- 28. Zijlstra W.G. et. al. // Clin. Chem. 1991. V.37. №9. P.1633-1638.