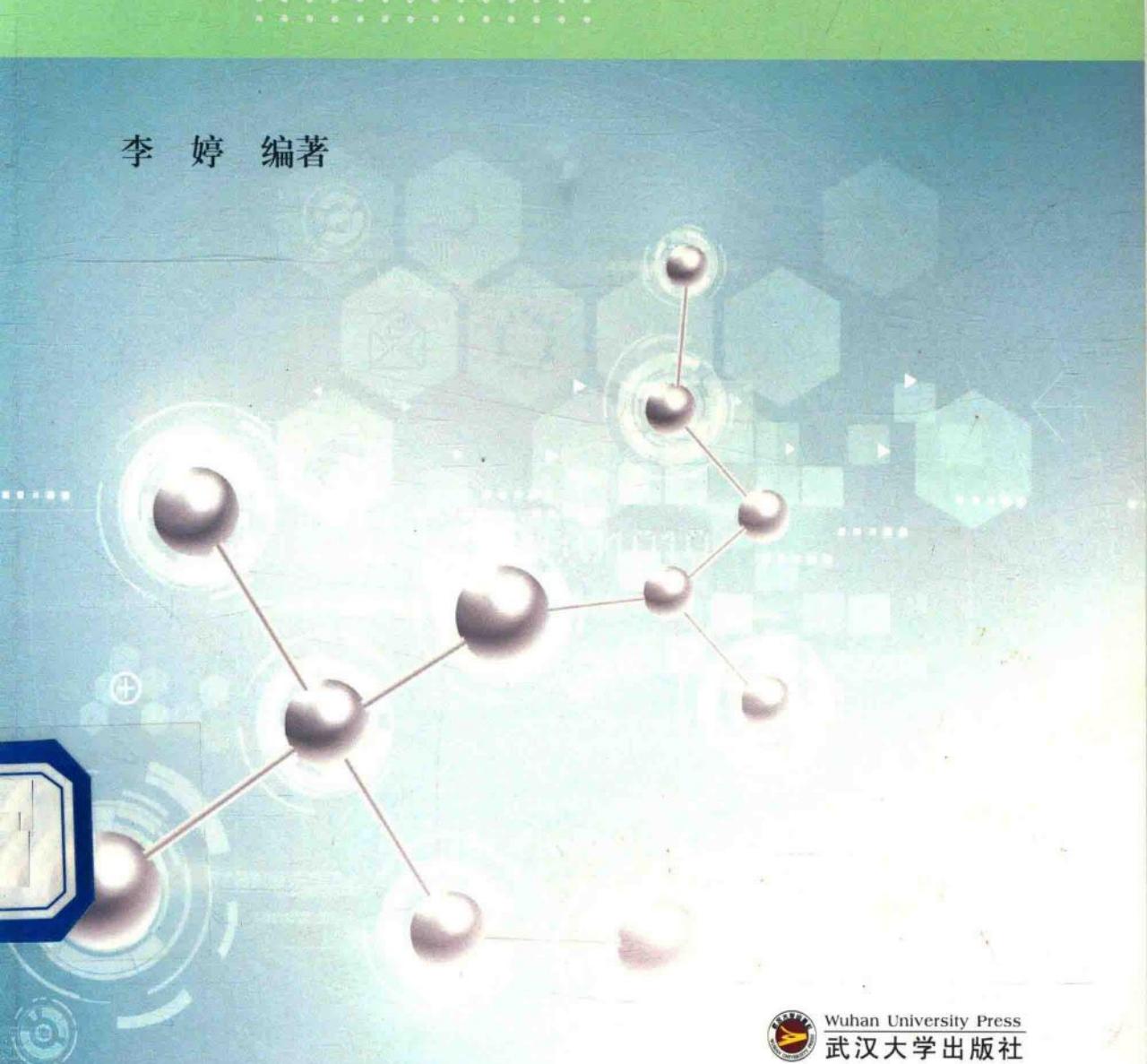


SHENGWU YIXUE
GUANGZI CHUANSHU

生物医学 光子传输

李 婷 编著



Wuhan University Press
武汉大学出版社

生物医学光子传输

李 婷 编著



Wuhan University Press
武汉大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

生物医学光子传输 / 李婷编著. — 武汉: 武汉大学出版社, 2015.4
ISBN 978-7-307-15668-5

I. 生… II. 李… III. 生物工程—医学工程—生物光学—信息传输—研究 IV. R318.51

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 088078 号

责任编辑：张宝珠 责任校对：成海毅 版式设计：三山科普

出版发行：武汉大学出版社（430072 武昌 珞珈山）
(电子邮件：cbs22@whu.edu.cn 网址：www.wdp.com.cn)

印刷：虎彩印艺股份有限公司

开本：787×1092 1/16 印张：11.75 字数：293 千字

版次：2015 年 4 月第 1 版 印次：2015 年 4 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-307-15668-5 定价：30.00 元

版权所有，不得翻印：凡购我社的图书，如有质量问题，请与当地图书销售部门联系调换。

内容简介

本书首先阐述了光在宏观非均匀介质（如生物组织）中传输研究与仿真计算的应用范畴，研究方法及其发展现状。针对其中最精确，最灵活的研究方法——蒙特卡洛模拟（MC）及其软件实现的工具，做详细的比较，总结出新型光子传输 MC 的需求。在此基础上，详细深入地介绍作者建立的多体素构建的介质中光传输的光子传输 MC 模拟模型，即 MCVM，具体包括 MC 基本原理、随机变量抽样、体素化介质中光子传输问题描述、体素化介质中光子传输规律、传输特性物理量的记录、编程实现、仿真计算结果与验证、光源特性对仿真结果的定量影响、在生物、医学中的应用实例等。最后详细介绍了光子传输模型 MCVM 的使用。

目 录

内容简介

| | |
|-------------------------|----|
| 绪论 | 1 |
| 第1章 生物组织的光学特性 | 3 |
| 1.1 生物组织的光学特性参数 | 3 |
| 1.1.1 生物组织的光学特性参数 | 4 |
| 1.1.2 光在生物组织中的散射 | 7 |
| 1.2 生物组织光学特性参数的测量方法 | 11 |
| 1.2.1 测量方法的分类和测量量 | 11 |
| 1.2.2 组织光学特性参数的求解方法 | 14 |
| 1.3 光学组织模型 | 20 |
| 1.4 典型生物组织的光学特性参数 | 21 |
| 1.4.1 皮肤及皮下组织光学特性参数 | 22 |
| 1.4.2 眼部组织光学特性参数 | 27 |
| 1.4.3 脑部组织光学特性参数 | 30 |
| 1.4.4 乳房组织光学特性参数 | 35 |
| 1.4.5 骨组织光学特性参数 | 36 |
| 1.4.6 肌肉组织光学特性参数 | 38 |
| 参考文献 | 39 |
| 第2章 光在生物组织中传输的研究方法 | 41 |
| 2.1 辐射传输方程与扩散近似 | 41 |
| 2.1.1 辐射传输方程的描述变量 | 41 |
| 2.1.2 辐射传输方程 | 42 |
| 2.1.3 辐射传输方程的扩散近似 | 43 |
| 2.1.4 扩散方程的边界条件 | 45 |
| 2.1.5 扩散方程的应用 | 48 |
| 2.2 蒙特卡罗模拟 | 50 |
| 2.3 多流方法 | 50 |
| 2.3.1 Kubelka-Munk 二流理论 | 50 |
| 2.3.2 四流理论 | 51 |
| 2.4 Adding-Doubling 方法 | 52 |

| | |
|-----------------------------------|-----------|
| 2.5 混合方法..... | 56 |
| 2.5.1 扩散方程与有限元的结合 | 56 |
| 2.5.2 扩散方程与蒙特卡罗模拟的结合 | 58 |
| 2.6 不同方法的比较..... | 59 |
| 参考文献 | 59 |
| 第3章 蒙特卡罗模拟..... | 61 |
| 3.1 概述与基本原理..... | 61 |
| 3.2 蒙特卡罗方法的历史 | 63 |
| 3.3 工作过程与模拟计算 | 65 |
| 3.4 蒙特卡罗方法的应用 | 73 |
| 3.5 蒙特卡罗方法的发展 | 81 |
| 参考文献 | 82 |
| 第4章 光在混浊介质中传输的蒙特卡罗模拟 | 83 |
| 4.1 发展历史简述..... | 83 |
| 4.2 现有的常用方法: MCML | 83 |
| 4.3 现有的常用方法: MCLS | 86 |
| 4.4 现有的常用方法: tMCimg | 86 |
| 4.5 现有的常用方法: triMC3D | 88 |
| 4.6 现有的常用方法: MCXYZ | 91 |
| 参考文献 | 93 |
| 第5章 MCVM 方法的数学物理模型 | 94 |
| 5.1 光在生物组织中传输的蒙特卡罗模拟基本步骤..... | 94 |
| 5.2 随机变量抽样方法..... | 96 |
| 5.3 体素化介质中光子传输的问题描述 | 98 |
| 5.4 体素化介质中光子传输规律 | 99 |
| 5.4.1 光子表征..... | 99 |
| 5.4.2 发射光子包 | 100 |
| 5.4.3 光子步长与吸收 | 102 |
| 5.4.4 移动光子包 | 103 |
| 5.4.5 光子散射 | 103 |
| 5.4.6 光子路径与相邻体素边界交叉点的确定 | 104 |
| 5.4.7 体素组织边界的反射与折射 | 106 |
| 5.4.8 光子终止 | 107 |
| 5.4.9 稳态和时间分辨的光子传输 | 108 |
| 参考文献 | 109 |

| | |
|-------------------------------|-----|
| 第6章 光源特性对模拟结果的影响 | 111 |
| 6.1 介绍 | 111 |
| 6.2 卷积方法及原理 | 112 |
| 6.3 圆形均匀光束的卷积 | 114 |
| 6.4 高斯光束的卷积 | 116 |
| 6.5 卷积的数值解 | 117 |
| 6.6 卷积误差分析 | 120 |
| 6.7 分配入射光子包方法 | 121 |
| 参考文献 | 124 |
| 第7章 MCVM操作与光传输仿真教程 | 126 |
| 7.1 MCVM软件的下载及安装 | 126 |
| 7.2 MCVM的使用说明 | 126 |
| 7.2.1 输入数据文件 | 127 |
| 7.2.2 建立组织模型 | 128 |
| 7.2.3 执行 | 128 |
| 7.2.4 输出数据文件 | 130 |
| 7.2.5 输出数据的处理 | 131 |
| 7.2.6 基于 MATLAB 的 MCVM 模拟平台示例 | 131 |
| 7.3 MCVM 使用举例 | 136 |
| 参考文献 | 142 |
| 第8章 蒙特卡罗模拟在医疗光子学领域的应用 | 144 |
| 8.1 在 DCS/NIRS 中的应用 | 144 |
| 8.2 在脉搏血氧计研制中的应用 | 148 |
| 8.3 在 fNIRS 系统中的应用 | 151 |
| 8.4 在光遗传学中的应用 | 156 |
| 8.5 在 DOT 中的应用 | 158 |
| 参考文献 | 164 |
| 附录 | 167 |
| 附录 A 生物组织光学特性参数补充列表 | 167 |
| A.1 上皮及黏膜组织光学特性参数 | 167 |
| A.2 肝脏组织光学特性参数 | 170 |
| A.3 心肌组织光学特性参数 | 172 |
| A.4 动脉组织光学特性参数 | 173 |
| A.5 肺部组织光学特性参数 | 174 |
| 附录 B 术语索引 | 175 |

绪 论

生物医学光学研究光学理论和方法在生物医学研究和临床问题的应用。随着生物学和光学的发展，生物医学光学检测和生物医学光学成像及光谱技术，已经成为生命科学和医学临床应用中非常重要的工具。通过光学标记技术、光学控制技术、基因技术、光学检测和成像技术等的结合，生物医学光学已经成为认识生命科学基本问题的重要研究工具。

生物医学光学方法相比于其他生物医学方法有如下优点：

- 非电离辐射，应用于光学诊断的光谱范围，光子能量相对较低，不会引起 X 射线应用中存在的电离辐射问题。
- 多参数，光学方法中的一个大类是光谱方法，基于吸收光谱、拉曼光谱、荧光光谱等可以从多个方面反映生物组织的成分、微环境等的变化，获得多种测量参数，从而能够从多种角度反映生命活动过程。而对于临床疾病的诊断，由于可以获得多种参数，因而有可能以更大的对比度区分病变和正常的组织。
- 光学成像方法具有高空间分辨率，并且结合一定的光学成像技术，可以实现特定部位在体情况下的高分辨成像，如视网膜的在体高分辨成像。
- 结合新出现的光遗传技术，光学方法能够实现对可兴奋细胞的精确光刺激，从而能够受控的研究一些特定的生命活动过程，如神经元信息处理过程等。

生物医学光学应用中，生物体和生物组织作为与光相互作用的介质，一方面，通过相互作用的光学物理和光学化学过程，可以实现微环境的监测（离子环境的变化等），观察生命活动的过程，也可以实现光控制和光治疗；另一方面，生物组织作为光传输的介质，其光学特性会影响和改变光的传播过程和光能量在生物组织中的分布，而这对于生物医学光学应用和生物医学光学方法及仪器的评估是十分重要的信息。为此，需要认识和研究生物组织的光学性质和光在生物组织中传输问题的分析方法。

光在生物组织中的传输问题可以视为一类特殊的光在介质中传输的问题，其特殊性即表现为生物组织的光学特性。生物组织是一种混浊介质（turbid media），其对光传播的影响主要表现为散射和吸收。生物组织在微观结构上十分复杂，其对光传播的影响也可以视为空间和时间上随机变化的大量介质成分的集合体。因而，光在生物组织中传播问题的研究可以借鉴和吸收光在混浊介质或随机介质中传播问题的理论和分析方法。

光生物组织中的传输问题，是光与组织相互作用中的重要研究内容，是扩散光学断层成像（DOT）和近红外光谱（NIRS）技术等生物医学光学领域中重要的研究工具。光在生物组织中的传输问题对于确定探测器位置，分析探测深度，建立断层成像中重建算法都有重要意义。除此之外，光在生物组织中的传输问题对于光学显微成像、光遗传学、光动力治疗等领域也十分重要，是研究者开展进一步研究需要借助的方法。

光在生物组织中的传输问题，可以从电磁理论或光辐射能传播的角度，建立解析方程，并在特定条件下，求其解析解应用于实际问题的分析中。另一方面，光传播问题，可以视为光子在介质中以一定概率经多次散射而形成的随机行走过程，通过模拟大量光子的随机行走

过程，可以对光在生物组织中的传播和稳态分布进行数值模拟。光的传播过程实际还包括干涉，衍射等波动光学现象，但本书所涉及的光传播过程将只从辐射能量传播或光子随机行走的角度进行考虑，而忽略光的波动属性。本书将介绍光在生物组织中传输问题的解析分析方法和数值模拟分析方法，但以后者为主。

为了认识光在生物组织中的传输问题，我们将从认识生物组织的光学特性和其测量方法开始，再介绍光在生物组织中传输的经典模型和理论，主要涉及辐射传输理论及其扩散近似，以及蒙特卡罗方法。由于蒙特卡罗模拟方法的灵活性和广泛适用性，我们将以蒙特卡罗方法为主，其基本原理和具体的实现过程及使用方法。我们也将通过一些具体的应用案例，介绍光在生物组织中传输问题的分析在实际的生物医学光学方法和问题研究中的应用。

我们将介绍可以对光在具有复杂三维结构的生物组织或生物体中的传播进行模拟的MCVM 代码，包括其原理、编程和应用。

本书中所涉及的代码可以免费获得和使用。希望通过本书的学习，读者可以理解光在生物组织中的传输问题及其分析方法，并获得对光传输问题的研究意义和应用的直观认识。

书中的示意图及部分示例引自相关参考书籍和学术论文，在每章的结尾列出了该章所引参考文献，并略有扩充。读者可根据参考文献对相关主题进行更深入地了解和学习。

第1章 生物组织的光学特性

生物组织的光学性质和结构决定了光在生物组织中的传输特性。从诊断的角度，组织光学性质的变化往往也反映了组织自身的变化（如极端的病变情况），可以作为组织生理或病理状态的反映指标。分析光传输过程，需要首先建立相应的参数，对组织的光学性质进行描述。本章将介绍描述生物组织光学性质的主要参数和测量方法。在实际研究中，需要建立可以模拟组织光学特性的物理模型，用于相关方法的校正和评价。本章也将介绍这方面的内容。

生物组织的光学特性参数是生物组织光子传输研究及仿真计算必需的参量。没有光学特性参量的数值，就没有办法进行光传输仿真。光学特性参量数值的准确度也与光传输仿真的精度紧密相关。因此，本章是本书光传输方面内容的基础。

1.1 生物组织的光学特性参数

生物组织与光的相互作用，表现为光的透射、散射、组织界面的折/反射、吸收，以及光吸收后的二次光发射（如荧光发射或拉曼散射）。其中，光的透射、前向与后向散射问题可以归类为散射问题；而吸收及二次光发射可以归类为吸收问题（二次光发射可以分成光吸收和二次光发射前后两个过程分别分析）。这里的散射指弹性散射。因而，从光传输的角度，光与生物组织的作用过程可以简化为对散射和吸收两大过程的分析。通过折射率、吸收系数、散射系数等描述组织光学特性的参数可以对组织界面和组织内部的光传输过程进行分析。

光与生物组织的相互作用如图 1-1 所示。

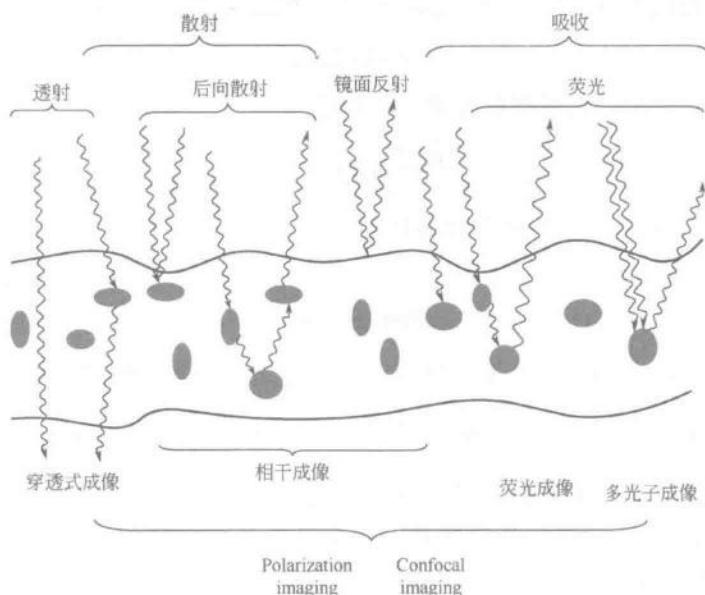


图 1-1 光与生物组织的相互作用

1.1.1 生物组织的光学特性参数

1. 折射率

在描述光在两种均匀介质的界面进行传输时，我们会使用折射率的概念描述两种介质的光学特性。基于折射率可以定量分析光在两种界面的折射现象。同一化学结构的物质在相同物理条件下（温度等）的折射率为确定的数值，且与波长相关。多种物质的均一混合物，其折射率为各物质的贡献之和。生物组织是一种非均匀介质，其有效折射率可近似为其组分折射率的平均值。

水是大部分生物组织的主要组成部分。水的折射率约为 1.33，生物组织作为一种非均匀的混合物质，其折射率大于水的折射率。典型的生物组织，如皮肤的折射率为 1.37 左右，骨骼的折射率为 1.43 左右。

折射率决定了光在空气与组织界面以及不同组织边界的反射和折射，也决定了光在组织中的传输速度，是生物组织的重要光学特性参数。

2. 吸收系数

吸收系数 (absorption coefficient) μ_a 定义为光子在介质中传播单位长度内被吸收的概率，其倒数为平均吸收长度。吸收系数的单位为 cm^{-1} ，生物组织吸收系数的典型值为 0.1 cm^{-1} 。

特定物质对光的吸收可以用其吸收截面来定义。而吸收系数也与其吸收截面成正比。另一方面，单位体积生物组织的吸收系数则可以由该体积内全部吸收物的总吸收截面来确定。其描述过程如下：

对单一吸收物，可以定义其吸收截面为 σ_a 。另一方面，根据吸收物的几何形状，可以定义其几何截面 σ_g ，如对于半径为 r 的吸收球体，其几何截面 σ_g 为 πr^2 。我们可以定义吸收效率 Q_a 描述吸收物的吸收截面和几何吸收截面之间的关系，即

$$\sigma_a = Q_a \sigma_g \quad (1-1)$$

如果单位体积内的吸收物的数量为 N_a ，则该单位体积介质的吸收系数可以表示为

$$\mu_a = N_a \sigma_a \quad (1-2)$$

根据吸收系数的定义，对纯吸收介质，可以有方程

$$\frac{dI}{I} = -\mu_a dx \quad (1-3)$$

式中， I 为光强； x 为光在介质中传播的距离。

对式 (1-3) 进行积分，可以得到

$$I(x) = I(0) \exp(-\mu_a x) \quad (1-4)$$

式 (1-4) 称为 Beer-Lambert 定律，描述了光在介质中光强随传播距离指数衰减的关系。

其中， x 为光在介质中传播的距离；而 $\mu_a x$ 称为光学距离。

在化学领域，物质对光的吸收强弱是用消光系数 (extinction coefficient) ε 表示。消光系数定义为每微摩尔浓度的溶液在单位厘米内的光吸收量。光吸收量由光密度表示，光密度 (optical density, OD) 定义为

$$OD = -\log_{10}(I/I_0) \quad (1-5)$$

其中, I 和 I_0 分别表示出射光强和入射光强。

结合式(1.4)和式(1.5), 可以得到:

$$\frac{OD}{O \cdot D} = \varepsilon C x = \mu_a x \log_{10} e$$

即

$$\mu_a = (1 / \log_{10} e) \varepsilon C \approx 2.303 \varepsilon C \quad (1-6)$$

式中, C 为溶液浓度。

近红外光在一般生物组织中的光吸收系数很小, 其范围在 $0.001\sim 0.1\text{cm}^{-1}$ 。在该波段内, 生物组织中的水吸收很低, 主要的光吸收物质为血红蛋白、肌红蛋白、黑色素等。图 1-2 给出了包括水在内的生物组织主要组成成分的吸收光谱。可以看到, 作为生物组织主要成分的水在可见和近红外光谱区间的吸收很低, 这个光谱区间即构成了所谓的光谱诊断窗口 ($600\sim 1300\text{ nm}$)。

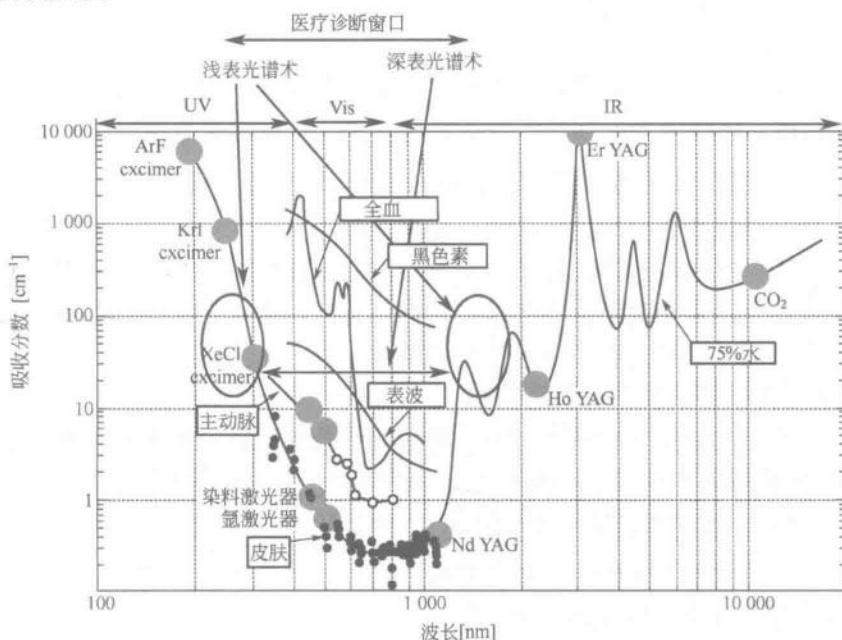


图 1-2 生物组织主要成分的吸收光谱及常见光源的波长。

3. 散射系数

散射系数的定义与吸收系数类似, 指光子在介质中传播单位长度内, 光在被散射的概率。散射系数的倒数称为散射平均自由程。生物组织具有高散射的特性, 其散射系数的范围为 $100\sim 1000\text{ cm}^{-1}$ 。

同样, 散射系数也可以通过物质的散射截面以及单位体积内的总散射截面来定义。对单一散射颗粒, 定义其散射截面为 σ_s , 其几何截面为 σ_g , 则有

$$\sigma_s = Q_s \sigma_g \quad (1-7)$$

式中, Q_s 为散射效率。

如果单位体积内的散射颗粒的数量为 N_s , 则该单位体积介质的散射系数可以表示为

$$\mu_s = N_s \sigma_s \quad (1-8)$$

Beer-Lambert 定律也可用于描述散射过程，此时式(1.4)中的吸收系数 μ_a 由散射系数 μ_s 代替，而等式左边的 $I(x)$ 表示光在介质中传播距离 x 后，未发生散射的那部分光的光强。或者也可以说光在介质中传播距离 x 后，不发生散射的概率（或弹道光出射的概率）为

$$\frac{I(x)}{I(0)} = \exp(-\mu_s x) \quad (1-9)$$

光散射起源于生物组织的不均匀性，以及组织中不同成分折射率的不匹配。从光散射的角度，可以把生物组织建模为一些悬浮于具有不同折射率的背景介质中的散射粒子的集合体。取决于散射粒子的尺寸，其适用的光散射描述理论也不同。当散射粒子的尺寸大于光波长或与光波长相近时，适用于米氏散射理论（Mie scattering Theory）描述；当散射粒子的尺寸远小于光波长时，适用于瑞利散射理论（Rayleigh Theory）描述。散射粒子的尺寸与光波长相近时，其散射最强。在生物组织中，细胞胞体的典型尺寸在 $10 \mu\text{m}$ 左右，而细胞核与线粒体的尺寸为 $1 \sim 10 \mu\text{m}$ ，细胞核和线粒体也被认为是主要的散射物。关于光散射的理论描述将在下一节介绍。

前面的叙述中，分别用吸收系数和散射系数描述生物组织对光的吸收和散射，并介绍了 Beer-Lambert 定律。将吸收系数和散射系数结合起来，可以定义总衰减系数

$$\mu_t = \mu_a + \mu_s \quad (1-10)$$

总衰减系数的倒数称为平均自由程（mean free path）。

描述生物组织的光学特性还往往使用反照率（albedo）的概念。反照率定义为 $\alpha = \mu_s / \mu_a$ 。大部分生物组织往往表现出高散射低吸收的特性，也即具有高反照率。这也是后面所提到的扩散近似之所以适用于分析光在大部分生物组织中传输的原因。

4. 散射各向异性因子及约化散射系数

光在被散射粒子散射后继续传播，除了用散射系数描述光子被散射的概率，光散射过程的完整描述还需要考虑光的散射方向问题。这一问题是通过散射相函数（scattering phase function）来定义的。散射相函数记为 $p(\hat{s}, \hat{s}')$ ，表示沿方向 \hat{s} 传播的光子沿方向 \hat{s}' 散射的概率。当散射粒子的散射不依赖于入射方向时，则可以简单地用方向 \hat{s} 和 \hat{s}' 之间的夹角 θ （散射角）来描述散射相函数，即 $p(\theta) = p(\hat{s}, \hat{s}')$ 。

对于 $p(\theta)$ 有

$$2\pi \int_0^\pi p(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (1-11)$$

$p(\theta)$ 为关于散射角 θ 的概率分布密度函数。对散射角的余弦求均值，得到

$$g = \langle \cos \theta \rangle = \int_0^\pi \cos \theta \cdot p(\theta) 2\pi \sin \theta d\theta \quad (1-12)$$

g 称为散射各项异性因子，表示光子散射的各项异性程度。 g 的值为 0 时，表示各项同性；为 1 时，表示完全前向散射；为 -1 时，表示完全后向散射。在光谱诊断窗口内， g 值为 $0.8 \sim 0.95$ ($37^\circ \sim 18^\circ$)，即前向散射较强。

此外，结合散射系数和散射各向异性因子，可以定义：

$$\mu'_s = \mu_s (1 - g) \quad (1-13)$$

μ'_s 称为约化散射系数（reduced scattering coefficient），也称为传输系数（transport

coefficient)。其倒数 l'_s 称为传输平均自由程，表示光子在介质中沿初始方向传输直到改变其传输方向之前所经过的平均距离。当光在介质中的传输行为以多次散射为主时，约化散射系数为描述光散射行为的最重要的参数，在后面的一些重要理论描述中，也往往涉及约化散射系数这一参数。

结合吸收系数和约化散射系数，并基于后面将要介绍的扩散理论，可以得到光在特定组织中的有效穿透深度为

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)}} \quad (1-14)$$

δ 的倒数定义为有效衰减系数，记为 μ_{eff} ，即

$$\mu_{\text{eff}} = \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)} \quad (1-15)$$

1.1.2 光在生物组织中的散射

在可见到近红外光谱范围内（光学诊断窗口），大部分生物组织表现为一种高散射低吸收的混浊介质。光散射问题是光在混浊介质中传输的重要问题，也是一个十分复杂的问题。

混浊介质可以建模为悬浮在背景介质中的散射颗粒的集合体，当散射颗粒之间的间隔足够大，则散射颗粒的光散射行为可以被认为是相互独立的。光在生物组织中的散射问题可以从单个散射颗粒对光的散射问题出发进行分析。

考虑单色平面波被一任意直径的均匀球形颗粒散射的问题。光作为一种电磁波，这个问题可以由麦克斯韦方程组进行描述。通过分别建立和求解球形颗粒内部以及外部的麦克斯韦方程组，并通过在圆球表面应用边界条件，可以得到该问题的解析解。德国物理学家 Gustav Mie 研究了这个问题，并在 1908 年发表的一篇论文中，给出了描述上述问题的麦克斯韦方程组的解。这一精确解被以他的名字命名为米氏理论（Mie theory），而这一问题也称为米氏散射（Mie scattering）问题。因而米氏理论实际是指描述单色平面波被一个一定直径的均匀球形散射的麦克斯韦方程组的解析解。

米氏理论是描述光在混浊介质中散射的最为重要的理论之一。米氏理论可用于计算单个粒子散射的散射截面、散射效率、以及散射各向异性因子。而根据前述散射截面，散射效率以及散射粒子的浓度即可以计算得到散射介质的散射系数。

米氏理论的计算公式相对复杂，其结果表现为一个无穷级数展开。其解析形式并不直观，根据不同条件的一系列计算结果，并绘制曲线，可以得到关于米氏散射特点的直观认识。已经有一些米氏理论的计算代码可供计算使用。其中包括经典的 BHMIE 算法（由 Bohren 和 Huffman 实现的米氏理论计算代码），以及基于 BHIME 算法，但提供了 Windows 图形界面的 MiePlot 程序 (<http://philiplaven.com/mieplot.htm>)。

另外，在 http://omlc.ogi.edu/calc/mie_calc.html 上提供了基于网页界面的米氏理论计算和绘图程序，可以通过输入球体直径、浓度、光波长以及折射率等参数得到散射系数等的计算结果。

米氏理论可用于研究任意直径的均匀球形颗粒对单色平面波的散射问题，但其计算相对复杂，米氏解的数学表现形式也不直观。在满足一定条件时，可以使用一些近似理论对散射

问题进行更为简单、直观的描述。

图 1-3 所示为基于网页界面的米氏理论计算程序界面。

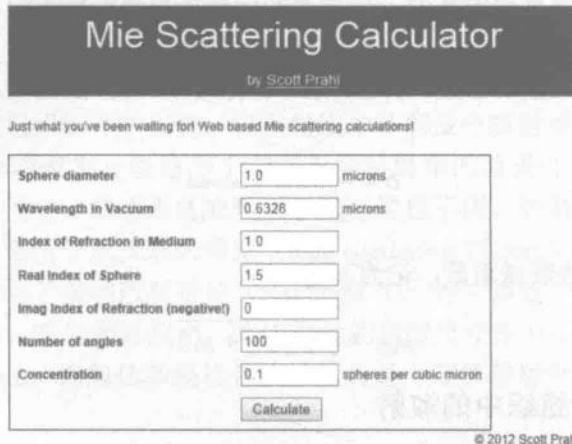


图 1-3 基于网页界面的米氏理论计算程序界面。

图 1-4 所示为一些文献中提出的曲约化米氏散射数值解算方法所得的等效颗粒直径 d 分别取 $0.5\mu\text{m}$ 和 $2\mu\text{m}$ 时的米氏散射相函数，对应的各向异性因子 g 分别为 0.745 和 0.963。计算表明：等效颗粒直径越大，散射相函数在小角度的数值越大，因而各向异性因子也就越大；等效颗粒直径越小颗粒的后向散射增强，同时散射相函数也趋于光滑。因此，利用 MIE 散射相函数可以合理解释细胞中各大小不等的亚细胞器官在不同方向上散射程度的不同：细胞核相对于其他亚细胞器官体积较大，在小角度范围内的散射更明显；线粒体等体积较大的亚细胞器官的前向散射特性显著降低。

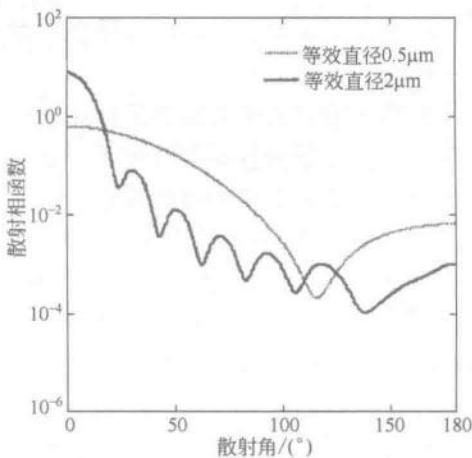


图 1-4 不同等效颗粒的米氏散射相函数

当散射颗粒的直径远小于光波长时，可以使用瑞利散射理论进行描述。考虑半径为 a 的散射小球，球体折射率为 n_s ，球体置于折射率为 n_b 的背景介质中。如图 1-5 所示，当小球位于坐标原点位置，光沿 z 轴传播，当 a 远小于波长时，可以得到 P 点位置处的散射光强为

$$I(r, \theta) = \frac{(1 + \cos^2 \theta) k^4}{2r^2} \left| \frac{n_{\text{rel}}^2 - 1}{n_{\text{rel}}^2 + 2} a^3 \right|^2 I_0 \quad (1.16)$$

式中， $k = \frac{2\pi n_b}{\lambda}$ ； $n_{\text{rel}} = \frac{n_s}{n_b}$ 为小球的相对折射率； I_0 为入射光强。

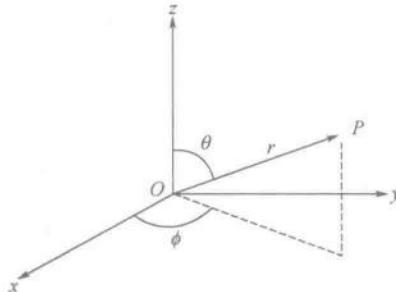


图 1-5 瑞利散射球坐标系

从式(1.16)可以看出， $I(r, \theta)$ 正比于 $1/\lambda^4$ 。换句话说，散射强度随波长的增加急剧下降。小球的散射截面为

$$\sigma_s = \frac{8(ka)^4}{3} \left| \frac{n_{\text{rel}}^2 - 1}{n_{\text{rel}}^2 + 2} \right|^2 \quad (1.17)$$

散射截面也正比于 $1/\lambda^4$ 。

根据散射效率的定义，可以得到散射效率为

$$\mathcal{Q}_s = \frac{8\pi a^2 (ka)^4}{3} \left| \frac{n_{\text{rel}}^2 - 1}{n_{\text{rel}}^2 + 2} \right|^2 \quad (1.18)$$

瑞利散射为各向同性的，即 $g=0$ 。根据散射截面和散射颗粒的密度，可以计算得到介质的散射系数。

瑞利散射理论可以解释晴朗天气下蓝天的形成。晴朗天气下，空气中的气体分子是主要的光散射颗粒，且其大小远小于可见光波长。根据瑞利散射，波长短的蓝光其散射更强，波长更长的其他可见光成分则受到更小的散射，人眼看到更多的是大气散射来的蓝光。另一方面，波长更短的紫光因为大气吸收强烈，因而对天空颜色的影响也不大。

当空气中存在直径更大的水汽或尘埃颗粒时，瑞利散射不再适用，此时需要采用米氏理论解释。

图 1-6 显示了瑞利散射理论和米氏散射理论对不同大小散射颗粒的分析结果。图中显示情况为散射颗粒折射率为 1.33，波长为 633 nm，散射角度为 120°。可以看到，在散射颗粒直径小于光波长时，瑞利散射与米氏散射的分析结果相近。瑞利散射也称为米氏散射的瑞利近似。图 1-7 是半径为 0.5 μm，折射率为 1.33 的散射粒子，背景介质折射率为 1 的情况下，在 120° 散射方向上散射强度随波长的变化。可以看到，根据米氏散射理论散射强度随波长变化不大，而瑞利散射强度随波长从 400 nm 到 900 nm，有 1 个数量级以上的变化。注意，米氏理论计算结果与散射角度有很大关系，不同散射角，散射强度随波长的变化会有不同。

另一方面，对于半径为 $0.5 \mu\text{m}$ 的散射粒子，瑞利散射理论已不再适用，但其结论符合瑞利散射强度随波长的变化关系。

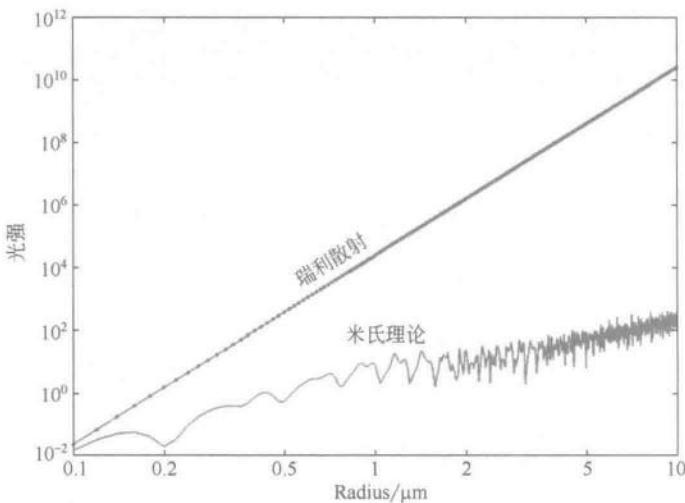


图 1-6 米氏散射和瑞利散射的散射强度随散射球体半径的变化

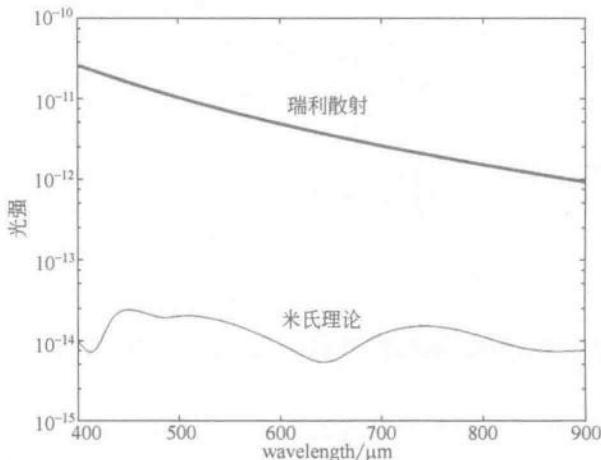


图 1-7 米氏散射和瑞利散射的散射强度随波长的变化

散射相函数是描述介质散射特性的最重要和最基本的参量之一。尽管米氏散射的理论数值计算方法经过广大学者的努力已经相当完善，但由于其数学计算复杂性及计算资源负担，在研究光在生物组织中的散射问题时，目前广泛采用的是经验公式 Henyey 和 Greenstein 于 1941 年提出的第一个与一些实验数据吻合较好的函数，简称为 HG 相函数。HG 相函数原本来自天文物理学，在组织光学、材料学等领域都发现了与实验数据的优良吻合性。在本书介绍的光传输研究重要方法——Monte Carlo 方法中，绝大多数模型采用 HG 相函数。因此，这里详细对其进行介绍。

HG 相函数忽略了散射光强与生物组织内的散射体/粒子的大小和形态的相关性，认为散射光强的角分布由各向异性因子唯一决定。一些研究者指出 HG 函数具有局限性，例如不能很好地描述生物组织背向散射光问题，没有考虑入射光波长影响等，提出了一些修正，但这