

ДИФФУЗИЯ ФОТОНОВ В СЛУЧАЙНЫХ СРЕДАХ И АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ В МОДЕЛЯХ ХЕНЬИ – ГРИНШТЕЙНА И РЭЛЕЯ – ГАНСА

В. Л. Кузьмин^{a}, А. Ю. Вальков^{a,b**}, Л. А. Зубков^c*

^a *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

^b *Санкт-Петербургский государственный университет
199034, Санкт-Петербург, Россия*

^c *Drexel University, School of Biomedical Engineering
19104, Philadelphia, Pennsylvania, United States*

Поступила в редакцию 31 августа 2018 г.,
после переработки 31 августа 2018 г.
Принята к публикации 27 сентября 2018 г.

Проведено численное моделирование методом Монте-Карло интенсивности многократного обратно-рассеянного излучения как функции расстояния источник–приемник для моделей анизотропного рассеяния Хеньи–Гринштейна и Рэля–Ганса. Найдено, что вопреки обычному предположению диффузионного режима об универсальности описания рассеяния в терминах коэффициента экстинкции и транспортной длины, интенсивность многократного рассеяния зависит от вида фазовой функции и от степени анизотропии даже для систем с одинаковыми значениями коэффициентов экстинкции и транспортных длин. При этом фазовая функция Рэля–Ганса дает более чувствительные к анизотропии рассеяния результаты, чем функция Хеньи–Гринштейна.

DOI: 10.1134/S0044451019030088

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к переносу лазерного излучения в случайной среде в большой степени связан в последнее время с биомедицинскими приложениями (см. [1–4]). Одной из основных задач здесь является определение оптических параметров среды, коэффициента рассеяния, μ_s , и коэффициента абсорбции, μ_a , которые, в свою очередь, используются для определения физиологического состояния тканей. Важной проблемой при их определении является учет анизотропии индикатрисы однократного рассеяния, или фазовой функции. Из эксперимента извлекается приведенный коэффициент рассеяния μ'_s , связанный с коэффициентом рассеяния μ_s определением $\mu'_s = (1 - g)\mu_s$ [5], где параметр $g = \langle \cos \theta \rangle$ — средний косинус угла рассеяния, характеризующий степень анизотропии рассеяния. Наиболее часто используемой моделью анизотропного рассеяния явля-

ется эмпирическая фазовая функция Хеньи–Гринштейна (ХГ), что связано, в основном, с ее математическим удобством. Эта функция непосредственно включает в себя параметр g .

Однако анизотропия рассеяния и сам параметр g зависят от физических свойств рассеивателей и, прежде всего, их размеров. Простейшей моделью, исходящей из размеров рассеивателей, является модель суспензии твердых сфер, что соответствует фазовой функции Рэля–Ганса (РГ). Формально, описание однократного рассеяния на основе формул Ми является более точным в сравнении с моделью РГ. Однако использование формул Ми с одновременным использованием уравнения переноса, соответствующего уравнению Бете–Солпитера, с ограничением парными корреляторами диэлектрической проницаемости и лестничным приближением, представляет собой превышение точности [6].

Метод Монте-Карло (МК) в применении к задаче переноса излучения представляет собой стохастическое вычисление многократных интегралов путем статистической выборки мощностью N_{in} мно-

* E-mail: kuzmin_vl@mail.ru

** E-mail: e-mail: alexvalk@mail.ru

гомерных массивов размерностью до $3n_{sc}$, представляющих собою координаты n_{sc} актов рассеяния. Решающим шагом, определяющим эффективность МК-алгоритма, со времен Метрополиса является правильное семплирование, отражающее характер функции распределения. Наиболее эффективное семплирование основано на методе обратного преобразования, сводящем пространственные интегралы, понимаемые как свертки физических переменных со сложными распределениями, к интегралам по равномерно распределенным величинам. Однако на практике такой метод обычно используется лишь в простейших случаях, когда возможно аналитическое обращение кумулятивной (интегральной) функции распределения. В более сложных ситуациях обычно используются другие подходы. Так, в работе [7] для решения задачи МК-моделирования многократного рассеяния предлагается метод семплирования, пригодный для трехмерных анизотропных фазовых функций, основанный на кусочной аппроксимации плотности распределения.

Ранее мы кратко описали применение метода семплирования, основанного на кусочном моделировании кумулятивной функции распределения, что дало возможность применять метод обратного преобразования к фазовой функции РГ [8], рассчитав, в частности, угловую зависимость интенсивности обратного рассеяния в диффузионном режиме. Здесь мы приводим результаты моделирования в условиях, типичных для современного эксперимента и практических применений [9–11], с разделенными пространственно источником и приемником излучения. В рамках обычных представлений диффузионной теории переноса излучения считается [5], что при одинаковых значениях коэффициента абсорбции и транспортной длины поведение систем универсально и не зависит от анизотропии рассеяния. Мы обнаружили, что масштабного перехода $\mu_s \rightarrow \mu'_s$ недостаточно для учета анизотропии; в частности, мы нашли, что интенсивность обратного рассеяния продолжает зависеть от степени анизотропии и вида фазовой функции даже для систем с одинаковыми значениями коэффициента μ'_s .

Для распределения по углам рассеяния в виде модели ХГ легко находится в элементарном виде обратное преобразование для кумулятивной, или интегральной, функции распределения. Использование фазовой функции Ми [12] и ряда других функций [13, 14] затруднено именно из-за невозможности получить кумулятивную функцию, приемлемую для создания обозримого численного алгоритма. Отметим, что функция вида Орнштейна – Цернике также

позволяет найти обратное преобразование кумулятивной функции в элементарном виде, что может быть использовано при моделировании переноса излучения в жидко-кристаллических средах [15–17].

В настоящей работе найденная в явной форме кумулятивная функция модели Рэля – Ганса позволила эффективно реализовать для этой модели метод обратного преобразования и выполнить моделирование многократного рассеяния для обоих видов фазовых функций одновременно.

На основе развитого алгоритма стохастического моделирования многократного рассеяния выполнен численный расчет сигналов, измеряемых современной методикой диффузионной ближнеинфракрасной спектроскопии (DNIRS — diffuse near infrared spectroscopy); расчет дополнен сравнением с экспериментальными данными. Показано, что в целом для зависимости от расстояния источник–приемник интенсивности обратного рассеянного излучения в рамках моделей ХГ и РГ расчеты дают сходную картину. Однако на расстояниях порядка десяти транспортных длин, типичных для биомедицинских приложений, обнаружена различная скорость приближения к стандартному случаю изотропного рассеяния при уменьшении степени анизотропии для РГ- и ХГ-моделей; количественно на малых расстояниях модель РГ приводит к большим значениям интенсивности обратного рассеяния нежели модель ХГ.

Мы выполнили моделирование интенсивности обратного рассеяния в современной постановке эксперимента как функцию расстояния между источником и приемником, расположенными на поверхности модели биоткани (биофантома). Мы нашли заметную зависимость от вида фазовой функции и степени анизотропии рассеяния; эта зависимость наблюдается в том числе для систем с равными значениями приведенных коэффициентов рассеяния и абсорбции, для которых диффузионное приближение предполагает универсальность поведения. Интенсивность многократного рассеяния строго назад изменяется с ростом анизотропии рассеяния, заметно различаясь для рассматриваемых моделей, вопреки распространенному положению об универсальности описания рассеяния в диффузионном режиме, при котором конкретный вид фазовой функции становится не важен в пределе высоких кратностей рассеяния.

В разд. 2 изложено описание переноса излучения в терминах уравнения Бете – Солпитера; разд. 3 содержит точные результаты для изотропного рассеяния; разд. 4 описывает алгоритм моделирования

Монте-Карло; в разд. 5 на основе полученной кумулятивной функции развит метод обратного преобразования для фазовой функции РГ; в разд. 6 приводятся результаты моделирования; разд. 7 содержит Заключение.

2. ПЕРЕНОС ИЗЛУЧЕНИЯ В РАМКАХ УРАВНЕНИЯ БЕТЕ – СОЛПИТЕРА

Распространение и рассеяние монохроматической световой волны в случайной среде будем описывать, используя волновое уравнение в интегральной форме:

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}_1 T_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta\varepsilon(\mathbf{r}_1) E(\mathbf{r}_1), \quad (1)$$

где $E_0(\mathbf{r})$ и $E(\mathbf{r})$ – спектральные компоненты поля в однородной среде и случайного поля в среде с флуктуациями диэлектрической проницаемости $\delta\varepsilon$, а $T_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) = k_0^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^{-1} \exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|)$ – функция Грина (с точностью до множителя $1/4\pi$) в вакууме в частотном представлении. Такое же уравнение определяет функцию Грина в случайной среде:

$$T_{fl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = T_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}_1 T_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta\varepsilon(\mathbf{r}_1) T_{fl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'). \quad (2)$$

Усредненная по флуктуациям диэлектрической проницаемости функция Грина T_{fl} имеет в главном порядке вид

$$T(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) = \langle T_{fl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \rangle = k^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^{-1} \exp(ik |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|),$$

где $k = nk_0$, n – показатель преломления.

Итерируя волновое уравнение (1), представим $E(\mathbf{r})$ в виде ряда по степеням флуктуаций диэлектрической проницаемости $\delta\varepsilon(\mathbf{r})$:

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(4\pi)^n} \int \prod_{i=1}^n d\mathbf{r}_i \delta\varepsilon(\mathbf{r}_i) \times T_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \dots T_0(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) E_0(\mathbf{r}_1). \quad (3)$$

Среднее $\langle \delta E^*(\mathbf{r}) \delta E(\mathbf{r}) \rangle$ по конфигурациям рассеивателей произведения флуктуации поля $\delta E(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r}) - \langle E(\mathbf{r}) \rangle$ на комплексно-сопряженное дает с точностью до стандартных множителей интенсивность рассеянного излучения для точки наблюдения \mathbf{r} , расположенной вне рассеивающей среды.

Это выражение, $\langle \delta E^*(\mathbf{r}) \delta E(\mathbf{r}) \rangle$, представляется в виде произведения двух итерационных рядов для поля и его комплексно-сопряженного. При статистическом усреднении по конфигурациям рассеивателей отдельные слагаемые произведения итерационных рядов содержат многочастичные корреляционные функции диэлектрической проницаемости

$\langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}_1) \dots \delta\varepsilon(\mathbf{r}_n) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_1) \dots \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_m) \rangle$. В результате хаотизации по разности фаз, возникающей при многократном рассеянии, при условии слабого рассеяния $\lambda \ll l$, где λ – длина волны, а l – средняя длина свободного пробега фотона, отлична от нуля только некогерентная составляющая (главный вклад в которую вносит лестничная, в диаграммных терминах) последовательности актов рассеяния полей δE и δE^* на одной и той же последовательности флуктуаций. Предполагая радиус корреляции r_c флуктуаций $\delta\varepsilon$ не слишком большим, $r_c \ll l$, получим с учетом теоремы Вика

$$\langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}_1) \dots \delta\varepsilon(\mathbf{r}_n) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_1) \dots \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_m) \rangle_L = \delta_{nm} \prod_{i=1}^n \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}_i) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_i) \rangle. \quad (4)$$

Оставляя только такие лестничные составляющие многочастичных корреляторов, некогерентную часть интенсивности рассеянного излучения представим в виде ряда по кратностям рассеяния:

$$\langle \delta E^*(\mathbf{r}) \delta E(\mathbf{r}) \rangle_L = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(4\pi)^{2n}} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_n d\mathbf{r}'_1 \dots d\mathbf{r}'_n \times T_{oi}^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_n) T_{oi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}_n) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_n) \rangle \times \prod_{i=1}^{n-1} T^*(\mathbf{r}'_{i+1} - \mathbf{r}'_i) T(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i) \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}_i) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}'_i) \rangle \times E^*(\mathbf{r}'_1) E(\mathbf{r}_1), \quad (5)$$

где $T_{oi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ – усредненная по флуктуациям функция Грина с аргументами, \mathbf{r} и \mathbf{r}_n , расположенными, соответственно, вне и внутри случайной среды; на большом расстоянии до среды она представляется во фраунгоферовом приближении как

$$T_{oi}(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1) = T(\mathbf{r}_0) \exp(-i\mathbf{k}_f \mathbf{r}_1).$$

Оптическая теорема связывает коэффициент рассеяния μ_s и интеграл по телесному углу от фурье-образа коррелятора диэлектрической проницаемости

$$G(\mathbf{q}) = \frac{1}{(4\pi)^2} \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}') \rangle. \quad (6)$$

В случае скалярного поля

$$\mu_s = k_0^4 \int d\Omega_f G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i). \quad (7)$$

Для электромагнитного поля в (7) добавляется рэлеевский множитель: $G \rightarrow G(1 + \cos^2 \theta_f)/2$.

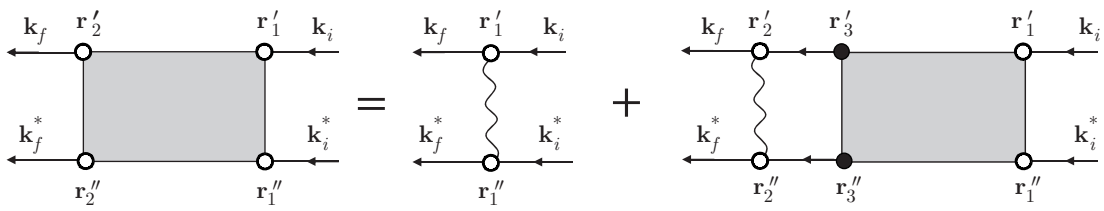


Рис. 1. Схематическое представление уравнения Бете–Солпитера в виде фейнмановских диаграмм. Заштрихованный прямоугольник — пропагатор Бете–Солпитера, волнистая линия — коррелятор флуктуаций диэлектрической проницаемости; внутренние линии — полевые функции Грина; стрелки — входящие или выходящие плоские волны; по зачерненным вершинам проводится интегрирование

Пусть z — декартова координата точки $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\perp, z)$, нормальная к границам плоскопараллельного слоя толщиной T , $z \in [0; T]$; $T = \infty$ соответствует полупространству. Определим некогерентную часть интенсивности рассеянного назад излучения, отнесенную к плотности энергии падающего поля, как

$$J(s_i, s_f) = 4\pi \int_0^\infty dz_1 \int_{z_2 > 0} d\mathbf{r}_2 \Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \times \exp(-\mu(s_f z_2 + s_i z_1)), \quad (8)$$

где $s_i = 1/\cos\theta_i$, $s_f = 1/\cos\theta_f$, θ_i — угол падения, θ_f — угол обратного рассеяния, отсчитываемый от обратного направления. Пропагатор $\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ возникает как результат суммирования лестничного ряда по кратностям рассеяния. Формально этот ряд имеет вид операторной геометрической прогрессии; его суммирование приводит к замкнутому уравнению, известному как уравнение Бете–Солпитера (см. рис. 1).

Лестничное приближение требует, чтобы длина волны, а также размер неоднородностей и радиус их корреляций были меньше длины рассеяния, $\lambda \ll l_{ext}$ и $d, r_c \ll l_{ext}$. Это требование в рассматриваемых приложениях выполняется: длина волны и размеры рассеивателей порядка микрона, а длина экстинкции в биосистемах порядка десятков микрон и более. Необходимо также выполнение условия слабой интенсивности флуктуаций диэлектрической проницаемости, $\delta\epsilon \ll 1$; это требование позволяет учитывать только такие конфигурации, где расстояния между каждыми последовательными актами рассеяния соизмеримы с длиной экстинкции, и можно не учитывать конфигурации, в которых расстояния между отдельными актами рассеяния определяются радиусом корреляции.

Уравнение Бете–Солпитера, описывающее перенос стационарного излучения, запишем в виде

$$\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = k_0^4 G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + k_0^4 \int d\mathbf{r}_3 G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_{23}) \Lambda(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \Gamma(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_{23}, \mathbf{k}_i),$$

где пропагатор $\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ описывает распространение излучения, падающего в точке \mathbf{r}_1 и выходящего из точки \mathbf{r}_2 , с начальным \mathbf{k}_i и финальным \mathbf{k}_f волновыми векторами; \mathbf{k}_{ij} — волновой вектор вдоль направления из \mathbf{r}_i в \mathbf{r}_j , $k_0 = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны в вакууме; пропагатор однократного рассеяния $\Lambda(r) = r^{-2} \exp(-\mu r)$ представляет собой произведение комплексно-сопряженной пары функций Грина скалярного поля с учетом множителя k_0^4 , $\mu = \mu_s + \mu_a$ — коэффициент экстинкции, μ_a — коэффициент поглощения.

Вводя нормированную фазовую функцию

$$p(\hat{\mathbf{k}}_f \hat{\mathbf{k}}_i) = G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) / \int d\Omega_f G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i), \quad (9)$$

где $\hat{\mathbf{k}}$ обозначает единичный вектор вдоль \mathbf{k} , уравнение Бете–Солпитера представим в виде

$$\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \mu_s p(\hat{\mathbf{k}}_f \hat{\mathbf{k}}_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + \mu_s \int d\mathbf{r}_3 p(\hat{\mathbf{k}}_f \hat{\mathbf{k}}_{23}) \Lambda(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \Gamma(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_{23}, \mathbf{k}_i). \quad (10)$$

Когерентная часть интенсивности обратного рассеяния дается формулой (8) при замене экспоненты на произведение

$$\exp(-\mu(s_f + s_i)(z_1 + z_2)/2) \cos((\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)).$$

Для рассеяния строго назад этот вклад за вычетом вклада однократного рассеяния дает удвоение интенсивности; здесь мы его не рассматриваем в силу угловой узости пика.

3. ТОЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ИЗОТРОПНОГО РАССЕЯНИЯ

Итерируя уравнение Бете – Солпитера, запишем интенсивность в виде ряда по кратностям рассеяния:

$$J(s_i, s_f) = J^{(1)}(s_i, s_f) + \sum_{n=2}^{\infty} J^{(n)}(s_i, s_f), \quad (11)$$

где

$$J^{(1)}(s_i, s_f) = 4\pi(\mu_s/\mu)(s_f + s_i)^{-1}p(\hat{\mathbf{k}}_f \hat{\mathbf{k}}_i)$$

— вклад однократного рассеяния, а $J^{(n)}(s_i, s_f)$ — рассеяния n -го порядка, $n > 1$.

Аналитически вычисляются для полупространства также вклады двух и трех кратных рассеяний. Интенсивность двукратного рассеяния имеет вид

$$J^{(2)}(s_i, s_f) = (\mu_s/4\pi)^2 \int_0^{\infty} dz_1 \int_{z_2>0} d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \times \\ \times \Lambda(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \exp(-\mu(s_f z_2 + s_i z_1)). \quad (12)$$

В силу цилиндрической симметрии интеграл по поперечным переменным легко преобразуется:

$$\int d\mathbf{r}_3 \Lambda(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = 2\pi \int_{z_1, z_3>0} dz_3 \int \rho d\rho r^{-2} e^{-\mu r},$$

где $r = \sqrt{\rho^2 + |z_3 - z_1|^2}$; заменяя переменные интегрирования ρ на r и r на t , $r = |z_3 - z_1|t$, приводим внутренний интеграл к виду

$$\int d\mathbf{r}_3 \Lambda(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = 2\pi \int_{z_3>0} dz_3 \int_1^{\infty} t^{-1} dt \times \\ \times \exp(-\mu(s_f z_2 + s_i z_1 + t|z_3 - z_1|)),$$

после чего элементарно вычисляются интегралы от экспонент по z_1, z_2 , с учетом дельта-функции,

$$J^{(2)}(s_f, s_i) = \frac{\mu_s^2}{\mu^2} \times \\ \times \frac{1}{2(s_f + s_i)} \left(\frac{\ln(1 + s_f)}{s_f} + \frac{\ln(1 + s_i)}{s_i} \right). \quad (13)$$

В случае изотропного рассеяния, $p(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{k}}_i) = 1/4\pi$, нормального падения и рассеяния строго назад в отсутствие поглощения мы получаем для полупространства и низших порядков рассеяния:

$$J^{(1)}(1, 1) = 0.5, \quad J^{(2)}(1, 1) = \frac{1}{2} \ln 2,$$

$$J^{(3)}(1, 1) = \frac{1}{4} \ln^2 2 + \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{48} \pi^2,$$

$$J^{(4)}(1, 1) \approx 0.206753.$$

Мы используем эти значения для контроля точности численных симуляций многократного рассеяния. Точное решение задачи об угловом распределении интенсивности рассеяния от полупространства, известной как задача Милна, для изотропного рассеяния можно представить в виде (см. [18, 19])

$$J(s_i, s_f) = \frac{1}{s_i + s_f} \exp(-H(s_i) - H(s_f)), \quad (14)$$

$$H(s) = \frac{s}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{ds'}{s^2 + s'^2} \ln \left(1 - \frac{\arctg s'}{s'} \right). \quad (15)$$

В направлении строго назад $J(1, 1) \approx 4.22768$ [20].

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО

В стохастическом методе интенсивность рассеяния представляет собой среднее по выборке N_{in} падающих фотонов

$$J_{\omega}(\rho) = \frac{1}{N_{in}} \sum_{i=1}^{N_{in}} J_{\omega}^{(i)}(\rho), \quad (16)$$

где вклад отдельного фотона $J_{\omega}^{(i)}(\rho)$ является суммой вкладов отдельных кратностей рассеяния

$$J_{\omega}^{(i)}(\rho) = \sum_{n < n_{sc}} W_n^{(i)} e^{-\mu z_n^{(i)}} \cos(c^{-1} \omega R_n^{(i)} + \theta_0). \quad (17)$$

Здесь $W_n^{(i)}$ — ненормированный вес i -го фотона, а $z_n^{(i)}$ — его расстояние до границы от точки n -го акта рассеяния $\mathbf{r}_n^{(i)}$, в соответствии с формулой (8), а величина $R_n^{(i)} = z_1^{(i)} + \sum_{j \geq 2} r_{j,j-1}^{(i)} + z_n^{(i)}$ представляет собой оптический путь, пройденный i -м фотоном, испытавшим n актов рассеяния, ω — частота модуляции. В случае $\omega = 0$ моделируется сигнал DNIRS стационарного CW-излучения. При выборе $\theta_0 = 0$ и $\theta_0 = \pi/2$ измеряются два независимых сигнала, позволяющие определить два параметра — амплитуду и фазовый сдвиг рассеянного модулированного излучения в методике диффузных волн фотонной плотности (DPDW — diffuse photon density wave) в частотном представлении.

Вес $W_n^{(i)}$ с учетом геометрии задачи представляет собой случайное значение подынтегрального выражения многократного пространственного интеграла, возникающего как итерация n -го порядка

уравнения Бете–Солпитера (10). При реализации процедуры итераций возникает стохастическая последовательность, или траектория точек рассеяния $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$.

В случае попадания фотона за пределы ограниченной среды направление его движения следует повернуть согласно законам отражения, умножая вес на коэффициент отражения Френеля (см. [21, 22]). В часто рассматриваемом случае пренебрежения отражением на границе (формально — при равенстве вещественных частей показателей преломления) вклад траектории с вершиной вне среды отбрасывается в нашем алгоритме; таким образом вес $W_n^{(i)}$ представляет собой произведение коэффициентов Френеля; в частном случае рассеяния без отражения равенство этого коэффициента нулю эквивалентно учету ограниченности среды.

Время счета почти линейно зависит от объема выборки N_{in} , а также растет с ростом максимально возможного числа актов рассеяния n_{sc} , учитываемого в сумме (17); в работе [23] было показано, что результаты численного моделирования стабильны в полубесконечной среде с точностью до процента при $n_{sc} \leq 10^5$. При фиксированной транспортной длине $l_{tr} = 1/\mu'_s$ число учитываемых актов рассеяния должно увеличиваться с уменьшением длины рассеяния $l_s = l_{tr}(1 - g)$, т. е. с увеличением параметра анизотропии g .

Описываемая процедура построения алгоритма вычисления интенсивности рассеяния полностью повторяет известную процедуру MCML [21] вплоть до момента, когда фотон покидает среду.

В нашем подходе вклад диаграммы с фотоном, покинувшим среду, отбрасывается по условию ограниченности области интегрирования. Вклад в сигнал дает каждая диаграмма, как среднее экспонент затухания $\exp(-\mu z_n^{(i)})$; их величина определяется координатами каждого акта рассеяния.

Для сравнения рассматриваемого алгоритма с алгоритмом MCML мы рассчитали сигнал как число фотонов, покинувших среду, в соответствии с методом MCML, и альтернативно согласно выражению (17), которое можно интерпретировать как среднее указанных экспонент, т. е. как среднее функций, описывающих затухание излучения, возвращающегося назад, к границе среды, испытав n актов рассеяния; напомним, что этот экспоненциальный множитель возникает при постановке задачи о рассеянии во фраунгоферовом приближении для функции Грина с точкой наблюдения вдали от среды. На основе процедуры MCML рассчитывается сред-

нее число фотонов, покидающих среду после n актов рассеяния.

Мы использовали указанное выше точное значение интенсивности рассеяния назад от полупространства для изотропной индикатрисы, $J(1, 1) \approx 4.22768$, полученное при решении задачи Милна, для проверки корректности используемых программных кодов. Мы нашли, что в рамках развитой нами модели (17) с точностью до одного процента значение $J(1, 1) = 4.23 \pm 0.05$ воспроизводится уже при объеме выборки $N_{in} = 10^4$ со временем счета несколько минут на обычном персональном компьютере при использовании одного ядра ЦП, в то время как в рамках общепринятого метода регистрации рассеяния MCML, та же точность достигается при выборке не менее миллиона, $N_{in} \geq 10^6$; число актов рассеяния в обоих случаях не менее $n = 10^5$.

5. МЕТОД ОБРАТНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ФАЗОВОЙ ФУНКЦИИ РГ

При МК-моделировании переноса излучения стандартно используются две подстановки метода обратного преобразования: подстановка, основанная на экспоненциальном распределении расстояний между рассеивателями, и подстановка, основанная на фазовой функции угла рассеяния.

Для вычисления случайного значения подынтегрального выражения, соответствующего n -му члену в (11), мы рекуррентно порождаем случайную траекторию событий рассеяния в точках \mathbf{r}_j , $j = 1, \dots, n$, используя на каждом шаге две указанные процедуры обратного преобразования. Расстояние $r'_j = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j-1}|$ разыгрывается с помощью переменной $\xi_j = \exp(-\mu r'_j)$, а полярный угол θ_j , отсчитывающийся от предыдущего направления рассеяния \mathbf{r}'_{j-1} , с помощью переменной

$$\chi_j = 2\pi \int_{-1}^{t_j} p(t') dt', \quad t_j = \cos \theta_j. \quad (18)$$

Переходя последовательно для каждого $j = 2, 3, \dots$ от 3D-интегрирования по \mathbf{r}_j к интегрированию по разностной переменной $\mathbf{r}'_j = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j-1}$, имеем

$$\int d\mathbf{r}'_j \Lambda(r'_j) p(t_j) f(r'_j, t_j) = \frac{1}{2\pi\mu} \times \int_0^1 d\xi_j \int_0^1 d\chi_j \int_0^{2\pi} d\phi_j f(-\mu^{-1} \ln \xi_j, t(\chi_j)), \quad (19)$$

где $f(r'_j, t_j)$ — произвольная функция, $t_j = t(\chi_j)$ — обратная функция к $\chi_j = \chi(t_j)$ в (18), ϕ_j — азимутальный угол. Интегрирование в (19) выполняется усреднением по выборке равномерно распределенных случайных переменных $\xi_j, \chi_j \in [0; 1]$ и $\phi_j \in [0; 2\pi]$.

Вводя переменную $q = kR\sqrt{2(1-t)}$ для (18), получаем

$$1 - \chi = 2\pi(kR)^{-2} \int_0^q p(q')q'dq'. \quad (20)$$

Здесь учтено условие нормировки

$$2\pi(kR)^{-2} \int_0^{2kR} p(q')q'dq' = 1. \quad (21)$$

Если рассматривать функцию $2\pi(kR)^{-2}p(q')$ как плотность распределения величины $q' \in [0; 2kR]$, то согласно (20) функция $\chi'(q) = 1 - \chi(q)$ имеет смысл кумулятивной функции распределения, которая равна вероятности того, что величина q' находится в интервале $(-\infty; q)$.

Фазовую функцию РГ можно записать как

$$p(q) = 2(\pi A)^{-1}q^{-6}(\sin q - q \cos q)^2. \quad (22)$$

По условию (21) постоянная $A = (kR)^{-2}F(q_{max})$, где

$$F(q) = 4 \int_0^q q'^{-5}(\sin q' - q' \cos q')^2 dq', \quad (23)$$

$q_{max} = 2kR$ — наибольшее физически возможное значение безразмерного параметра q . Существенно, что $F(q)$ является элементарной функцией,

$$F(q) = q^{-4}(q^4 - q^2 + q \sin 2q - \sin^2 q), \quad (24)$$

$0 \leq F(q) < 1$.

Фазовая функция ХГ

$$p_{HG}(t) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2gt)^{3/2}} \quad (25)$$

была впервые предложена для рассеяния в астрофизике [24]. Подставляя (25) в (18) легко получить для этой модели кумулятивную функцию распределения по углу θ в виде элементарной функции. Широкое распространение ХГ-модели для МК-моделирования рассеяния в различных физических системах связано с тем, что здесь несложной элементарной функцией оказывается также и функция, обратная к кумулятивной:

$$t = \frac{2(1 + g^2)\chi(g\chi + 1 - g) - (1 - g)^2}{(2g\chi + 1 - g)^2}. \quad (26)$$

На рис. 2 мы представили фазовые функции ХГ и РГ для четырех значений параметров анизотропии g , сжав для иллюстративности при больших значениях интенсивности масштаб нелинейным образом.

Из (20) получаем $\chi' = F(q)/F(2kR)$. Обратное преобразование дает величину

$$q = F^{-1}(x), \quad (27)$$

где $x = F(2kR)\chi'$, $0 \leq x \leq F(2kR) < 1$.

Используя теорему Лагранжа об обращении рядов, получим из (24) разложение

$$q^2 = \frac{9}{2}x + \frac{81}{40}x^2 + \frac{729}{560}x^3 + \frac{21627}{22400}x^4 + \dots, \quad (28)$$

по которому можно вычислять значения обратной функции $q = F^{-1}(x)$. Однако этот ряд сходится только при $|x| < x_1 = F(q_1) \approx 0.9528$, где $q_1 \approx 4.4934$ — наименьший положительный корень уравнения $\text{tg}(q) = q$. В точке $|x| = x_1$ ряд расходится, так как $(F^{-1})'(x_1) = \infty$ в силу $F'(q_1) = 0$. Поэтому разложение (28) практически полезно только при x меньших x_1 и не слишком близких к нему.

Индикатриса рассеяния $F'(q) \propto p(q)$ обращается в нуль во всех точках $q_m > 0$, удовлетворяющих уравнению

$$q_m = \text{tg } q_m. \quad (29)$$

Его корни определяют углы θ_m , для которых интенсивность однократного рассеяния равна нулю,

$$\theta_m = 2 \arcsin \frac{q_m}{q_{max}}. \quad (30)$$

Для вычисления q_m удобен асимптотический ряд

$$q_m = r_m - \frac{1}{r_m} - \frac{2}{3r_m^3} - \frac{13}{15r_m^5} - \frac{146}{105r_m^7} - \frac{781}{315r_m^9} - \frac{16328}{3465r_m^{11}} + \dots, \quad (31)$$

где $r_m = \pi(m + 1/2)$, $m \geq 1$. В точках

$$x_m = F(q_m) = q_m^2/(1 + q_m^2)$$

обратная функция $F^{-1}(x)$ имеет сингулярности производной $(F^{-1}(x))' \propto (x - x_m)^{-2/3}$.

Эти сингулярности мы учитываем в численном алгоритме кусочной аппроксимации $F^{-1}(x)$ так, чтобы ее первая производная имела правильные особенности в точках x_m . При $x < x_1 \approx 0.9528$, не очень близких к x_1 , используется аппроксимация (28) высокого порядка.

Мы выбрали параметры среды, характерные для водной суспензии интралипида, используемой в качестве биомодели (биофантома) при моделировании

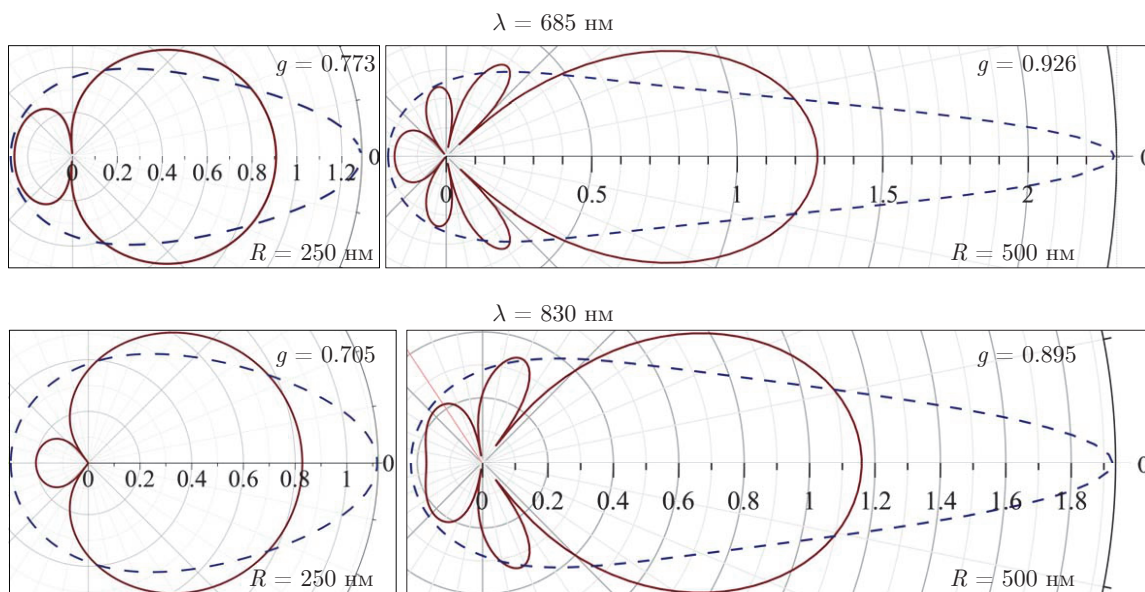


Рис. 2. Фазовые функции ХГ (штриховые линии) и РГ (сплошные линии) для двух длин волн и сред с четырьмя параметрами анизотропии g и соответствующими им радиусами рассеивателей R ; показатель преломления $n = 1.33$

Таблица 1. Некоторые особые точки q_m, x_m и соответствующие им углы θ_m для $\lambda = 685$ нм и $n = 1.33$

m	q_m	x_m	θ_m	
			$R = 250$ нм	$R = 500$ нм
1	4.4934	0.95281	94.9°	43.2°
2	7.7253	0.98352	—	78.6°
3	10.904	0.99166	—	126.7°
4	14.066	0.99550	—	—
10	32.956	0.99908	—	—

биоткани. В работе [25] были выполнены измерения фазового сдвига и амплитуды DPDW в частотно-доменном инструментарии с длиной волны $\lambda = 685$ нм и показателем преломления воды $n = 1.33$. Для системы твердых сфер с $R = 250$ нм величина $kR \approx 3.05$ и из (32) имеем $g = 0.7727$. Эта пара параметров применяется далее при сравнительном анализе моделей ХГ и РГ.

В табл. 1 приведены некоторые значения q_m и x_m ; для типичных размеров частиц $R = 250$ нм и $R = 500$ нм, приведены также углы рассеяния (30), где фазовая функция РГ обращается в нуль; мы положили $\lambda = 685$ нм, $n = 1.33$. Для приве-

денных значений длины волны и показателя преломления имеем $q_{max} \approx 6.100$, $x_{max} \approx 0.9738$ при $R = 250$ нм, и $q_{max} \approx 12.20$, $x_{max} \approx 0.9933 \dots$ при $R = 500$ нм. В клетках, содержащих прочерки, нарушается условие $q_m < q_{max}$ и θ_m не существуют. Ряд (28) можно использовать в области, реализуемой с вероятностью $\xi' = x_1/x_{max} \approx 0.978$ при $R = 250$ нм и $\xi' \approx 0.959$ при $R = 500$ нм; отметим, что в угловых переменных для применимости (28) это дает соответственно интервалы $\theta < 94.9^\circ$ и $\theta < 43.2^\circ$, сужающиеся с ростом размера частиц с ростом вытянутости индикатрисы.

В модели ХГ анизотропия рассеяния определяется параметром $g = \langle \cos \theta_s \rangle$, а в модели РГ — параметром kR , связанным с g соотношением [8]

$$g = \frac{4 - (kR)^{-2} \text{Cin}(4kR)}{F(2kR)} - 3, \tag{32}$$

где $\text{Cin}(x)$ — интегральный косинус.

Рисунок 3 [8] показывает существенное отличие кумулятивных функций распределения, используемых при МК-симуляциях многократного рассеяния, для моделей ХГ и РГ с равными параметрами анизотропии g . В частности, для кривых РГ видны точки сингулярностей производных, отвечающие обращению в нуль интенсивности рассеяния.

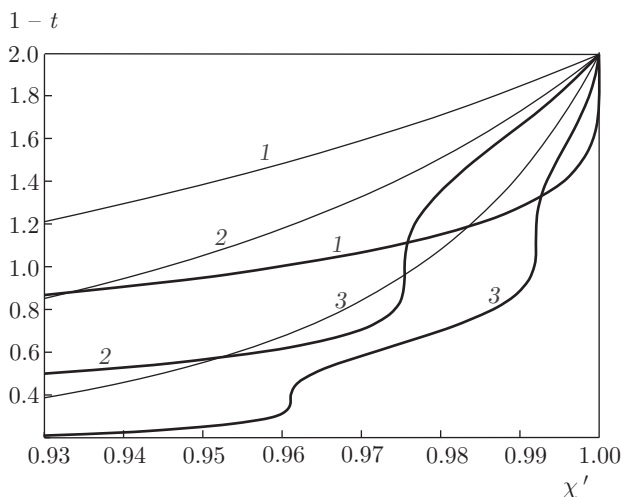


Рис. 3. Угловая переменная $1 - t = 1 - \cos \theta$ как функция кумулятивной вероятности χ' для моделей ХГ (тонкие линии) и РГ (толстые линии) в области χ' близких к единице: 1 — $g = 0.654$; 2 — $g = 0.786$; 3 — $g = 0.931$. В модели РГ этим значениям g , согласно (32), соответствуют $kR = 2.31, 3.21, 6.42$

6. МОДЕЛИРОВАНИЕ DPDW

Мы выполнили расчеты интенсивности обратного рассеяния в зависимости от расстояния между источником и приемником, расположенными на поверхности образца. Пусть сигнал образован вкладом излучения, попадающего на поверхности в кольцо радиуса ρ и шириной $\Delta\rho \ll \rho$; определим локальную интенсивность обратного рассеяния $j(\rho) = S^{-1}J(1, 1)$ как отношение полной интенсивности $J(1, 1)$ в кольце, к площади кольца, $S = 2\pi\rho\Delta\rho$.

В табл. 2 приведены результаты для рассеяния точно назад, $J(1, 1)$, для фазовых функций ХГ и РГ от полубесконечной среды для различной степени анизотропии. Видно прекрасное согласие с точным решением задачи Милна при $g = 0$, что можно рассматривать как верификацию численных расчетов. Приведены значения $J(1, 1)$, полученные при учете, в порядке возрастания, $n_{sc}/100, n_{sc}/10, \text{ и } n_{sc} = 2 \cdot 10^6$ актов рассеяния, и время счета на обычном персональном компьютере при использовании одного ядра ЦП. Отметим здесь, что, как оказалось, расчеты по модели ХГ требуют для достижения той же численной точности больших значений N_{in} и n_{sc} и, соответственно, большего машинного времени, чем по модели РГ. Данный факт может, на первый взгляд, показаться удивительным, поскольку аналитически кумулятивная функция ХГ выглядит проще, чем аналогичная функция РГ. Мы объясняем это суще-

ственно более вытянутым характером индикатрисы рассеяния ХГ по сравнению с индикатрисой РГ на узком участке вперед, что хорошо видно на рис. 2. Этот пик интегрально вносит весьма малый вклад в рассеяние, но заметно увеличивает необходимые для достижения нужной точности эффективные кратности n_{sc} в алгоритме МК.

Отметим, что с ростом анизотропии значения интенсивности рассеяния от полупространства $J(1, 1)$ для моделей РГ и ХГ все более различаются, что указывает на нарушение стандартного представления об универсальности описания многократного рассеяния в терминах l_{tr} и g .

Для сравнения результатов расчета в рамках моделей РГ и ХГ мы взяли данные, полученные путем измерения для суспензии интралипида в методологии DPDW в частотном домене [25] с концентрацией от 0.5 до 2 объемных процентов для частоты модуляции $(2\pi)^{-1}\omega = 100\text{--}200$ МГц и ближнеинфракрасного излучения с длинами волны $\lambda = 685$ нм или 830 нм.

На рис. 4 мы представили функцию ослабления $\Phi(\rho) = \ln(\rho^2 j(\rho))$, обычно используемую при интерпретации измерений, в зависимости от расстояния источник–приемник, в сравнении с результатами численного моделирования на основе фазовых функций РГ и ХГ. Экспериментальные данные представлены для однопроцентной концентрации водного раствора интралипида. При моделировании обратного рассеяния излучения с длиной волны $\lambda = 685$ нм мы положили [25] коэффициент рассеяния $\mu'_s = 10.5 \text{ см}^{-1}$ и коэффициент поглощения $\mu_a = 0.004 \text{ см}^{-1}$, что практически совпадает с данными для чистой воды при этой длине волны; показатель преломления $n = 1.33$. В соответствии с оценками производителя, мы положили радиус частиц интралипида $R = 250$ нм. Формула (32) при этом размере рассеивателей дает значение параметра анизотропии $g = 0.773$, которое далее мы используем при моделировании с функцией ХГ. Переходя к моделированию рассеяния с длиной волны $\lambda = 830$ нм, при том же значении размера частиц из формулы (32) получаем $g = 0.705$; приведенный коэффициент рассеяния с изменением длины волны при этом уменьшается [6] ($\mu'_s = 8.74 \text{ см}^{-1}$); адсорбция воды для указанной длины волны увеличивается, $\mu_a = 0.04 \text{ см}^{-1}$.

Как видно на графиках, интенсивность, рассчитанная с фазовой функцией РГ, превышает значения, полученные в модели ХГ, в особенности в области малых расстояний источник–приемник, где доля вклада низших кратностей рассеяния, сохраняющих

Таблица 2. Интенсивность $J(1, 1)$ многократного рассеяния строго назад от полупространства для моделей ХГ и РГ для пяти различных значений анизотропии, заданных параметрами g и R . При $g = 0$ ($R = 0$) результаты обеих моделей идентичны; указано также теоретическое значение для асимптотически предельно большой анизотропии $g = 1$. Приведены данные при учете $n_{sc}/100$, $n_{sc}/10$ и n_{sc} актов рассеяния. Погрешности интенсивности при n_{sc} актах рассеяния порядка 0.2–0.3 %, соответствующее время счета τ

Параметры				τ , мин	Интенсивность, $J(1, 1)$						Теория
g	R , нм	N_{in}	n_{sc}		ХГ			РГ			
					$n_{sc}/100$	$n_{sc}/10$	n_{sc}	$n_{sc}/100$	$n_{sc}/10$	n_{sc}	
0	0	10^5	$2 \cdot 10^6$	20	4.16	4.21	4.22	4.16	4.21	4.22	4.22768 [20]
0.211	100	10^5	$2 \cdot 10^6$	20	4.20	4.24	4.25	4.19	4.24	4.25	–
0.467	150	10^5	$2 \cdot 10^6$	35	4.28	4.34	4.36	4.34	4.39	4.40	–
0.773	250	$5 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^6$	150	4.39	4.47	4.50	4.53	4.63	4.65	–
0.925	500	10^5	$4 \cdot 10^6$	70	4.46	4.60	4.64	4.58	4.69	4.72	–
1	∞	–	–	–	–	–	–	–	–	–	4.8897 [26]

специфику угловой зависимости фазовой функции, возрастает.

Численные значения интенсивности, полученные для анизотропного рассеяния, превышают результаты для изотропного рассеяния для обеих моделей (опять за исключением малых расстояний).

Отметим, что наклоны кривых практически совпадают для расстояний, превышающих несколько транспортных длин, $\rho \geq 0.6$ см, для обеих моделей анизотропии. При малых расстояниях измеренные и рассчитанные значения несопоставимы, поскольку на таких расстояниях существенным становится учет конечности диаметра падающего пучка лазерного излучения, в то время как в моделировании он представляется как предельно узкий пучок (см. [21]).

Численные результаты на рис. 4 получены с учетом эффектов внутреннего отражения, обусловленного скачком показателя преломления на границе; эти эффекты сглаживают различие в поведении сигналов DNIRS, обусловленное видом фазовых функций. Для иллюстрации различия между двумя моделями анизотропии мы представили отношения интенсивностей j_{HG} и j_{RG} , вычисленных для двух моделей анизотропии, к интенсивности j_{iso} , наблюдаемой в системе с изотропным рассеянием, с теми же оптическими параметрами; мы выполнили моделирование для случая равных показателей преломления на границе. На рис. 5 для излучения с $\lambda = 685$ нм приведены отношения j_{RG}/j_{iso} и j_{HG}/j_{iso} для трех различных значений параметров анизотропии, описывающих три предполагае-

мые суспензии с радиусами рассеивателей $R = 250$, $R = 150$, $R = 100$ нм и соответствующими параметрами $g = 0.773$, $g = 0.467$, $g = 0.211$, в зависимости от расстояния источник–детектор для среды, занимающей полупространство.

Графики демонстрируют существенное различие при описании рассеяния в рамках моделей ХГ и РГ с равными коэффициентами рассеяния и равными параметрами анизотропии g .

Представленные на рисунках данные указывают на явно выраженную зависимость от степени анизотропии: на малых расстояниях до двух транспортных длин интенсивность обратного рассеяния средами с анизотропией $g = 0.77$ превышает интенсивность обратного рассеяния средой с изотропным рассеянием в 1.3 раза в случае ХГ-анизотропии и более чем в 1.5 раза в случае РГ-анизотропии, при одном и том же значении коэффициентов μ'_s и μ_a . В случае сравнения расчетов рассеяния средами с меньшей анизотропией, $g = 0.47$, это превышение составляет приблизительно 1.3 и 1.2 соответственно для фазовых функций РГ и ХГ. Эти данные могут позволить определить экспериментально, какой механизм рассеяния, РГ или ХГ, ближе к реальному, путем измерений в средах с различными значениями параметра g . Отметим, что на расстояниях порядка десяти транспортных длин и более исчезает различие между данными для рассматриваемых моделей ХГ и РГ, в обоих случаях интенсивность обратного рассеяния приближается к интенсивности j_{iso} изотропной модели, подтверждая общее утверждение диффузионной теории об универсальности пе-

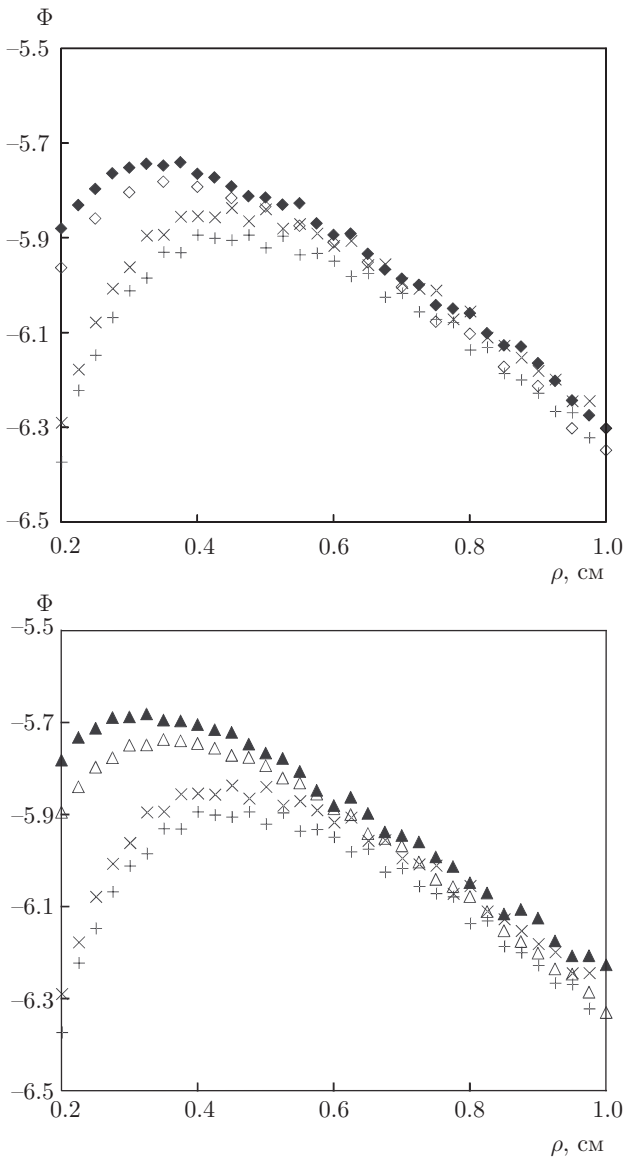


Рис. 4. Функция затухания $\Phi(\rho) = \ln(\rho^2 j(\rho))$ в зависимости от расстояния источник–приемник, измеренная в однопроцентном по объему водном растворе интралипида с показателем преломления $n = 1.33$, для двух длин волн: $\lambda = 685$ нм (\times), и $\lambda = 830$ нм ($+$), и рассчитанная на основе двух моделей: ХГ (\blacklozenge), РГ (\blacktriangle) при $\lambda = 685$ нм, и моделей ХГ (\diamond), РГ (\triangle) при $\lambda = 830$ нм; частота модуляции $\omega = 100 \cdot 2\pi$

реноса излучения в указанном диапазоне расстояний для систем с одинаковым значением транспортной длины.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы выполнили численное моделирование интенсивности обратного рассеяния в полубесконечной случайной среде, имитирующей биоткань, с учетом анизотропии рассеяния, описываемой альтернатив-

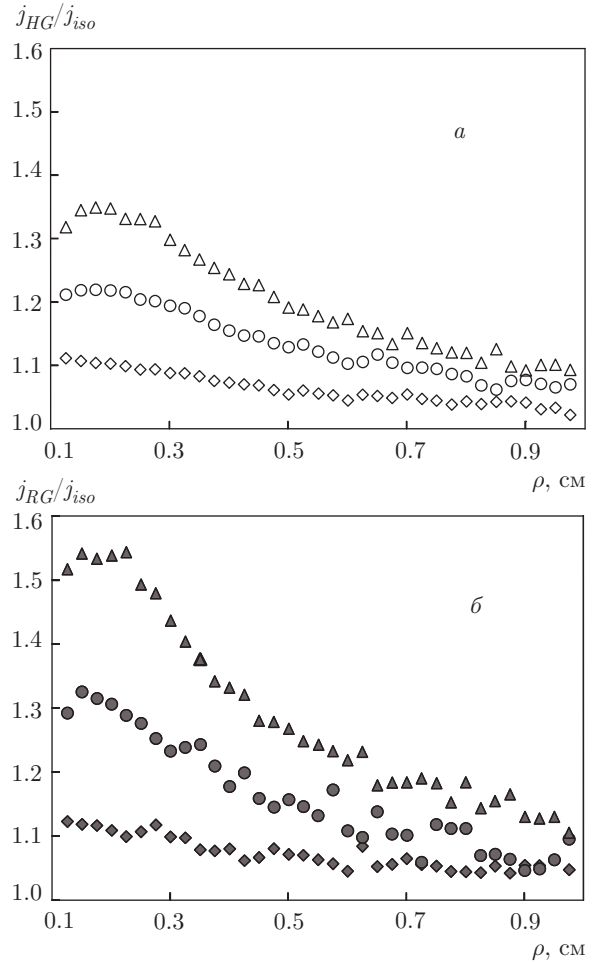


Рис. 5. Интенсивности рассеяния, рассчитанные для моделей среды с анизотропным рассеянием (j_{HG} или j_{RG}), отнесенные к соответствующей интенсивности для изотропной модели j_{iso} : а) \triangle — $g = 0.77$, \circ — $g = 0.47$, \diamond — $g = 0.21$; б) \blacktriangle — $R = 250$ нм ($g = 0.77$), \bullet — $R = 150$ нм ($g = 0.47$), \blacklozenge — $R = 100$ нм ($g = 0.21$); $l_{tr} = 950$ мкм, $\lambda = 685$ нм

но в рамках одной из двух моделей: широко используемой для моделирования функции Хеньи–Гринштейна, удобной в силу простоты обратной кумулятивной функции распределения, и функции Рэля–Ганса, позволяющей моделировать оптические свойства ткани или биофантама на основе физической модели суспензии.

Развитый алгоритм моделирования, являющийся модификацией стандартного метода МСМЛ, верифицирован путем сопоставления численных результатов с известными точными результатами для изотропного рассеяния.

При описании угловой зависимости сечения рассеяния, или фазовой функции, современный алгоритм моделирования Монте-Карло существенно использует метод обратного преобразования кумуля-

тивной угловой функции распределения. Его реализация в модели ХГ общеизвестна; в настоящей работе этот метод реализован для модели РГ на основе найденной в замкнутом виде кумулятивной функции. В области углов рассеяния, реализуемых с большей вероятностью, порядка 0.8, функция обратного преобразования аппроксимируется в виде конечного полинома высокого порядка. А в области больших углов, реализуемых с вероятностью порядка 0.2, мы моделировали ее путем кусочного сшивания обратных кубических парабол на участках между точно известными точками сингулярности обратной функции, так чтобы правильно передать эти сингулярности. Данная процедура позволяет выполнять моделирование рассеяния в рамках развитого алгоритма одинаково эффективно для обеих фазовых функций.

Исследуя интенсивность обратного рассеяния как функцию расстояния источник–приемник, мы обнаружили ее зависимость от вида функции распределения и степени анизотропии рассеяния. Различие описаний в рамках двух моделей увеличивается с ростом анизотропии, что позволяет определить предпочтительность той или другой фазовой функции при интерпретации сигналов DNIRS путем анализа данных, выполненных в системах с одинаковыми значениями приведенного коэффициента рассеяния, но с различными значениями параметра анизотропии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00465А). Авторы благодарны Д. И. Кокорину за помощь в вычислениях.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. V. Tuchin, *Handbook of Optical Biomedical Diagnostics*, 2nd ed. SPIE Publ., Bellingham, WA (2016).
2. T. Durduran, R. Choe, W. B. Baker, and A. G. Yodh, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 076701 (2010).
3. В. В. Тучин, *Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике*, Физматлит, Москва (2012).
4. T. Vo-Dinh, *Biomedical Photonics Handbook*, V. II, 2nd ed. CRC Press, New York (2015).
5. А. Исимару, *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах*, Том 1, Мир, Москва (1981).
6. В. Л. Кузьмин, *ЖЭТФ* **127**, 1173 (2005).
7. E. V. Aksenova, D. I. Kokorin, and V. P. Romanov, *Comp. Phys. Comm.* **196**, 384 (2015).
8. В. Л. Кузьмин, А. Ю. Вальков, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 261 (2017).
9. T. Binzoni, and F. Martinelli, *Appl. Opt.* **54**, 5320 (2015).
10. D. A. Boas, S. Sakadžić, J. Selb, P. Farzam, M. A. Franceschini, and S. A. Carp, *Neurophotonics* **3**, 031412 (2016).
11. D. Diaz, A. Lafontant, M. Neidrauer, M. S. Weingarten, R. DiMaria-Ghalili, E. Scruggs, J. Rece, G. W. Fried, V. L. Kuzmin, and L. Zubkov, *J. Biomed. Opt.* **22**, 25003 (2017).
12. D. Toubanc, *Appl. Opt.* **35**, 3270 (1996).
13. Q. Liu and F. Weng, *Appl. Opt.* **45**, 7475 (2006).
14. H. R. Gordon, *Opt. Express* **15**, 5572 (2007).
15. Е. В. Аксенова, В. Л. Кузьмин, В. П. Романов, *ЖЭТФ* **135**, 587 (2009).
16. В. Л. Кузьмин, А. Ю. Вальков, *Опт. и спектр.* **111**, 497 (2011).
17. E. V. Aksenova, D. I. Kokorin, and V. P. Romanov, *Phys. Rev. E* **89**, 052506 (2014).
18. Е. Е. Городничев, С. Л. Дударев, Д. Б. Рогозкин, *ЖЭТФ* **96**, 847 (1989).
19. V. L. Kuzmin, V. P. Romanov, and E. V. Aksenova, *Phys. Rev. E* **65**, 016601 (2001).
20. T. M. Nieuwenhuizen and J. M. Luck, *Phys. Rev. E* **48**, 569 (1993).
21. L. H. Wang, S. L. Jacques, and L. Q. Zheng, *Comput. Meth. Prog. Bio.* **47**, 131 (1995).
22. T. H. Pham, O. Coquoz, J. B. Fishkin, E. Anderson, and B. J. Tromberg, *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 2500 (2000).
23. M. H. Eddowes, T. N. Mills, and D. T. Delpy, *Appl. Opt.* **34**, 2261 (1995).
24. L. G. Henyey, and J. L. Greenstein, *Astrophys. J.* **93**, 70 (1941).
25. V. L. Kuzmin, M. T. Neidrauer, D. Diaz, and L. A. Zubkov, *J. Biomed. Opt.* **20**, 5006 (2015).
26. E. Amic, J. M. Luck, and T. M. Nieuwenhuizen, *J. Phys. A: Mathematical and General* **29**, 4915 (1996).