

H-006

光拡散方程式の不均一グリッドFDTD解析を用いた3次元光散乱体 時間領域光学パラメータ推定

Time-Resolved Noninvasive Optical Parameter Determination in Three-Dimensional Turbid Medium Utilizing FDTD Analysis with Inhomogeneous Grids for Diffusion Equations

谷藤 忠敏
Tadatoshi Tanifuji

市坪 公太
Khota Ichitsubo

1. まえがき

波長 700–900nm における酸化及び還元ヘモグロビンの光吸収係数差を利用して、近赤外光による生体組織の血中酸素濃度分布同定を行う光トモグラフィ(OT: Optical Tomography)実現の可能性が指摘されている^[1]。また、OT実現方法として、生体の散乱光強度直流成分から生体内部光学パラメータ推定を行う方法^[2]に加え、散乱光強度の変調周波数依存性^[3]あるいは時間波形^[4]変化を利用する方法が試みられている。とりわけ、時間領域推定法は、他の2方法と比較して光学パラメータ推定精度が優れている^[5]。このため、後方散乱光パルスのみを用いる時間領域推定法は、前方散乱光検出が不可能な光学的厚みが大きな生体内部光学パラメータ推定可能性を有する^[5]。

本報告では、時間領域光学パラメータ推定を実際の生体に適用する上で必要な3次元不均一散乱体の光パルス応答計算時間短縮を可能とする光拡散方程式^[6]の不均一グリッドFDTD(Finite Difference Time Domain)解析法を提案する。次いでこの解析法を用いて、後方散乱光パルスのみから生体内部の光学パラメータを精度良く推定可能なことを示す。

2. FDTD解析法と光学パラメータ推定法

本節では、筆者等が提案した光拡散方程式のFDTD解析法^[7]を、不均一グリッドで構成された解析法へ拡張する。次に後方散乱光パルス波形から散乱体内部の光学パラメータ分布を推定する方法を述べる。

2.1 光拡散方程式の不均一グリッドFDTD解析

Maxwell方程式の積分型であるAmpere及びFaradayの電磁誘導の法則を不均一グリッドにより空間及び時間領域で離散化するFDTD解析法は既に定式化されている^[8]。光拡散方程式を放射発散度 $\phi(\mathbf{r})$ 及び拡散放射流速 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t)$ で定義されるグリッド体積 V で積分すると次式を得る。

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) dV + \frac{1}{3} \iiint_V \nabla \phi(\mathbf{r}, t) dV + \iiint_V \mu_n(\mathbf{r}) \mathbf{J}_z(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) dV = \hat{z} f\left(t - \frac{z}{c}\right) \iiint_V \mu_s(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) F_0(\rho) \exp(-\mu_s z + 1) dV, \quad (1)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \phi(\mathbf{r}, t) dV + \iiint_V \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) dV + \iiint_V \mu_a(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) dV = f\left(t - \frac{z}{c}\right) \iiint_V \mu_s(\mathbf{r}) F_0(\rho) \exp(-\mu_s z + 1) dV. \quad (2)$$

上式で \mathbf{r} 、 $\hat{\mathbf{s}}$ 及び t は位置、角度及び時刻を示す。また輸送減衰係数 $\mu_n(\mathbf{r})$ は光吸収及び散乱係数 $\mu_a(\mathbf{r})$ 及び $\mu_s(\mathbf{r})$ と非等

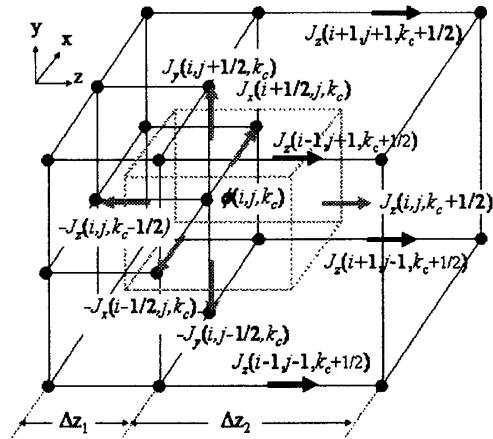


図1 不均一グリッド境界での放射発散度計算法

方散乱パラメータ $g(\mathbf{r})$ から $\mu_n(\mathbf{r}) = \mu_a(\mathbf{r}) + (1 - g(\mathbf{r}))\mu_s(\mathbf{r})$ で定義される。 $\mu_n(\mathbf{r}) = \mu_a(\mathbf{r}) + \mu_s(\mathbf{r})$ 及び $\mu'_s(\mathbf{r}) = (1 - g(\mathbf{r}))\mu_s(\mathbf{r})$ は全減衰及び等価散乱係数を示す。 $F_0(\rho)$ はz軸方向に入射したレーザー光の(x,y)面内光パワー分布で、 $\rho = x\hat{x} + y\hat{y}$ で定義される。また、 $f(t)$ は入射光パルス波形、 c は散乱体中の光速を示す。

散乱体中の放射発散度変化は、光源入射点近傍で空間・時間的な変化が大きい。このため、入射点からの距離に比例してグリッドサイズ Δz の拡大を図ると数値解精度劣化を抑圧し計算時間短縮に有効と考えられる。このため、図1に示すようにz軸方向のYee格子座標 k_c で Δz_1 から Δz_2 に拡大する不均一グリッドFDTD解析の定式化を行う。(2)式の左辺第2項の積分はガウスの定理を用いて変形後、差分で近似すると次式を得る。

$$\begin{aligned} \iiint_V \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) dV &= \iint_{S_x} \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) \cdot \mathbf{n}_x dS \\ &+ \iint_{S_y} \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) \cdot \mathbf{n}_y dS + \iint_{S_z} \mathbf{J}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) \cdot \mathbf{n}_z dS \\ &\equiv \left[J_x\left(x + \frac{\Delta x}{2}, y, z\right) - J_x\left(x - \frac{\Delta x}{2}, y, z\right) \right] \Delta y_1 (\Delta z_1 + \Delta z_2) / 2 \\ &+ \left[J_y\left(x, y + \frac{\Delta y}{2}, z\right) - J_y\left(x, y - \frac{\Delta y}{2}, z\right) \right] \Delta x_1 (\Delta z_1 + \Delta z_2) / 2 \\ &+ \left[J_z\left(x, y, z + \frac{\Delta z_2}{2}\right) - J_z\left(x, y, z - \frac{\Delta z_1}{2}\right) \right] \Delta x_1 \Delta y_1, \quad (3) \end{aligned}$$

上式で S_{yz} 、 S_{xz} 及び S_{xy} は格子面のx、y及びz軸方向の法線ベクトル \mathbf{n}_x 、 \mathbf{n}_y and \mathbf{n}_z に垂直な面を示す。(3)式を(2)式に代入し、他項の積分もグリッド単位に離散化して整理すると、放射発散度に対する次式のFDTD解を得る。

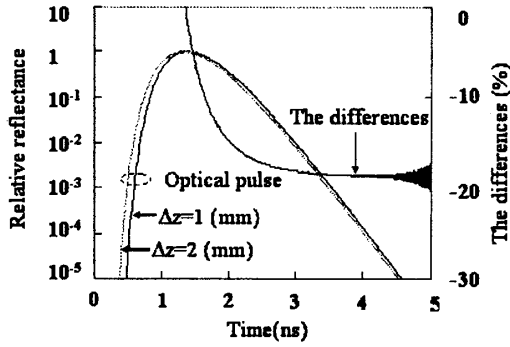


図2 グリッドサイズと光パルス応答

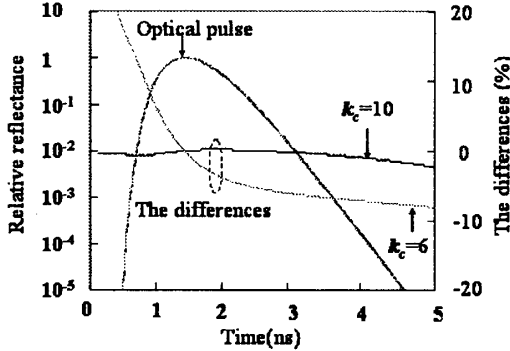


図3 不均一グリッドFDTD解析の数値解誤差

$$\begin{aligned} \phi^{n+1}(i, j, k_c) = & C_2 \phi^n(i, j, k_c) + C_{2\delta} \left(J_x^{n+1/2} \left(i + \frac{1}{2}, j, k_c \right) - J_x^{n+1/2} \left(i - \frac{1}{2}, j, k_c \right) \right) \\ & + C_{2\delta} \left(J_y^{n+1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k_c \right) - J_y^{n+1/2} \left(i, j - \frac{1}{2}, k_c \right) \right) + C_{2\delta} \left(J_z^{n+1/2} \left(i, j, k_c + \frac{1}{2} \right) - J_z^{n+1/2} \left(i, j, k_c - \frac{1}{2} \right) \right) \\ & + C_{2\delta} \mu_s \left(f_{i,j,k_c}^{n+1} + f_{i,j,k_c}^n \right) / 2 \frac{\iint_{S_{xy}} F_0(\rho) dx dy}{\Delta x_1 \Delta y_1} \times \frac{\int_{k_c \Delta z_1 - \Delta z_2 / 2}^{k_c \Delta z_1 + \Delta z_2 / 2} \exp(-\mu_r \tau) d\tau}{\Delta z_1 / 2 + \Delta z_2 / 2}. \quad (4) \end{aligned}$$

上式で係数 $C_{2,2\delta,2\delta}$ は、グリッド内で平均化された光学パラメータと Δz 及び時間幅 Δt で定義される。また、 $J_z(i, j, k_c + 1/2)$ は周囲の値の補間値で求める。拡散放射流速の各成分及び不均一グリッド領域内の放射発散度は、従来の FDTD 解^[7]が適用できる。積分形式光拡散方程式から導出される FDTD 解は①係数に光学パラメータのグリッド内平均値を使用する、及び②(4)式第 5 項の励起項が積分で与えられる、点を除いて微分形式方程式から導出される解と同一である。従って(4)式で与えられる積分形 FDTD 解は、グリッド内での光学パラメータ変化を許容し、z 軸方向に急激に減衰する拡散励起光の寄与を解析的に積分可能となり、数値解析誤差の抑圧が可能であるという特徴がある。x 及び y 軸方向に不均一なグリッドについても上と同様に定式化が可能である。

2.2 光学パラメータ推定法

次式の自乗残差 χ^2 最小値を Downhill simplex 法^[9]を用いて探索することにより、3 次元光散乱体の光学パラメータ推定を行った。

$$\chi^2 = \sum_{n=m}^{n_0} \left[\frac{I_0(t_n) - I(t_n)}{\sigma^2(t_n)} \right]^2, \quad (5)$$

(5)式で $I_0(t_n)$ 及び $I(t_n)$ は $t_n = n\Delta t$ における光パルス強度実測及び理論値、 $\sigma^2(t_n)$ はノイズ分散である。Downhill simplex 法は $(n+1)$ 個の光学パラメータで定義される n 次元空間にお

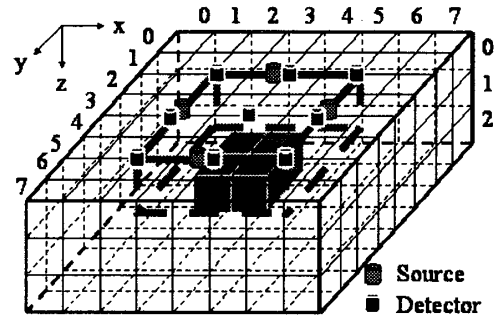


図4 3次元散乱体と光源・検出器配置

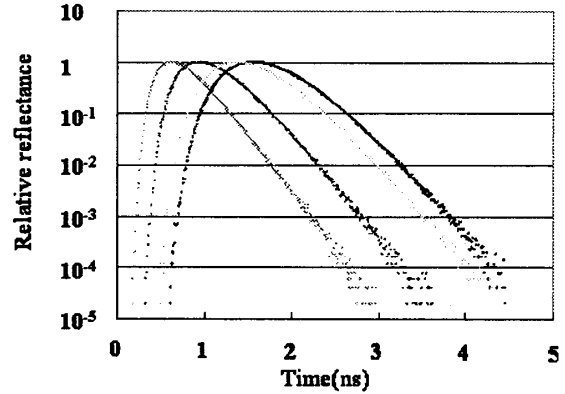


図5 シミュレーションに使用した光パルス波形例

ける χ^2 最悪値を与える多面体頂点を移動し、最終的に頂点間の距離が一定値以下になるまで繰り返す。この方法は χ^2 の光学パラメータによる微分が不要なため、後方散乱光パルスのみを用いた光学パラメータ推定精度を検討するための簡易推定法として使用した。

3. 後方散乱光パルスによる光学パラメータ推定

3.1 3次元光散乱体の FDTD 解析時間と精度

最初に $100 \times 100 \times 30 \text{ mm}^3$ の 3 次元均一散乱体光パルス応答計算時間の $\Delta z (= \Delta x = \Delta y)$ 依存性を調べた。その結果、 Δz が 1 及び 2 mm の均一グリッドの場合、それぞれ 1000 及び 500 タイムスロットの計算に 108 及び 7 秒要した。計算には、CPU クロックが 3GHz の PC を使用した。図 2 は $\Delta z = 1$ 及び 2 mm の後方散乱光パルス波形と $\Delta z = 1 \text{ mm}$ のパルス波形で規格化した $\Delta z = 2 \text{ mm}$ の光パルス相対振幅誤差を示す。図から $\Delta z = 2 \text{ mm}$ のパルス振幅は、散乱体の光学パラメータ推定の重要な情報を含む光パルス尾部振幅で 20% 程度の誤差を伴うことが分かる。

次に前節で述べた 1 及び 2 mm の不均一グリッドを用いた FDTD 解析の数値解精度と計算時間の k_c 依存性を検討した。その結果 k_c を 10 以上に設定すると全ての時間帯における光パルス振幅誤差を 1% 以下に抑圧可能なことが分かった。次に、x 及び y 軸方向の Δz についても同様な検討を行った。その結果 xy 面の光源・検出器を含む領域以外の Δz が 2mm の場合は数値解析誤差は 1% 以下であった。図 3 はこの条件下で $k_c = 10$ とした場合の光パルス応答と相対誤差を示す。図に示すように誤差は 2% 以下に留まっている。この場合の計算時間は 32 秒で、 $\Delta z = 1 \text{ mm}$ の場合の 1/3 以下に短縮できた。また、図から $k_c = 6$ の場合は 10% 程度の誤差を伴うことが分かる。

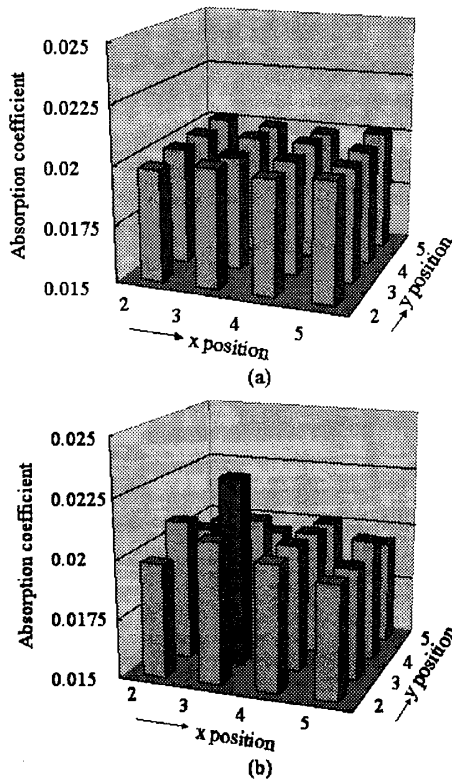


図6 1領域の光吸収変化時の光学パラメータ推定値

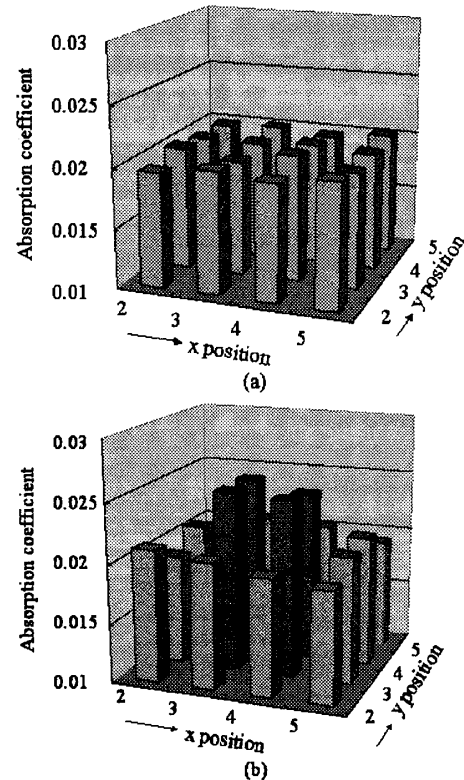


図7 4領域の光吸収変化時の光学パラメータ推定値

3.2 光学パラメータ推定精度

上述した解析法を用いて、後方散乱光パルスのみによる3次元光散乱体の光学パラメータ推定精度を検討した。図4に示すように $80 \times 80 \times 30 \text{ mm}^3$ の散乱体に4個の光源と9個の検出器を配置して前節で述べた方法により $10 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ の単位領域毎の光学パラメータ推定を行った。なお、図には単位領域を識別するために x , y 及び z 方向に番号を付した。(5)式の実測値光パルス波形はFDTD計算値にポアソン乱数を重畳することで模擬した。模擬した実測パルス波形例を図5に示す。この方法で模擬した光パルスとノイズ振幅の関係は、時間相関単一フォトンカウンティングによる実測値と良い一致を示す^[10]。本検討では、図の点線で囲まれた(2, 2, 0)及び(5, 5, 1)を対角要素とする32個の単位領域で構成した直方体部分をROI (Region Of Interest)とした。各領域の μ_a 及び μ_s はそれぞれ0.02及び 2.0 mm^{-1} と仮定した。図6(a)及び6(b)はROI中単位領域(3, 3, 1)の μ_a が0.02から 0.025 mm^{-1} へ変化したときのROI表層及び第2層の光学パラメータ推定値を示す。領域(3, 3, 1)の μ_a 推定値は 0.023 mm^{-1} 、他領域推定値の平均値及び標準偏差は0.02及び $3.3 \times 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$ であった。図7(a)及び(b)は4個の領域の μ_a が同時に0.02から 0.025 mm^{-1} へ変化したときの推定値を示す。推定値の平均及び標準偏差は0.0248及び 4.2×10^{-4} 、他の28領域のそれらは0.02及び 5.29×10^{-4} であった。以上の結果から後方散乱光パルスのみを用いて $10 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ の領域の光吸収係数を10%の誤差で推定が可能なが分かった。また、単位領域の体積が大きくなるに従い誤差が小さくなることを確認した。推定に要した時間は、CPUクロックが3GHzのPCで約12時間であった。

4. まとめと今後の課題

光拡散方程式の不均一グリッドを用いたFDTD法を定式化し、3次元散乱体の光パルス応答解析時間を1/3以下に短縮可能なことを明確にした。また、数値解析精度の劣化は2%以下に抑圧可能なことを明確にした。この解析法を後方散乱光のみを用いた3次元散乱体の光学パラメータ推定に適用し、 $10 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ の単位領域光学パラメータを10%の誤差で推定可能なことを明らかにした。今後はFDTD法による光パルス応答計算時間を更に短縮するためのNonstandard FDTD法等の検討を行う必要がある。また、光学パラメータを推定する逆問題解法の高度化を図り、実用的な3次元時間領域OTの実現を目指す。

—参考文献—

- [1] Vo-Dinh, "Biomedical Photonics Handbook", Boca Raton FL: CRC Press, 2003.
- [2] H. Dehghani *et al.*, J. Opt. Soc. Am. A/Vol.19, pp.1162-1171, 2002.
- [3] T. O. McBride, *et al.*, Appl. Opt. Vol.38, No.25, pp.5480-5490, 1999.
- [4] A. H. Hielscher *et al.*, IEEE Trans. Medical Imaging, vol.18, No.3, pp.262-271, 1999.
- [5] F. Gao *et al.*, Applied Optics, vol. 41, No.4, pp. 778-791, 2002.
- [6] A. Ishimaru, Wave Propagation and Scattering in Random Media, Piscataway, NJ: IEEE Press, 1997, ch.9.
- [7] T. Tanifuji *et al.*, IEEE Trans. Medical Imaging, vol.21, No.2, pp.181-184, 2002.
- [8] A. Taflov, "Computational Electrodynamics The Finite-Difference Time-Domain Method", Norwood MA: ARTECH HOUSE, 1995, ch.11.
- [9] W. H. Press *et al.*, "Numerical Recipes in C++", Cambridge UK: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 2002, ch. 10.
- [10] 石川他, 2004年信学総体, D-7-12