

ulm university universität
uulm

Analytische Lösungen der Strahlungstransfergleichung und ihrer Approximationen

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS
(Dr.-Ing.)

der Fakultät für Ingenieurwissenschaften
und Informatik der Universität Ulm

von

André Liemert
aus Ulm

Gutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Raimund Hibst
	Prof. Dr. rer. nat. Peter Unger
	Prof. Dr. rer. nat. Alwin Kienle
Amtierender Dekan:	Prof. Dr.-Ing. Klaus Dietmayer

Ulm, 02.05.2011

Analytical solutions of the radiative transfer equation and their approximations

Abstract

This thesis presents the derivation of analytical expressions of the radiative transfer equation and their approximations in the steady-state and time domains. The diffusion equation, which is the most often used approximation of the radiative transfer equation, is solved analytically for different homogeneous and layered geometries. By applying the integral transform formalism the respective form of the diffusion equation is reduced to an ordinary differential equation. At this stage the solution of the boundary value problem is obtained via standard techniques. The derived solutions were validated against other independent analytical methods found in literature and the Monte Carlo method. Analytical solutions of the simplified spherical harmonics equations are derived for homogeneous media. The Fourier transform is used to convert these coupled diffusion-like equations to a system of ordinary differential equations. The obtained solutions for infinite and semi-infinite media were validated against the finite difference method. The infinite space fluence within the transport theory is derived for an anisotropically scattering medium and different source distributions. Additionally, for the case of isotropic scattering a simplified version is given. Based on results of the infinite space fluence and by applying the eigenvalue method the radiance caused by an isotropic point source in an infinitely extended medium is obtained. The analytical solutions were compared to the Monte Carlo method. Within the stochastic nature of the Monte Carlo simulations an exact agreement was found in the steady-state and time domains.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Grundlagen der Diffusions- und Transporttheorie **3**

3 Diffusionsgleichung für lateral unbegrenzte Medien **7**
3.1 Greensche Funktion der homogenen Schicht 7
3.2 Modell für ein N-schichtiges Medium 13
3.3 Zweischichtiges Medium mit gleichen reduzierten Streukoeffizienten . . 25

4 Diffusionsgleichung für lateral begrenzte Medien **29**
4.1 Axial geschichtete Modelle 29
4.1.1 Homogener Quader 29
4.1.2 Geschichteter Quader 31
4.1.3 Homogener Zylinder 33
4.1.4 Geschichteter Zylinder 37
4.2 Radial geschichtete Modelle 42
4.2.1 Konzentrische Kugeln 42
4.2.2 Geschichteter Zylinder 49

5 Simplified Spherical Harmonics Methode **51**
5.1 Eindimensionale P_N Gleichungen 52
5.2 SP_N Gleichungen im Steady-State-Bereich 55
5.2.1 Greensche Funktionen für das infinite Medium 58
5.2.2 Greensche Funktionen für die homogene Kugel 64
5.2.3 Greensche Funktionen für ein semi-infinites Medium 66
5.3 SP_N Gleichungen im Frequenzbereich 70

6 Analytische Lösungen der Strahlungstransfergleichung **75**
6.1 Fluenz und Strahldichte für ein infinites nicht streuendes Medium . . . 75
6.2 Fluenz für ein infinites streuendes Medium 80
6.2.1 Alternative Lösung für das isotrop streuende Medium 88
6.3 Eigenwertmethode 95
6.4 Strahldichte im kugelsymmetrischen Medium 100
6.4.1 Ähnlichkeitsrelation innerhalb der P_N Theorie 104

7 Zusammenfassung und Ausblick **107**

Literaturverzeichnis **109**

Nomenklatur

$\Gamma(x)$	Gamma-Funktion
μ_a	Absorptionskoeffizient
μ_s	Streukoeffizient
μ_{eff}	effektiver Abschwächungskoeffizient
μ_s'	reduzierter Streukoeffizient
∂V	Mediumsgrenzfläche
$\Phi(\vec{r})$	Fluenz
$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$	Strahldichte
$\Theta(x)$	Heaviside-Funktion
$\vec{J}(\vec{r})$	Photonenstromdichte
$\vec{n}$	Normalenvektor
$\vec{r}$	Ortsvektor
c	Lichtgeschwindigkeit im Medium
D	Diffusionskonstante
g	Anisotropiefaktor
$I_m(x)$	modifizierte Besselfunktion erster Art der Ordnung m
$i_m(x)$	modifizierte sphärische Besselfunktion erster Art der Ordnung m
$j{=}\sqrt{-1}$	imaginäre Einheit
$J_m(x)$	Besselfunktion erster Art der Ordnung m
$j_m(x)$	sphärische Besselfunktion erster Art der Ordnung m
$K_m(x)$	modifizierte Besselfunktion zweiter Art der Ordnung m
$k_m(x)$	modifizierte sphärische Besselfunktion zweiter Art der Ordnung m
n	Brechungsindex im Medium
n_e	Brechungsindex des umgebenden Mediums
$P_n(x)$	Legendre Polynom der Ordnung n
R	Reflektanz
R_{fres}	Reflektivität
T	Transmission
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	Kugelflächenfunktion
DE	*engl.* diffusion equation
EBC	*engl.* extrapolated-boundary condition

PCBC	*engl.* partial-current boundary condition
RTE	*engl.* radiative transfer equation
TE	*engl.* telegraph equation
ZBC	*engl.* zero-boundary condition

1 Einleitung

In vielen verschiedenen Teildisziplinen der Physik ist die Strahlungstransfergleichung (RTE) zur Beschreibung diverser Transportprozesse involviert. Konkrete Anwendungsbereiche dieser Integro-Differentialgleichung sind beispielsweise die Kernphysik [1, 2], die Wärmeübertragung, die Astrophysik, die Klimaforschung sowie die Biomedizinische Optik [3, 4, 5]. Im zuletzt genannten Anwendungsbereich wird diese Gleichung zur Bestimmung der Lichtausbreitung in streuenden Medien verwendet. Die Beschreibung der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie erfolgt innerhalb der klassischen Physik über die Maxwell-Gleichungen. Aufgrund der mathematischen Komplexität der Maxwell-Theorie und den begrenzten Rechnerkapazitäten wird zur Bestimmung der Lichtausbreitung in streuenden Medien nahezu ausnahmslos die RTE verwendet. Das Licht ist in diesem Fall nicht als elektromagnetische Welle, sondern als Teilchenstrom aufzufassen.
Innerhalb der Transporttheorie lassen sich mitunter die verschiedenen Polarisationszustände des Lichts berücksichtigen. Allerdings ist hierzu die skalare RTE durch ein gekoppeltes System bestehend aus vier Strahlungstransfergleichungen zu ersetzen [6, 7]. Die Literatur beinhaltet abgesehen von einzelnen Ausnahmefällen keine analytischen Lösungen der RTE mit Angabe aller erforderlichen Größen. Die Ausnahmen stellen das nicht streuende [1, 2] und das isotrop streuende [8] Medium dar. Genau genommen geht jedoch auch der analytische Ausdruck für das isotrop streuende Medium bereits aus einer Approximation hervor. Infolge dessen werden zur Lösung der RTE numerische Verfahren eingesetzt. Neben der Diskreten-Ordinaten-Methode [9] wird größtenteils die Monte Carlo Methode [10] zur numerischen Lösung der RTE verwendet. Ein bedeutsamer Nachteil der verfügbaren numerischen Methoden sind die relativ langen Rechenzeiten zum Erhalt von ausreichend genauen Ergebnissen. In Anbetracht von Genauigkeit und erforderlicher Rechenzeit können analytische Lösungen als Goldstandard angesehen werden. Insbesondere für die Lösung des inversen Problems wie beispielsweise die Bestimmung der optischen Eigenschaften im Gewebe zur medizinischen Diagnostik besitzen diese deutliche Vorteile gegenüber den entsprechenden numerischen Verfahren.
Bedingt durch die Tatsache, dass keine relevanten analytischen Lösungen der RTE bekannt waren, wurden in der Vergangenheit verschiedene Approximationen dieser Gleichung betrachtet. Die bekannteste und noch immer am häufigsten verwendete Näherung der RTE ist durch die Diffusionsgleichung (DE) [11] gegeben. Diese ist anwendbar, falls die effektive Streuung μ_s' sehr viel größer ist als die Absorption μ_a und der betrachtete Ort $\vec{r}$ weit entfernt von der Quelle $\vec{r}\,'$ und der Mediumsgrenze ∂V liegt. Obwohl die DE formal für beliebig kleine Geometrien wie z.B. einen Quader [12]

oder einen Zylinder analytisch gelöst werden kann, sind die resultierenden Lösungen aufgrund des oben angegebenen Gültigkeitsbereiches zur Beschreibung der Lichtausbreitung nicht anwendbar.
Die nächste Approximation höherer Ordnung bildet die vor kurzem in den Bereich der Biomedizinischen Optik eingeführte *Simplified Spherical Harmonics* Methode mit den zugrundeliegenden SP_N Gleichungen [9]. Diese Gleichungen liefern insbesondere für stark absorbierende Medien wesentlich bessere Resultate als die Diffusionstheorie. Innerhalb der Literatur wurden die SP_N Gleichungen bisher ausschließlich numerisch mit der Finiten-Differenzen-Methode [9] und der Methode der finiten Elemente [13] gelöst.
Die RTE lässt sich unter Verwendung von Kugelfächenfunktionen in Form von unendlich vielen gekoppelten partiellen Differentialgleichungen, den P_N Gleichungen, exakt wiedergeben. Diese Entwicklung ist deutlich komplizierter als die SP_N Theorie und entspricht der sogenannten *Spherical Harmonics* Methode [14]. Analytische Lösungen zu diesen Gleichungen liegen in der Literatur für das dreidimensionale Medium bis zur Ordnung $N = 3$ vor [4, 15].
Im folgenden wird die Vorgehensweise innerhalb dieser Arbeit grob aufgezeigt. Den Ausgangspunkt zur Ermittlung analytischer Lösungen bildet die n-dimensionale Diffusionsgleichung für ein unendlich ausgedehntes homogenes Medium, da die dimensionsabhängige Greensche Funktion sowie die erforderlichen Rechenmethoden in nachfolgenden Kapiteln benötigt werden. Im nächsten Schritt wird die dreidimensionale Diffusionsgleichung unter Einbezug von Randbedingungen zur Definition eines lateral unendlich ausgedehnten Mediums in Abhängigkeit der Schichtenanzahl N gelöst. Die resultierende Greensche Funktion wird mit der analytischen Methode von Fabrizio Martelli, Universität Florenz, und mit der Monte Carlo Simulation validiert. Unter Verwendung bereits hergeleiteter Ergebnisse folgt dann die Lösung der DE für den axial geschichteten Quader und Zylinder. Das Kapitel zur Diffusionstheorie wird mit der Bestimmung der Lösungen für die konzentrischen Kugeln und des radial geschichteten Zylinders abgeschlossen.
Im nachfolgenden Kapitel werden die SP_N Gleichungen betrachtet. Nach deren Herleitung aus den eindimensionalen P_N Gleichungen erfolgt die Bestimmung der Greenschen Funktion für das dreidimensionale unendlich ausgedehnte Medium. Die ermittelten analytischen Ausdrücke werden mit der numerischen Lösung von Dr. Alexander Klose, Columbia University, verglichen. Die hergeleiteten Greenschen Funktionen des unendlich ausgedehnten Mediums repräsentieren den partikulären Anteil der Lösung der SP_N Gleichungen und werden im weiteren Verlauf in Kombination mit der homogenen Lösung zum Erhalt von begrenzten Strukturen verwendet. Diese Erweiterung ist insbesondere für die Anwendung der gefundenen Lösungen innerhalb der Biomedizinischen Optik von großer Bedeutung. Die Ausdrücke für die Fluenz und die Reflektanz werden erneut mit der numerischen Lösung von Dr. Alexander Klose validiert.
Das letzte Kapitel beinhaltet die Herleitung analytischer Lösungen für die Fluenz und Strahldichte der RTE. Im allgemeinen Fall des streuenden Mediums erfolgt die Validierung der ermittelten Ausdrücke ausschließlich über die Monte Carlo Methode.

2 Grundlagen der Diffusions- und Transporttheorie

Die Verwendung der Diffusionstheorie zur Bestimmung der Lichtausbreitung in streuenden Medien wird mit deren mathematischen Einfachheit im Vergleich zur Maxwell- und Transporttheorie begründet. Die zugrundeliegende Diffusionsgleichung ergibt sich aus einer Entwicklung der Strahlungstransfergleichung nach Kugelflächenfunktionen mit Abbruch nach der ersten Ordnung [6, 14]. Diese Entwicklung entspricht der sogenannten P_1 Approximation. Während Lösungen der Strahlungstransfergleichung mit Ausnahme einzelner Sonderfälle auf numerischen Methoden beruhen, ergibt sich im Rahmen der Diffusionstheorie die Möglichkeit der Ermittlung analytischer Lösungen. Im zeitunabhängigen Fall ist

$$D\nabla^2\Phi(\vec{r}) - \mu_a\Phi(\vec{r}) = -S(\vec{r}) \tag{2.1}$$

die entsprechende Diffusionsgleichung mit der Quelle $S(\vec{r})$ als Eingangsgröße und der Fluenz $\Phi(\vec{r})$ als Lösung. Innerhalb der Literatur wird die Fluenz unter anderem auch als Raumbestrahlungsstärke bezeichnet. Aus Sicht der praktischen Anwendung ist diese bedeutsamer als die mathematisch kompliziertere Strahldichte $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ [16]. Definiert ist diese Größe als das Integral der Strahldichte über den gesamten Raumwinkelbereich

$$\Phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \mathrm{d}\Omega. \tag{2.2}$$

Die Diffusionskonstante D setzt sich aus der Absorption und der Streuung nach

$$D = \frac{1}{3} \frac{1}{\mu_a + (1-g)\mu_s} \tag{2.3}$$

zusammen. Der Absorptionskoeffizient μ_a und der Streukoeffizient μ_s entsprechen der Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon auf einer infinitesimalen Wegstrecke absorbiert bzw. gestreut wird. Der Kehrwert dieser Größen gibt die mittlere freie Weglänge für Absorption und Streuung an. Der auftretende Anisotropiefaktor g ist gleich dem mittleren Kosinus $< \cos\theta >$ des Streuwinkels. Neben der Fluenz ist die Photonenstromdichte mit der allgemeinen Definition [14, 17]

$$\vec{J}(\vec{r}) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \vec{\Omega} \mathrm{d}\Omega. \tag{2.4}$$

eine weitere wichtige Größe. Innerhalb der Diffusionstheorie wird diese aus dem Gradienten der Fluenz [17]

$$\vec{J}(\vec{r}) = -D\nabla\Phi(\vec{r}) \tag{2.5}$$

gebildet. Es handelt sich hierbei um das erste Fick'sche Gesetz. Die Lösung der RTE ist die sogenannte Strahldichte. Die Diffusionstheorie als Entwicklungsstufe beinhaltet die approximierte Version der Strahldichte [17]

$$\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}\Phi(\vec{r}) + \frac{3}{4\pi}\vec{J}(\vec{r})\cdot\vec{\Omega}. \tag{2.6}$$

Diese Größe bildet die Basis zur Berechnung des an der Mediumsgrenze reflektierten Lichts $R(\vec{r})$. Unter Berücksichtigung der oben angegebenen Beziehung ergibt die allgemeine Reflektanzgleichung [15, 18]

$$R(\vec{r}) = \int\limits_{\vec{\Omega}\cdot\vec{n}>0} [1 - R_{fres}(\vec{\Omega}\cdot\vec{n})](\vec{\Omega}\cdot\vec{n})\,\psi(\vec{r},\vec{\Omega})\mathrm{d}\Omega \tag{2.7}$$

für Orte $\vec{r}\in\partial V$ den im Rahmen der Diffusionstheorie geltenden Ausdruck

$$R(\vec{r}) = \left(\frac{1}{4} - \frac{R_1}{2}\right)\Phi(\vec{r}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{3R_2}{2}\right)\vec{J}(\vec{r})\cdot\vec{n}. \tag{2.8}$$

Der Vektor $\vec{n}$ charakterisiert die nach außen weisende Flächennormale. Die Koeffizienten R_n $(n = 1, 2)$ sind abhängig vom Verhältnis aus den Brechungsindizes zwischen dem Medium und der Umgebung. Allgemein werden diese aus

$$R_n = \int\limits_0^1 \tau^n R_{fres}(\tau)\mathrm{d}\tau, \quad n = 1, 2, ... \tag{2.9}$$

berechnet [9]. Der Wert für die Reflektivität wird wie folgt bestimmt. Zuerst wird der kritische Winkel der totalen Reflexion aus $\theta_c = \arcsin(n_e/n)$ gebildet. Für $n_e > n$ wird $\theta_c = \pi/2$ gesetzt. Falls $\theta < \theta_c$ ist, gilt [18]

$$R_{fres}(\cos\theta) = \frac{1}{2}\left(\frac{n\cos\theta\,' - n_e\cos\theta}{n\cos\theta\,' + n_e\cos\theta}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{n\cos\theta - n_e\cos\theta\,'}{n\cos\theta + n_e\cos\theta\,'}\right)^2, \tag{2.10}$$

wobei sich der Winkel $\theta\,' = \arcsin(n/n_e\sin\theta)$ über das Brechungsgesetz von Snellius ausdrücken lässt. Für den Fall $\theta \geq \theta_c$ nimmt die Reflektivität den Wert $R_{fres}(\tau) = 1$ an.
Das transmittierte Licht an der Mediumsgrenze ∂V wird über das Fick'sche Gesetz zu

$$T(\vec{r}) = -D\vec{n}\cdot\nabla\Phi(\vec{r}), \quad \vec{r}\in\partial V, \tag{2.11}$$

bestimmt [17].
Zur Definition von Mediumsgrenzen ist die DE unter Einbezug von Randbedingungen

zu lösen. Innerhalb der Transporttheorie wird als Randbedingung ein Verschwinden der Strahldichte auf der Mediumsgrenze ∂V für sämtliche in das Medium weisende Betrachtungsrichtungen $\vec{\Omega}$ gefordert. Mathematisch formuliert lautet diese Bedingung

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = 0 \quad \text{für} \quad \vec{r} \in \partial V \wedge \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0. \tag{2.12}$$

Innerhalb der Diffusionstheorie kann diese Randbedingung nicht mehr exakt erfüllt werden. Die Beschreibung der Lichtausbreitung unter Verwendung dieser vereinfachten Theorie erfordert entsprechend angepasste Randbedingungen, um Abweichungen zur Transporttheorie möglichst gering zu halten. Die oben angeführte Randbedingung wird innerhalb der Diffusionstheorie durch das Verschwinden der nach innen gerichteten Photonenstromdichte

$$\int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{n}<0} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})\vec{\Omega}\mathrm{d}\Omega = 0 \tag{2.13}$$

approximiert. Daraus resultiert die Dirichlet-Neumann-Randbedingung

$$\Phi(\vec{r}) + 2AD\vec{n} \cdot \nabla\Phi(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \in \partial V, \tag{2.14}$$

wobei der Faktor A vom Brechungsindexunterschied an der Mediumsgrenze abhängt und aus [19]

$$A = \frac{1 + 3R_2}{1 - 2R_1} \tag{2.15}$$

gebildet wird. Im Jahre 1994 wurden von Haskell *et al.* [18] die *extrapolated-boundary condition* (EBC) zur Verbesserung der Ergebnisse der Diffusionstheorie veröffentlicht. Die EBC entspricht einer Approximation der Dirichlet-Neumann-Randbedingung und reduziert diese auf die reine Dirichlet-Randbedingung

$$\Phi(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \in \partial V'. \tag{2.16}$$

Hierbei wird das ursprüngliche Volumen des Mediums V auf das extrapolierte Volumen V' vergrößert. Die einfachste, jedoch aus Sicht der Transporttheorie falsche Bedingung, ist die Forderung nach dem Verschwinden der Fluenz auf der Mediumsgrenze. Bei dieser Randbedingung handelt es sich um die sogenannte *zero-boundary condition* (ZBC).
Die bisherigen Ergebisse sind direkt auf den zeitabhängigen Fall übertragbar. Die entsprechende Diffusionsgleichung entsteht aus (2.1) durch Hinzufügen der zeitlichen Ableitung der Fluenz und lautet [11]

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{r}, t) + \mu_a\Phi(\vec{r}, t) - D\nabla^2\Phi(\vec{r}, t) = S(\vec{r}, t). \tag{2.17}$$

Ein ganz ähnlicher Zusammenhang existiert auch bei der Strahlungstransfergleichung. Im Unterschied zur DE wird dort die zeitliche Änderung der Strahldichte hinzugefügt. In vielen Fällen bietet sich zur Ermittlung zeitabhängiger Ergebnisse der Umweg über

den Frequenzbereich an. Wird in der zeitunabhängigen DE der reelle Absorptionskoeffizient μ_a durch die komplexwertige Größe $\mu_a + j\omega/c$ ersetzt und eine inverse Fouriertransformation durchgeführt, erhält man exakt das Ergebnis der zeitabhängigen DE. Im Verlauf dieser Arbeit werden Ergebnisse für den Zeitbereich nahezu ausnahmslos über diesen Weg ermittelt.
Die Diffusionsgleichung entspricht aus Sicht der Systemtheorie einem linearen zeitinvarianten System, welches durch seine Impulsantwort charakterisiert ist. In diesem Zusammenhang wird die Impulsantwort als die sogenannte Greensche Funktion bezeichnet. Abbildung 2.1 zeigt schematisch den Zusammenhang zwischen der Quelle, der Greenschen Funktion und der resultierenden Fluenz.

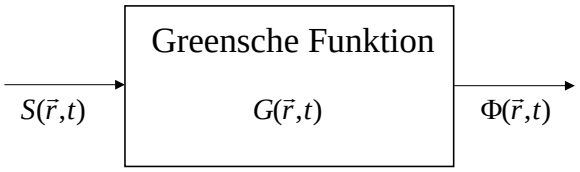

Abbildung 2.1: Lineares zeitinvariantes System.

Der Eingang und Ausgang sind über die Faltung miteinander verknüpft. Ist die Greensche Funktion einmal bestimmt, so ist jede weitere spezielle Lösung über das Faltungsintegral gegeben [20]. Diese Eigenschaft wird beispielsweise zur Simulation verschiedener Einstrahlprofile wie das Topf- oder Gauß-Profil verwendet.
Die Diffusionsgleichung des nicht absorbierenden Mediums besitzt die Form der Wärmeleitunsgleichung [21]. Die im Rahmen dieser Arbeit ermittelten Lösungen sind somit auf Problemstellungen der Wärmeausbreitung übertragbar. Weitherhin lassen sich durch geeignete Substitutionen die Formen der Helmholtz- und Telegraphengleichung (TE) herstellen. Letzterer Gleichungstyp wird im Kapitel der *Simplified Spherical Harmonics* Methode gesondert behandelt.

3 Diffusionsgleichung für lateral unbegrenzte Medien

3.1 Greensche Funktion der homogenen Schicht

In diesem Abschnitt wird die Greensche Funktion eines homogenen Mediums der Dicke L bestimmt und gleichzeitig wichtige Beziehungen und Korrespondenzen für die spätere Analyse homogener und inhomogener Strukturen mit einer endlichen Oberfläche ∂V abgeleitet. Ein schematischer Aufbau der betreffenden Geometrie ist in Abbildung 3.1 unter Angabe von optischen und geometrischen Größen zu sehen.

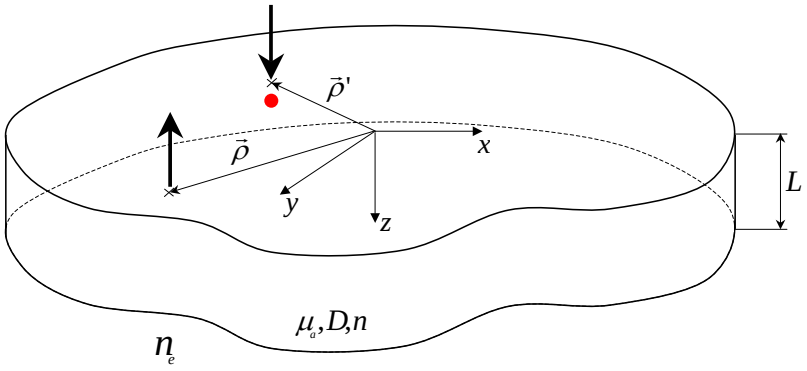

Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau eines homogenen Mediums.

Es werden zwei verschiedene Lösungswege aufgezeigt. Der erste basiert auf der Methode der gespiegelten Quellen, beginnt mit der Bestimmung der Greenschen Funktion des unendlichen Raumes und endet in der Positionierung von Spiegelquellen zur Ausbildung von Grenzflächen zwischen Medium und Umgebung. Bei der zweiten Methode wird die Endlichkeit der Schichtdicke ausgenutzt und mit periodischen Randbedingungen gearbeitet. Mit der Entwicklung der Greenschen Funktion nach orthogonalen Basisfunktionen lässt sich die Anzahl der partiellen Ableitungen innerhalb der Diffusionsgleichung reduzieren. Die vorgegebenen Randbedingungen werden hierbei bereits mit der Wahl eines entsprechenden Basissystems berücksichtigt.
Im Verlauf dieser Arbeit werden Impulsantworten der Diffusionsgleichung in verschiedenen Dimensionen benötigt. Um diesbezüglich allgemein zu bleiben, wird bei der ersten der beiden genannten Methoden von der n-dimensionalen Diffusionsgleichung ausgegangen.

Methode der gespiegelten Quellen

Die zeitabhängige Diffusionsgleichung des n-dimensionalen Raumes ist durch die partielle Differentialgleichung

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} G(\vec{x},t) - \frac{\mu_a}{D} G(\vec{x},t) - \frac{1}{Dc}\frac{\partial}{\partial t} G(\vec{x},t) = -\frac{1}{D} S(\vec{x},t) \tag{3.1}$$

mit den Koordinaten $\vec{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$ gegeben. Als Quelle wird in den folgenden Herleitungen die Distribution $S(\vec{x},t) = \delta(\vec{x})\delta(t)$ angesetzt. Bis auf ein Verschwinden der Greenschen Funktion nach sehr langer Zeit und für unendlich große Abstände zur Quelle sind vorerst keine weiteren Randbedingungen vorgegeben. Der Quellterm wird daher nach den Wellen

$$\delta(\vec{x})\delta(t) = \frac{\delta(t)}{(2\pi)^n} \iiint_{\mathbb{R}^n} \cdots \iint e^{-j\vec{k}\cdot\vec{x}} \mathrm{d}^n k, \tag{3.2}$$

mit dem Wellenvektor $\vec{k} = (k_1, k_2, ..., k_n)^T$, entwickelt. Die gesuchte Greensche Funktion wird mit

$$G(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \iiint_{\mathbb{R}^n} \cdots \iint G(\vec{k},t) e^{-j\vec{k}\cdot\vec{x}} \mathrm{d}^n k \tag{3.3}$$

angesetzt. Durch Einsetzen beider Entwicklungen in (3.1) entsteht die gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t} G(\vec{k},t) + (\mu_a c + k_1^2 + k_2^2 + \cdots + k_n^2) G(\vec{k},t) = c\delta(t). \tag{3.4}$$

Die Lösung dieser Gleichung entspricht der Impulsantwort eines Tiefpasses 1. Ordnung [20]

$$G(\vec{k},t) = ce^{-\mu_a ct} e^{-Dck^2 t} \Theta(t). \tag{3.5}$$

In dieser Arbeit treten abgesehen von den zweiseitigen harmonischen Eigenfunktionen $e^{j\omega t}$ ausschließlich kausale Zeitfunktionen auf. Die explizite Kenntlichmachung der Kausalität mittels Sprungfunktion entfällt, stattdessen werden Ausnahmefälle hervorgehoben. Die Rücktransformation in den Ortsbereich erfolgt mit Verwendung eines bekannten Transformationspaares der eindimensionalen Signaltheorie [20]

$$e^{-Dck_1^2 t} \quad \bullet\!\!-\!\!\circ \quad \frac{1}{\sqrt{4\pi Dct}} e^{-\frac{x_1^2}{4Dct}}. \tag{3.6}$$

Die Ausnutzung der Produktform ergibt für die n-dimensionale zeitabhängige Greensche Funktion

$$\begin{aligned} G(r,t) &= ce^{-\mu_a ct} \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dck_i^2 t} e^{-jk_i x_i} \mathrm{d}k_i \right) \\ &= \frac{c}{(4\pi Dct)^{n/2}} e^{-\mu_a ct} e^{-\frac{r^2}{4Dct}}, \end{aligned} \tag{3.7}$$

mit $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$ als Abstand zur Quelle. Die Antwort auf eine beliebige Quelle $S(\vec{x}, t)$ ist über das Faltungsintegral

$$\Phi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \iiint_{\mathbb{R}^n} \cdots \iint G(\vec{x}', t') S(\vec{x} - \vec{x}', t - t') \mathrm{d}^n x' \mathrm{d}t' \tag{3.8}$$

ermittelbar. Mit der Integration der zeitabhängigen Funktion

$$G(r) = \int_{-\infty}^{\infty} G(r, t) \mathrm{d}t \tag{3.9}$$

entsteht die Lösung im Steady-State-Bereich. Ein in [22] zu findendes Integral ergibt die ortsabhängige Fluenz

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{\nu+1} D} \left(\frac{\mu_{eff}}{r}\right)^{\nu} K_\nu(\mu_{eff} r), \quad \mu_{eff} = \sqrt{\frac{\mu_a}{D}}, \qquad \nu = n/2 - 1. \tag{3.10}$$

Die bisher ermittelten Ergebnisse sollen zur Begrenzung des dreidimensionalen infiniten Mediums auf ein semi-infinites herangezogen werden. Die isotrop abstrahlende punktförmige Quelle ist durch $S(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z - z_0)$ vorgegeben. In Gleichung (3.10) wird $n = 3$ gesetzt und die Beziehung der modifizierten Besselfunktion

$$K_{1/2}(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} e^{-r} \tag{3.11}$$

berücksichtigt. Es resultiert die Photonendichtewelle des infiniten Mediums

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi D} \frac{e^{-\mu_{eff} |\vec{r} - \vec{r}_0|}}{|\vec{r} - \vec{r}_0|}. \tag{3.12}$$

Die Ausbildung der Grenzfläche $z = 0$ erfolgt mit der EBC $G(\rho, z = -z_b) = 0$. Die Greensche Funktion wird hierfür an der Ebene $z = -z_b = -2AD$ gespiegelt und mit einem entgegengesetzten Vorzeichen versehen. In Abbildung 3.2 wird das Vorgehen graphisch aufgezeigt, wobei ein nicht ausgefüllter Kreis eine Spiegelquelle repräsentiert. Die extrapolierte Grenzfläche entspricht der gestrichelten Linie.

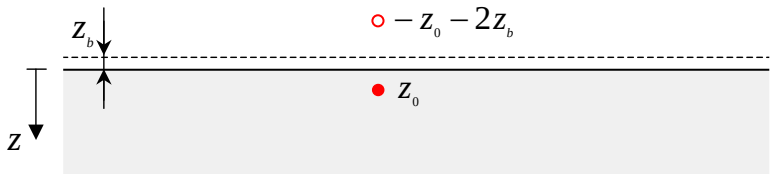

Abbildung 3.2: Quellenanordnung für ein semi-infinites Medium.

Durch Überlagerung beider Funktionen entsteht das semi-infinite Medium. Die Fluenz im Steady-State-Bereich lautet unter Verwendung der Koordinaten $z_0^+ = z_0$ und $z_0^- = -z_0 - 2z_b$

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi D}\left(\frac{e^{-\mu_{eff} r_1}}{r_1} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_2}}{r_2}\right), \tag{3.13}$$

mit den Abständen

$$r_1 = \sqrt{\rho^2 + (z - z_0^+)^2},$$
$$r_2 = \sqrt{\rho^2 + (z - z_0^-)^2}.$$

Diese Ergebnis ist unmittelbar auf den Zeitbereich übertragbar. Durch Spiegelung der zeitabhängigen Fluenz des infiniten Raumes findet sich für das semi-infinite Medium

$$G(\vec{r}, t) = \frac{c}{(4\pi Dct)^{3/2}} e^{-\mu_a ct} e^{-\frac{\rho^2}{4Dct}} \left[e^{-\frac{(z-z_0^+)^2}{4Dct}} - e^{-\frac{(z-z_0^-)^2}{4Dct}}\right]. \tag{3.14}$$

Zur Begrenzung des unendlich ausgedehnten Mediums auf ein semi-infinites ist eine einzige Spiegelquelle ausreichend. Eine endliche Schicht erfordert darüber hinaus die Einhaltung der Bedingung $G(\rho, z = L') = 0$. Zur Veranschaulichung hilft die Vorstellung an die brennende Kerze zwischen zwei Spiegeln weiter. Scheinbar gibt es unendlich viele Kopien von dieser. Abbildung 3.3 zeigt die Anordnung der verschiedenen Quellen. Übertragen auf die vorliegende Aufgabenstellung entsprechen die Ebenen mit den Gleichungen $z = -z_b$ und $z = L + z_b$ den zwei benötigten Spiegeln. Die z-Koordinaten der Spiegelquellen mit positiven Vorzeichen sind $z_k^+ = 2kL + 4kz_b + z_0$, für die negativen gilt $z_k^- = 2kL + (4k-2)z_b - z_0$, wobei $k \in \mathbb{Z}$ ist. Aufgrund der Linearitätseigenschaft der DE ist die Fluenz des homogenen Mediums der Dicke L die Überlagerung aus sämtlichen Quellen

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi D} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{-\mu_{eff} r_k^+}}{r_k^+} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_k^-}}{r_k^-}\right), \tag{3.15}$$

mit

$$r_k^+ = \sqrt{\rho^2 + (z - z_k^+)^2},$$
$$r_k^- = \sqrt{\rho^2 + (z - z_k^-)^2}. \tag{3.16}$$

Die Überführung dieses Ergebnisses in den Zeitbereich bringt für die Fluenz die Funktion

$$G(\vec{r}, t) = \frac{c}{(4\pi Dct)^{3/2}} e^{-\mu_a ct} e^{-\frac{\rho^2}{4Dct}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{(z-z_k^+)^2}{4Dct}} - e^{-\frac{(z-z_k^-)^2}{4Dct}}\right]. \tag{3.17}$$

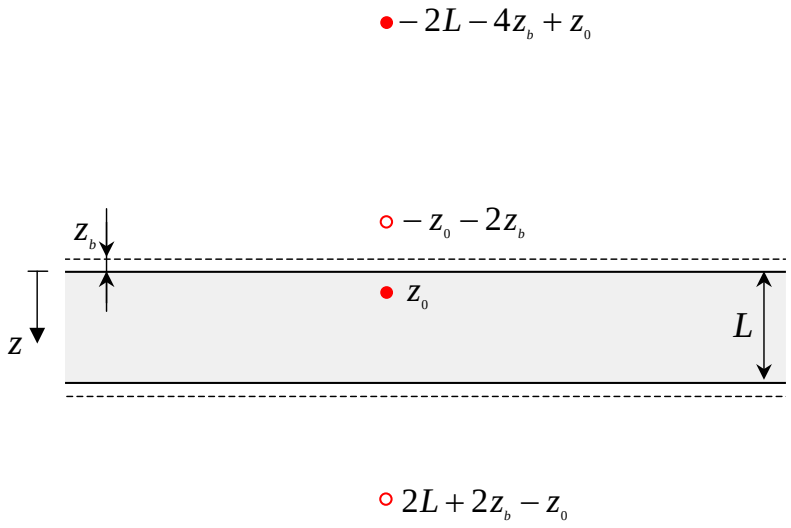

Abbildung 3.3: Quellenanordnung für eine Schicht.

Entwicklung nach Eigenfunktionen

Für ein Medium der Schichtdicke L sind Lösungen der DE ausschließlich im Intervall $0 \leq z \leq L$ zu betrachten. Es bietet sich daher an, die gesuchte Lösungsfunktion bezüglich der z-Koordinate nach orthogonalen Basisfunktionen $\phi_l(z)$ mit zugehörigen Koeffizienten G_l zu entwickeln. Aufgrund der Beschränktheit des Intervalls auf der z-Achse, kann der gesuchten Lösung ein periodischer Verlauf unterstellt werden. Im vorliegenden Fall wird mit periodischen Randbedingungen gearbeitet. Die Greensche Funktion wird in der Reihendarstellung

$$G(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} G_l(x,y)\phi_l^*(z_0)\phi_l(z) \tag{3.18}$$

und unter Berücksichtigung der Vollständigkeitsrelation

$$\delta(z-z_0) = \sum_{l=1}^{\infty} \phi_l^*(z_0)\phi_l(z) \tag{3.19}$$

angesetzt. Die Orthogonalenentwicklung entspricht hier der Darstellung einer periodischen Funktion durch deren Fourierreihe. Entsprechend angepasste Eigenfunktionen mit zugehörigen Eigenwerten sind

$$\phi_l(z) = \sqrt{\frac{2}{L+2z_b}}\sin[\lambda_l(z+z_b)], \quad \lambda_l = l\pi/(L+2z_b). \tag{3.20}$$

Das Einsetzen der Reihendarstellungen in (3.1) für $n=3$ bringt nach einem Vergleich die zweidimensionale Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}G_l(x,y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}G_l(x,y) - \alpha^2 G_l(x,y) = -\frac{1}{D}\delta(x)\delta(y), \tag{3.21}$$

mit $\alpha^2 = \mu_{eff}^2 + \lambda_l^2$. Die Lösung dieser Gleichung ist bereits mit der Vorarbeit aus dem ersten Teil bekannt und folgt aus (3.10) für $n = 2$ zu

$$G_l(\rho) = \frac{K_0(\alpha\rho)}{2\pi D}. \tag{3.22}$$

Mit den gefundenen Entwicklungskoeffizienten ist

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi D} \sum_{l=1}^{\infty} K_0(\alpha\rho)\phi_l^*(z_0)\phi_l(z) \tag{3.23}$$

eine Alternative zu (3.15). Zur Bestimmung des zeitabhängigen Pendants wird (3.7) für $n = 2$ verwendet. Das Äquivalent zu unendlich vielen Spiegelquellen stellt

$$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\mu_a ct} e^{-\frac{\rho^2}{4Dct}} \sum_{l=1}^{\infty} e^{-Dc\lambda_l^2 t} \phi_l^*(z_0)\phi_l(z) \tag{3.24}$$

dar. Da (3.17) und (3.24) beides zeitabhängige Lösungen der dreidimensionalen DE für ein homogenes Medium sind, ist sowohl

$$G(z, t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{c}{D\pi t}} e^{-\mu_a ct} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{(z-z_k^+)^2}{4Dct}} - e^{-\frac{(z-z_k^-)^2}{4Dct}} \right] \tag{3.25}$$

als auch

$$G(z, t) = ce^{-\mu_a ct} \sum_{l=1}^{\infty} e^{-Dc\lambda_l^2 t} \phi_l^*(z_0)\phi_l(z) \tag{3.26}$$

Lösung des eindimensionalen Randwertproblems

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} G(z, t) + \mu_a G(z, t) - D\frac{\partial^2}{\partial z^2} G(z, t) = \delta(z - z_0)\delta(t) \tag{3.27}$$

mit $G(z = -z_b, t) = G(z = L', t) = 0$. Von diesem Zusammenhang wird im weiteren Verlauf der Arbeit noch Gebrauch gemacht.

3.2 Modell für ein N-schichtiges Medium

Zur Bestimmung der Lichtausbreitung in einem geschichteten Medium ist die Diffusiongleichung unter Einbezug von Randbedingungen innerhalb des Mediums zu lösen. In der Theorie der partiellen Differentialgleichungen stellen die Integraltransformationen sowie der Separationsansatz mit zugehöriger Eigenwertbestimmung die klassischen Methoden und Verfahren zur Ermittlung analytischer Lösungen dar [23]. Von Seiten der Numerik sind die Finite-Differenzen-Methode [24], die Finite-Elemente-Methode [25] und die Randelementmethode [26] zu nennen. In zurückliegenden Jahren wurde die zeitabhängige DE mit einem Separationsansatz für ein zwei- und dreischichtiges Medium mit zylindrischer Berandung von Martelli *et al.* [27, 28] gelöst. Die auftretende Eigenwertgleichung ist relativ kompliziert, da sowohl reelle als auch imaginäre Eigenwerte auftreten und hierzu zahlreiche Fallunterscheidungen erforderlich sind. Ein Rückschluss auf die Lösung für eine beliebige Schichtenanzahl N ist mit dieser Methode unwahrscheinlich. Dieses Kapitel der Arbeit beinhaltet die Herleitung der Lösung für ein inhomogenes, vorerst lateral unendlich ausgedehntes Medium bestehend aus beliebig vielen Schichten unter Verwendung von Integraltransformationen. Die Herangehensweise basiert auf der Arbeit von Kienle *et al.* [19], in welcher die Lösung der DE für ein zweischichtiges semi-infinites Medium präsentiert wurde.
Die isotrop abstrahlende Punktquelle wird entlang der positiven z-Achse in der Tiefe $z' = z_0 = 1/(\mu_{a1} + \mu'_{s1})$ positioniert.

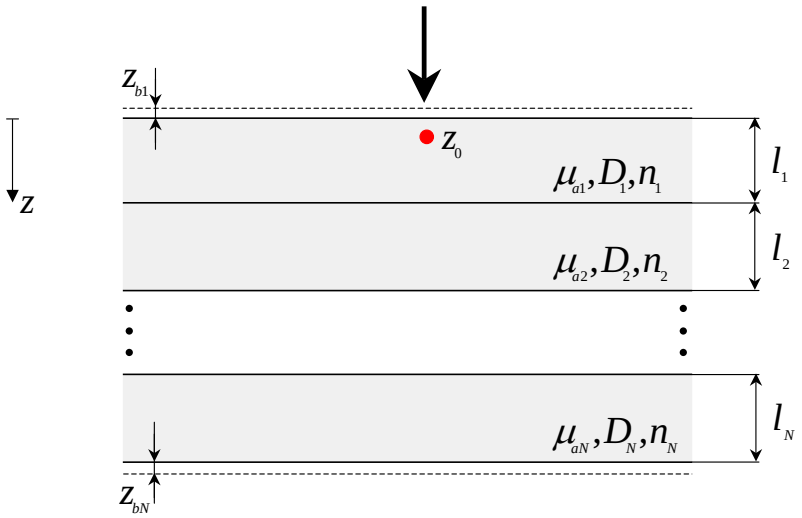

Abbildung 3.4: N-schichtiges Medium.

Das Ziel ist die Lösung der Diffusionsgleichung für die Quelle $S(\vec{r}, t) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t)$. Beginnend im Steady-State-Bereich lautet die zu lösende Gleichung

$$\nabla^2 G(\vec{r}) - \mu_{eff}^2 G(\vec{r}) = -\frac{1}{D}\delta(x)\delta(y)\delta(z - z_0). \tag{3.28}$$

Aufgrund der lateralen Unendlichkeit des Modells liegt eine zylindersymmetrische Anordnung vor. Es bietet sich die Verwendung von Zylinderkoordinaten an. Der Laplace-Operator besitzt in diesem Fall keine azimutale Abhängigkeit, wodurch Gleichung (3.28) als

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}G(\rho,z)+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}G(\rho,z)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}G(\rho,z)-\mu_{eff}^2G(\rho,z)=-\frac{1}{2\pi D\rho}\delta(\rho)\delta(z-z_0) \quad (3.29)$$

geschrieben werden kann. Für dieses Modell sind bis auf

$$\lim_{\rho\to\infty}G(\rho,z)=0 \quad (3.30)$$

keine lateralen Randbedingungen vorgegeben. Es wird daher die Greensche Funktion für zwei Dimensionen nach den Wellen $e^{j\vec{\rho}\cdot\vec{k}}$ entwickelt. Für zylindersymmetrische Signale besteht insbesondere die Möglichkeit, diese Entwicklung auf eine Dimension zu reduzieren. Im Ortsbereich, als auch im transformierten Bereich werden Polarkoordinaten eingeführt und in die Definitionsgleichung der inversen Fouriertransformation

$$G(x,y)=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}G(k_1,k_2)e^{-j(k_1x+k_2y)}\mathrm{d}k_1\mathrm{d}k_2 \quad (3.31)$$

eingesetzt. Dies ergibt

$$\begin{array}{l|l} x=\rho\cos\phi & k_1=k\cos\theta \\ y=\rho\sin\phi & k_2=k\sin\theta \end{array} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow G(\rho)&=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}G(k)e^{-j(k\cos\theta\rho\cos\phi+k\sin\theta\rho\sin\phi)}k\mathrm{d}k\mathrm{d}\theta \\ &=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}G(k)\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}e^{-jk\rho\cos(\theta-\phi)}\mathrm{d}\theta k\mathrm{d}k=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}G(k)J_0(k\rho)k\mathrm{d}k. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Die gesuchte Greensche Funktion wird in der Darstellung

$$G(\rho,z)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}G(k,z)J_0(k\rho)k\mathrm{d}k \quad (3.34)$$

angesetzt. Für die isotrope Quelle findet sich entsprechend

$$S(\rho,z)=\frac{1}{2\pi\rho}\delta(\rho)\delta(z-z_0)=\frac{1}{2\pi}\delta(z-z_0)\int_0^{\infty}J_0(k\rho)k\mathrm{d}k. \quad (3.35)$$

Diese Entwicklungform für zweidimensionale Signale wird in der Literatur mit Hankeltransformation bezeichnet [29]. Die formulierten Ausdrücke für die Fluenz (3.34) und

des Quellterms (3.35) werden in (3.29) eingesetzt. Ein Vergleich beider Seiten bringt die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}G(k,z) - \alpha^2 G(k,z) = -\frac{1}{D}\delta(z - z_0), \tag{3.36}$$

mit $\alpha^2 = \mu_{eff}^2 + k^2$. Die Lösung dieser Gleichung ist die abschnittsweise definierte Funktion $G(k,z)$ mit den Teilfunktionen $G_n(k,z)$ $(n = 1, 2, ..., N)$. Der Index n korrespondiert mit der n-ten Schicht des Mediums und mit dem Teilintervall $L_{n-1} \leq z < L_n$. Die Größe L_n entspricht der Summe der ersten n Schichtdicken und ist durch $L_n = \sum_{i=1}^{n} l_i$ gegeben. Zur Bestimmung der Lösung wird ein Ansatz in Form einer Kombination aus homogener und partikulärer Lösung formuliert. Das Fundamentalsystem der Gleichung (3.36) bilden die Exponentialfunktionen $\{e^{\pm\alpha z}\}$. Als allgemeine Lösung wird

$$G(k,z) = \begin{cases} G_1(k,z) = G_1^{(h)}(k,z) + G_1^{(p)}(k,z), & 0 \leq z < L_1 \\ G_n(k,z) = G_n^{(h)}(k,z), & L_{n-1} \leq z < L_n \end{cases} \tag{3.37}$$

angesetzt. Der partikuläre Anteil tritt lediglich im Bereich $0 \leq z < L_1$ auf, da die Punktquelle vorerst in der ersten Schicht angenommen wird. Dieser Anteil entspricht der Impulsantwort der Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}G_1^{(p)}(k,z) - \alpha_1^2 G_1^{(p)}(k,z) = -\frac{1}{D_1}\delta(z - z_0). \tag{3.38}$$

Das Ergebnis ergibt sich unmittelbar aus Beziehung (3.10) für $n = 1$ zu

$$G_1^{(p)}(k,z) = \frac{e^{-\alpha_1|z-z_0|}}{2D_1\alpha_1}. \tag{3.39}$$

Der Ansatz für die Gesamtlösung lautet nun

$$G(k,z) = \begin{cases} A_1 e^{\alpha_1 z} \; + \; B_1 e^{-\alpha_1 z} + \frac{e^{-\alpha_1|z-z_0|}}{2D_1\alpha_1}, & 0 \leq z < L_1 \\ A_n e^{\alpha_n z} \; + \; B_n e^{-\alpha_n z}, & L_{n-1} \leq z < L_n\,, \end{cases} \tag{3.40}$$

mit $\alpha_n = \sqrt{\mu_{an}/D_n + k^2}$. Die Koeffizienten A_n und B_n werden durch Einarbeitung der Randbedingungen [17, 30]

$$\begin{aligned} &G(k, z = -z_{b1}) = 0, \\ &n_{n+1}^2 G(k, z = L_n^-) = n_n^2 G(k, z = L_n^+), \\ &D_n \partial_z G(k, z = L_n^-) = D_{n+1} \partial_z G(k, z = L_n^+), \\ &G(k, z = L_N + z_{bN}) = 0, \end{aligned} \tag{3.41}$$

festgelegt. Mit der Aufstellung der Bedingungsgleichungen resultiert ein lineares Gleichungssystem mit $2N$ Unbekannten, welches für bis zu vier Schichten explizit gelöst

wurde. Im Verlauf der algebraischen Umformung und Zusammenfassung kam die Vermutung auf, dass sich die Lösungsfunktionen nach einer bestimmten Systematik entwickeln lassen. Die Annahme wurde in Form einer Abwärtsrekursion mit zugehörigen Startwerten formuliert. Für eine gegebene Schichtenanzahl N bilden

$$\begin{aligned}
\beta_{N-1} &= \sinh[\alpha_N(l_N + z_{bN})],\\
\gamma_{N-1} &= \cosh[\alpha_N(l_N + z_{bN})],\\
\beta_{N-2} &= D_{N-1}\alpha_{N-1}n_{N-1}^2\cosh(\alpha_{N-1}l_{N-1})\beta_{N-1} + D_N\alpha_N n_N^2\sinh(\alpha_{N-1}l_{N-1})\gamma_{N-1},\\
\gamma_{N-2} &= D_{N-1}\alpha_{N-1}n_{N-1}^2\sinh(\alpha_{N-1}l_{N-1})\beta_{N-1} + D_N\alpha_N n_N^2\cosh(\alpha_{N-1}l_{N-1})\gamma_{N-1},
\end{aligned} \tag{3.42}$$

die Startwerte für die Rekursionsformeln

$$\begin{aligned}
\beta_n &= D_{n+1}\alpha_{n+1}n_{n+1}^2\cosh(\alpha_{n+1}l_{n+1})\beta_{n+1} + D_{n+2}\alpha_{n+2}n_{n+2}^2\sinh(\alpha_{n+1}l_{n+1})\gamma_{n+1},\\
\gamma_n &= D_{n+1}\alpha_{n+1}n_{n+1}^2\sinh(\alpha_{n+1}l_{n+1})\beta_{n+1} + D_{n+2}\alpha_{n+2}n_{n+2}^2\cosh(\alpha_{n+1}l_{n+1})\gamma_{n+1}.
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Mit Verwendung der rekursiven Beziehungen in absteigender Form bis zum Erreichen der Werte β_1 und γ_1, findet sich die Lösung der Diffusionsgleichung für ein N-schichtiges Medium. Die analytischen Ausdrücke im transformierten Bereich lauten für $0 \le z < L_1$

$$\begin{aligned}
G_1(k,z) =& \frac{e^{-\alpha_1|z-z_0|} - e^{-\alpha_1(z+z_0+2z_{b1})}}{2D_1\alpha_1} + \frac{\sinh[\alpha_1(z_0+z_{b1})]\sinh[\alpha_1(z+z_{b1})]}{D_1\alpha_1 e^{\alpha_1(l_1+z_{b1})}}\\
&\times \frac{D_1\alpha_1 n_1^2\beta_1 - D_2\alpha_2 n_2^2\gamma_1}{D_1\alpha_1 n_1^2\beta_1\cosh[\alpha_1(l_1+z_{b1})] + D_2\alpha_2 n_2^2\gamma_1\sinh[\alpha_1(l_1+z_{b1})]},
\end{aligned}$$

für $L_{n-1} \le z < L_n$

$$\begin{aligned}
G_n(k,z) =& n_n^2\sinh[\alpha_1(z_0+z_{b1})]\prod_{\nu=2}^{n-1}(D_\nu\alpha_\nu n_\nu^2)\\
&\times \frac{D_n\alpha_n n_k^2\beta_n\cosh[\alpha_n(L_n-z)] + D_{n+1}\alpha_{n+1}n_{n+1}^2\gamma_n\sinh[\alpha_n(L_n-z)]}{D_1\alpha_1 n_1^2\beta_1\cosh[\alpha_1(l_1+z_{b1})] + D_2\alpha_2 n_2^2\gamma_1\sinh[\alpha_1(l_1+z_{b1})]}
\end{aligned}$$

und für $L_{N-1} \le z < L_N$

$$G_N(k,z) = \frac{n_N^2\prod_{i=2}^{N-1}(D_i\alpha_i n_i^2)\sinh[\alpha_1(z_0+z_{b1})]\sinh[\alpha_N(L_N+z_{bN}-z)]}{D_1\alpha_1 n_1^2\beta_1\cosh[\alpha_1(l_1+z_{b1})] + D_2\alpha_2 n_2^2\gamma_1\sinh[\alpha_1(l_1+z_{b1})]}. \tag{3.44}$$

Der Wechsel in den Ortsbereich erfolgt über die inverse Hankeltransformation aus Gleichung (3.34). Die erforderliche numerische Integration lässt sich problemlos mit einer Gauß-Quadratur bewältigen. Zur Bestimmung von zeitabhängigen Ergebnissen werden die Absorptionskoeffizienten μ_{an} durch die komplexwertigen Größen $\mu_{an} + j\omega/c_n$

ersetzt und anschließend eine inverse Fouriertransformation durchgeführt.
Die Greensche Funktion ist eine kausale Zeitfunktion. Die Konsequenz dieser Eigenschaft soll etwas näher erläutert werden. Jedes Signal lässt sich in einen geraden und ungeraden Anteil splitten. Beide Anteile sind im Falle eines kausalen Signals über die Signum-Funktion miteinander verknüpft [20]

$$G_g(\vec{r},t) = G_u(\vec{r},t)\,\mathrm{sgn}(t). \tag{3.45}$$

Der gerade Anteil korrespondiert im Spektrum mit dem Realteil, der ungerade mit dem Imaginärteil. Im transformierten Bereich entsteht

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\{G(\vec{r},\omega)\} &= \frac{j}{2\pi}\,\mathrm{Im}\{G(\vec{r},\omega)\} * \frac{2}{j\omega} \\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}\{G(\vec{r},\kappa)\}}{\omega-\kappa}\mathrm{d}\kappa = \mathcal{H}\{\mathrm{Im}\{G(\vec{r},\omega)\}\}.\end{aligned} \tag{3.46}$$

Der Real- und Imaginärteil stehen über die Hilbertransformation [20] bzw. der Kramers-Kronig-Relation in Beziehung. Prinzipiell würde die Rücktransformation in den Zeitbereich für einen dieser Anteile genügen. Bezogen auf den Rechenaufwand ergeben sich jedoch keine bedeutsamen Vorteile.
Die hergeleitete Lösung wird für ein 6-schichtiges Medium mit den in Tabelle 3.1 aufgeführten optischen und geometrischen Eigenschaften

Tabelle 3.1: Eigenschaften des 6-schichtigen Mediums

Schicht	μ_s' [mm^{-1}]	μ_a [mm^{-1}]	n	l [mm]
1	1.0	0.01	1.4	6
2	0.8	0.02	1.3	8
3	1.1	0.009	1.2	7
4	0.7	0.015	1.5	4
5	1.2	0.03	1.6	5
6	0.9	0.025	1.4	10

über die Monte Carlo Methode auf Korrektheit überprüft. Die rein ortsabhängige Lösung findet sich durch Integration der Zeitfunktion. Es wird daher ein Vergleich zum allgemeineren Fall der zeitaufgelösten Monte Carlo Methode angestellt. Zuvor wird die frequenzabhängige Funktion $G(\vec{r},\omega)$ zur Darstellung des Symmetrieverhaltens in der Ebene $z = 0$ und für den Abstand $\rho = 20\,\mathrm{mm}$ ausgewertet. Die folgenden zwei Abbildungen zeigen den frequenzabhängigen Real- und Imaginärteil.

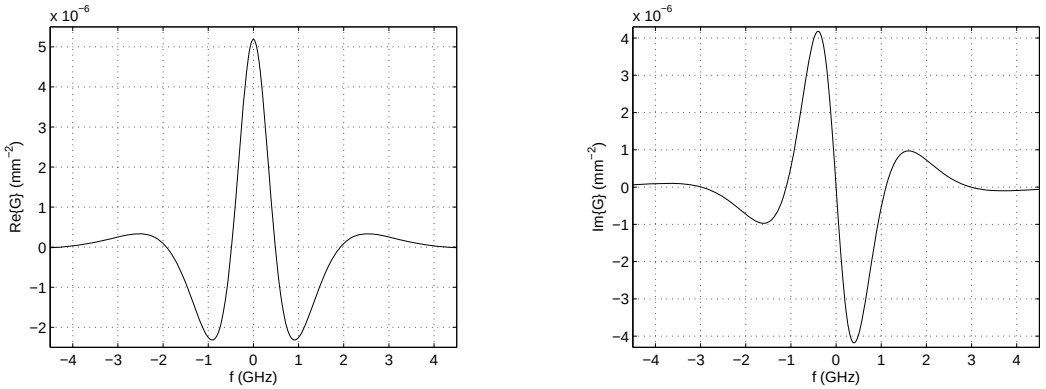

Abbildung 3.5: Realteil (linkes Bild) und Imaginärteil (rechtes Bild) in Abhängigkeit von der Frequenz.

Beide Anteile besitzen ihr charakteristisches Symmetrieverhalten und sind über die Hilberttransformation miteinander verknüpft. Für den Vergleich zur Monte Carlo Methode wird die zeitaufgelöste Reflektanz an der Mediumsgrenze betrachtet. Der Brechungsindex des umgebenden Mediums beträgt $n_e = 1.0$. Die Reflektanz ist für vier verschiedene Detektorpositionen in Abbildung 3.6 dargestellt.

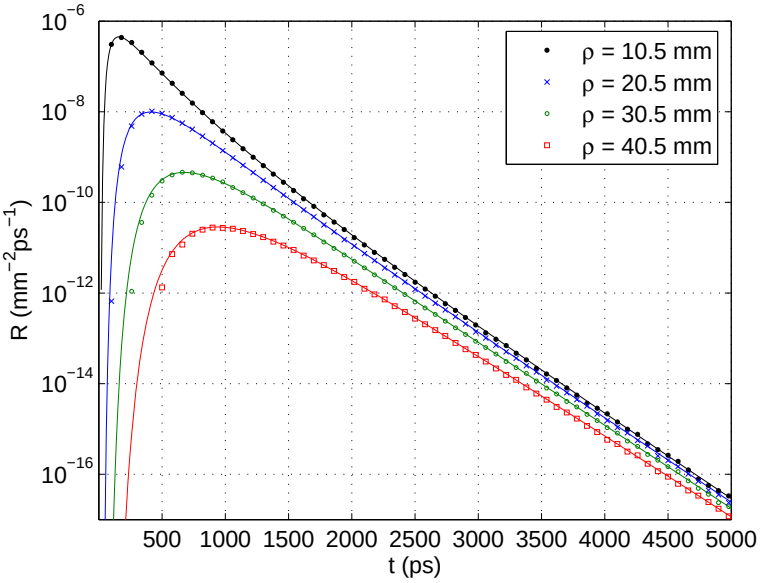

Abbildung 3.6: Zeitaufgelöste Reflektanz für vier verschiedene Detektorpositionen. Die Symbole entsprechen der Monte Carlo Methode.

In Anbetracht, dass die Diffusionstheorie einer stark vereinfachten Version der RTE entspricht, findet sich insgesamt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen beiden Theorien. Die größeren Abweichungen für sehr kleine Zeitwerte sind typisch für diese Approximation. Im Verlauf dieser Arbeit wird sich zeigen, dass dieser Effekt mit Approximationen höherer Ordnung beseitigt werden kann.

Durch Vergleiche zur Monte Carlo Simulation lassen sich Fehler innerhalb der analytischen Lösung im Regelfall ausschließen. Eine direkte Kontrollmöglichkeit wird jedoch nur durch andere verfügbare Lösungen der DE gewährleistet. Mit der analytischen Methode von Martelli *et al.* [28] ist ein derartiger Vergleich für bis zu drei Schichten möglich. Das zugrundeliegende Modell bei diesem Verfahren ist ein Zylinder mit sehr großem Radius. Für ein dreischichtiges Medium mit den in Tabelle 3.3 aufgeführten Eigenschaften

Tabelle 3.3: Eigenschaften des dreischichtigen Mediums

Schicht	$\mu_s'\,[\mathrm{mm}^{-1}]$	$\mu_a\,[\mathrm{mm}^{-1}]$	$l\,[\mathrm{mm}]$	n
1	1.5	0.04	2	1.4
2	0.8	0.02	3	1.3
3	1.2	0.01	∞	1.5

wurde die zeitaufgelöste Reflektanz über beide Verfahren ermittelt und in Abbildung 3.7 festgehalten. Der externe Brechungsindex ist zu $n_e = 1.0$ gewählt.

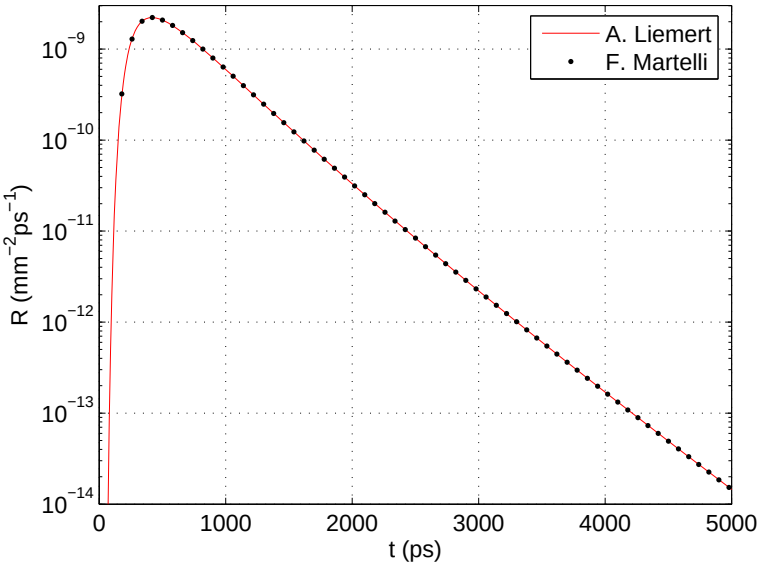

Abbildung 3.7: Vergleich der zeitaufgelösten Reflektanz für einen Abstand von $\rho = 20\,\mathrm{mm}$ zur z-Achse.

Die Reflektanz beider Methoden stimmen in exzellenter Weise überein. Der relative Unterschied zwischen beiden Varianten beträgt $\approx 10^{-7}$ und ist mit höher betriebenen Aufwand innerhalb der Numerik weiter verringerbar.
Im nächsten Schritt erfolgt eine Modifizierung der Quelle zur Nachbildung von zwei häufig verwendete Laserstrahlprofilen. Es handelt sich einerseits um das Gauß-Profil mit der Gleichung

$$S(\rho) = \frac{2}{\pi\rho_w^2} e^{-\frac{2\rho^2}{\rho_w^2}}, \tag{3.47}$$

wobei ρ_w über den $1/e^2$-Abfall definiert ist. Andererseits entspricht

$$S(\rho) = \frac{1}{\pi\rho_w^2}\mathrm{circ}\left(\frac{\rho}{\rho_w}\right) = \frac{1}{\pi\rho_w^2}\begin{cases} 1, & \rho < \rho_w \\ 0, & \rho > \rho_w \end{cases} \tag{3.48}$$

dem sogenannten Topfprofil. Beide Quellterme sind auf Eins normiert. Unter Verwendung der bisherigen Ergebnisse stellt die Ermittlung der Reaktion auf diese Quellen keine besondere Schwierigkeit dar. Die Greensche Funktion ist vor der inversen Hankeltransformation mit der entsprechend transformierten Quelle zu multiplizieren. Die Hankeltransformierte des Gauß-Profils ist

$$S(k) = \frac{4}{\rho_w^2}\int_0^\infty \rho J_0(k\rho)e^{-\frac{2\rho^2}{\rho_w^2}}\,\mathrm{d}\rho = e^{-\frac{1}{8}\rho_w^2 k^2}. \tag{3.49}$$

Für das Topfprofil findet sich hingegen

$$S(k) = \frac{2}{\rho_w^2}\int_0^{\rho_w} \rho J_0(k\rho)\mathrm{d}\rho = \frac{2J_1(\rho_w k)}{\rho_w k}. \tag{3.50}$$

Die auftretenden Integrale sind in [22] nachzuschlagen. Zu beiden vorgestellten Strahlprofilen wurde ein Vergleich zwischen der Reflektanz aus der Diffusions- und Transporttheorie vorgenommen. Zur Lösung der RTE dient die Monte Carlo Methode. Verwendet wurde das dreischichtige Medium aus Tabelle 3.3. In Abbildung 3.8 ist das Resultat bei Verwendung des gaußförmigen Strahlprofils zu sehen.

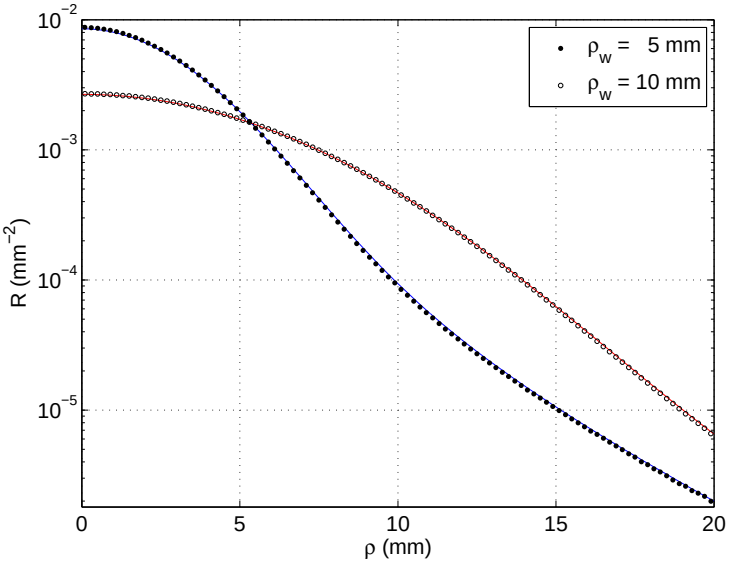

Abbildung 3.8: Ortsaufgelöste Reflektanz bei Verwendung eines gaußförmigen Strahlprofils. Die Symbole entsprechen der Monte Carlo Methode.

Die Reflektanz verursacht von einem Topfprofil wird in Abbildung 3.9 gegenübergestellt.

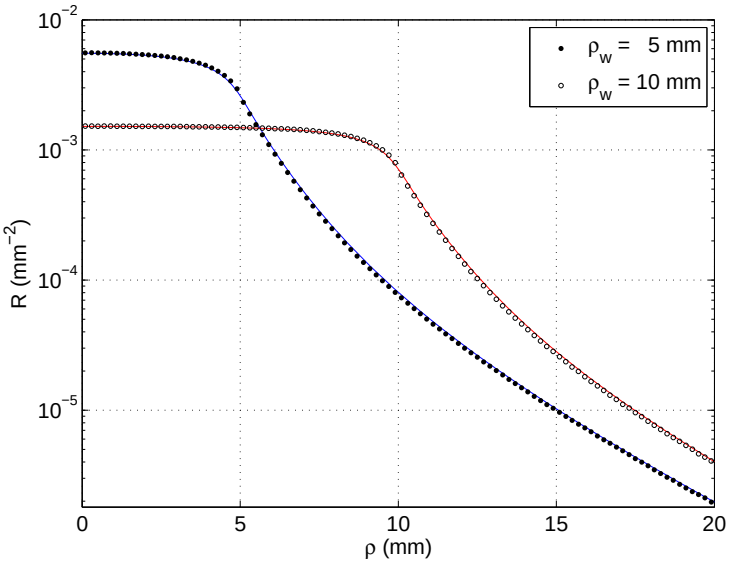

Abbildung 3.9: Ortsaufgelöste Reflektanz bei Verwendung eines Topfprofils. Die Symbole entsprechen der Monte Carlo Methode.

Unter Berücksichtigung, dass die Diffusionstheorie mit ihren Randbedingungen als erste Entwicklungsstufe aus der RTE hervorgeht, findet sich ein sehr zufriedenstellendes Resultat. Ein weiterer wesentlicher Unterschied innerhalb dieses Vergleiches besteht in der simulierten Quelle. Während für die Diffusionstheorie eine flächenhafte Quelle in der Tiefe $z = z_0$ angenommen wird, simuliert die Monte Carlo Methode den realitätsnäheren Fall einer exponentiell abnehmenden Quellstärke bei zunehmender Tiefe. Im Anwendungsbereich von gepulsten Lasern sind die auftretenden Pulse auf einen maximalen Wert limitiert und weisen eine gewisse Pulsweite auf. Mit den hier ermittelten Lösungen lassen sich auch diese Effekte relativ einfach modellieren. Zur Nachbildung eines zeitlichen Laserpulses wird häufig das Modell eines Gauß-Pulses mit der Gleichung

$$S(\vec{r}, t) = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}}. \tag{3.51}$$

verwendet. Die Pulsweite lässt sich über den Parameter σ variieren, wobei im Grenzfall gilt

$$\lim_{\sigma \to 0} \frac{e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}} = \delta(t). \tag{3.52}$$

In den nachfolgenden Betrachtungen wird das Augenmerk auf die Veränderung der entstehenden Signalformen infolge des Gauß-Pulses gerichtet. Die Nichtkausalität der Quelle bleibt deshalb unberücksichtigt. Zur Ermittlung der Lösung für diese Pulsart wird wie im Falle der vorgestellten Strahlprofile vorgegangen. Im transformierten

Bereich geht die oben angeführte Quelle (3.51) in

$$S(k, z, \omega) = e^{-\frac{\sigma^2\omega^2}{2}}\delta(z - z') \tag{3.53}$$

über. Die analytischen Ausdrücke sind vor den anstehenden inversen Transformationen mit dem Faktor $\exp(-\sigma^2\omega^2/2)$ zu multiplizieren. Für das 6-schichtige Medium aus Tabelle 3.1 wurde die zeitaufgelöste Reflektanz bei Verwendung des zeitlichen Gauß-Pulses für vier verschiedene Pulsweiten simuliert und die Ergebnisse in Abbildung 3.10 dargestellt.

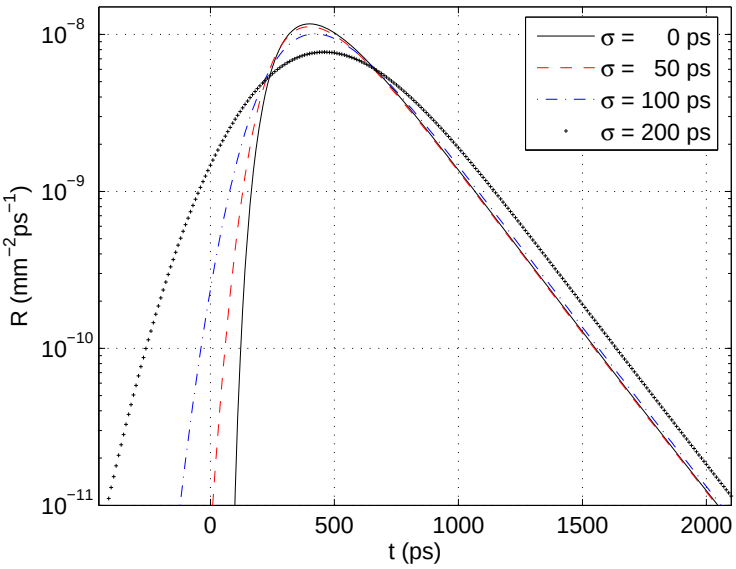

Abbildung 3.10: Zeitaufgelöste Reflektanz bei Verwendung eines zeitlichen Gauß-Pulses. Der Abstand zur z-Achse beträgt $\rho = 20\,\text{mm}$.

Wie aus der Abbildung ersichtlich, wirken sich erst relativ große Pulsweiten signifikant auf die Form der zeitaufgelösten Reflektanz für die Zeitwerte nach dem Maximum aus.

Die oben ermittelte Lösung der DE für ein N-schichtiges Medium ist gültig, falls sich die Quelle innerhalb der ersten Schicht befindet. Ist die Quelle in der letzten Schicht positioniert, so kann nach erfolgter Spiegelung des Mediums die bereits hergeleitete Lösung erneut verwendet werden. Für den Fall, dass die Quelle in der Schicht i $(i = 2, 3, ..., N-1)$ auftritt, ist die Lösung noch unbekannt und soll nachfolgend ermittelt werden. Aus Sicht der Anwendung wird diese Lösung zur Berechnung der Fluoreszenz benötigt.
Unter der Annahme, dass sich die isotrope Punktquelle innerhalb der i-ten Schicht eines N-schichtigen Mediums befindet, wird zur Auffindung der Greenschen Funktion der modifizierte Ansatz

$$G(k, z) = \begin{cases} G_i(k, z) = A_i e^{\alpha_i z} + B_i e^{-\alpha_i z} + \frac{e^{-\alpha_i |z - z_0|}}{2D_i\alpha_i}, & L_{i-1} \le z < L_i \\ G_n(k, z) = A_n e^{\alpha_n z} + B_n e^{-\alpha_n z}, & L_{n-1} \le z < L_n \end{cases} \tag{3.54}$$

verwendet. Im Rahmen der Veröffentlichung [31] wurde in einem vierschichtigen Medium nacheinander die Quelle in jede der vier Schichten gesetzt und die zugehörige DE unter Berücksichtigung der Randbedingungen aus (3.41) gelöst. Diese Prozedur ist mit einem relativ großen Aufwand verbunden. Wie bereits in Kapitel 3.2 ist es möglich, eine Abhängigkeit der Lösung von der Position der Quelle und der Schichtenanzahl zu formulieren. Mit den Startwerten

$$\begin{aligned}
\beta_{N-1} &= \sinh[\alpha_1(l_1 + z_{b1})] \\
\gamma_{N-1} &= \cosh[\alpha_1(l_1 + z_{b1})] \\
\beta_{N-2} &= D_2\alpha_2 n_2^2 \cosh(\alpha_2 l_2)\beta_{N-1} + D_1\alpha_1 n_1^2 \sinh(\alpha_2 l_2)\gamma_{N-1} \\
\gamma_{N-2} &= D_2\alpha_2 n_2^2 \sinh(\alpha_2 l_2)\beta_{N-1} + D_1\alpha_1 n_1^2 \cosh(\alpha_2 l_2)\gamma_{N-1}
\end{aligned} \tag{3.55}$$

ergibt die Verwendung der Rekursionsbeziehungen

$$\begin{aligned}
\beta_n =& D_{N-n}\alpha_{N-n} n_{N-n}^2 \cosh(\alpha_{N-n} l_{N-n})\beta_{n+1} \\
&+ D_{N-n-1}\alpha_{N-n-1} n_{N-n-1}^2 \sinh(\alpha_{N-n} l_{N-n})\gamma_{n+1} \\
\gamma_n =& D_{N-n}\alpha_{N-n} n_{N-n}^2 \sinh(\alpha_{N-n} l_{N-n})\beta_{n+1} \\
&+ D_{N-n-1}\alpha_{N-n-1} n_{N-n-1}^2 \cosh(\alpha_{N-n} l_{N-n})\gamma_{n+1}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

als Lösung für den Bereich $0 \leq z < L_1$

$$\begin{aligned}
G_1(k,z) =& n_1^2 \sinh[\alpha_1(z + z_{b1})] \prod_{\nu=2}^{i-1} (D_\nu \alpha_\nu n_\nu^2) \\
&\times \frac{D_i\alpha_i n_i^2 \beta_i \cosh[\alpha_i(L_i - z)] + D_{i+1}\alpha_{i+1} n_{i+1}^2 \gamma_i \sinh[\alpha_i(L_i - z)]}{D_1\alpha_1 n_1^2 \beta_1 \cosh[\alpha_1(l_1 + z_{b1})] + D_2\alpha_2 n_2^2 \gamma_1 \sinh[\alpha_1(l_1 + z_{b1})]}
\end{aligned}$$

und für $L_{N-1} \leq z < L_N$ die Funktion

$$\begin{aligned}
G_N(k,z) =& n_N^2 \sinh[\alpha_N(L_N + z_{bN} - z)] \prod_{\nu=2}^{N-i} (D_{N+1-\nu}\alpha_{N+1-\nu} n_{N+1-\nu}^2) \\
&\times \frac{D_i\alpha_i n_i^2 \beta_{N+1-i} \cosh[\alpha_i(L_i - z)] + D_{i-1}\alpha_{i-1} n_{i-1}^2 \gamma_{N+1-i} \sinh[\alpha_i(L_i - z)]}{D_N\alpha_N n_N^2 \beta_1 \cosh[\alpha_N(l_N + z_{bN})] + D_{N-1}\alpha_{N-1} n_{N-1}^2 \gamma_1 \sinh[\alpha_N(l_N + z_{bN})]}.
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Mit diesen Ausdrücken lässt sich die Reflektanz und die Transmission ermitteln. Desweiteren ist mit dem Übergang auf die komplexwertigen Absorptionskoeffizienten die Lösung im Frequenzbereich und über die inverse Fouriertransformation auch im Zeitbereich gegeben.
Es folgt ein Vergleich zwischen der zeitaufgelösten Reflektanz der Diffusions- und Transporttheorie. Verwendet wird das 6-schichtige Medium aus Tabelle 3.1, wobei die isotrop abstrahlende Punktquelle nacheinander in den Schichten mit den Indizes $i = 2, 3, 4, 5$ positioniert wird. Der Brechungsindex des umgebenden Mediums ist zu $n_e = 1.0$ gewählt. In Abbildung 3.11 ist die Gegenüberstellung beider Theorien zu sehen.

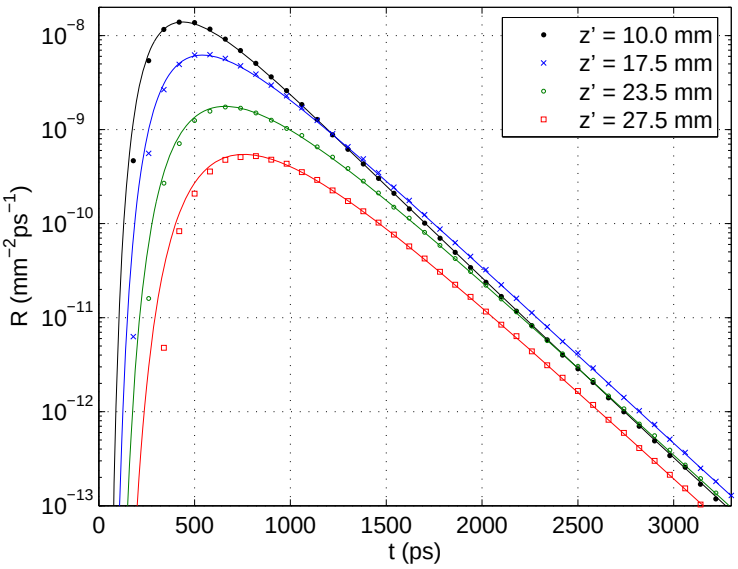

Abbildung 3.11: Zeitaufgelöste Reflektanz für vier verschiedene Positionen der isotrop abstrahlenden Punktquelle innerhalb eines 6-schichtigen Mediums für einen Abstand von $\rho = 20.5\,\text{mm}$ zwischen Quelle und Detektor. Die Symbole entsprechen der Monte Carlo Methode.

Abgesehen von den kleinen Zeitwerten findet sich wie im Vergleich der zeitaufgelösten Reflektanz aus Kapitel 3.2 eine gute Übereinstimmung zwischen beiden Theorien.

Die Lösung der DE für das N-schichtige Medium wurde in [32, 33, 34] veröffentlicht. Zusätzlich werden über die Internetseite [35] Simulationsprogramme zur Verfügung gestellt.

3.3 Zweischichtiges Medium mit gleichen reduzierten Streukoeffizienten

Die Lösung der dreidimensionalen Diffusionsgleichung für ein lateral unendlich ausgedehntes inhomogenes Medium ist im allgemeinen mit einer numerischen Integration verbunden. Für ein zweischichtiges Medium mit gleichen reduzierten Streukoeffizienten ist die Rücktransformation in den Ortsbereich geschlossen möglich. Das Endergebnis liegt zwar direkt im Zeit- und Ortsbereich vor, beinhaltet jedoch weiterhin ein Faltungsintegral bezüglich der Zeitvariablen. Die Lösungsfunktion für ein derartiges Modell ergibt sich aus Gleichung (3.44) für $N = 2$ und $l_2 \to \infty$ zu

$$G(k,z) = \frac{e^{-\alpha_1|z-z'|} - e^{-\alpha_1(z+z'+2z_b)}}{2D\alpha_1} + \frac{\sinh[\alpha_1(z'+z_b)]\sinh[\alpha_1(z+z_b)]}{D\alpha_1 e^{\alpha_1(L_1+z_b)}} \times \frac{\alpha_1-\alpha_2}{\alpha_1\sinh[\alpha_1(L_1+z_b)] + \alpha_2\cosh[\alpha_1(L_1+z_b)]}. \tag{3.58}$$

Unter Berücksichtigung der Definitionsgleichungen für die Hyperbolicus-Funktionen und der geometrischen Reihe werden mit Verwendung von Hilfsgrößen nachfolgende Umformungen vorgenommen. Die erste Hilfsvariable ist

$$\begin{aligned} X(k) &= \frac{\alpha_1-\alpha_2}{\alpha_1\sinh[\alpha_1(L_1+z_b)] + \alpha_2\cosh[\alpha_1(L_1+z_b)]} \\ &= 2\frac{\alpha_1-\alpha_2}{\alpha_1(e^{\alpha_1(L_1+z_b)} + e^{-\alpha_1(L_1+z_b)}) + \alpha_2(e^{\alpha_1(L_1+z_b)} - e^{-\alpha_1(L_1+z_b)})} \\ &= 2\frac{\alpha_1-\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)e^{\alpha_1(L_1+z_b)} + (\alpha_1-\alpha_2)e^{-\alpha_1(L_1+z_b)}}. \end{aligned} \tag{3.59}$$

Als zweite Größe wird $Y(k) = (\alpha_1-\alpha_2)(\alpha_1+\alpha_2)^{-1}$ eingeführt. Mit den neu definierten Größen entsteht der Term

$$X(k) = 2Y(k)e^{-\alpha_1(L_1+z_b)}\frac{1}{1+Y(k)e^{-2\alpha_1(L_1+z_b)}}, \tag{3.60}$$

wobei $\left|Y(k)e^{-2\alpha_1(L_1+z_b)}\right| < 1$ gilt. Die Verwendung der geometrischen Reihe

$$\frac{1}{1+x} = 1 + x - x^2 \pm ... = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n x^n \tag{3.61}$$

bringt

$$X(k) = 2e^{\alpha_1(L_1+z_b)}\sum_{n=1}^{\infty}\left[-Y(k)e^{-2\alpha_1(L_1+z_b)}\right]^n. \tag{3.62}$$

Der entstandene Ausdruck wird in Gleichung (3.58) eingesetzt und ergibt die Funktion

$$\begin{aligned} G(k,z) = & \frac{e^{-\alpha_1\left|z-z_0^+\right|} - e^{-\alpha_1(z-z_0^-)}}{2D\alpha_1} \\ & - \frac{1}{2D\alpha_1}\sinh[\alpha_1(z'+z_b)]\sinh[\alpha_1(z+z_b)\sum_{n=1}^{\infty}\left[-Y(k)e^{-2\alpha_1(L_1+z_b)}\right]^n \\ = & \frac{e^{-\alpha_1\left|z-z_0^+\right|} - e^{-\alpha_1(z-z_0^-)}}{2D\alpha_1} \\ & + \frac{1}{2D\alpha_1}\sum_{n=1}^{\infty}\left(e^{\alpha_1(z-z_n^+)} - e^{\alpha_1(z-z_n^-)} + e^{-\alpha_1(z-z_{-n}^+)} - e^{-\alpha_1(z-z_{-n}^-)}\right) \\ & \times\left[-Y(k)\right]^n, \end{aligned} \tag{3.63}$$

wobei die Koordinaten

$$\begin{aligned} z_n^+ =& 2n(L_1+z_b)+z' \\ z_n^- =& 2n(L_1+z_b)-2z_b-z' \end{aligned}$$

verwendet werden. Dieser Ausdruck wird vom Steady-State-Bereich in den Frequenzbereich durch Hinzunahme des Imaginärteils $j\omega/c$ in den Absorptionskoeffizienten μ_{ai} überführt. Die Rücktransformation in den Zeitbereich erfolgt über

$$G(k,z,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G(k,z,\omega)e^{j\omega t}\mathrm{d}\omega. \tag{3.64}$$

Die Frequenzvariable ω kommt lediglich in den Größen

$$\alpha_i = \sqrt{\frac{\mu_{ai}c + Dck^2 + j\omega}{Dc}} \tag{3.65}$$

vor. Mit der Substitution $s = Dck^2 + j\omega$ entsteht

$$G(k,z,t) = \frac{e^{-Dck^2t}}{2\pi j}\int_{Dck^2-j\infty}^{Dck^2+j\infty} G(z,s)e^{st}\mathrm{d}s, \qquad \alpha_i = \sqrt{\frac{\mu_{ai}c+s}{Dc}}. \tag{3.66}$$

Zum einen ist der Anteil mit Ortsinformation von der zeitlichen Inversion separiert worden, wodurch der Wechsel in den Ortsbereich unmittelbar durchgeführt werden kann. Zum anderen ist ein komplexes Kurvenintegral mit einer Parallelen zur imaginären Achse als Integrationsweg entstanden. Desweiteren gilt $\mathrm{Re}\{s\} = Dck^2 > 0$. Unter diesen Umständen lässt sich dieses Integral über tabellierte Korrespondenzen der Laplacetransformation auswerten. Aus [36] entnimmt man für $\mathrm{Re}\{s\} > 0$ und $a \in \mathbb{R}^+$ die Transformationspaare

$$\frac{1}{\sqrt{\pi t}}e^{-\frac{a^2}{4t}}\Theta(t) \quad \circ\!\!-\!\!\bullet \quad \frac{e^{-a\sqrt{s}}}{\sqrt{s},} \tag{3.67}$$

$$\frac{n}{t}e^{-\frac{1}{2}at}I_n\left(\frac{a}{2}t\right)\Theta(t) \quad \circ\!\!-\!\!\bullet \quad \frac{a^n}{\left(\sqrt{s+a}+\sqrt{s}\right)^{2n}}. \tag{3.68}$$

Sämtliche vorkommenden Exponentialfunktionen sind von der gleichen Bauart. Die Rücktransformation zu einer dieser Funktionen wird anhand der Korrespondenz

$$\frac{e^{-\alpha_1|z-z_0^+|}}{2D\alpha_1} \quad \bullet\!\!-\!\!\circ \quad \frac{1}{2}\sqrt{\frac{c}{D\pi t}}e^{-\mu_{a1}ct}e^{-\frac{(z-z_0^+)^2}{4Dct}}\Theta(t) \tag{3.69}$$

aufgezeigt. Für die eingeführte Hilfsvariable gilt das Paar

$$\frac{(\mu_{a2}c-\mu_{a1}c)^n}{\left(\sqrt{s+\mu_{a1}c}+\sqrt{s+\mu_{a2}c}\right)^{2n}} \quad \bullet\!\!-\!\!\circ \quad \frac{n}{t}e^{-\frac{1}{2}(\mu_{a1}+\mu_{a2})ct}I_n\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}t\right)\Theta(t). \tag{3.70}$$

Im transformierten Bereich liegt eine Summe von Produkten vor, folglich entsteht im Zeitbereich eine Summe von Faltungsoperationen. Während der Rücktransformation tritt innerhalb des Faltungsintegrals eine Summe der Form

$$\sum_{n=1}^{\infty}\left(e^{-\frac{(z-z_n^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_n^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}+e^{-\frac{(z-z_{-n}^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_{-n}^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}\right)\frac{n}{t}I_n\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}c\tau\right) \tag{3.71}$$

auf, welche sich durch symmetrische Indizierung in die kompaktere Darstellung

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{\infty}\left(e^{-\frac{(z-z_n^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_n^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}\right)\frac{n}{t}I_n\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}c\tau\right)\\
+&\sum_{n=-\infty}^{-1}\left(e^{-\frac{(z-z_{+n}^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_{+n}^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}\right)\frac{-n}{t}I_{-n}\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}c\tau\right)\\
=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(e^{-\frac{(z-z_n^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_n^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}\right)\frac{|n|}{t}I_{|n|}\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}c\tau\right).
\end{aligned}$$

überführen lässt. Durch algebraische Vereinfachung entsteht die zeitabhängige Greensche Funktion für zwei Schichten mit gleichen reduzierten Streukoeffizienten

$$\begin{aligned}
G(\vec{r},t)=&\frac{c}{(4\pi Dct)^{3/2}}e^{-\mu_{a1}ct}e^{-\frac{\rho^2}{4Dct}}\left[e^{-\frac{(z-z_0^+)^2}{4Dct}}-e^{-\frac{(z-z_0^-)^2}{4Dct}}\right]\\
&+\frac{1}{8\pi Dt}e^{-\mu_{a1}ct}e^{-\frac{\rho^2}{4Dct}}\int_0^t\frac{1}{\sqrt{\pi Dc(t-\tau)}}e^{-\frac{1}{2}(\mu_{a2}-\mu_{a1})c\tau}\\
&\times\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[e^{-\frac{(z-z_n^+)^2}{4Dc(t-\tau)}}-e^{-\frac{(z-z_n^-)^2}{4Dc(t-\tau)}}\right]\frac{|n|}{\tau}I_{|n|}\left(\frac{\mu_{a2}-\mu_{a1}}{2}c\tau\right)\mathrm{d}\tau.
\end{aligned} \tag{3.72}$$

Die ermittelte Lösung wird aufgrund der nicht ganz einfachen Herleitung und relativ komplizierten Darstellung auf Korrektheit überprüft. Mit Verwendung eines Fortran-Programms von Fabrizio Martelli wurde die zeitaufgelöste Reflektanz beider Methoden gegenübergestellt und in Abbildung 3.12 aufgenommen. Die Symbole entsprechen der Methode von Fabrizio Martelli. Der Brechungsindex der Umgebung ist zu $n_e = 1.0$ gewählt.

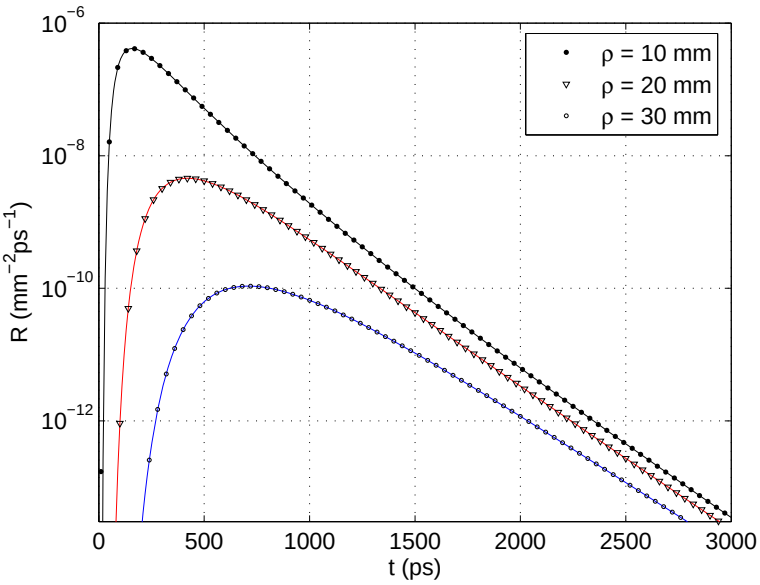

Abbildung 3.12: Vergleich der zeitaufgelösten Reflektanz an verschiedenen Orten für einen reduzierten Streukoeffizient von $\mu_s' = 1.2\,\mathrm{mm}^{-1}$. Die restlichen Parameter sind $\mu_{a1} = 0.004\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_{a2} = 0.02\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $l_1 = 2\,\mathrm{mm}$. Der Brechungsindex innnerhalb der Schichten beträgt $n_1 = n_2 = 1.4$.

Die ermittelte Lösung stimmt mit der Methode von Martelli *et al.* wie bereits in vergangenen Vergleichen sehr gut überein und wurde in [33] veröffentlicht.

4 Diffusionsgleichung für lateral begrenzte Medien

4.1 Axial geschichtete Modelle

4.1.1 Homogener Quader

Innerhalb der Literatur liegen Lösungen der Diffusions- und Wärmeleitungsgleichung für einen homogenen Quader mit unterschiedlich gutem Konvergenzverhalten vor [12, 21, 27]. Dieses Unterkapitel mit den darin enthaltenen Ansätzen dient als Vorbereitung auf den wichtigeren Fall des geschichteten Quadermodells. Der gewählte Lösungsweg unterscheidet sich von den bisherigen in der Literatur vorgestellten, führt jedoch zu den gleichen Endresultaten wie in [12] anschaulich über die Methode der Spiegelquellen präsentiert wurde. In Abbildung 4.1 ist der schematische Aufbau des homogenen Quaders zu sehen. Der Ortsvektor wird bei dieser Anwendung abweichend zu der seither verwendeten Notation mit $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$ bezeichnet. Mit dieser Konvention liegen die Ergebnisse in einer kompakteren und übersichtlicheren Form vor.

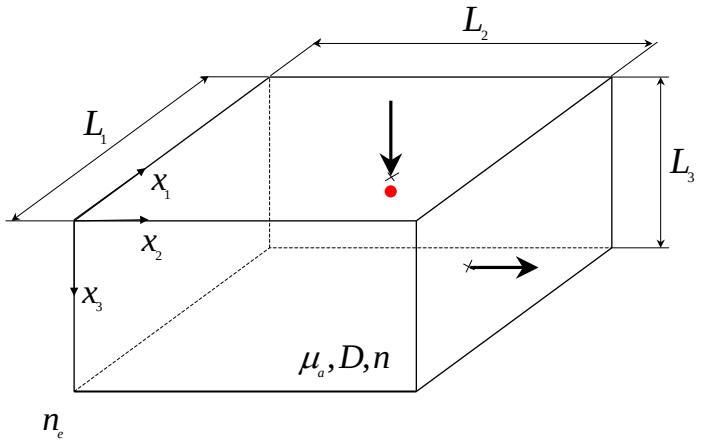

Abbildung 4.1: Homogener Quader.

Der Ursprung des Koordinatensystems wird bei dieser Aufgabenstellung in eine Quaderecke gelegt. Die Lage des Koordinatenursprungs ist für die spätere Wahl der Eigenfunktionen entscheidend. Prinzipiell könnte der Ursprung auch in das Zentrum einer

Quaderfläche gelegt werden. Der Quader ist ein klassisches Beispiel für die Verwendung von trigonometrischen Basisfunktionen. Die dreidimensionale Punktquelle lässt sich durch die Fourierreihe

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}') = \sum_{n_1=1}^{\infty}\sum_{n_2=1}^{\infty}\sum_{n_3=1}^{\infty}\phi^*_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}')\phi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}) \tag{4.1}$$

darstellen. Unter Berücksichtigung der EBC lauten die angepassten Eigenfunktionen mit ihren Eigenwerten

$$\phi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}) = \prod_{k=1}^{3}\sqrt{\frac{2}{L_k+2x_b}}\sin[\lambda_{n_k}(x_k+x_b)], \tag{4.2}$$

wobei $\lambda_{n_k} = n_k\pi/(L_k+2x_b)$ und $x_b = 2AD$. Der Ansatz zur Auffindung der Greenschen Funktion ist durch

$$G(\vec{r},t) = \sum_{n_1=1}^{\infty}\sum_{n_2=1}^{\infty}\sum_{n_3=1}^{\infty}G_{n_1,n_2,n_3}(t)\phi^*_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}')\phi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}) \tag{4.3}$$

gegeben. Das Einsetzen beider Reihen in die Diffusionsgleichung bringt die gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t}G_{n_1,n_2,n_3}(t) + Dc(\lambda_{n_1}^2+\lambda_{n_2}^2+\lambda_{n_3}^2)G_{n_1,n_2,n_3}(t) = c\delta(t). \tag{4.4}$$

Mit Rückblick auf Kapitel 3.1 findet sich als Lösung

$$G_{n_1,n_2,n_3}(t) = ce^{-\mu_a ct}e^{-Dc\lambda_{n_1}^2 t}e^{-Dc\lambda_{n_2}^2 t}e^{-Dc\lambda_{n_3}^2 t}, \quad t>0. \tag{4.5}$$

Die gefundenen Entwicklungskoeffizienten $G_{n_1,n_2,n_3}(t)$ sind in die Reihendarstellung (4.3) einzusetzen. Das Endergebnis lässt sich als ein Produkt aus den Lösungen dreier separater eindimensionaler Diffusionsgleichungen auffassen. Unter Berücksichtigung der möglichen Lösungen des eindimensionalen Randwertproblems (3.27), findet sich für die zeitabhängige Fluenz innerhalb eines homogenen Quaders die Reihe

$$G(\vec{r},t) = ce^{-\mu_a ct}\prod_{k=1}^{3}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi Dct}}\sum_{n_k=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x_k-x_{n_k}^+)^2}{4Dct}} - e^{-\frac{(x_k-x_{n_k}^-)^2}{4Dct}}\right), \tag{4.6}$$

mit $x_{n_k}^+ = 2n_kL_k + 4x_b + x_k'$ und $x_{n_k}^- = 2n_kL_k + (4n_k-2)x_b - x_k'$. Diese Darstellung konvergiert für kleine Zeiten deutlich besser als die Variante mit den trigonometrischen Eigenfunktionen.
Zur Ermittlung der Lösung im Steady-State-Bereich ist die Integration des zeitabhängigen Pendants erforderlich. In diesem Bereich erweist sich der Übergang von der Fourierreihe auf die Summe von Exponentialfunktionen als besonders vorteilhaft, da die

Darstellung mit den trigonometrischen Eigenfunktionen hier enorm schlecht konvergiert. Durch Ausmultiplikation der Produktform (4.6) entsteht vorerst

$$G(\vec{r},t) = \frac{c}{(4\pi Dct)^{3/2}} e^{-\mu_a ct} \sum_{n_1=1}^{\infty}\sum_{n_2=1}^{\infty}\sum_{n_3=1}^{\infty} e^{-\frac{r_1^2}{4Dct}} - e^{-\frac{r_2^2}{4Dct}} + e^{-\frac{r_3^2}{4Dct}} - e^{-\frac{r_4^2}{4Dct}} + e^{-\frac{r_5^2}{4Dct}} - e^{-\frac{r_6^2}{4Dct}} + e^{-\frac{r_7^2}{4Dct}} - e^{-\frac{r_8^2}{4Dct}} \quad (4.7)$$

mit den Abständen

$$\begin{aligned}
r_1 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^+)^2 + (x_2 - x_{n_2}^+)^2 + (x_3 - x_{n_3}^+)^2} \\
r_2 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^+)^2 + (x_2 - x_{n_2}^+)^2 + (x_3 - x_{n_3}^-)^2} \\
r_3 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^+)^2 + (x_2 - x_{n_2}^-)^2 + (x_3 - x_{n_3}^-)^2} \\
r_4 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^+)^2 + (x_2 - x_{n_2}^-)^2 + (x_3 - x_{n_3}^+)^2} \\
r_5 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^-)^2 + (x_2 - x_{n_2}^+)^2 + (x_3 - x_{n_3}^-)^2} \\
r_6 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^-)^2 + (x_2 - x_{n_2}^+)^2 + (x_3 - x_{n_3}^+)^2} \\
r_7 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^-)^2 + (x_2 - x_{n_2}^-)^2 + (x_3 - x_{n_3}^+)^2} \\
r_8 &= \sqrt{(x_1 - x_{n_1}^-)^2 + (x_2 - x_{n_2}^-)^2 + (x_3 - x_{n_3}^-)^2}.
\end{aligned} \quad (4.8)$$

Innerhalb der Dreifachsumme befinden sich insgesamt 8 zeitabhängige Greensche Funktionen des unendlichen Raumes, von denen die Lösung im Steady-State-Bereich bereits in Kapitel 3.1 hergeleitet wurde. Die rein ortsabhängige Fluenz innerhalb des homogenen Quaders wird somit zu

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi D} \sum_{n_1=1}^{\infty}\sum_{n_2=1}^{\infty}\sum_{n_3=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu_{eff} r_1}}{r_1} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_2}}{r_2} + \frac{e^{-\mu_{eff} r_3}}{r_3} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_4}}{r_4} + \frac{e^{-\mu_{eff} r_5}}{r_5} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_6}}{r_6} + \frac{e^{-\mu_{eff} r_7}}{r_7} - \frac{e^{-\mu_{eff} r_8}}{r_8}. \quad (4.9)$$

4.1.2 Geschichteter Quader

In Martelli *et al.* [27] wird die zeitabhängige Diffusionsgleichung für einen geschichteten Quader bestehend aus bis zu drei Schichten gelöst und mit der Monte Carlo Methode validiert. Innerhalb der Literatur konnten keine weiteren analytischen Lösungen für einen geschichteten Quader gefunden werden. In diesem Teilabschnitt erfolgt die Herleitung der Lösung für einen Quader bestehend aus beliebig vielen unterschiedlichen Schichten basierend auf Ergebnissen des Kapitels 3.2. In Abbildung 4.2 ist das geschichtete Quadermodell schematisch dargestellt.

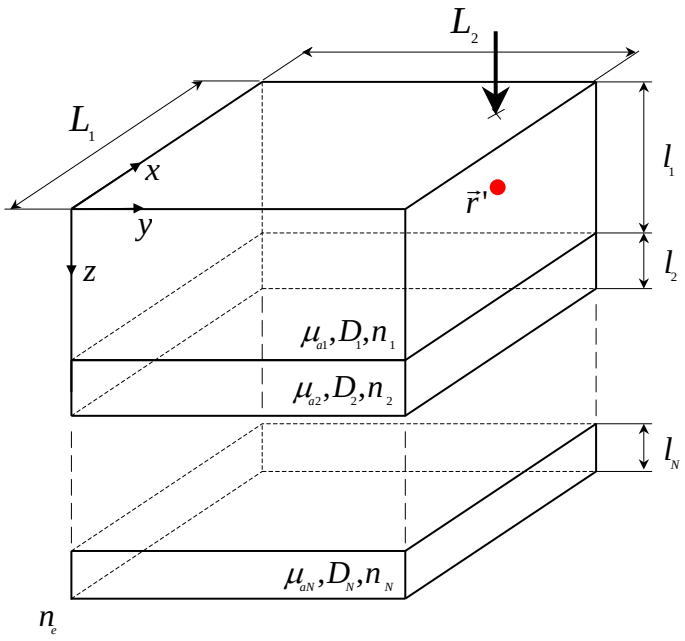

Abbildung 4.2: Geschichteter Quader.

Die isotrop abstrahlende Punktquelle wird in diesem Fall nur noch in zwei anstatt in drei Dimensionen nach den trigonometrischen Eigenfunktionen entwickelt, d.h.

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \delta(z-z') \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} \phi^*_{mn}(x',y')\phi_{mn}(x,y). \tag{4.10}$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen lauten unter Verwendung der ZBC

$$\phi_{mn}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{L_1 L_2}} \sin(\lambda_m x)\sin(\lambda_n y), \tag{4.11}$$

mit $\lambda_m = m\pi/L_1$ und $\lambda_n = n\pi/L_2$. Die zu ermittelnde Greensche Funktion wird in Form der Reihe

$$G(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} G_{mn}(z)\phi^*_{m,n}(x',y')\phi_{m,n}(x,y) \tag{4.12}$$

angesetzt. Durch das Einsetzen beider Entwicklungen resultiert die eindimensionale Diffusionsgleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} G_{mn}(\lambda_m,\lambda_n,z) - \alpha^2 G_{mn}(\lambda_m,\lambda_n,z) = -\frac{1}{D}\delta(z-z'), \tag{4.13}$$

mit $\alpha^2 = \mu^2_{eff} + \lambda^2_m + \lambda^2_n$. Zur Definition der Quaderschichten ist diese Gleichung exakt unter Berücksichtigung der Randbedingungen (3.41) aus Kapitel 3.2 zu lösen. Die Entwicklungskoeffizienten und damit die Lösung der Diffusionsgleichung für einen N-schichtigen Quader ergeben sich durch Verwendung der abschnittsweise definierten Lösungsfunktion (3.44) für $k^2 = \lambda^2_m + \lambda^2_n$.

4.1.3 Homogener Zylinder

In Bereichen der Biomedizinischen Optik finden sich Anwendungen von Lösungen der Diffusionsgleichung unter Berücksichtigung einer zylinderförmigen Begrenzung. Zum einen werden oft in Experimenten zylinderförmige Phantome eingesetzt, zum anderen entsprechen bestimmte Teile des menschlichen Körpers wie beispielsweise der Arm oder der Finger in erster Näherung einem Zylinder. Innerhalb der Literatur liegen zwar Lösungen der Diffusionsgleichung für homogene Zylinder mit unterschiedlicher Länge vor [37, 38], jedoch erfordern diese zum Teil relativ lange Rechenzeiten. Für den allgemeinen Fall der dezentralen Einstrahlung im Zeitbereich liegen die Rechenzeiten nicht selten bei einer Viertelstunde. In diesem Kapitel werden für den homogenen Zylinder Lösungen hergeleitet, welche für den allgemeinen Fall noch $\approx$ 30 Millisekunden an Rechenzeit benötigen. In Arridge *et al.* [39] ist das zweidimensionale Pendant dieser Lösung, die linienförmige Quelle im unendlich langen Zylinder angegeben, für die Punktladung im begrenzten Zylinder finden sich dort lediglich Hinweise ohne ein konkretes Endergebnis. Es folgt die Lösung der Diffusionsgleichung für einen homogenen Zylinder unter Einbezug der Randbedingung $G(\vec{r} \in \partial V', t) = 0$, wobei $\partial V'$ den Rand des um die extrapolierte Länge $2AD$ vergrößerten Zylinders kennzeichnet. Weiterhin dient dieses Kapitel als Vorbereitung auf den wichtigeren Fall des geschichteten Zylindermodells. Zu Anschauungszwecken zeigt Abbildung 4.3 den schematischen Aufbau eines endlich langen Zylinders mit Angabe aller in den Herleitungen verwendeten optischen und geometischen Größen.

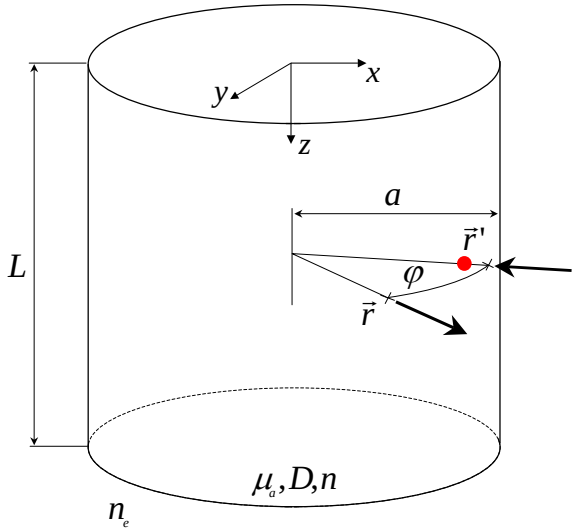

Abbildung 4.3: Aufbau eines homogenen Zylindermodells.

Lösung via modifizierte Bessel'sche Differentialgleichung

Der Frequenzbereich beinhaltet für $\omega = 0$ den Steady-State-Bereich sowie über die inverse Fouriertransformation den Zeitbereich. Die Bestimmung der zeitabhängigen Fluenz über den Frequenzbereich erweist sich für den Fall einer zylinderförmigen Geometrie in Bezug auf Rechenzeiten als vorteilhaft. Der Fall der dezentralen Einstrahlung erfordert, wie später gezeigt wird, die Iteration sämtlicher Nullstellen aller Besselfunktion erster Art mit ganzzahliger Ordnung. Infolge dieser Iteration ergeben sich je nach benötigter Genauigkeit enorm lange Rechenzeiten zur Auswertung der zeitabhängigen Lösung. Bei der folgenden Methode entfällt eine derartige Eigenwertbestimmung, stattdessen treten modifizierte Besselfunktionen mit komplexen Argumenten auf. Unter Berücksichtigung rekursiver Eigenschaften lässt sich diese Variante mit großer Zeitersparnis umsetzen. Für einen Zylinder mit endlicher Länge L werden die Eigenfunktionen aus (3.20) auf die Diffusionsgleichung

$$\nabla^2 G(\vec{r}) - \mu_{eff}^2 G(\vec{r}) = -\frac{1}{D}\delta(\vec{r} - \vec{r}\,'). \tag{4.14}$$

angewendet. Die Fluenz weist bezogen auf ihre Winkelabhängigkeit eine 2π-Periodizität auf. Periodische Funktionen sind als Fourierreihe darstellbar wodurch sich die Reihe

$$\delta(\phi - \phi') = \frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{jm(\phi-\phi')} \tag{4.15}$$

ergibt. Beide Entwicklungen kombiniert ergeben für die Greensche Funktion den Ansatz

$$G(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty} G_{lm}(\rho)\phi_{lm}^*(\phi', z')\phi_{lm}(\phi, z), \tag{4.16}$$

mit

$$\phi_{lm}(\phi, z) = \frac{\sin(\lambda_l(z + z_b))}{\sqrt{\pi(L + 2z_b)}} e^{jm\phi}. \tag{4.17}$$

Durch Substitution der Reihenansätze in Gleichung (4.14) reduziert sich diese auf die inhomogene Bessel'sche Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}G_{lm}(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}G_{lm}(\rho) - \left(\alpha^2 + \frac{m^2}{\rho^2}\right)G_{lm}(\rho) = -\frac{1}{D\rho}\delta(\rho - \rho'), \tag{4.18}$$

mit $\alpha^2 = \mu_{eff}^2 + \lambda_l^2$. Es ist

$$G_{lm}(\rho) = G_{lm}^{(h)}(\rho) + G_{lm}^{(p)}(\rho) \tag{4.19}$$

die gesuchte Lösung zusammengesetzt aus dem homogenen und partikulären Anteil. Ersterer ergibt sich aus der Besselschen Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}G_{lm}^{(h)}(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}G_{lm}^{(h)}(\rho) - \left(\alpha^2 + \frac{m^2}{\rho^2}\right)G_{lm}^{(h)}(\rho) = 0 \tag{4.20}$$

mit der allgemeinen Lösung

$$G_{lm}^{(h)}(\rho) = AI_m(\alpha\rho) + BK_m(\alpha\rho). \tag{4.21}$$

Die Funktionen $K_m(x)$ sind für $x = 0$ nicht definiert. Diese liefern keinen sinnvollen Beitrag zur Lösung und werden durch $B = 0$ ausgeschlossen. Zur Bestimmung des partikulären Anteils wird die Greensche Funktion der zweidimensionalen Diffusionsgleichung aus (3.22) nach Eigenfunktionen entwickelt. Das Additionstheorem der Besselfunktionen [22]

$$K_0(\alpha|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos(m\varphi) \begin{cases} I_m(\alpha\rho)K_m(\alpha\rho'), & \rho < \rho' \\ I_m(\alpha\rho')K_m(\alpha\rho), & \rho > \rho' \end{cases} \tag{4.22}$$

ist bereits die gesuchte Fourierreihe. Mit Einführung der Größen $\rho_< = \min\{\rho, \rho'\}$ und $\rho_> = \max\{\rho, \rho'\}$ wird dieses zu

$$K_0(\alpha|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos(m\varphi) I_m(\alpha\rho_<) K_m(\alpha\rho_>). \tag{4.23}$$

Da $K_{-m}(x) = K_m(x)$ wie auch $I_{-m}(x) = I_m(x)$ gilt, ändert sich (4.22) bei Ersatz von $\cos(m\varphi)$ durch $e^{jm\varphi}$ nicht. Die Entwicklungskoeffizienten sind

$$G_{lm}^{(p)}(\rho) = \frac{1}{D} I_m(\alpha\rho_<) K_m(\alpha\rho_>) \tag{4.24}$$

und entsprechen der Greenschen Funktion der inhomogenen modifizierten Bessel'schen Differentialgleichung. Die Randbedingung bringt die Bestimmungsgleichung

$$AI_m(\alpha a') + \frac{1}{D} I_m(\alpha\rho') K_m(\alpha a') = 0 \tag{4.25}$$

und damit den unbekannten Koeffizienten

$$A = -\frac{1}{D} \frac{I_m(\alpha\rho')K_m(\alpha a')}{I_m(\alpha a')}. \tag{4.26}$$

Die Koeffizienten der gesamten Entwicklung lauten demnach

$$G_{lm}(\rho) = \frac{1}{D} I_m(\alpha\rho_<) \left[K_m(\alpha\rho_>) - \frac{I_m(\alpha\rho_>)K_m(\alpha a')}{I_m(\alpha a')} \right]. \tag{4.27}$$

Es gibt Anwendungen, bei denen sich die Ergebnisse eines endlich langen Zylindermodells von denjenigen mit unendlicher Länge nicht signifikant unterscheiden. Mitunter verschlechtert sich die Konvergenz der Reihen bei zunehmender Länge. In diesen Fällen ist der Übergang auf ein infinites Modell sinnvoll. Die Reihendarstellung bezüglich der z-Koordinate ist durch eine kontinuierliche Fouriertransformation zu ersetzen. Dieser Wechsel ist prinzipiell möglich, beinhaltet jedoch die Auswertung eines relativ komplizierten Integrals. Eine einfachere Variante mit exakt gleichem Endergebnis ergibt sich mit Verwendung der im nächsten Abschnitt vorgestellten Zylinderfunktionen.

Entwicklung nach Zylinderfunktionen

Die trigonometrischen Eigenfunktionen ermöglichen die Begrenzung auf endliche Strukturen mit rechteckigen Querschnitt. Die Zylinderfunktionen hingegen führen zu einer kreisförmigen Berandung. Diese Funktionen bilden ebenfalls ein vollständiges und orthogonales Basissystem. Es gilt zum einen das Skalarprodukt

$$\int_0^a \rho J_m(\lambda_n \rho) J_m(\lambda_{n'} \rho) \mathrm{d}\rho = \frac{1}{2} J_{m+1}^2(\lambda_n a) \delta_{n,n'} \tag{4.28}$$

und zum anderen die Vollständigkeitsrelation

$$\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi') = \frac{1}{\pi a'^2}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\cos(m\varphi)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_m(\lambda_n\rho)J_m(\lambda_n\rho')}{J_{m+1}^2(\lambda_n a')}, \tag{4.29}$$

mit der Phasendifferenz $\varphi = \phi - \phi'$ und $a' = a + 2AD$. Die zugehörigen Eigenwerte λ_n sind die positiven Nullstellen der Gleichung $J_m(\lambda_n a') = 0$, welche in dieser Arbeit über das Halley-Verfahren iteriert wurden. Der vollständige Lösungsansatz zur Bestimmung der zeitabhängigen Greenschen Funktion ist durch

$$G(\vec{r},t) = \frac{1}{\pi a'^2}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\cos(m\varphi)\sum_{n=1}^{\infty}G_{mn}(z,t)\frac{J_m(\lambda_n\rho)J_m(\lambda_n\rho')}{J_{m+1}^2(\lambda_n a')} \tag{4.30}$$

gegeben. Es entsteht die eindimensionale Diffusionsgleichung

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}G_{mn}(z,t) + (\mu_a + D\lambda_n^2)G_{mn}(z,t) - D\frac{\partial^2}{\partial z^2}G_{mn}(z,t) = \delta(z-z')\delta(t) \tag{4.31}$$

mit der bereits bekannten Lösung

$$G_{mn}(z,t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{c}{D\pi t}}e^{-\mu_a c t}e^{-Dc\lambda_n^2 t}e^{-\frac{(z-z')^2}{4Dct}}. \tag{4.32}$$

Von nun ab sind die Lösungen für den infiniten, semi-infiniten als auch finiten Zylinder im Steady-State- und Zeitbereich bekannt. Die Methode der Spiegelquellen wird herangezogen, um die jeweilige Randbedingung in z-Richtung zu erfüllen. Als Beispiel findet sich für den infiniten Zylinder die Funktion

$$G(\vec{r},t) = \frac{1}{2\pi a'^2}\sqrt{\frac{c}{D\pi t}}e^{-\mu_a c t}e^{-\frac{(z-z')^2}{4Dct}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\cos(m\varphi)\sum_{n=1}^{\infty}e^{-Dc\lambda_n^2 t}\frac{J_m(\lambda_n\rho')J_m(\lambda_n\rho)}{J_{m+1}^2(\lambda_n a')} \tag{4.33}$$

als die zeitabhängige Fluenz bei beliebiger Quellposition $\vec{r}'$. Der Wechsel vom Zeitbereich in den Steady-State-Bereich kann für alle Zylindermodelle mit bekannten Korrespondenzen analytisch erfolgen. Für die oben angegebene Zeitfunktion findet sich im Steady-State-Bereich die Lösung

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi D a'^2}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\cos(m\varphi)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_m(\lambda_n\rho')J_m(\lambda_n\rho)}{\alpha J_{m+1}^2(\lambda_n a')}e^{-\alpha|z-z'|}, \tag{4.34}$$

mit $\alpha^2 = \mu_{eff}^2 + \lambda_n^2$.
Für den Zylinder ist zusätzlich das transmittierte Licht an der Zylindermantelfläche $\mathcal{M}$ zu beachten. Für die Orte $\vec{r} \in \mathcal{M}$ ergibt das Fick'sche Gesetz die Transmission zu

$$T(\vec{r}, t) = -D\vec{e}_\rho \nabla G(\vec{r}, t) = -D\frac{\partial}{\partial \rho} G(\vec{r}, t). \tag{4.35}$$

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Verwendung von Zylinderfunktionen aufgrund der notwendigen Nullstelleniteration größere Rechenzeiten erfordert als die Version mit den modifizierten Besselfunktionen. Dieser Nachteil wirkt sich insbesondere für den Fall der dezentralen Quellposition aus. Der entscheidende Vorteil dieser Methode liegt in der Erweiterbarkeit des homogenen Zylindermodells auf ein axial geschichtetes Modell. Im nächsten Kapitel wird diese Erweiterung unter Verwendung bisheriger Ergebnisse vorgenommen.

Die Lösungen der DE für den homogenen Zylinder wurden in [40] veröffentlicht.

4.1.4 Geschichteter Zylinder

Betrachtet wird ein geschichtetes Modell mit dem Volumen $V = \bigcup_{i=1}^{N} V_i$ bestehend aus den Teilzylindern V_i mit der physikalischen Oberfläche ∂V. Für den extrapolierten Zylinder V' wird die Mantelfläche $\mathcal{M} = \bigcup_{i=1}^{N} \mathcal{M}_i$ beibehalten. Das verwendete Zylindermodell ist schematisch in Abbildung 4.4 dargestellt.

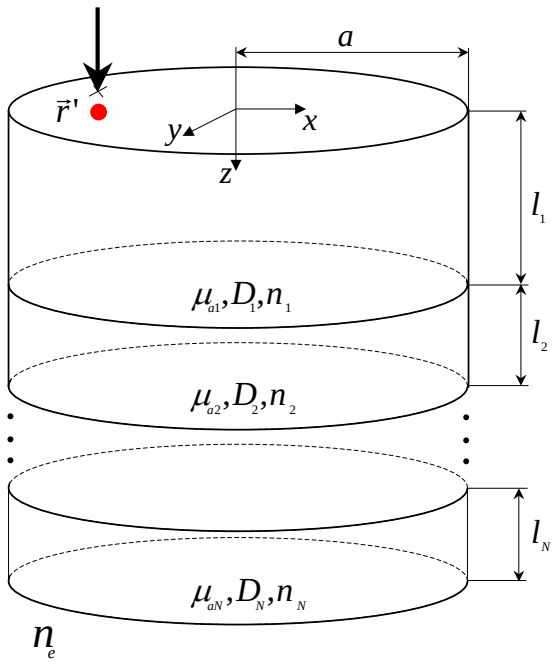

Abbildung 4.4: Axial geschichteter Zylinder.

Die Randbedingungen in z-Richtung sind analog zum lateral unbegrenzten Schichtenmodell und somit aus Kapitel 3.2 zu übernehmen. Es handelt sich demnach um dieselbe Aufgabenstellung mit der zusätzlichen lateralen Bedingung $G(\vec{r}, t) = 0$ für $\vec{r} \in \mathcal{M}$. Diese ZBC wird durch die verwendeten Zylinderfunktionen berücksichtigt. Mit dem Ansatz

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{\pi a^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos(m\varphi) \sum_{n=1}^{\infty} G_{mn}(z) \frac{J_m(\lambda_n \rho) J_m(\lambda_n \rho')}{J_{m+1}^2(\lambda_n a)} \tag{4.36}$$

entsteht die eindimensionale Diffusionsgleichung (3.36) aus Kapitel 3.2. Die Lösung für das axial geschichtete Zylindermodell ergibt sich also durch Übernahme sämtlicher Ergebnisse aus dem Kapitel des N-schichtigen Gewebeaufbaus mit dem Ersatz von k durch λ_n. Die inverse Hankeltransformation (3.34) ist durch die oben angegebene Reihendarstellung zu ersetzen. Im zeitabhängigen Fall wird erneut mit komplexwertigen Absorptionskoeffizienten gearbeitet und eine inverse Fouriertransformation durchgeführt.
Für die zeitabhängigen Lösungen ergab sich wieder über die Methode von Martelli *et al.* eine Kontrollmöglichkeit. Bei den nachfolgenden Vergleichen wird das Augenmerk auf die neu hinzu gekommene Zylindergeometrie gerichtet und daher ein zweischichtiges Modell verwendet. Martelli *et al.* haben die zeitabhängige Diffusionsgleichung für ein Zylindermodell bestehend aus bis zu drei Schichten über einen Separationsansatz gelöst. Von Seiten dieser Gruppe wurde zu Vergleichszwecken ein Fortran-Programm zur Lösung der zeitaufgelösten Diffusionsgleichung für einen zweischichtigen Zylinder nach der Methode aus [17, 27] zur Verfügung gestellt. In den nachfolgenden Vergleichen ist der Zylinder durch die Eigenschaften

Tabelle 4.1: Eigenschaften des zweischichtigen Zylinders

Schicht	$\mu_s'\,[\mathrm{mm}^{-1}]$	$\mu_a\,[\mathrm{mm}^{-1}]$	$l\,[\mathrm{mm}]$
1	1.0	0.01	2
2	1.5	0.005	3

charakterisiert. Der Brechungsindex des umgebenden Mediums ist in allen Fällen zu $n_e = 1.0$ gewählt. Die isotrop abstrahlende punktförmige Quelle befindet sich am Ort $\vec{r}_0 = (0, 0, z_0)$.
Der erste Vergleich zeigt die zeitaufgelöste Reflektanz für drei verschiedene Detektorpositionen. Die Gegenüberstellung beider Methoden ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Im zweiten Vergleich wird der Einfluss des Brechnungsindex der ersten Schicht auf das reflektierte Licht an der Grenzfläche betrachtet und in Abbildung 4.6 festgehalten. In allen Schaubildern ist die Methode von Martelli *et al.* symbolhaft gekennzeichnet.

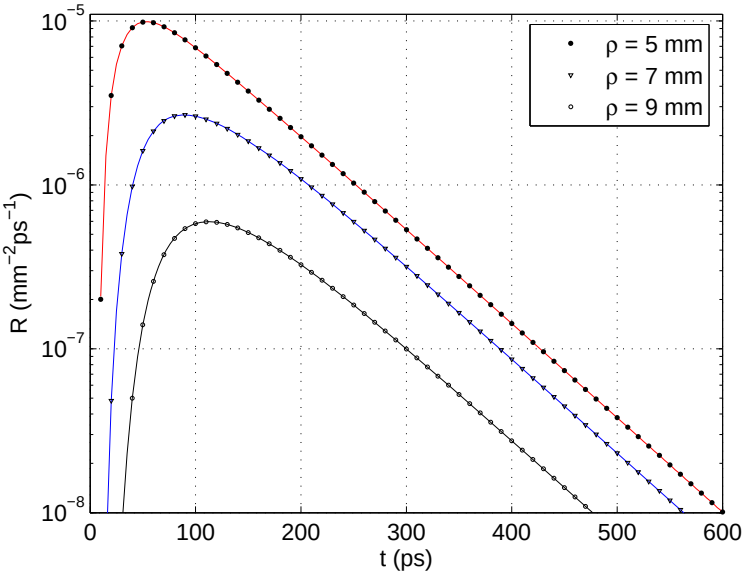

Abbildung 4.5: Zeitaufgelöste Reflektanz eines zweischichtigen Zylinders mit Radius $a = 10\,\text{mm}$. Der Brechungsindex beider Schichten beträgt $n_1 = n_2 = 1.4$.

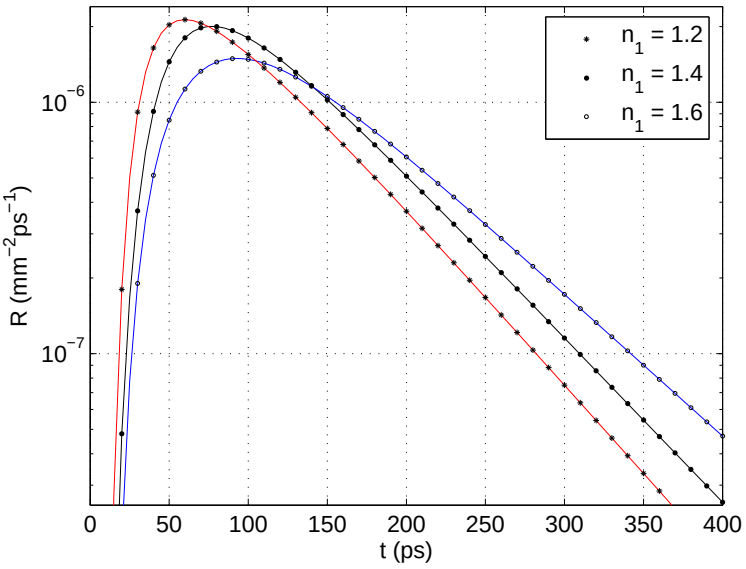

Abbildung 4.6: Zeitaufgelöste Reflektanz eines zweischichtigen Zylinders mit Radius $a = 8\,\text{mm}$ detektiert bei $\rho = 7\,\text{mm}$.

Den Abbildungen ist neben der sehr guten Übereinstimmung die Beeinflussung der Reflektanz infolge des veränderten Brechungsindex in der ersten Schicht zu entnehmen.

Für einen letzten Vergleich wird der Radius des zylinderförmigen Phantoms verändert und die sich ergebende Reflektanz in Abbildung 4.7 dargestellt.

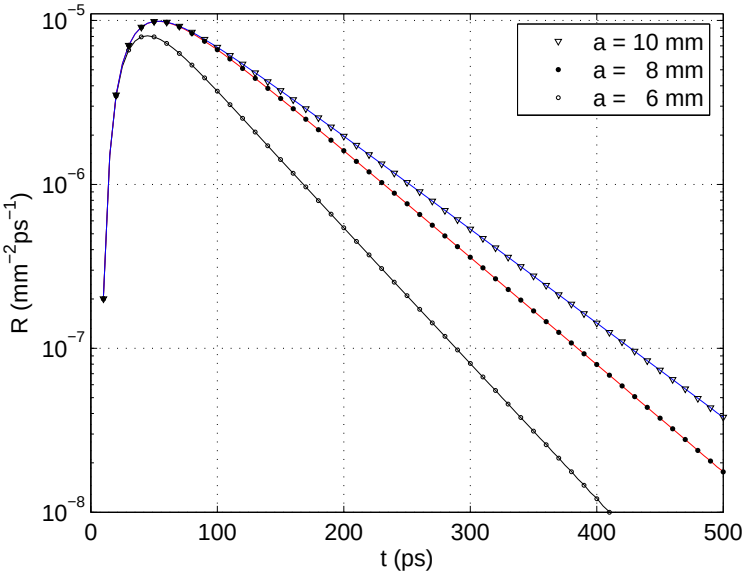

Abbildung 4.7: Zeitaufgelöste Reflektanz eines zweischichtigen Zylinders mit unterschiedlichen Radien detektiert bei $\rho = 5\,\mathrm{mm}$.

Wie aus der Graphik ersichtlich, kann bei dieser Detektorposition relativ bald mit einem lateral unendlich ausgedehnten Modell kalkuliert werden. In allen durchgeführten Vergleichen ergibt sich zwischen beiden Methoden ein relativer Unterschied von $\approx 10^{-7}$.
An dieser Stelle erfolgt eine kurze Diskussion zu beiden Methoden. Die entstehende Eigenwertgleichung bei der Methode nach [27] wurde von einer anderen Gruppe über einige Jahre hinweg nicht korrekt gelöst, da imaginäre Eigenwerte zu Beginn nicht berücksichtigt wurden. Diese Gleichung erfordert zahlreiche Fallunterscheidungen bezüglich reeller und imaginärer Eigenwerte. Ein Fehlen der imaginären Eigenwerte äußert sich dahingehend, dass Lösungen nur in ganz bestimmten Fällen mit dem korrekten Ergebnis übereinstimmen. Die exakte Lösung dieser Gleichung wurde von Martelli *et al.* innerhalb der Veröffentlichung [27] präsentiert.
Die Methode aus dieser Dissertation erfordert zwar keine Lösung einer komplizierten Eigenwertgleichung, jedoch ist die Realisierung der inversen Fouriertransformation für den zeitabhängigen Fall mit einer relativ komplexen Rechnung verbunden.
Die ortsaufgelöste Reflektanz ist im zeitaufgelösten Pendant enthalten und durch Integration über den gesamten Zeitbereich bestimmbar. Für das zweischichtige Modell aus Tabelle 4.1 wurde diese für eine zentrale und dezentrale Einstrahlposition simuliert. Aufgrund der vorherigen Kontrolle im Zeitbereich, wird auf den Nachweis der Korrektheit z. B. über die Monte Carlo Methode in Abbildung 4.8 verzichtet.

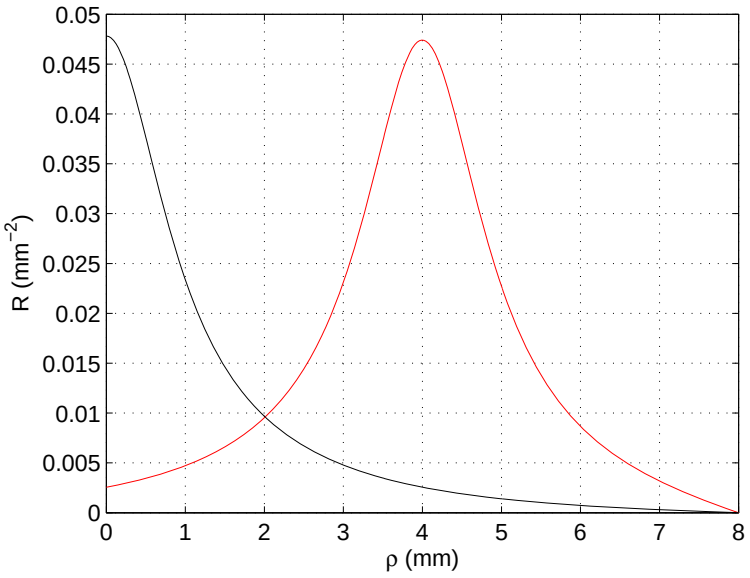

Abbildung 4.8: Ortsaufgelöste Reflektanz des zweischichtigen Zylinders mit Radius $a = 8\,\text{mm}$ bei zentraler und dezentraler Einstrahlung. Die Phasendifferenz zwischen Quelle und Detektor beträgt $\varphi = 0$.

Die Lösung der DE für den N-schichtigen Zylinder wurde in [41] veröffentlicht. Zusätzlich werden über die Internetseite [35] Simulationsprogramme zur Verfügung gestellt.

4.2 Radial geschichtete Modelle

Zur Modellbildung bestimmter Körperteile eignet sich die Verwendung radial geschichteter Geometrien. Zur Messung der Hämodynamik am Arm und Bein ist die Verwendung eines geschichteten Modells erforderlich, da die Haut und insbesondere die subkutane Fettschicht die Lichtausbreitung und somit die Messungen am Muskel stark beeinflussen. Um die Krümmung der Extremitäten genauer berücksichtigen zu können wird die Lösung der Diffusionsgleichung für ein radial geschichtetes Zylindermodell benötigt, wodurch die optischen Eigenschaften des Muskels und damit dessen Hämodynamik genauer bestimmt werden können. Das seither verwendete Modell für Arm und Bein sind ein homogenes [37, 39] oder ein zweischichtiges semi-infinites [19] Medium. In der Veröffentlichung von Sikora *et al.* [42] wurde beispielsweise eine dreischichtige Kugel zur Beschreibung der diffusen Lichtausbreitung innerhalb eines Kopfes vorgestellt.
Aus mathematischer Sicht unterscheiden sich die Lösungen der Diffusionsgleichung für die konzentrischen Kugeln und des radial geschichteten Zylinders praktisch nicht. Ist die Lösung für eine der beiden Geometrien bekannt, so ergibt sich unmittelbar das Ergebnis für die noch fehlende. In Bezug auf die erforderlichen Rechenzeiten gibt es jedoch einen deutlichen Unterschied, da das Kugelmodell im Gegensatz zum Zylindermodell als Lösung aus der zweidimensionalen Diffusionsgleichung hervorgeht. In diesem Teilabschnitt der Arbeit wird zuerst die Lösung für die konzentrischen Kugeln bestimmt und anschließend unter Verwendung der zuvor gewonnenen Ergebnisse auf das Zylindermodell übertragen.

4.2.1 Konzentrische Kugeln

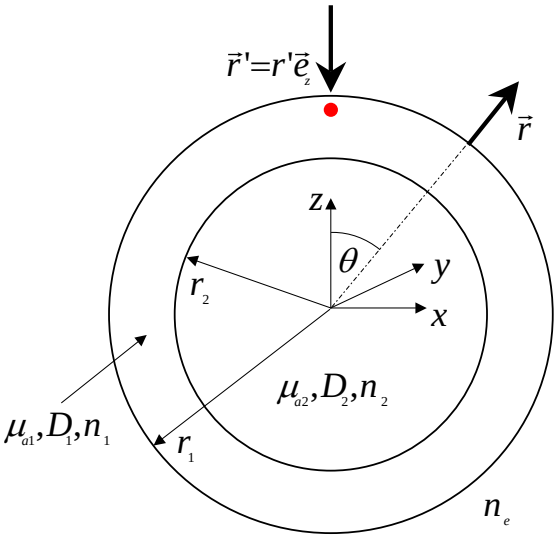

Abbildung 4.9: Konzentrische Kugeln.

In Abbildung 4.9 ist ein schematischer Aufbau für den Fall zweier konzentrisch angeordneter Kugeln mit entsprechender Bemaßung zu sehen. Die isotrop abstrahlende Punktquelle wird bei den folgenden Herleitungen entlang der z-Achse an der Stelle $z = r'$ positioniert $\Rightarrow \theta' = 0$. Der Kosinus des Winkels zwischen der z-Achse und dem Betrachtungsort $\vec{r}$ wird mit $\tau = \cos\theta$ bezeichnet. Die vorliegende Anordnung besitzt demnach keine azimutale Abhängigkeit. Zur Ermittlung der Greenschen Funktion im Steady-State-Bereich wird die zweidimensionale Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}G(r,\tau) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}G(r,\tau) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \tau}\left\{(1-\tau^2)\frac{\partial}{\partial \tau}G(r,\tau)\right\} - \mu_{\mathit{eff}}^2 G(r,\tau) = \\ -\frac{1}{2\pi D r^2}\delta(r-r')\delta(\tau-1) \tag{4.37}$$

unter Verwendung von Kugelkoordinaten betrachtet [21]. Die Einarbeitung der Randbedingungen geschieht einzig in radialer Richtung. Zur Abspaltung der Winkelabhängigkeit und Reduktion auf eine Dimension werden die Legendre Polynome betrachtet. Mit Verwendung der Vollständigkeitsrelation lässt sich die Quelle als

$$S(r,\tau) = \frac{1}{2\pi r^2}\delta(r-r')\delta(\tau-1) = \frac{\delta(r-r')}{2\pi r^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}P_l(\tau) \tag{4.38}$$

schreiben. Zur Auffindung der Greenschen Funktion wird die Reihe

$$G(r,\tau) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}G_l(r)P_l(\tau) \tag{4.39}$$

angesetzt. Aus der Legendre'schen Differentialgleichung [22] lässt sich der Zusammenhang

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left\{(1-\tau^2)\frac{\partial}{\partial \tau}P_l(\tau)\right\} = -l(l+1)P_l(\tau) \tag{4.40}$$

entnehmen. Wie in zurückliegenden Kapiteln dieser Arbeit werden die Ansätze in die entsprechende Ausgangsgleichung eingesetzt und anschließend beide Seiten miteinander verglichen, wodurch die rein radial abhängige Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}G_l(r) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}G_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}G_l(r) - \mu_{\mathit{eff}}^2 G_l(r) = -\frac{1}{2\pi D r^2}\delta(r-r') \tag{4.41}$$

als Bestimmungsgleichung resultiert. Die Lösung des quellenfreien Mediums geht aus der modifizierten sphärischen Bessel'schen Differentialgleichung [22] mit

$$G_l^{(h)}(r) = A i_l(\mu_{\mathit{eff}} r) + B k_l(\mu_{\mathit{eff}} r) \tag{4.42}$$

hervor. Zur Ermittlung der partikulären Lösung wird die Greensche Funktion des unendlich ausgedehnten Mediums über ein Additionstheorem der sphärischen Besselfunktionen [22]

$$\frac{e^{-\mu_{\mathit{eff}}|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi D|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{\mu_{\mathit{eff}}}{2\pi D}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}i_l(\mu_{\mathit{eff}} r_<)k_l(\mu_{\mathit{eff}} r_>)P_l(\tau) \tag{4.43}$$

ausgedrückt. Durch Hinschauen lässt sich

$$G_l^{(p)}(r) = \frac{\mu_{eff}}{2\pi D} i_l(\mu_{eff} r_<) k_l(\mu_{eff} r_>) \tag{4.44}$$

extrahieren. Die Randbedingungen zur Definition der konzentrischen Kugeln lauten

$$\begin{aligned} &G_l(r = r_1') = 0, \\ &n_{n+1}^2 G_l(r = r_n^-) = n_n^2 G_l(r = r_n^+), \\ &D_n \partial_r G_l(r = r_n^-) = D_{n+1} \partial_r G_l(r = r_n^+), \\ &G_l(r = 0) < \infty. \end{aligned} \tag{4.45}$$

Die isotrope Quelle wird innerhalb der äußersten Schicht positioniert. Der Ansatz zur Bestimmung der Gesamtlösung lautet

$$G_l(r) = \begin{cases} A_1 i_l(\gamma_1 r) + B_1 k_l(\gamma_1 r) + \gamma_1 i_l(\gamma_1 r_<) k_l(\gamma_1 r_>)/(2\pi D_1), & r_2 < r \leq r_1 \\ A_n i_l(\gamma_n r) + B_n k_l(\gamma_n r), & r_{n+1} < r \leq r_n \,, \end{cases} \tag{4.46}$$

mit $\gamma_i = \sqrt{\mu_{ai}/D_i}$ $(i = 1, 2, ..., N)$. Für das transmittierte Licht an der Kugeloberfläche werden die beiden Unbekannten A_1 und B_1 benötigt. Im Einklang zum axial geschichteten Modell wurde diese sehr aufwendige Berechnung für drei und vier konzentrische Kugeln durchgeführt und anschließend ein allgemeiner Lösungansatz formuliert. Die Startwerte

$$\begin{aligned} \alpha_{N-1} &= D_{N-1} n_{N-1}^2 k_l'(\gamma_{N-1} r_N) i_l(\gamma_N r_N) - D_N n_N^2 k_l(\gamma_{N-1} r_N) i_l'(\gamma_N r_N), \\ \beta_{N-1} &= D_{N-1} n_{N-1}^2 \, i_l'(\gamma_{N-1} r_N) \, i_l(\gamma_N r_N) - D_N n_N^2 i_l(\gamma_{N-1} r_N) i_l'(\gamma_N r_N), \end{aligned} \tag{4.47}$$

ergeben in Verbindung mit den Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} \alpha_n \;=\; & D_n n_n^2 \left[i_l(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \alpha_{n+1} - k_l(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \beta_{n+1} \right] k_l'(\gamma_n r_{n+1}) \\ & - D_{n+1} n_{n+1}^2 \left[i_l'(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \alpha_{n+1} - k_l'(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \beta_{n+1} \right] k_l(\gamma_n r_{n+1}), \\ \beta_n \;=\; & D_n n_n^2 \left[i_l(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \alpha_{n+1} - k_l(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \beta_{n+1} \right] i_l'(\gamma_n r_{n+1}) \\ & - D_{n+1} n_{n+1}^2 \left[i_l'(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \alpha_{n+1} - k_l'(\gamma_{n+1} r_{n+1}) \beta_{n+1} \right] i_l(\gamma_n r_{n+1}), \end{aligned} \tag{4.48}$$

die beiden Unbekannten

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{k_l(\gamma_1 r_1)}{2\pi D_1} \frac{k_l(\gamma_1 r') \beta_1 - i_l(\gamma_1 r') \alpha_1}{i_l(\gamma_1 r_1) \alpha_1 - k_l(\gamma_1 r_1) \beta_1}, \\ B_1 &= \frac{\beta_1}{2\pi D_1} \frac{i_l(\gamma_1 r') k_l(\gamma_1 r_1) - k_l(\gamma_1 r') i_l(\gamma_1 r_1)}{i_l(\gamma_1 r_1) \alpha_1 - k_l(\gamma_1 r_1) \beta_1}. \end{aligned} \tag{4.49}$$

Die Notwendigkeit der Punktquelle auf der z-Achse diente lediglich einer vereinfachten Herleitung. Für eine Quelle am Ort $\vec{r}'$ wird das Koordinatensystem gedanklich so ausgerichtet, dass sich die Quelle stets auf der z-Achse befindet. Der Kosinus des Winkels zwischen der z-Achse und dem Betrachtungsort $\vec{r}$ wird jetzt über $\tau = \vec{e}_r \cdot \vec{e}_{r'}$ definiert.

Die Lösung der homogenen Kugel mit Radius R kann direkt mit der Lösung der inhomogenen modifizierten Bessel'schen Differentialgleichung (4.18) angegeben werden. Das Ergebnis ist bis auf die Funktionsart und einem Faktor 2π identisch. Ein Vergleich liefert unmittelbar das Resultat

$$G_l(r) = \frac{1}{2\pi D} i_l(\mu_{eff} r_<) \left[k_l(\mu_{eff} r_>) - \frac{i_l(\mu_{eff} r_>) k_l(\mu_{eff} R')}{i_l(\mu_{eff} R')} \right] \tag{4.50}$$

für die Entwicklungskoeffizienten.
Die zeitabhängige Fluenz der homogenen Kugel wird mit Verwendung des komplexen Absorptionskoeffizienten $\mu_a \to \mu_a + j\omega/c$ und anschließender inverser Fouriertransformation ermittelt. Das Fourierintegral könnte in diesem Fall mit Hilfe des Residuensatzes analytisch gelöst werden. Ein einfacherer Weg ergibt jedoch die Entwicklung der Quelle nach den sphärischen Besselfunktionen

$$\frac{\delta(r - r')}{r^2} = \frac{2}{R^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{j_l(\lambda_n r) j_l(\lambda_n r')}{j_{l+1}^2(R\lambda_n)}, \tag{4.51}$$

wobei die Eigenwerte λ_n die positiven Nullstellen der Gleichung $j_l(\lambda_n R) = 0$ sind. Aus der sphärischen Bessel'schen Differentialgleichung [22] lässt sich der Zusammenhang

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) j_l(\lambda_n r) = -\lambda_n^2 j_l(\lambda_n r) \tag{4.52}$$

ablesen. Zur Lösung der rein radial abhängigen Differentialgleichung aus (4.41) wird der Ansatz

$$G_l(r) = \frac{2}{R^3} \sum_{n=1}^{\infty} G_{ln} \frac{j_l(\lambda_n r) j_l(\lambda_n r')}{j_{l+1}^2(R\lambda_n)} \tag{4.53}$$

verwendet. Die Randbedingung zum Erhalt der Kugelgeometrie ist in diesem bereits enthalten. Als Lösung der entstehenden algebraischen Gleichung findet sich

$$G_{ln} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\mu_a + D\lambda_n^2}. \tag{4.54}$$

Der Übergang auf den komplexen Absorptionskoeffizient ergibt im Frequenzbereich die Funktion

$$G_{ln}(\omega) = \frac{c}{2\pi} \frac{1}{\mu_a c + Dc\lambda_n^2 + j\omega}. \tag{4.55}$$

Das zeitabhängige Pendant zu dieser Funktion ist die kausale Exponentialfunktion [20]

$$G_{ln}(t) = \frac{c}{2\pi} e^{-\mu_a c t} e^{-Dc\lambda_n^2 t}. \tag{4.56}$$

Mit dieser ergibt sich die zeitabhängige Fluenz für die homogene Kugel

$$G(\vec{r}, t) = \frac{c}{2\pi R^3} e^{-\mu_a c t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\tau) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-Dc\lambda_n^2 t} \frac{j_l(\lambda_n r) j_l(\lambda_n r')}{j_{l+1}^2(R\lambda_n)}. \tag{4.57}$$

In der Herleitung wurde die ZBC berücksichtigt. Durch Vergrößerung des Kugelradiuses von R auf $R' = R + 2AD$ erfolgt unmittelbar der Wechsel auf die EBC. Analog zum homogenen Zylinder erfordert auch in diesem Fall die Lösung direkt im Zeitbereich aufgrund der Nullstelleniteration deutlich längere Rechenzeiten als die inverse Fouriertransformation.
Für $r' \to 0$ wandert die Punktquelle in den Ursprung wodurch sich die Fluenz zu

$$G(r,t) = \frac{c}{2\pi R^3} e^{-\mu_a c t} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-Dc\lambda_n^2 t} \frac{j_0(\lambda_n r)}{j_1^2(R\lambda_n)} \tag{4.58}$$

vereinfacht. Die sphärische Besselfunktion nullter Ordnung ist

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} = \mathrm{si}(x). \tag{4.59}$$

Für diesen Sonderfall lauten die Eigenwerte

$$\mathrm{si}(\lambda_n R) = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_n = n\pi/R, \quad n = 1, 2, ... \quad . \tag{4.60}$$

Mit der sphärischen Besselfunktion erster Ordnung

$$j_1(x) = \frac{\sin x - x\cos x}{x^2} \quad \Rightarrow \quad j_1(\lambda_n R) = j_1(n\pi) = \frac{(-1)^{n-1}}{n\pi} \tag{4.61}$$

findet sich der noch weiter vereinfachte Ausdruck

$$G(r,t) = \frac{c}{2rR^2} e^{-\mu_a c t} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin(\lambda_n r) e^{-Dc\lambda_n^2 t}. \tag{4.62}$$

Im allgemeinen Fall $r' \neq 0$ wurden die Eigenwerte analog zu denen der Zylinderfunktionen nach dem Halley-Verfahren bestimmt. Das transmittierte Licht an der Kugeloberfläche der geschichteten Kugel geht aus dem Fick'sche Gesetz

$$T(\tau) = -D_1 \, \vec{n} \cdot \nabla G(\vec{r})|_{\vec{r}\in\partial V} = -D_1 \frac{\partial}{\partial r} G(r,\tau)|_{r=r_1} \tag{4.63}$$

hervor. Im folgenden Vergleich werden zwei verschiedene Aspekte untersucht. Zum einen sollen die rekursiven Beziehungen auf Richtigkeit getestet werden, zum anderen ergibt sich die Möglichkeit die iterierten Eigenwerte sowie die inverse Fouriertransformation auf Genauigkeit und Korrektheit zu überprüfen. Die zeitaufgelöste Transmission einer homogenen Kugel soll hierzu auf zwei verschiedene Arten simuliert werden. Die erste Möglichkeit bietet die Greensche Funktion direkt im Zeitbereich (4.57). Alternativ dazu werden 10 konzentrische Kugeln mit gleichen optischen Eigenschaften und den Radien $r_i = (11 - i)$ mm $(i = 1, 2, ..., 10)$ zu einem homogenen Körper zusammmengesetzt. Die isotrope Punktquelle ist dabei innerhalb der äußersten Schicht zu platzieren. Die erste Methode benötigt die Eigenwerte, bei der zweiten erfolgt der Wechsel aus dem Frequenzbereich in den Zeitbereich numerisch über die inverse Fouriertransformation. In Abbildung 4.10 ist die zeitaufgelöste Transmission für drei verschiedene Orte auf der Kugeloberfläche zu sehen. Die durchgehenden Linien entsprechen jeweils der Eigenwertmethode, die Werte der inversen Fouriertransformation sind symbolisch dargestellt. Für das umgebende Medium wird ein Brechungsindex von $n_e = 1.0$ angenommen.

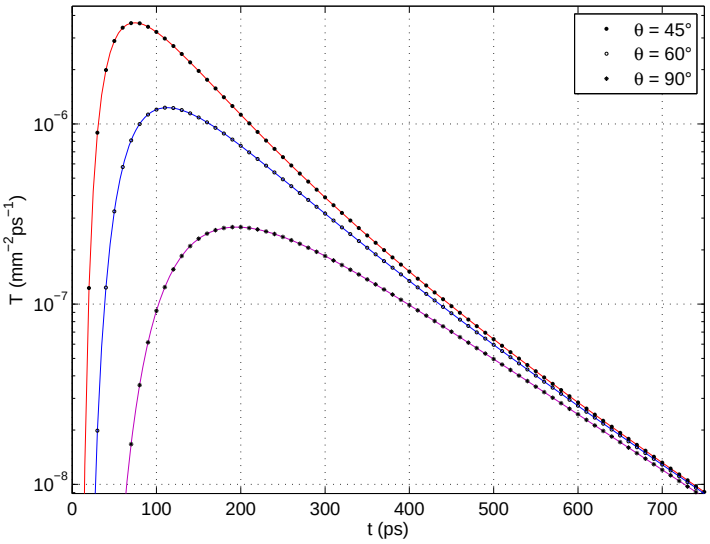

Abbildung 4.10: Zeitaufgelöste Transmission einer homogenen Kugel an drei verschiedenen Orten auf der Oberfläche. Die optischen Eigenschaften sind $\mu_a = 0.01\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $\mu'_{s1} = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$. Der Kugelradius ist zu $R = 10\,\mathrm{mm}$ gewählt, der Abstand der Quelle zum Zentrum beträgt $r' = 9.5\,\mathrm{mm}$. Der Brechungsindex der Kugel beträgt $n = 1.4$.

Die Transmission stimmt für alle Detektorpositionen sehr gut überein. Der relative Unterschied zwischen beiden Verfahren liegt bei $\approx 10^{-7}$. Der Unterschied zwischen der jeweiligen Rechenzeit ist dagegen enorm. Die an sich weitaus kompliziertere 10-schichtige Kugel ist in diesem Vergleich ungefähr 100 mal schneller ausgewertet als der direkt im Zeitbereich vorliegende Ausdruck.
Eine weitere wichtige Kontrollmöglichkeit zur Überprüfung der rekursiven Ausdrücke, sowohl für die konzentrischen Kugeln, als auch für das lateral unendlich ausgedehnte Schichtenmodell, stellt ein Vergleich zwischen diesen beiden Geometrien dar. Hierzu wird der Kugelradius sehr groß gewählt, so dass näherungsweise ein lateral unendlich ausgedehntes Modell entsteht. Obendrein ist dieser Vergleich im Falle der Kugeln relativ anspruchsvoll, da bei derartigen Abmessungen relativ viele Legendre Polynome benötigt werden. Verwendet wird das 6-schichtige Medium aus Tabelle 3.1 mit dem Unterschied, dass die 6. Schicht jetzt unendlich dick angenommen wird. Es soll die zeitaufgelöste Transmission für zwei verschiedene Positionen der Quelle innerhalb der äußersten Kugelschicht bzw. der ersten Schicht des lateral unendlich ausgedehnten Schichtenmodells betrachtet werden. Die Detektion erfolgt unmittelbar oberhalb der Quelle. Die Ergebnisse aus diesem Vergleich sind im nachfolgenden Schaubild zu sehen. Die Symbole repräsentieren die Transmission des 'originalen' lateral unendlich ausgedehnten Modells. Der Brechungsindex der Umgebung bleibt unverändert.

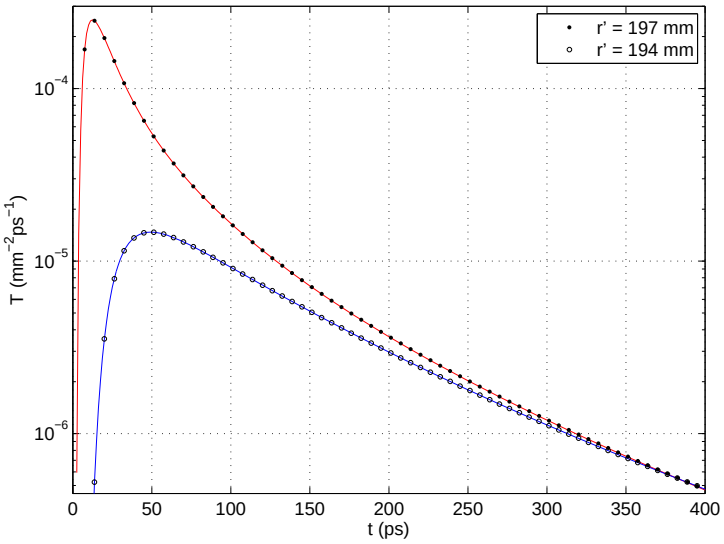

Abbildung 4.11: Zeitaufgelöste Transmission für zwei verschiedene Positionen der isotropen Punktquelle. Der Radius des geschichteten Kugelmodells ist zu $R = 200\,\mathrm{mm}$ gewählt.

Die Ergebnisse beider Modelle konvergieren für die gewählten Abmaße zu ein und derselben Transmission.

4.2.2 Geschichteter Zylinder

Das radial geschichtete Zylindermodell eignet sich zur Nachbildung von Extremitäten wie beispielsweise eines Unterarmes oder Oberschenkels. Aufgrund der vorliegenden Länge kann bei den Herleitungen von einem unendlich langen Zylinder ausgegangen werden. Die angenommene isotrope Punktquelle befindet sich analog zum Kugelmodell in der äußersten Schicht. Für einen radial geschichteten Zylinder bestehend aus drei unterschiedlichen Schichten zeigt Bild 4.12 eine Schnittdarstellung durch die Ebene $z = z'$ mit allen verwendeten Größen.

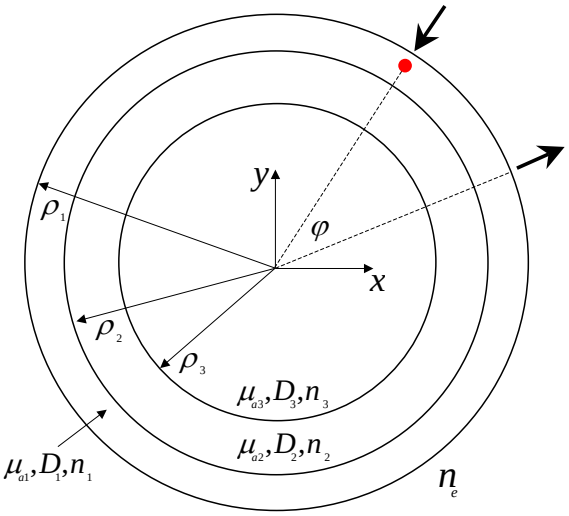

Abbildung 4.12: Radial geschichteter Zylinder.

Die Quelle wird bei dieser Anordnung in zwei Dimensionen einer Entwicklung unterzogen. In Bezug auf die azimutale Abhängigkeit wird deren Periodizität ausgenutzt und die Fourierreihendarstellung aus (4.15) übernommen. Die unendliche Ausdehnung in z-Richtung erfordert eine kontinuierliche Entwicklung in Form eines Fourierintegrals. Für diesen Teil der Quelle gilt der Zusammenhang

$$\delta(z - z') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos[k(z - z')] \mathrm{d}k. \tag{4.64}$$

Der gesamte Quellterm wird damit zu

$$S(\vec{r}) = \frac{1}{\rho}\delta(\rho - \rho')\delta(\phi - \phi')\delta(z - z') = \frac{\delta(\rho - \rho')}{2\pi^2\rho} \int_0^\infty \cos[k(z - z')] \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{jl\varphi} \mathrm{d}k. \tag{4.65}$$

Beide Entwicklungen kombiniert ergeben für die Greensche Funktion den Ansatz

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \cos[k(z - z')] \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l(\rho, k) e^{jl\varphi} \mathrm{d}k. \tag{4.66}$$

Es entsteht die inhomogene modifizierte Bessel'sche Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}G_l(\rho,k)+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}G_l(\rho,k)-\left(\gamma^2+\frac{l^2}{\rho^2}\right)G_l(\rho,k)=-\frac{1}{D\rho}\delta(\rho-\rho'), \tag{4.67}$$

mit $\gamma=\sqrt{\mu_{eff}^2+k^2}$. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung wurde bereits innerhalb des Kapitels 4.1.3 bestimmt und ist deshalb bekannt. Der komplette Lösungsansatz unter Berücksichtigung einer beliebigen Anzahl an unterschiedlichen Schichten lautet damit

$$G_l(\rho,k)=\begin{cases}A_1I_l(\gamma_1\rho)+B_1K_l(\gamma_1\rho)+1/D_1I_l(\gamma_1\rho_<)K_l(\gamma_1\rho_>), & \rho_2<\rho\leq\rho_1\\ A_nI_l(\gamma_n\rho)+B_nK_l(\gamma_n\rho), & \rho_{n+1}<\rho\leq\rho_n\,,\end{cases} \tag{4.68}$$

wobei $\gamma_i=\sqrt{\mu_{ai}/D_i+k^2}$ $(i=1,2,...,N)$. Die radialen Randbedingungen sind analog zu denen der konzentrischen Kugeln und lauten

$$\begin{aligned}&G_{1l}(\rho=\rho_1',k)=0,\\ &n_{n+1}^2G_{nl}(\rho=\rho_n^-,k)=n_n^2G_{n+1l}(\rho=\rho_n^+,k),\\ &D_n\partial_\rho G_{nl}(\rho=\rho_n^-,k)=D_{n+1}\partial_\rho G_{n+1l}(\rho=\rho_n^+,k),\\ &G_{Nl}(\rho=0,k)<\infty.\end{aligned} \tag{4.69}$$

Die Lösung dieser Aufgabenstellung ist, wie bereits erwähnt, mit der Lösung für die konzentrischen Kugeln bekannt. In diesem Fall führen die Startwerte

$$\begin{aligned}\alpha_{N-1}&=D_{N-1}n_{N-1}^2K_l'(\gamma_{N-1}\rho_N)I_l(\gamma_N\rho_N)-D_Nn_N^2K_l(\gamma_{N-1}\rho_N)I_l'(\gamma_N\rho_N),\\ \beta_{N-1}&=D_{N-1}n_{N-1}^2\,I_l'(\gamma_{N-1}\rho_N)\,I_l(\gamma_N\rho_N)\,-D_Nn_N^2I_l(\gamma_{N-1}\rho_N)I_l'(\gamma_N\rho_N),\end{aligned} \tag{4.70}$$

in Verbindung mit den Rekursionsformeln

$$\begin{aligned}\alpha_n\;=\;&D_nn_n^2\left[I_l(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\alpha_{n+1}-K_l(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\beta_{n+1}\right]K_l'(\gamma_n\rho_{n+1})\\ &-D_{n+1}n_{n+1}^2\left[I_l'(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\alpha_{n+1}-K_l'(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\beta_{n+1}\right]K_l(\gamma_n\rho_{n+1}),\\ \beta_n\;=\;&D_nn_n^2\left[I_l(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\alpha_{n+1}-K_l(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\beta_{n+1}\right]I_l'(\gamma_n\rho_{n+1})\\ &-D_{n+1}n_{n+1}^2\left[I_l'(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\alpha_{n+1}-K_l'(\gamma_{n+1}\rho_{n+1})\beta_{n+1}\right]I_l(\gamma_n\rho_{n+1}),\end{aligned} \tag{4.71}$$

zu den beiden Konstanten

$$\begin{aligned}A_1&=\frac{K_l(\gamma_1\rho_1)}{D_1}\frac{K_l(\gamma_1\rho')\beta_1-I_l(\gamma_1\rho')\alpha_1}{I_l(\gamma_1\rho_1)\alpha_1-K_l(\gamma_1\rho_1)\beta_1},\\ B_1&=\frac{\beta_1}{D_1}\frac{I_l(\gamma_1\rho')K_l(\gamma_1\rho_1)-K_l(\gamma_1\rho')I_l(\gamma_1\rho_1)}{I_l(\gamma_1\rho_1)\alpha_1-K_l(\gamma_1\rho_1)\beta_1}.\end{aligned} \tag{4.72}$$

Für das transmittierte Licht des radial geschichteten Zylindermodells ergibt das Fick'sche Gesetz den Zusammenhang

$$T(\varphi,z)=-D_1\,\vec{n}\cdot\nabla G(\vec{r})|_{\vec{r}\in\partial V}=-D_1\frac{\partial}{\partial\rho}\,G(\rho,\varphi,z)|_{\rho=\rho_1}\,. \tag{4.73}$$

5 Simplified Spherical Harmonics Methode

Die Diffusionsgleichung als die erste Entwicklungsstufe der RTE wird innerhalb ihres Gültigkeitsbereichs erfolgreich zur Approximation dieser aus mathematischer Sicht weitaus komplizierteren Integro-Differentialgleichung eingesetzt. Problematisch erweist sich die Beschreibung der Lichtausbreitung unter Verwendung der Diffusionstheorie im Falle von geringen Abständen zwischen Quelle und Detektor, stark absorbierenden Medien, kurze Zeiten sowie Kombinationen aus den genannten Faktoren. Die *Simplified Spherical Harmonics* Methode [9] mit den zugrundeliegenden SP_N Gleichungen werden erst seit einigen Jahren zur Beschreibung der Lichtausbreitung in biologischem Gewebe eingesetzt. Innerhalb des Neutronentransports sind diese Gleichungen bereits über einen sehr viel längeren Zeitraum involviert und einst für diese Teildisziplin der Physik aus der Strahlungstransfergleichung abgeleitet worden [43]. Die Motivation, diese Art von Gleichungen auch in Bereichen der Biomedizinischen Optik einzubringen, liegt in der einfacheren mathematischen Zugänglichkeit im Vergleich zur exakteren *Spherical Harmonics* Methode [1, 2, 14]. Abgekürzt wird diese Theorie als P_N Methode bezeichnet. Hierbei werden sämtliche Größen der RTE nach Kugelflächenfunktionen entwickelt. Für eine unendlich große Approximationsordnung $N \to \infty$ strebt diese Entwicklung gegen die exakte Lösung der RTE. Ein Abbruch nach Erreichen der Ordnung N resultiert in $(N+1)^2$ gekoppelten partiellen Differentialgleichungen. Lediglich im planarsymmetrischen Medium sind die Ergebnisse der P_N und SP_N Gleichungen identisch. Die mathematisch einfachere Handhabung der SP_N Gleichungen hat jedoch Konsequenzen auf das Konvergenzverhalten der resultierenden Lösungen. Die geltenden Randbedingungen innerhalb der Kernphysik sind nicht ohne weiteres auf den Photonentransport übertragbar. Im Jahre 2006 präsentierten Klose und Larsen in ihrer Studie [9] die Herleitung der SP_N Gleichungen samt ihrer zugehörigen Randbedingungen im Steady-State-Bereich, um diese Theorie erfolgreich zur Beschreibung der Lichausbreitung einsetzen zu können. Weiterhin wurde eine Beziehung zur Bestimmung der Reflektanz innerhalb dieser Theorie hergeleitet. Im darauffolgenden Jahr 2007 wurden von Frank *et al.* in [44] die zeitabhängigen SP_N Gleichungen auf zwei verschiedene Arten hergeleitet und unter Verwendung der Finiten-Differenzen-Methode gelöst. Die SP_N Gleichungen im Frequenz- und Zeitbereich sowie deren Umsetzung mit der Methode der finiten Elemente wurden in [13] und [45] diskutiert.
Eine Literaturrecherche in Bezug auf verfügbare analytische Lösungen zu den SP_N Gleichungen verlief ergebnislos. Im Verlauf dieses Kapitels werden erstmalig analytische Lösungen der SP_N Gleichungen vorgestellt und validiert.

5.1 Eindimensionale P_N Gleichungen

Die Basis der SP_N Gleichungen bilden die eindimensionalen P_N Gleichungen mit den zugehörigen Randbedingungen aus der Transporttheorie. Dieses System unendlich vieler gekoppelter Differentialgleichungen wird aus der RTE für ein planarsymmetrisches Medium abgeleitet. Anschaulich gesprochen wird anstatt einer Punktquelle im dreidimensionalen Raum eine unendlich ausgedehnte flächenhafte Quelle betrachtet. In diesem Unterkapitel wird das System der eindimensionalen P_N Gleichungen aus einer zeitunabhängigen Version der RTE abgeleitet. Ein geeignetes Modell zur Beschreibung des Photonentransports in einem planarsymmetrischen Medium ist durch die Integro-Differentialgleichung [1, 2, 9]

$$\tau \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\tau) + \mu_t \psi(x,\tau) = \mu_s \int_{-1}^{1} f(\tau,\tau')\psi(x,\tau')\mathrm{d}\tau' + S(x,\tau) \tag{5.1}$$

mit

$$f(\tau,\tau') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} f_n P_n(\tau) P_n(\tau') \tag{5.2}$$

sowie den Entwicklungskoeffizienten

$$f_n = \int_{-1}^{1} f(\xi) P_n(\xi)\mathrm{d}\xi \tag{5.3}$$

gegeben. Die Lösung dieser Gleichung für die Quelle $S(x,\tau)$ ist die Strahldichte $\psi(x,\tau)$. Diese ist ein Maß für die Strahlstärke pro Flächeneinheit am Betrachtungsort x in Richtung des Einheitsvektors $\vec{\Omega}$. Die Größe $\tau = \vec{\Omega}\cdot\vec{e}_x$ ist der Kosinus des Winkels zwischen der betrachteten Richtung und dem Einheitsvektor $\vec{e}_x$ der x-Achse. Die Funktion $f(\tau,\tau')$ repräsentiert eine azimutal unabhängige Phasenfunktion. Eine verallgemeinerte Darstellung der Phasenfunktion lässt mit Verwendung von Kugelflächenfunktionen [14, 46] durch

$$\begin{aligned} f(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}') &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\tau',\varphi') Y_{lm}(\tau,\varphi) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l \sum_{m=-l}^{l} \frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{lm}(\tau) P_{lm}(\tau') e^{jm(\varphi-\varphi')}. \end{aligned} \tag{5.4}$$

angeben. Die oben angegebene azimutal unabhängige Darstellung entsteht durch Integration des verallgemeinerten Ausdrucks über φ und unter Berücksichtigung des Skalarprodukts

$$\int_{0}^{2\pi} e^{-jm\varphi'} e^{jm\varphi}\mathrm{d}\varphi' = 2\pi\delta_{m,0}. \tag{5.5}$$

Die Phasenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit welcher ein Photon aus der Richtung $\vec{\Omega}'$ kommend in Richtung $\vec{\Omega}$ gestreut wird. Es gilt die Normierung

$$\int_{4\pi} f(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}')\mathrm{d}\Omega' = 1. \tag{5.6}$$

In zurückliegenden Kapiteln dieser Arbeit wurde zur Bestimmung von Lösungen der Diffusionsgleichung die Methode der Entwicklung nach bestimmten Eigenfunktionen bereits erfolgreich angewendet. Die Arbeit mit der RTE kann in ähnlicher Weise fortgesetzt werden. Im ersten Schritt wird diese Gleichung in eine winkelunabhängige Darstellung überführt. Ein geeignetes Basissystem zur Abspaltung der Winkelinformation wird durch die Legendre Polynome bereitgestellt. Diese bilden analog zu den harmonischen Wellen der Fourierreihe ein vollständiges Orthogonalsystem. Die P_N Gleichungen sind in diesem Zusammenhang nichts anderes als ein System von Bestimmungsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten der Legendre Polynome. Innerhalb der RTE sind alle winkelabhängigen Größen nach diesen Polynomen zu entwickeln. Für die Strahldichte wird die Reihendarstellung

$$\psi(x,\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2}\phi_n(x)P_n(\tau) \tag{5.7}$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$\phi_n(x) = \int_{-1}^{1} \psi(x,\tau)P_n(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{5.8}$$

angesetzt. In der Literatur werden diese Koeffizienten mitunter auch als Legendre-Momente bezeichnet [9] und ergeben sich in ähnlicher Art und Weise wie die Koeffizienten der Fourierreihe durch Anwendung des Skalarprodukts

$$\int_{-1}^{1} P_n(\tau)P_m(\tau)\mathrm{d}\tau = \frac{2}{2n+1}\delta_{n,m}. \tag{5.9}$$

Analog dazu ist für die Quelle

$$S(x,\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2}s_n(x)P_n(\tau) \tag{5.10}$$

mit

$$s_n(x) = \int_{-1}^{1} S(x,\tau)P_n(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{5.11}$$

anzusetzen. Die formulierten Reihendarstellungen werden in die RTE eingesetzt und die Rekursionsbeziehung der Legendre Polynome [22]

$$\tau P_n(\tau) = \frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(\tau) + \frac{n}{2n+1}P_{n-1}(\tau) \tag{5.12}$$

berücksichtigt. Zu beachten sei, dass durch die Verwendung dieser Rekursionsbeziehung eine Indexverschiebung in den Reihen vorgenommen werden muss, um identische Reihenglieder miteinander vergleichen zu können. Die Literatur zur Transporttheorie beinhaltet unter anderem die Bedingung $\phi_{-1}(x) = 0$ [9]. Diese resultiert aus der erforderlichen Indexverschiebung und dient somit zum Zwecke der Herleitung, nicht jedoch für die eigentliche Arbeit mit diesen Gleichungen. Die Entwicklungen liegen nun in aufbereiteter Form vor. Der Vergleich beider Seiten ergibt das unendlichdimensionale System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{n+1}{2n+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_{n+1}(x) + \frac{n}{2n+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_{n-1}(x) + \mu_{an}\phi_n(x) = s_n(x) \tag{5.13}$$

zur Bestimmung der Legendre-Momente mit $\mu_{an} = \mu_a + (1 - f_n)\mu_s$ als Absorptionsmomente. Ein Abbruch nach Erreichen der Ordnung N resultiert in der sogenannten P_N Approximation. Es werden dann lediglich die ersten $N + 1$ Gleichungen für $n = 0, 1, ..., N$ berücksichtigt und $\phi_{N+1}(x) = 0$ gesetzt. In P_N Approximation wird die Strahldichte zur endlichen Reihe

$$\psi(x, \tau) = \sum_{n=0}^{N} \frac{2n+1}{2}\phi_n(x)P_n(\tau). \tag{5.14}$$

Die erfolgten Herleitungen sind in Bezug auf die Phasenfunktion mit vorausgesetzter azimutaler Unabhänigkeit allgemein gehalten. Für die häufig verwendete Henyey-Greenstein Phasenfunktion

$$f(\cos\theta) = \frac{1}{2}\frac{1-g^2}{(1+g^2-2g\cos\theta)^{3/2}} \tag{5.15}$$

gelten die Koeffizienten $f_n = g^n \;\forall\; n \in \mathbb{N}_0$. In einem späteren Vergleich wird von der Rayleigh-Phasenfunktion

$$f(\cos\theta) = \frac{3}{8}(1+\cos^2\theta) = \frac{1}{2}P_0(\cos\theta) + \frac{1}{4}P_2(\cos\theta) \tag{5.16}$$

Gebrauch gemacht. Mit der Berechnungsvorschrift (5.3) finden sich die erforderlichen Koeffizienten zu $f_n = \delta_{n,0} + \frac{1}{10}\delta_{n,2}$. Weitere Typen von Phasenfunktionen können aus Linearkombinationen gebildet werden. Für die kompliziertere Power-Funktion

$$f(\cos\theta) = \frac{1}{2}\frac{\eta+1}{2^\eta}(1+\cos\theta)^\eta, \quad \eta = \frac{2g}{1-g} \tag{5.17}$$

sind die Koeffizienten ebenfalls noch in der geschlossenen Form

$$f_n = \prod_{m=1}^{n} \frac{\eta+1-m}{\eta+1+m} \tag{5.18}$$

darstellbar [47]. Zur Ermittlung analytischer Lösungen dieser Differentialgleichungen wird ausschließlich von der isotropen Quelle $S(x, \tau) = S(x)/2$ ausgegangen. Zu diesem

Quelltyp gehören die Koeffizienten

$$s_n(x) = \frac{S(x)}{2} \int_{-1}^{1} P_n(\tau) \mathrm{d}\tau = S(x)\delta_{n,0}. \tag{5.19}$$

In diesem Fall handelt es sich bei allen P_N Gleichungen ausgenommen für $n = 0$ um homogene Differentialgleichungen. Im nächsten Unterkapitel wird aus diesen Gleichungen die vereinfachte SP_N Theorie abgeleitet.

5.2 SP_N Gleichungen im Steady-State-Bereich

Die SP_N Gleichungen entstehen aus den eindimensionalen P_N Gleichungen durch Elimination der ungeradzahligen Legendre-Momente. Nach Einführung sogenannter gemischter Momente ergibt sich als Ergebnis ein System von gekoppelten Diffusionsgleichungen. Innerhalb der SP_N Theorie werden Ergebnisse einer planarsymmetrischen Anordnung auf ein dreidimensionales Medium durch den Austausch von Differentialoperatoren übertragen. Im Gegensatz dazu gestaltet sich die Analyse von dreidimensionalen Anordnungen unter Verwendung der exakteren P_N Theorie als weitaus komplizierter. Das prinzipielle Vorgehen wird im folgenden aufgezeigt. Aus dem System der P_N Gleichungen (5.13) ergeben sich Legendre-Momente für jedes ungerade $n \geq 1$ zu

$$\phi_n(x) = -\frac{1}{\mu_{an}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[\frac{n+1}{2n+1} \phi_{n+1}(x) + \frac{n}{2n+1} \phi_{n-1}(x) \right]. \tag{5.20}$$

In den P_N Gleichungen werden ungeradzahlige Legendre-Momente durch diesen Ausdruck ersetzt, wodurch für jedes geradzahlige n aus dem Intervall $0 \leq n \leq N-1$ gekoppelte Differentialgleichungen 2. Ordnung

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\mu_{an+1}} \frac{n+1}{2n+1} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left[\frac{n+1}{2n+3} \phi_{n+2}(x) + \frac{n+1}{2n+3} \phi_n(x) \right] \\ &+ \frac{1}{\mu_{an-1}} \frac{n}{2n+1} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left[\frac{n}{2n-1} \phi_n(x) + \frac{n-1}{2n-1} \phi_{n-2}(x) \right] - \mu_{an} \phi_n(x) = -S(x)\delta_{n,0}, \end{aligned} \tag{5.21}$$

mit $\phi_{N+1}(x) = 0$ entstehen. Der Wechsel aus dem planarsymmetrischen Medium in den dreidimensionalen Raum erfolgt mit dem Austausch des Differentialoperators $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ durch sein dreidimensionales Pendant ∇^2. Desweiteren werden die in den Randbedingungen auftretenden Richtungsableitungen an der Mediumsgrenze durch die Gradientenbildung entlang der nach außen weisenden Flächennormalen ersetzt. Die Berechnung der Reflektanz erfolgt ebenfalls im planarsymmetrischen Medium und wird anschließend übertragen. Das reflektierte Licht an einem Grenzpunkt $x \in \partial V$ ist über

$$R(x) = \int_{0}^{1} [1 - R_{fres}(\tau)] \tau \psi(x, \tau) \mathrm{d}\tau \tag{5.22}$$

definiert [9]. Derartige Rückschlüsse sind innerhalb der P_N Theorie nicht möglich. Die momentan vorliegenden SP_N Gleichungen haben noch nicht den Charakter von gekoppelten Diffusionsgleichungen. Diese Umformung wird etwas später bei der Ermittlung analytischer Lösungen der SP_3 Gleichungen aufgezeigt. Die Arbeit mit den SP_N Gleichungen und den zugehörigen Randbedingungen ist für verschiedene Geometrien auf der Basis analytischer Lösungsansätze möglich. Im zeitunabhängigen Fall ist die Diffusionstheorie als erste Entwicklungsstufe durch die SP_1 Gleichung gegeben. Für $N = 1$ ergibt sich aus (5.21) die Bestimmungsgleichung für die Fluenz

$$\nabla^2\phi_0(\vec{r}) - \mu_{\mathit{eff}}^2\phi_0(\vec{r}) = -\frac{1}{D}S(\vec{r}) \tag{5.23}$$

in Form der klassischen Diffusionsgleichung. Die zugehörige SP_1 Randbedinung für Orte $\vec{r} \in \partial V$ auf dem Rand des Mediums V ist durch

$$\left(\frac{1}{2} - R_1\right)\phi_0(\vec{r}) + \left(\frac{1+3R_2}{3\mu_{a1}}\right)\vec{n}\,\nabla\phi_0(\vec{r}) = \int\limits_{\vec{\Omega}\cdot\vec{n}<0} S(\vec{\Omega})2|\vec{\Omega}\cdot\vec{n}|\mathrm{d}\Omega \tag{5.24}$$

gegeben und entspricht der *partial-current boundary condition* (PCBC) [9]. Die Integration über den Quellterm liefert bei Annahme einer Punktquelle innerhalb des Mediums keinen Beitrag. Die Lösung der DE unter Berücksichtigung dieser Randbedingung ist komplizierter als bei Verwendung der EBC. Im folgenden dient eine homogene Kugel mit einer im Zentrum befindlichen isotropen Punktquelle zur Gegenüberstellung beider Randbedingungen. Zuvor wird die DE unter Einbezug der PCBC gelöst. Die Kugel sei durch den Radius R sowie die nach außen weisende Flächennormale $\vec{n} = \vec{e}_r$ charakterisiert. Mit Verwendung von Kugelkoordinaten ist die Gleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\phi_0(r) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\phi_0(r) - \mu_{\mathit{eff}}^2\phi_0(r) = -\frac{\delta(r)}{4\pi D r^2} \tag{5.25}$$

unter der Bedingung

$$\left(\frac{1}{2} - R_1\right)\phi_0(r=R) + D(1+3R_2)\frac{\partial}{\partial r}\phi_0(r)|_{r=R} = 0 \tag{5.26}$$

zu lösen. Die allgemeine Lösung setzt sich wieder aus dem homogenen und partikulären Anteil zusammen. Für die homogene Lösung wird der Ansatz

$$\phi_0^{(h)}(r) = \frac{e^{\lambda r}}{r} \tag{5.27}$$

verwendet. Aus der charakteristischen Gleichung ergibt sich mit den Wurzeln $\lambda = \pm\mu_{\mathit{eff}}$

$$\phi_0^{(h)}(r) = \tilde{A}\frac{e^{\mu_{\mathit{eff}} r}}{r} + \tilde{B}\frac{e^{-\mu_{\mathit{eff}} r}}{r}. \tag{5.28}$$

Diese Darstellung ist etwas ungünstig, da zwei Konstanten zu bestimmen sind. Geschickter erweist sich die Verwendung der modifizierten sphärischen Besselfunktionen nullter Ordnung $i_0(x) = x^{-1}\sinh(x)$ und $k_0(x) = x^{-1}e^{-x}$ [22]. Daraus resultiert

$$\phi_0^{(h)}(r) = Ai_0(\mu_{\mathit{eff}} r) + Bk_0(\mu_{\mathit{eff}} r). \tag{5.29}$$

Im quellenfreien Medium muss die Lösung im Koordinatenursprung endlich sein was durch $B = 0$ gewährleistet wird. Die partikuläre Lösung ist die Greensche Funktion des unendlichen Mediums

$$\phi_0^{(p)}(r) = \frac{e^{-\mu_{eff} r}}{4\pi D r}. \tag{5.30}$$

Mit der gemischten Dirichlet-Neumann-Bedingung findet sich die zweite Konstante zu

$$A = \frac{1}{4\pi D} \frac{2\mu_{eff} D(1+3R_2)k_1(\mu_{eff} R) - (1-2R_2)k_0(\mu_{eff} R)}{2\mu_{eff} D(1+3R_2)i_1(\mu_{eff} R) + (1-2R_2)i_0(\mu_{eff} R)}. \tag{5.31}$$

Ein analoges Resultat ergibt sich mit Verzicht auf die Besselfunktionen und der Einarbeitung der Quellenbedingung

$$\lim_{r \to 0} 4\pi r^2 |J(r)| = 1. \tag{5.32}$$

Der Ersatz der PCBC durch die EBC würde die Konstante

$$A = -\frac{\mu_{eff}}{4\pi D} \frac{e^{-\mu_{eff} R'}}{\sinh(\mu_{eff} R')}, \quad R' = R + 2AD, \tag{5.33}$$

zur Folge haben. Die nachstehenden zwei Abbildungen zeigen die Fluenz innerhalb einer homogenen Kugel für unterschiedliche Brechungsindizes sowie unter Einbezug verschiedener Randbedingungen.

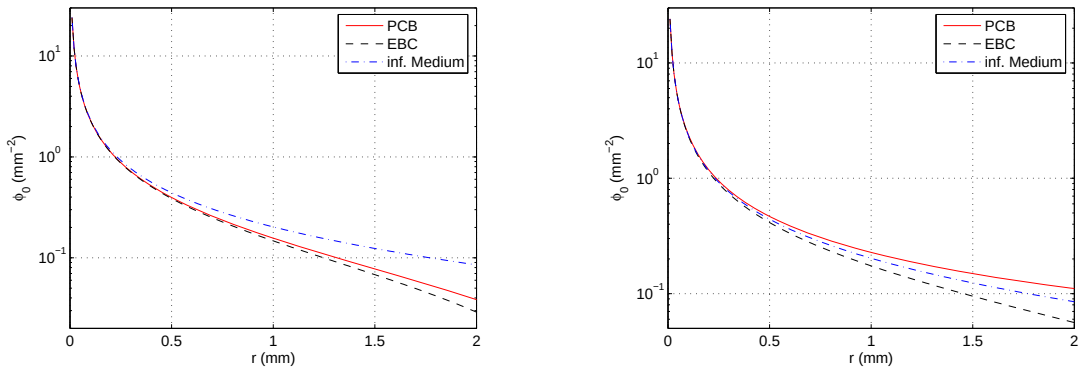

Abbildung 5.1: Fluenz innerhalb einer homogenen Kugel mit einem Brechungsindex von $n = 1.0$ (linkes Bild) und $n = 1.4$ (rechtes Bild). Der Kugelradius beträgt $R = 2\,\text{mm}$.

Die Beeinträchtigung der Fluenz infolge der auftretenden Reflexionen an der Kugeloberfläche ist deutlich zu sehen.
Die bisherigen in der Literatur vorgestellten Methoden zur Bestimmung von Lösungen der SP_N Gleichungen sind ausschließlich numerisch basiert. Im Verlauf der Arbeit mit diesen Gleichungen ergab sich mit den bereits vorgestellten mathematischen Methoden die Möglichkeit der Auffindung analytischer Ausdrücke. Die Validierung der

gefundenen Lösungen erfolgte auf verschiedene Arten. Beginnend mit Vergleichen zur klassischen Diffusionstheorie wurde im weiteren Verlauf die Monte Carlo Methode miteinbezogen. Mit Dr. Alexander Klose, welcher seinerseits die Methode der finiten Differenzen zur numerischen Lösung der SP_N Gleichungen verwendet, ergab sich die Möglichkeit eines direkten Vergleiches. Innerhalb dessen wurde die Fluenz und die Reflektanz unter Annahme verschiedener Quellendistributionen mit dem Resultat einer sehr guten Übereinstimmung verglichen.
Die erste Erweiterung der Diffusionstheorie bilden für $N = 3$ die SP_3 Gleichungen. Mit der Einführung der gemischten Momente [9]

$$\begin{aligned} \varphi_1(\vec{r}) &= \phi_0(\vec{r}) + 2\phi_2(\vec{r}) \\ \varphi_2(\vec{r}) &= 3\phi_2(\vec{r}) \end{aligned} \tag{5.34}$$

findet sich die Struktur von gekoppelten Diffusionsgleichungen. In [9] ist dieses System explizit in der aufbereiteten Form

$$\begin{aligned} &-\nabla\frac{1}{3\mu_{a1}}\nabla\varphi_1(\vec{r}) + \mu_a\varphi_1(\vec{r}) = S(\vec{r}) + \frac{2}{3}\mu_a\varphi_2(\vec{r}) \\ &-\nabla\frac{1}{7\mu_{a3}}\nabla\varphi_2(\vec{r}) + \left(\frac{4}{9}\mu_a + \frac{5}{9}\mu_{a2}\right)\varphi_2(\vec{r}) = -\frac{2}{3}S(\vec{r}) + \frac{2}{3}\mu_a\varphi_1(\vec{r}) \end{aligned} \tag{5.35}$$

angegeben. Durch Invertierung von Beziehung (5.34) gelangt man wieder zu den geradzahligen Momenten

$$\begin{aligned} \phi_0(\vec{r}) &= \varphi_1(\vec{r}) - \frac{2}{3}\varphi_2(\vec{r}), \\ \phi_2(\vec{r}) &= \frac{1}{3}\varphi_2(\vec{r}). \end{aligned} \tag{5.36}$$

Von entscheidender Bedeutung für die Arbeit mit den SP_N Gleichungen ist die Kenntnis der Greenschen Funktionen für die gemischten Momente. Zum einen ist damit die Fluenz des infiniten Raumes vorgegeben, zum anderen wird durch diese in Verbindung mit dem homogenen Anteil die Gesamtlösung gebildet. Beide Anteile sind zur Einarbeitung der SP_N Randbedingungen erforderlich. Das nächste Unterkapitel beinhaltet die Herleitung analytischer Ausdrücke für diese Momente.

5.2.1 Greensche Funktionen für das infinite Medium

Die Greenschen Funktionen der gemischten Momente φ_i $(i = 1, 2)$ sind unter Annahme der isotropen Punktquelle $S(r) = \delta(r)/(4\pi r^2)$ aufzufinden. Es wird wie bereits in zurückliegenden Kapiteln von der Entwicklungseigenschaft einer verallgemeinerten Funktion Gebrauch gemacht. Die Entwicklung der gemischten Momente im infiniten kugelsymmetrischen Medium ist durch das Integral

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^\infty k\varphi_i(k)\sin(kr)\mathrm{d}k \tag{5.37}$$

gegeben. Diese Beziehung geht aus der Definitionsgleichung der dreidimensionalen Fouriertransformation unter Verwendung von Kugelkoordinaten hervor. Das zweidimensionale zylindersymmetrische Pendant entspricht der Hankeltransformation aus Kapitel 3.2. Der Quellterm lautet in dieser Notation

$$S(r) = \frac{\delta(r)}{4\pi r^2} = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty k \sin(kr) \mathrm{d}k. \tag{5.38}$$

Mit der Substitution beider Entwicklungen in den SP_3 Gleichungen (5.35) entsteht das System zweier linearer Gleichungen

$$\begin{pmatrix} \frac{k^2}{3\mu_{a1}} + \mu_a & -\frac{2}{3}\mu_a \\ -\frac{2}{3}\mu_a & \frac{k^2}{7\mu_{a3}} + \frac{4}{9}\mu_a + \frac{5}{9}\mu_{a2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(k) \\ \varphi_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}. \tag{5.39}$$

Als Lösung lässt sich

$$\varphi_i(k) = \frac{F_i^{(1)}(k^2)}{k^4 + \alpha k^2 + \beta}\ , \quad F_i^{(n)}(x) = \sum_{j=i-1}^{n} a_{ij} x^j \tag{5.40}$$

festhalten, wobei die Funktionen $F_i^{(n)}(x)$ zur kompakteren Darstellung von Ergebnissen eingeführt werden. Die Koeffizienten des Zählerpolynoms sind

$$a_{10} = \frac{35}{3}\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}, \quad a_{11} = 3\mu_{a1}, \quad a_{21} = -\frac{14}{3}\mu_{a3} \tag{5.41}$$

und die des Nennerpolynoms

$$\begin{aligned} \alpha &= 3\mu_a\mu_{a1} + \frac{28}{9}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{9}\mu_{a2}\mu_{a3}, \\ \beta &= \frac{35}{3}\mu_a\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}. \end{aligned} \tag{5.42}$$

Das modifizierte Nennerpolynom $Q(\lambda) = \lambda^2 + \alpha\lambda + \beta$ ist in Bezug auf dessen Nullstellen zu analysieren. Die Koeffizienten α and β sind positive reelle Zahlen. Für ein quadratisches Polynom sind diese Gegebenheiten nicht nur notwendig, sondern auch hinreichend, damit sich Nullstellen ausschließlich in der linken komplexen Zahlenhalbebene befinden [20]. Polynome mit dieser Eigenschaft werden als Hurwitzpolynome bezeichnet. In der Regelungstechnik wird dieses Kriterium zur Stabilitätsuntersuchung verwendet. Weiterhin kann gezeigt werden, dass sämtliche Nullstellen rein reell sind. Die Faktorisierung des Nennerpolynoms ermöglicht eine Zerlegung in Partialbrüche. Der Ansatz

$$\varphi_i(k) = \frac{F_i^{(1)}(k^2)}{(k^2 + \nu_1^2)(k^2 + \nu_2^2)} = \frac{A_i}{k^2 + \nu_1^2} + \frac{B_i}{k^2 + \nu_2^2}, \tag{5.43}$$

mit $\nu_1 = \sqrt{-\lambda_1}$ und $\nu_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ ergibt die Koeffizienten

$$A_i = \frac{F_i^{(1)}(\lambda_1)}{\nu_2^2 - \nu_1^2}, \quad B_i = \frac{F_i^{(1)}(\lambda_2)}{\nu_1^2 - \nu_2^2}. \tag{5.44}$$

Mit der hergestellten Partialbruchform gestaltet sich die Auswertung des Integrals (5.37) als relativ unkompliziert. Die Greensche Funktion der Diffusionsgleichung im Steady-State-Bereich lässt sich in der entwickelten Form

$$G(r) = \frac{e^{-\mu_{eff} r}}{4\pi D r} = \frac{1}{2\pi^2 D r} \int_0^\infty \frac{k \sin(kr)}{k^2 + \mu_{eff}^2} \mathrm{d}k \tag{5.45}$$

angeben. Ein Vergleich liefert unmittelbar die gemischten Momente

$$\varphi_i(r) = A_i \frac{e^{-\nu_1 r}}{4\pi r} + B_i \frac{e^{-\nu_2 r}}{4\pi r}, \quad i = 1, 2. \tag{5.46}$$

Mit deren Kenntnis wird die Fluenz in SP_3 Approximation zu [9]

$$\phi_0(r) = \varphi_1(r) - \frac{2}{3}\varphi_2(r). \tag{5.47}$$

Analytische Ausdrücke in der gezeigten Art und Weise sind für Ordnungen $N \leq 7$ möglich. Höhere Ordnungen erfordern zur Faktorisierung des Nenners eine numerische Nullstelleniteration. Für die SP_5 Gleichungen lauten die gemischten Momente im transformierten Bereich

$$\varphi_i(k) = \frac{F_i^{(2)}(k^2)}{k^6 + \alpha k^4 + \beta k^2 + \gamma}, \quad i = 1, 2, 3\ , \tag{5.48}$$

mit den Koeffizienten des Zählerpolynoms

$$\begin{aligned}
a_{10} &= \frac{231}{5}\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}\mu_{a4}\mu_{a5}, \\
a_{11} &= \frac{35}{3}\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3} + 33\mu_{a1}\mu_{a5}\left(\frac{16}{45}\mu_{a2} + \frac{9}{25}\mu_{a4}\right), \\
a_{12} &= 3\mu_{a1}, \quad a_{21} = -\frac{462}{25}\mu_{a3}\mu_{a4}\mu_{a5}, \\
a_{22} &= -\frac{14}{3}\mu_{a3}, \quad a_{32} = \frac{88}{15}\mu_{a5}
\end{aligned} \tag{5.49}$$

und entsprechend für den Nenner

$$\begin{aligned}
\alpha &= 3\mu_a\mu_{a1} + \frac{28}{9}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{9}\mu_{a2}\mu_{a3} + 11\mu_{a5}\left(\frac{64}{225}\mu_a + \frac{16}{45}\mu_{a2} + \frac{9}{25}\mu_{a4}\right), \\
\beta &= \mu_a\mu_{a1}\left(\frac{35}{3}\mu_{a2}\mu_{a3} + \frac{176}{15}\mu_{a2}\mu_{a5} + \frac{297}{25}\mu_{a4}\mu_{a5}\right) + \mu_{a3}\mu_{a4}\mu_{a5}\left(\frac{308}{25}\mu_a + \frac{77}{5}\mu_{a2}\right), \\
\gamma &= \frac{231}{5}\mu_a\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}\mu_{a4}\mu_{a5}.
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Für die Faktorisierung des Nenners ist nun das kubische Polynom

$$Q(\lambda) = \lambda^3 + \alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma \tag{5.51}$$

zu betrachten. Die Nullstellen lassen sich mit Hilfe der Formeln von Cardano ermitteln [20]. Es ist keine Fallunterscheidung notwendig, da sich alle Nullstellen auf der negativen reellen Achse befinden. Mit Verwendung der Größen

$$p = \frac{1}{3}\alpha^2 - \beta, \quad q = \frac{2}{27}\alpha^3 - \frac{1}{3}\alpha\beta + \gamma, \tag{5.52}$$

finden sich die drei Wurzeln

$$\lambda_{k+1} = 2\sqrt{\frac{p}{3}}\cos\left(\frac{\varphi + 2k\pi}{3}\right) - \frac{\alpha}{3}, \quad k = 0, 1, 2\ , \tag{5.53}$$

wobei

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{3q}{2p}\sqrt{\frac{3}{p}}\right) \tag{5.54}$$

ist. Die gemischten Momente der SP_5 Gleichungen entsprechen der Superposition

$$\varphi_i(r) = A_i\frac{e^{-\nu_1 r}}{4\pi r} + B_i\frac{e^{-\nu_2 r}}{4\pi r} + C_i\frac{e^{-\nu_3 r}}{4\pi r}, \quad i = 1, 2, 3\ , \tag{5.55}$$

mit

$$A_i = \frac{F_i^{(2)}(\lambda_1)}{(\nu_2^2 - \nu_1^2)(\nu_3^2 - \nu_1^2)}, \quad B_i = \frac{F_i^{(2)}(\lambda_2)}{(\nu_1^2 - \nu_2^2)(\nu_3^2 - \nu_2^2)}, \quad C_i = \frac{F_i^{(2)}(\lambda_3)}{(\nu_1^2 - \nu_3^2)(\nu_2^2 - \nu_3^2)}. \tag{5.56}$$

Die Fluenz entsteht in diesem Fall aus der Linarkombination dreier gemischter Momente [9]

$$\phi_0(r) = \varphi_1(r) - \frac{2}{3}\varphi_2(r) + \frac{8}{15}\varphi_3(r). \tag{5.57}$$

Die isotrope Punktquelle $S(r) = \delta(r)/(4\pi r^2)$ soll durch eine isotrop abstrahlende Linienquelle $S(\rho) = \delta(\rho)/(2\pi\rho)$ ersetzt werden. Für diese Quelle ergibt sich das Resultat direkt durch Integration der kugelsymmetrischen Momente über die z-Koordinate

$$\varphi_i(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_i(\rho, z)\mathrm{d}z. \tag{5.58}$$

In SP_3 Approximation bedeutet dies konkret

$$\varphi_i(\rho) = A_i\frac{K_0(\nu_1\rho)}{2\pi} + B_i\frac{K_0(\nu_2\rho)}{2\pi}, \quad i = 1, 2. \tag{5.59}$$

Einen Sonderfall nimmt das nicht absorbierende kugelsymmetrische Medium ein. Im System der SP_3 Gleichungen (5.39) verschwinden die Nebendiagonalelemente der Koeffizientenmatrix, wodurch sich ein entkoppeltes System ergibt. Die Bestimmungsgleichung für das Moment $\varphi_1(r)$ ist die Laplace-Gleichung

$$\nabla^2\varphi_1(r) = -3\mu_{a1}S(r) \tag{5.60}$$

mit der Lösung

$$\varphi_1(r) = \frac{3\mu_{a1}}{4\pi r}. \tag{5.61}$$

Das Moment $\varphi_2(r)$ folgt aus der DE

$$\nabla^2\varphi_2(r) - \frac{35}{9}\mu_{a2}\mu_{a3}\varphi_2(r) = \frac{14}{3}\mu_{a3}S(r) \tag{5.62}$$

zu

$$\varphi_2(r) = -\frac{14}{3}\mu_{a3}\frac{e^{-\frac{1}{3}\sqrt{35\mu_{a2}\mu_{a3}}r}}{4\pi r}. \tag{5.63}$$

Die analytische Lösung für die Fluenz verursacht von einer isotrop emittierenden Linienquelle (5.59) wurde mit der numerischen Lösung von Dr. Alexander Klose für zwei verschiedene Absorptionen verglichen und in Abbildung 5.2 festgehalten. Die numerische Lösung wird durch die ausgefüllten Punkte repräsentiert.

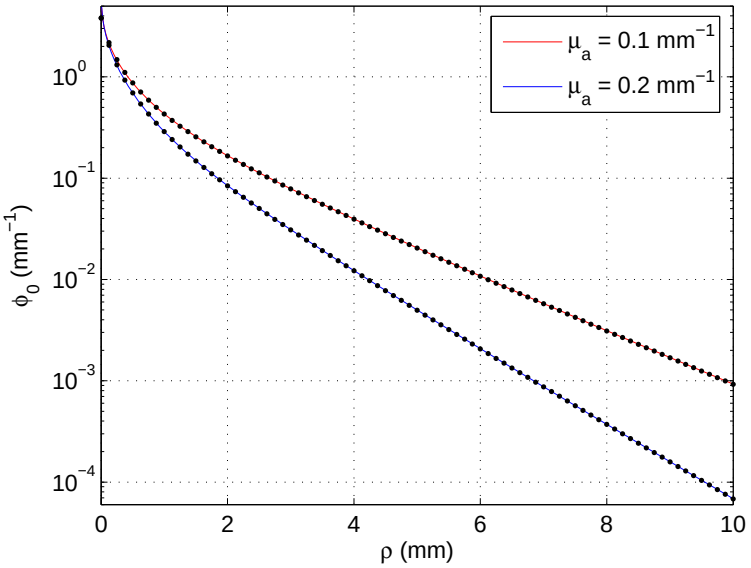

Abbildung 5.2: Vergleich der Fluenz im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $g = 0$.

Beide Methoden konvergieren zu einer gemeinsamen Fluenz. Der relative Unterschied zwischen beiden Verfahren liegt im Bereich von $\approx 10^{-5}$ und lässt sich durch weitere Verfeinerung des verwendeten Grids innerhalb der numerischen Lösung verringern.
Als nächstes soll die Effizienz der ermittelten Lösungen durch eine Gegenüberstellung zur Diffusions- und Transporttheorie aufgezeigt werden. Betrachtet wird hierzu die Fluenz im infiniten kugelsymmetrischen Medium verursacht von einer isotropen Punktquelle und unter Verwendung der Henyey-Greenstein Phasenfunktion. Die gewählten optischen Eigenschaften liegen vorerst innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Diffusionstheorie. In Abbildung 5.3 ist die Fluenz aus den drei verschiedenen Theorien dargestellt.

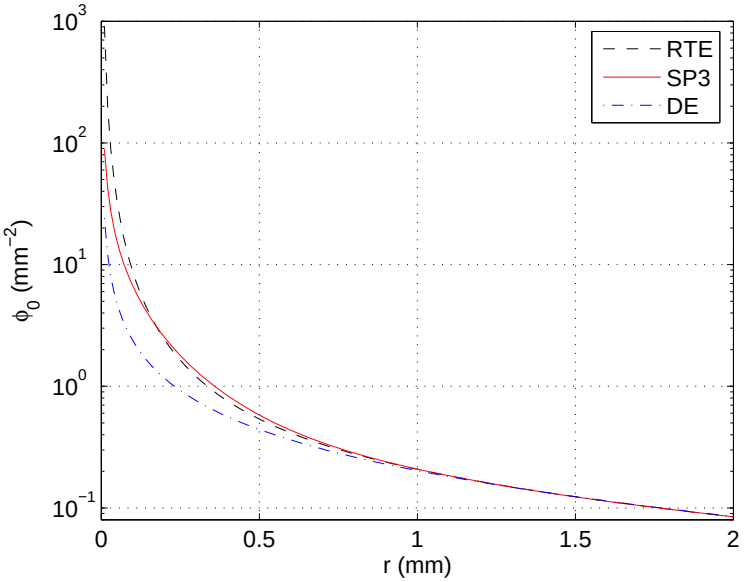

Abbildung 5.3: Fluenz im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.01\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und einem Anisotropiefaktor von $g = 0.9$.

Die Fluenz der SP_3 Gleichungen bringt verglichen mit der Diffusionstheorie eine deutliche Verbesserung für die geringen Abstände zur Quelle mit sich. Die großen Abweichungen der Diffusionstheorie bei Annäherung an die Quelle ist eine seit langem bekannte Schwachstelle dieser stark vereinfachten Theorie. Der Vergleich wird für ein Medium mit verzehnfachter Absorption wiederholt und das Resultat in Abbildung 5.4 festgehalten.

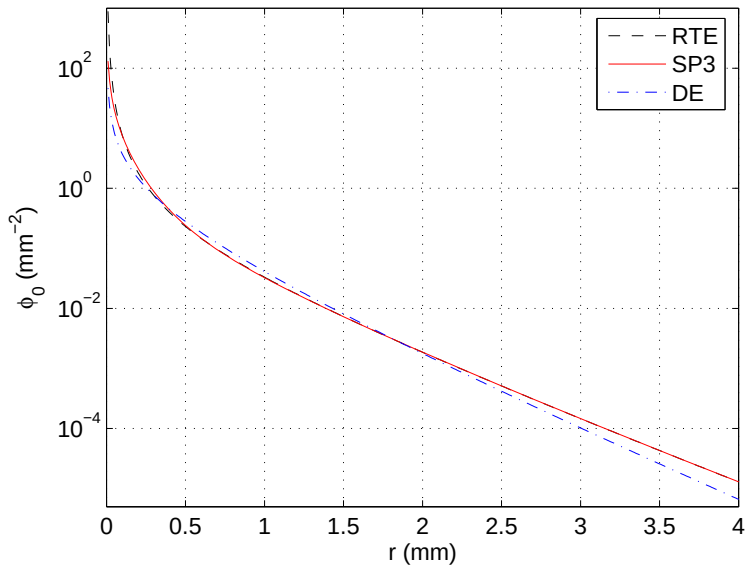

Abbildung 5.4: Fluenz im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und einem Anisotropiefaktor von $g = 0.9$.

Die Diffusionstheorie bricht nun über den gesamten Bereich zusammen. Das Konvergenzverhalten der SP_3 Gleichungen in unmittelbarer Nähe der Quelle hat sich durch die erhöhte Absorption noch weiter verbessert. Dieser Effekt ist auf die betragsmäßig größer werdenden Nullstellen des Nennerpolynoms infolge der stärkeren Absorption zurückzuführen.
Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass sich bereits mit der Verwendung der SP_3 Gleichungen im infiniten Medium eine enorme Verbesserung einstellt. Dies ist jedoch nicht verwunderlich, da die Fluenz des infiniten Mediums innerhalb der SP_N Theorie für $N \to \infty$ gegen die exakte Lösung strebt. Die Fluenz im infiniten Medium ist der einzigste Ausnahmefall, in welchem die Resultate der SP_N Gleichungen mit denjenigen der P_N Methode exakt übereinstimmen.

Die analytischen Lösungen für die Greenschen Funktionen der SP_N Gleichungen wurden in [48] veröffentlicht.

5.2.2 Greensche Funktionen für die homogene Kugel

Die Betrachtungen im infiniten Medium erfordern lediglich die Kenntnis der partikulären Lösung der SP_N Gleichungen. Der homogene Anteil wird in diesem Fall nicht benötigt. Zur Definition von Mediumsgrenzen wie beispielsweise einer Kugeloberfläche sind die SP_N Gleichungen unter Einbezug der zugehörigen Randbedingungen aus [9] zu lösen. Diese Erweiterung des infiniten Mediums auf eine abgeschlossene Geometrie ist mit dem Hintergedanke an Applikationen der ermittelten Lösung von sehr großer Bedeutung. Im folgenden wird eine homogene Kugel mit einer sich im Zentrum befindlichen isotropen Quelle betrachtet. Der Radius der Kugel wird mit R bezeichnet. Die SP_3 Gleichungen werden durch das Differentialgleichungssystem

$$\nabla^2 \vec{\varphi}(r) = \mathbf{A}\vec{\varphi}(r) + \vec{s}(r) \tag{5.64}$$

mit der Koeffizientenmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3\mu_a\mu_{a1} & -2\mu_a\mu_{a1} \\ -\frac{14}{3}\mu_a\mu_{a3} & \frac{28}{9}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{9}\mu_{a2}\mu_{a3} \end{pmatrix} \tag{5.65}$$

und der Störfunktion

$$\vec{s}(r) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -9\mu_{a1} \\ 14\mu_{a3} \end{pmatrix} \frac{\delta(r)}{4\pi r^2} \tag{5.66}$$

repräsentiert. Zur Auffindung der homogenen Lösung wird der Ansatz

$$\vec{\varphi}_h(r) = \vec{v}\,\frac{e^{\lambda r}}{r} \tag{5.67}$$

verwendet. Durch Einsetzen entsteht das charakteristische Polynom des Systems zu

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda^2\mathbf{E}) = \lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \beta, \tag{5.68}$$

mit

$$\alpha = \frac{3}{2}\mu_a\mu_{a1} + \frac{28}{18}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{18}\mu_{a2}\mu_{a3},$$
$$\beta = \frac{35}{3}\mu_a\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}. \tag{5.69}$$

Die Eigenwerte sind die Wurzeln der Gleichung $p(\lambda) = 0$ und gegeben durch

$$\lambda_1 = \pm\sqrt{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta}},$$
$$\lambda_2 = \pm\sqrt{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \beta}}. \tag{5.70}$$

Zu jedem Eigenwert findet sich der zugehörige Eigenvektor aus $(\mathbf{A} - \lambda_i^2\mathbf{E})\vec{v}_i = \vec{0}$ mit

$$\vec{v}_i = \begin{pmatrix} 2\mu_a\mu_{a1} \\ 3\mu_a\mu_{a1} - \lambda_i^2 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \tag{5.71}$$

Unter Berücksichtigung der modifizierten Besselfunktionen wird die Lösung für das quellenfreie Medium zu

$$\vec{\varphi}_h(r) = \mathcal{C}_1\vec{v_1}i_0(\lambda_1 r) + \mathcal{C}_2\vec{v_2}i_0(\lambda_2 r). \tag{5.72}$$

Die Besselfunktion der zweiten Art $k_0(x)$ wird aufgrund ihrer Singularität im Ursprung nicht berücksichtigt. Als partikuläre Lösung dienen in vektorieller Schreibweise die zuvor ermittelten gemischten Momente des infiniten Mediums

$$\vec{\varphi}_p(r) = \vec{a}_1\frac{e^{-\lambda_1 r}}{4\pi r} + \vec{a}_2\frac{e^{-\lambda_2 r}}{4\pi r}, \tag{5.73}$$

mit den Vektoren

$$\vec{a}_i = \frac{(-1)^{i-1}}{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}\begin{pmatrix} 3\mu_{a1}\lambda_i^2 - \frac{35}{3}\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3} \\ -\frac{14}{3}\mu_{a3}\lambda_i^2 \end{pmatrix}. \tag{5.74}$$

Die allgemeine Lösung ist die Überlagerung

$$\vec{\varphi}(r) = \vec{\varphi}_h(r) + \vec{\varphi}_p(r). \tag{5.75}$$

Zur Bestimmung der beiden übrigen Konstanten werden die Randbedingungen der SP_N Gleichungen betrachtet. An der Mediumsgrenze $r = R$ mit dem nach außen gerichteten Normalenvektor $\vec{n} = \vec{e}_r$ müssen die beiden Bedingungen [9]

$$\left(\frac{1}{2} + A_1\right)\varphi_1(r) + \left(\frac{1 + B_1}{3\mu_{a1}}\right)\partial_r\varphi_1(r) = \left(\frac{1}{8} + C_1\right)\varphi_2(r) + \left(\frac{D_1}{\mu_{a3}}\right)\partial_r\varphi_2(r)$$
$$\left(\frac{7}{24} + A_2\right)\varphi_1(r) + \left(\frac{1 + B_2}{7\mu_{a3}}\right)\partial_r\varphi_1(r) = \left(\frac{1}{8} + C_2\right)\varphi_2(r) + \left(\frac{D_2}{\mu_{a1}}\right)\partial_r\varphi_2(r) \tag{5.76}$$

erfüllt sein. Mit den gefundenen Konstanten lauten die gemischten Momente der homogenen Kugel

$$\vec{\varphi}(r) = \mathcal{C}_1\vec{v_1}i_0(\lambda_1 r) + \mathcal{C}_2\vec{v_2}i_0(\lambda_2 r) + \vec{a}_1\frac{e^{-\lambda_1 r}}{4\pi r} + \vec{a}_2\frac{e^{-\lambda_2 r}}{4\pi r}. \tag{5.77}$$

Die Fluenz verursacht von einer isotrop abstrahlenden Linienquelle im Zentrum eines unendlich ausgedehnten Zylinders lässt sich anhand obiger Erkenntnisse direkt angeben. Die homogene Lösung wird in der modifizierten Form

$$\vec{\varphi}_h(r) = \vec{v}\, I_0(\lambda\rho) \tag{5.78}$$

angesetzt. Als partikuläre Lösung dienen die Greenschen Funktionen aus Gleichung (5.59), womit sich als Endresultat die Momente

$$\vec{\varphi}(\rho) = \mathcal{C}_1\vec{v_1}I_0(\lambda_1\rho) + \mathcal{C}_2\vec{v_2}I_0(\lambda_2\rho) + \vec{a}_1\frac{K_0(\lambda_1\rho)}{2\pi} + \vec{a}_2\frac{K_0(\lambda_2\rho)}{2\pi} \tag{5.79}$$

finden.

5.2.3 Greensche Funktionen für ein semi-infinites Medium

Die Lösung der SP_3 Gleichungen für ein semi-infinites Medium mit angenommener isotroper Punktquelle gestaltet sich etwas schwieriger als für die homogene Kugel. Aufgrund der vorliegenden Symmetrieverhältnisse wird im Vergleich zur vorigen Lösung zusätzlich eine Integraltransformation benötigt. Das semi-infinite Medium wird als lateral unendlich ausgedehnt angenommen, wodurch sich die Implementierung der Hankeltransformation anbietet. Die gemischten Momente werden bei dieser Anwendung durch

$$\varphi_i(\rho, z) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty k\varphi_i(k, z)J_0(k\rho)\mathrm{d}k \tag{5.80}$$

repräsentiert. Für die Quelle wird Beziehung (3.35) direkt übernommen. Zum Erhalt eines halbunendlich ausgedehnten Mediums werden die Randbedingungen aus [9] im transformierten Bereich berücksichtigt. Als Mediumsgrenze dient die Ebene $z = 0$ mit dem nach außen weisenden Normalenvektor $\vec{n} = -\vec{e}_z$. Die Lösung für eine unendlich lange isotrope Linienquelle ergibt sich anschließend durch Integration über die x-Koordinate. Durch den Einsatz der Entwicklungen für die Momente und des Quellterms entsteht aus dem System der SP_3 Gleichungen (5.35) ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem 2. Ordnung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\vec{\varphi}(k, z) = \mathbf{A}\vec{\varphi}(k, z) + \vec{s}(k, z) \tag{5.81}$$

mit der Koeffizientenmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} k^2 + 3\mu_a\mu_{a1} & -2\mu_a\mu_{a1} \\ -\frac{14}{3}\mu_a\mu_{a3} & k^2 + \frac{28}{9}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{9}\mu_{a2}\mu_{a3} \end{pmatrix} \tag{5.82}$$

und der Störfunktion

$$\vec{s}(k,z) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -9\mu_{a1} \\ 14\mu_{a3} \end{pmatrix}\delta(z-z'). \tag{5.83}$$

Für die homogene Lösung wird der Ansatz $\vec{\varphi}_h(s,z) = \vec{v}e^{\lambda z}$ verwendet. Mit diesem resultiert das charakteristische Polynom des Systems

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda^2\mathbf{E}) = \left(\lambda^2 - k^2\right)^2 - 2\alpha\left(\lambda^2 - k^2\right) + \beta, \tag{5.84}$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{3}{2}\mu_a\mu_{a1} + \frac{28}{18}\mu_a\mu_{a3} + \frac{35}{18}\mu_{a2}\mu_{a3}, \\ \beta &= \frac{35}{3}\mu_a\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3}. \end{aligned} \tag{5.85}$$

Die Eigenwerte sind die Wurzeln der Gleichung $p(\lambda) = 0$ und durch

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \pm\sqrt{k^2 + \alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta}}, \\ \lambda_2 &= \pm\sqrt{k^2 + \alpha - \sqrt{\alpha^2 - \beta}} \end{aligned} \tag{5.86}$$

gegeben. Die Eigenvektoren sind erneut aus $(\mathbf{A} - \lambda_i^2\mathbf{E})\vec{v}_i = \vec{0}$ ermittelbar und lauten

$$\vec{v}_i = \begin{pmatrix} 2\mu_a\mu_{a1} \\ k^2 + 3\mu_a\mu_{a1} - \lambda_i^2 \end{pmatrix}, \quad i = 1,2. \tag{5.87}$$

Das quellenfreie Medium wird durch die gemischten Momente

$$\vec{\varphi}_h(k,z) = \mathcal{C}_1\vec{v_1}e^{\lambda_1 z} + \mathcal{C}_2\vec{v_1}e^{-\lambda_1 z} + \mathcal{C}_3\vec{v_2}e^{\lambda_2 z} + \mathcal{C}_4\vec{v_2}e^{-\lambda_2 z} \tag{5.88}$$

charakterisiert. Der Ausdruck für die partikuläre Lösung ist prinzipiell mit der Kenntnis der gemischten Momente des infiniten kugelsymmetrischen Mediums aus Gleichung (5.46) bekannt. In vektorieller Schreibweise lassen sich diese in der Form

$$\vec{\varphi}_p(\vec{r}) = \vec{a}_1\frac{e^{-\nu_1 r}}{4\pi r} + \vec{a}_2\frac{e^{-\nu_2 r}}{4\pi r}, \tag{5.89}$$

wobei $\nu_{1,2} = \sqrt{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - \beta}}$, $r = \sqrt{\rho^2 + (z-z')^2}$, angeben. Für die Vektoren $\vec{a}_i$ gilt

$$\vec{a}_i = \frac{(-1)^{i-1}}{\nu_1^2 - \nu_2^2}\begin{pmatrix} 3\mu_{a1}\nu_i^2 - \frac{35}{3}\mu_{a1}\mu_{a2}\mu_{a3} \\ -\frac{14}{3}\mu_{a3}\nu_i^2 \end{pmatrix}. \tag{5.90}$$

Der partikuläre Anteil ist einer Hankeltransformation zu unterziehen. Diese lässt sich auch wie folgt ermitteln. Zur Greenschen Funktion aus der Diffusiontheorie im transformierten Bereich (5.45) wird die Inverse nur für eine Ortskoordinate ausgewertet, d.h.

$$G(k,z) = \frac{1}{2\pi D}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{jk_3 z}}{k_3^2 + \sqrt{k^2 + \nu_1^2}^2}\mathrm{d}k_3 = \frac{e^{-\sqrt{k^2+\nu_1^2}|z|}}{2D\sqrt{k^2+\nu_1^2}}, \tag{5.91}$$

mit $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$. Dieses Ergebnis ist aber gleich der Hankeltransformierten der kugelsymmetrischen Originalfunktion $G(r)$. Wird diese Erkenntnis auf die gemischten Momente übertragen, so folgt für die gesuchte Hankeltransformierte das Ergebnis

$$\vec{\varphi}_p(k,z) = \vec{a}_1 \frac{e^{-\lambda_1|z-z'|}}{2\lambda_1} + \vec{a}_2 \frac{e^{-\lambda_2|z-z'|}}{2\lambda_2}. \tag{5.92}$$

Die allgemeine Lösung setzt sich wieder aus der Superposition

$$\vec{\varphi}(k,z) = \vec{\varphi}_h(k,z) + \vec{\varphi}_p(k,z) \tag{5.93}$$

zusammen. Die Aufgabenstellung wird mit der Einarbeitung der Randbedingungen fortgesetzt. Ein semi-infinites Medium erfordert unter anderem ein Verschwinden der Momente im Unendlichen. Demnach muss

$$\lim_{z\to\infty} \vec{\varphi}(k,z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_3 = 0 \tag{5.94}$$

gelten. Zur Bestimmung der restlichen Unbekannten werden die Randbedingungen aus [9] herangezogen. Mit den gefundenen Konstanten findet sich das Endergebnis zu

$$\vec{\varphi}(\vec{r}) = \vec{a}_1 \frac{e^{-\nu_1 r}}{4\pi r} + \vec{a}_2 \frac{e^{-\nu_2 r}}{4\pi r} + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k \vec{\varphi}_h(k,z) J_0(k\rho) \mathrm{d}k. \tag{5.95}$$

Die Fluenz für die isotrope Linienquelle folgt via Integration über die x-Koordinate

$$\vec{\varphi}(y,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\varphi}(x,y,z) \mathrm{d}x. \tag{5.96}$$

zu

$$\vec{\varphi}(y,z) = \frac{\vec{a}_1}{2\pi} K_0(\nu_1 d) + \frac{\vec{a}_2}{2\pi} K_0(\nu_2 d) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \vec{\varphi}_h(k,z) \cos(ky) \mathrm{d}k, \tag{5.97}$$

mit dem Abstand $d = \sqrt{y^2 + (z-z')^2}$.
Der ermittelte Ausdruck für die isotrop abstrahlende Linienquelle wurde wieder mit der numerischen Methode von Dr. Alexander Klose verglichen. In zwei Vergleichen wurde die Fluenz auf der z-Achse sowie die Reflektanz entlang der Mediumgrenze gegenübergestellt. Die Reflektanz wird nach Gleichung (32) aus [9] berechnet. Innerhalb beider Vergleiche befindet sich die isotrope Linienquelle in der Tiefe $z' = 10\,\mathrm{mm}$. Das verwendete isotrop streuende Medium besitzt für den Vergleich der Fluenz eine Absorption von $\mu_a = 0.5\,\mathrm{mm}^{-1}$. Im Falle der Reflektanzberechnung beträgt die Absorption $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$. Ferner gilt für das Medium der Streukoeffizient $\mu_s = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ sowie der Brechungsindex $n = 1.4$. Das umgebende Medium weist einen Brechungsindex von $n_e = 1.0$ auf. Innerhalb der beiden nachfolgenden Schaubilder ist zusätzlich jeweils das Ergebnis der SP_1 Gleichung enthalten, welches in diesem Fall der Lösung der Diffusionsgleichung unter Berücksichtigung der PCBC entspricht. Die Abbildungen 5.5 und 5.6 beinhalten die Fluenz und die Reflektanz. Die analytische Lösung ist durch die Linien, die numerische Lösung durch die ausgefüllten Punkte charakterisiert.

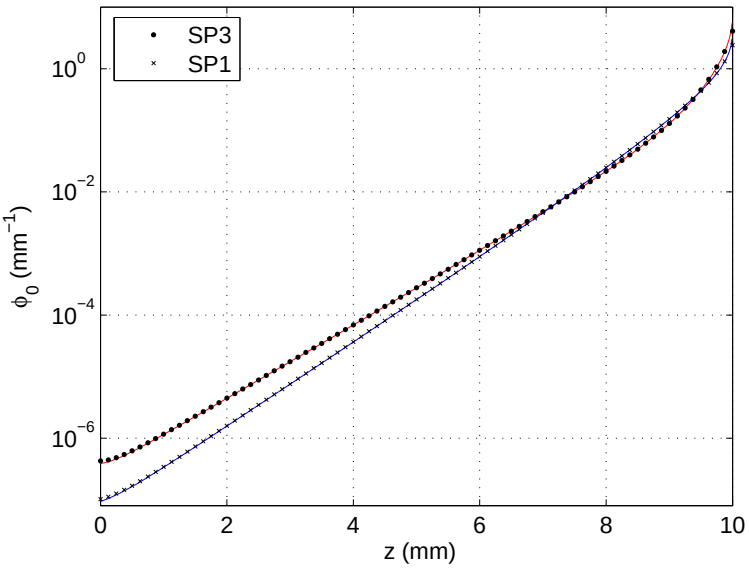

Abbildung 5.5: Fluenz in einem isotrop streuenden semi-infiniten Medium infolge einer isotrop abstrahlenden Linienquelle.

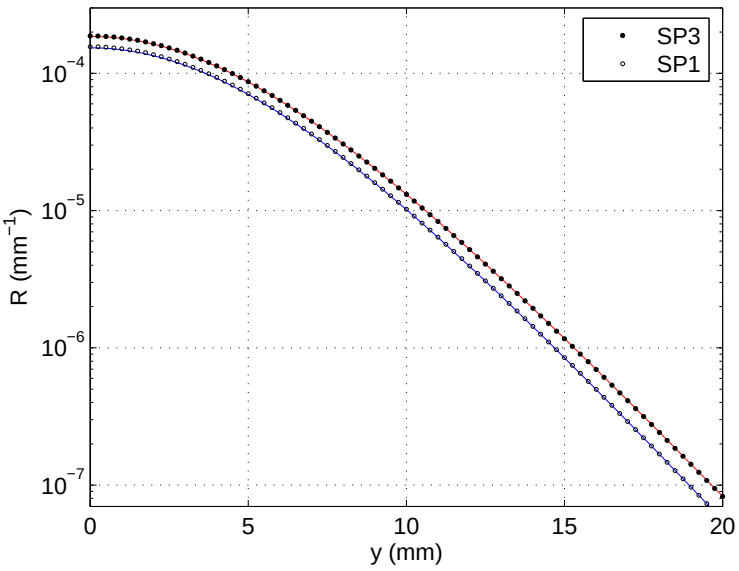

Abbildung 5.6: Reflektanz eines isotrop streuenden semi-infiniten Mediums infolge einer isotrop abstrahlenden Linienquelle.

Es stellt sich analog zur Fluenz im infiniten Medium eine sehr gute Übereinstimmung zwischen beiden Methoden ein. Während die Rechenzeiten der analytischen Lösung für den Fall einer isotropen Punktquelle praktisch unverändert bleibt, steigt diese hingegen bei der Finiten-Differenzen-Methode enorm an.

5.3 SP_N Gleichungen im Frequenzbereich

Die SP_N Gleichungen für den Frequenzbereich ergeben sich als Entwicklung aus der frequenzabhängigen Version der Strahlungstransfergleichung [14]

$$\left(\frac{j\omega}{c}+\tau\frac{\partial}{\partial x}+\mu_t\right)\psi(x,\tau,\omega)=\mu_s\int_{4\pi}f(\tau,\tau')\psi(x,\tau',\omega)\mathrm{d}\tau'+S(x,\tau,\omega). \tag{5.98}$$

Es sind alle Reihenentwicklungen nach den Legendre Polynomen aus Kapitel 5.1 zu übernehmen. Durch Wiederholung der dort vorgeführten Rechenoperationen und Umformungen entstehen praktisch die gleichen P_N Gleichungen wie im Steady-State-Bereich. Der Unterschied kommt in den Absorptionsmomenten zu tragen. Die P_N Gleichungen im Frequenzbereich lauten demnach

$$\frac{n+1}{2n+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_{n+1}(x,\omega)+\frac{n}{2n+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_{n-1}(x,\omega)+\mu_{an}(\omega)\phi_n(x,\omega)=s_n(x,\omega), \tag{5.99}$$

mit den komplexwertigen Größen $\mu_{an}(\omega)=\mu_a+(1-f_n)\mu_s+j\omega/c$. Die Ergebnisse des Steady-State-Bereiches sind durch einfaches Hinzufügen des Imaginärteils $j\omega/c$ innerhalb der Absorptionsmomente direkt auf den Frequenzbereich übertragbar. Desweiteren besteht über die inverse Fouriertransformation die Möglichkeit für den Wechsel in den Zeitbereich. Während im Steady-State-Bereich die SP_1 Gleichung exakt der Diffusionsgleichung entspricht, liegt im Frequenzbereich hingegen eine Diffusionsgleichung mit komplexwertiger Diffusionskonstante

$$\nabla^2\phi_0(\vec{r},\omega)-3\left(\mu_a+j\frac{\omega}{c}\right)\left(\mu_{a1}+j\frac{\omega}{c}\right)\phi_0(\vec{r},\omega)=-3\left(\mu_{a1}+j\frac{\omega}{c}\right)S(\vec{r},\omega) \tag{5.100}$$

vor. Dieser Gleichungstyp entspricht der sogenannten Telegraphengleichung. Die Greensche Funktion dieser Gleichung ist mit der Lösung der Diffusionsgleichung im Steady-State-Bereich bekannt und lautet mit Verwendung komplexer Absorptionsmomente

$$\phi_0(r,\omega)=3\left(\mu_{a1}+j\frac{\omega}{c}\right)\frac{e^{-r\sqrt{3\left(\mu_a+j\frac{\omega}{c}\right)\left(\mu_{a1}+j\frac{\omega}{c}\right)}}}{4\pi r}. \tag{5.101}$$

Während der Übergang aus dem Steady-State-Bereich in den Frequenzbereich völlig problemlos vonstatten geht, ist der Wechsel in den Zeitbereich um ein Vielfaches komplizierter und aufwendiger. Lediglich für die Fluenz der SP_1 Gleichung ist die inverse Fouriertransformation analytisch auswertbar. Der Lösungsweg soll im folgenden kurz aufgezeigt werden. Die Fluenz im Zeitbereich ist ein kausales Signal, daher bietet sich zur Lösung dieser Aufgabe der Formalismus der einseitigen Laplacetransformation an. Aus dem mathematischen Nachschlagewerk Abramowitz and Stegun [22] wird das Transformationspaar

$$F(s)=\frac{e^{-b\sqrt{s(s+a)}}}{\sqrt{s(s+a)}}\qquad\bullet\!\!-\!\!\circ\qquad f(t)=e^{-\frac{a}{2}t}I_0\left(\frac{a}{2}\sqrt{t^2-b^2}\right)\Theta(t-b) \tag{5.102}$$

entnommen. Um dieses anwenden zu können sind zuvor einige Zwischenschritte notwendig. Zuerst wird aus der kugelsymmetrischen Fluenz im Frequenzbereich das planarsymmetrische Pendant im Bildbereich mit dem Austausch $j\omega \rightarrow s$ sowie durch Anwendung der Beziehung [1]

$$\phi_0(x) = 2\pi \int_{|x|}^{\infty} r\phi_0(r)\mathrm{d}r \tag{5.103}$$

zu

$$\phi_0(x,s) = \frac{\sqrt{3}}{2}(s+\mu_{a1}c)\frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{c}|x|\sqrt{(s+\mu_a c)(s+\mu_{a1}c)}}}{\sqrt{(s+\mu_a c)(s+\mu_{a1}c)}} \tag{5.104}$$

bestimmt. Innerhalb dieser Bildfunktion besteht ein Zusammenhang zwischen dem Absorptionskoeffizient und der Anwendung des Dämpfungssatzes der Laplacetransformation [20]. Für $\mu_a = 0$ wird die Bildfunktion zu

$$\tilde{\phi}_0(x,s) = \frac{\sqrt{3}}{2}(s+\mu_s' c)\frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{c}|x|\sqrt{s(s+\mu_s' c)}}}{\sqrt{s(s+\mu_s' c)}} = \frac{\sqrt{3}}{2}(s+\mu_s' c)f(x,s) \tag{5.105}$$

mit den Parametern $a = \mu_s' c$ und $b = \sqrt{3}|x|/c$. Ist die Fluenz des nicht absorbierenden Mediums im Zeitbereich bekannt, so gilt für jede beliebige Absorption der Zusammenhang

$$\phi_0(x,t) = e^{-\mu_a ct}\tilde{\phi}_0(x,t). \tag{5.106}$$

Diese Eigenschaft ist innerhalb der Transporttheorie allgemein gültig [6]. Ein stärker absorbierendes Medium besitzt demnach einen größeren Konvergenzbereich als eines mit geringerer Absorption. Durch Anwendung des Differentationssatzes [20] findet sich die Zeitfunktion

$$\tilde{\phi}_0(x,t) = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mu_s' c\right) f(x,t). \tag{5.107}$$

Die Umkehrung der Beziehung (5.103) und die Berücksichtigung der exponentiellen Abnahme bedingt durch die Absorption ergeben die zeitabhängige Fluenz des dreidimensionalen Mediums

$$\phi_0(r,t) = -\frac{e^{-\mu_a ct}}{2\pi r}\frac{\partial}{\partial x}\tilde{\phi}_0(x,t)\bigg|_{x=r} = -\frac{\sqrt{3}}{4\pi r}\left(\frac{\partial^2 f(r,t)}{\partial t \partial r} + \mu_s' c\frac{\partial f(r,t)}{\partial r}\right)e^{-\mu_a ct}. \tag{5.108}$$

Mit gängigen Ableitungsregeln und anschließender algebraischer Vereinfachung folgt die Greensche Funktion der Telegraphengleichung für Zeiten $t > \sqrt{3}r/c$

$$\begin{aligned}\phi_0(r,t) = & c\frac{3\sqrt{3}}{\pi}\left(\frac{\mu_s'}{4}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{(ct)^2-3r^2}} e^{-\frac{1}{2}(\mu_a+\mu_{a1})ct}\left[I_1\left(\frac{\mu_s'}{2}\sqrt{(ct)^2-3r^2}\right)\right. \\ & \left. + \frac{ct}{\sqrt{(ct)^2-3r^2}} I_2\left(\frac{\mu_s'}{2}\sqrt{(ct)^2-3r^2}\right)\right].\end{aligned} \tag{5.109}$$

Die nachfolgenden zwei Abbildungen beinhalten Vergleiche zwischen der SP_N- und Transporttheorie im Zeitbereich. In beiden Abbildungen ist zusätzlich die zeitaufgelöste Fluenz aus der Diffusionstheorie enthalten.

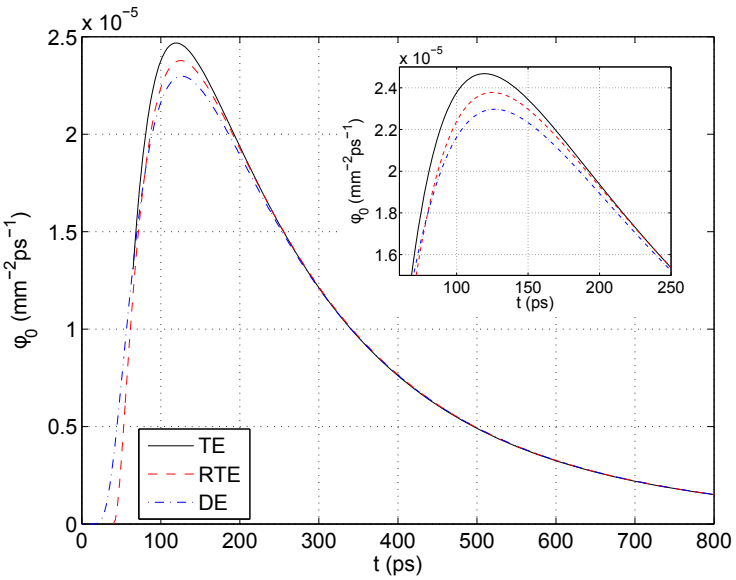

Abbildung 5.7: Zeitaufgelöste Fluenz der Telegraphengleichung im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.01\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$, $g = 0.9$ und $n = 1.4$. Der Abstand zur isotropen Punktquelle beträgt $r = 8\,\mathrm{mm}$.

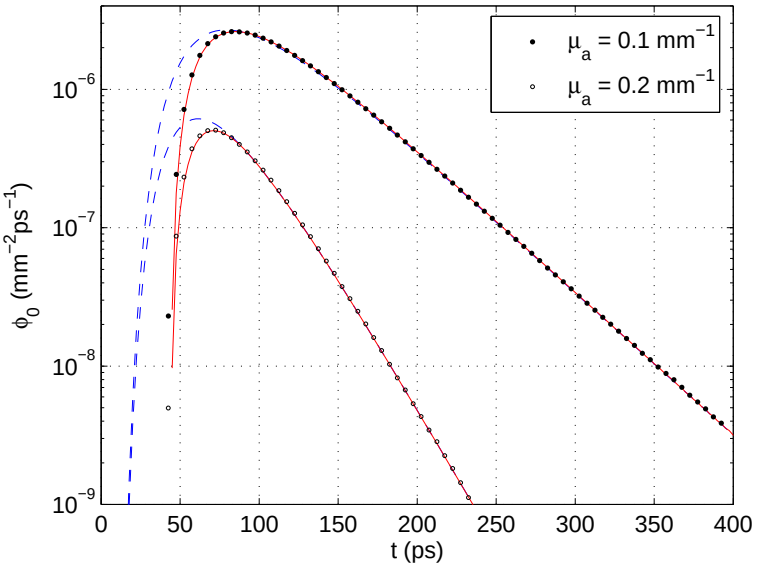

Abbildung 5.8: Zeitaufgelöste Fluenz der SP_3 Gleichungen im infiniten Medium mit den Eigenschaften $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$, $g = 0.9$ und $n = 1.4$. Der Abstand zur isotropen Punktquelle beträgt $r = 8.5\,\mathrm{mm}$.

Aus Abbildung 5.7 ist die Übereinstimmung aller Theorien für größer werdende Zeiten zu entnehmen. Die zeitabhängige Telegraphengleichung beinhaltet im Gegensatz zur Diffusionsgleichung zusätzlich die zweite Ableitung nach der Zeit. Für $t \to \infty$ liefert diese jedoch keinen signifikanten Beitrag. In der Umgebung des Maximums liefert die Lösung der TE jedoch einen zu großen Beitrag. Der Inset zeigt die gleichen Kurven lediglich für einen kleineren Zeitausschnitt.
Für Ordnungen $N > 1$ werden die Ergebnisse aus dem Frequenzbereich numerisch in den Zeitbereich transformiert. Die auf diese Art und Weise ermittelten Lösungen der zeitabhängigen SP_N Gleichungen sind in Bezug auf Schnelligkeit und Genauigkeit jedoch sehr gut. Für die Fluenz der SP_3 Gleichungen wurde dieses Verfahren angewendet und mit der Monte Carlo Methode verglichen. In Abbildung (5.8) sind für zwei verschiedene Absorptionskoeffizienten jeweils die zeitabhängige Fluenz aus verschiedenen Theorien dargestellt. Neben der sehr guten Übereinstimmung zwischen der Monte Carlo Methode (Symbole) und der SP_3 Theorie (durchgehende Linien) sind die großen Abweichungen der Diffusionstheorie (gestrichelte Linien) für kleine Zeiten erkennbar. Dieser Effekt ist ein seit langem bekannter Nachteil dieses vereinfachten Modells. Für größer werdende Zeiten gehen alle drei Kurven ineinander über.

6 Analytische Lösungen der Strahlungstransfergleichung

Dieses Kapitel beinhaltet die Herleitung analytischer Lösungen der RTE für die Fluenz und die Strahldichte in verschiedenen Dimensionen und unter Verwendung unterschiedlicher isotrop abstrahlender Quellen. Die analytischen Ausdrücke des nicht streuenden Mediums dienen als Referenz für die ermittelten rekursiven Beziehungen des streuenden Mediums. Zur Kontrolle der Fluenz und Strahldichte im streuenden Medium wird die Monte Carlo Methode herangezogen. Innerhalb der Literatur sind bis auf den Sonderfall des isotrop streuenden Mediums [8] keine konkreten analytischen Lösungen der dreidimensionalen RTE verfügbar. Während die Lösungen für das isotrop streuende Medium in einer und zwei Dimensionen exakt sind, geht der Ausdruck für den dreidimensionalen kugelsymmetrischen Raum bereits aus einer Approximation hervor, welche jedoch sehr zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Diese vorhandene Lösung existiert wiederum nur für den Zeitbereich. Die Fluenz im Steady-State-Bereich ist durch eine numerische Integration der Zeitfunktion gegeben.
Das infinite Medium ist aus Sicht der Anwendung jedoch nicht nur als ein rein theoretisches Modell zu betrachten. Durch Wenden einer über einen kleinen Raumwinkelbereich detektierenden Faser an einer einzigen Stelle innerhalb des Gewebes lässt sich nach Einbringen einer isotropen Quelle die Strahldichte messen und damit die optischen Eigenschaften des Mediums bestimmen. Weiterhin wird diese Methode zur Diagnose und Behandlung von karzinogenen Veränderungen innerhalb des Gewebes verwendet [4, 5]. Invasive Messungen an zwei Positionen sind obendrein für den Patienten wesentlich angenehmer als die Bestimmung der Fluenz an vielen verschiedenen Stellen im Körper. Die hergeleiteten analytischen Ausdrücke bieten mitunter die Möglichkeit Monte Carlo Programme und die darin generierten Zufallszahlen auf Korrektheit zu überprüfen.

6.1 Fluenz und Strahldichte für ein infinites nicht streuendes Medium

Im nicht streuenden Medium gilt für eine planarsymmetrische Anordnung die RTE [1]

$$\tau \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\tau) + \mu_t \psi(x,\tau) = S(x,\tau). \tag{6.1}$$

Zum Auffinden der Fluenz im infiniten Medium bei Verwendung der isotropen flächenhaften Quelle $S(x,\tau) = \delta(x)/2$ wird für diese die Entwicklung

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{jkx}\mathrm{d}k \tag{6.2}$$

verwendet. Der entsprechende Ansatz für die Strahldichte ist demnach durch

$$\psi(x,\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(k,\tau)e^{jkx}\mathrm{d}k \tag{6.3}$$

gegeben. Die RTE geht nach der Substitution der integralen Darstellungen in die Form der algebraischen Gleichung

$$(\mu_a + j\tau k)\psi(k,\tau) = \frac{1}{2} \tag{6.4}$$

über, wodurch sich die Strahldichte im transformierten Bereich

$$\psi(k,\tau) = \frac{1}{2}\frac{1}{\mu_a + j\tau k} = \frac{1}{2}\frac{\mu_a - j\tau k}{\mu_a^2 + (\tau k)^2} \tag{6.5}$$

findet. Vor der anstehenden Rücktransformation wird die Fluenz durch Integration der Strahldichte über den gesamten Winkelbereich ermittelt. Im planarsymmetrischen Medium sind die Fluenz und die Strahldichte über die Integration

$$\phi_0(k) = \int_{-1}^{1} \psi(k,\tau)\mathrm{d}\tau = \frac{1}{k}\arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right) \tag{6.6}$$

miteinander verknüpft. Die kontinuierliche Aufsummierung ergibt die ortsabhängige Fluenz [1]

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right)\frac{e^{jkx}}{k}\mathrm{d}k = \frac{1}{2}E_1(\mu_a|x|). \tag{6.7}$$

Die Funktion $E_1(x)$ ist eine Integralexponentialfunktion mit der Definitionsgleichung [22]

$$E_1(x) = \int_{1}^{\infty} \frac{e^{-xu}}{u}\mathrm{d}u. \tag{6.8}$$

Zur Bestimmung der Strahldichte im Originalbereich sind zwei Fallunterscheidungen erforderlich. Ist $\tau > 0$, kann das zugrundeliegende Originalsignal nur ein rechtsseitiges sein. Falls die Fouriertransformierte durch die Laplacetransformierte ersetzt wird, beinhaltet lediglich das Konvergenzgebiet $\mathcal{R}\mathrm{OC} : \mathrm{Re}\{s\} > -\mu_a/\tau$ die imaginäre Achse. Liegt diese außerhalb, würde die Strahldichte mit zunehmender Entfernung von der

isotropen Quelle immer weiter zunehmen. Physikalisch gesehen ist diese Lösung wenig sinnvoll. Damit gilt für diesen Fall

$$\psi(x,\tau) = \frac{1}{2\tau} e^{-\frac{\mu_a x}{\tau}}, \quad x,\, \tau > 0. \tag{6.9}$$

Für $\tau < 0$ liefern analoge Überlegungen das Resultat

$$\psi(x,\tau) = -\frac{1}{2\tau} e^{-\frac{\mu_a x}{\tau}}, \quad x,\, \tau < 0. \tag{6.10}$$

In komprimierter Schreibweise wird die Strahldichte zu

$$\psi(x,\tau) = \frac{1}{2|\tau|} e^{-\frac{\mu_a x}{\tau}} \Theta\Big(\frac{x}{\tau}\Big). \tag{6.11}$$

Eine Lösung im planarsymmetrischen Medium kann mit Hilfe der Beziehung [15]

$$\phi_0(r) = -\frac{1}{2\pi r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \phi_0(x)\bigg|_{x=r} \tag{6.12}$$

in den dreidimensionalen Raum mit sphärischer Symmetrie überführt werden. Unter Berücksichtigung der Ableitung $E_1'(x) = E_0(x)$ findet sich die Greensche Funktion für die Fluenz des nicht streuenden kugelsymmetrischen Mediums zu

$$\phi_0(r) = \frac{e^{-\mu_a r}}{4\pi r^2}. \tag{6.13}$$

Die Strahldichte ist eine Größe mit einer Abhängigkeit von der betrachteten Richtung. Für diese ist kein Rückschluss von Planarsymmetrie auf Kugelsymmetrie wie im Falle der Fluenz möglich. Mit Hilfe von [2] findet sich für die Strahldichte verursacht von einer Punktquelle der Zusammenhang

$$\psi(r,\vec{\Omega}) = \frac{e^{-\mu_a r}}{8\pi^2 r^2}\, \delta(\tau_r - 1), \quad \tau_r = \frac{\vec{\Omega}\cdot\vec{r}}{r}. \tag{6.14}$$

Die Fluenz für eine isotrop abstrahlende Linienladung ist als zweidimensionales Problem zu behandeln und ergibt sich durch die Integration

$$\phi_0(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(\rho,z)\mathrm{d}z = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\mu_a\sqrt{\rho^2+z^2}}}{\rho^2+z^2}\mathrm{d}z. \tag{6.15}$$

Dieses Integral ist wie im Falle der eindimensionalen Fluenz nicht geschlossen lösbar. Durch die Variablensubstitution $z = \rho\sinh u$ lässt sich jedoch eine Darstellung unter Verwendung einer der Bickley-Naylor-Funktionen $Ki_n(x)$ [22] erzielen. Das Ergebnis lautet dann

$$\phi_0(\rho) = \frac{1}{2\pi\rho} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\mu_a\rho\cosh\varphi}}{\cosh\varphi}\mathrm{d}\varphi = \frac{Ki_1(\mu_a\rho)}{2\pi\rho}. \tag{6.16}$$

Es ist möglich, einen Ausdruck für die n-dimensionale Fluenz anzugeben. Hierzu erfolgt ein kleiner Vorgriff auf ein Ergebnis des nächsten Unterkapitels. Dort wird sich zeigen, dass die Fouriertransformierte der n-dimensionalen Fluenz durch die Funktion

$$\phi_0^{(n)}(k) = \frac{1}{k} \arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right) \tag{6.17}$$

mit $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + \cdots + k_n^2}$ gegeben ist. Der Wechsel in den Ortsbereich erfolgt durch die Integration

$$\phi_0^{(n)}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \iiint_{\mathbb{R}^n} \cdots \iint \arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right) \frac{e^{j\vec{k}\cdot\vec{x}}}{k} \mathrm{d}^n k. \tag{6.18}$$

Für eine verschwindende Absorption ist dieses Integral für beliebige Dimensionen auswertbar. Die Fluenz vereinfacht sich vorerst zu

$$\phi_0^{(n)}(k) = \frac{\pi}{2k}. \tag{6.19}$$

Für n-dimensionale Signale kann das n-fach Integral auf eine Dimension reduziert werden. Es handelt sich hierbei um eine verallgemeinerte Hankeltransformation. Unter Verwendung n-dimensionaler Kugelkoordinaten wird Gleichung (6.18) zu [29]

$$\phi_0^{(n)}(r) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} r^{n/2-1}} \int_0^\infty k^{n/2} \phi_0^{(n)}(k) J_{n/2-1}(rk) \mathrm{d}k \tag{6.20}$$

mit $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$. Aus einer Integraltabelle findet sich als Ergebnis der Integration die Fluenz

$$\phi_0^{(n)}(r) = \frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{4\pi^{(n-1)/2} r^{n-1}}. \tag{6.21}$$

Sämtliche Ergebnisse dieses Unterkapitels basieren auf einer idealen diracförmigen Quelle. Innerhalb der Kernphysik sind seit langem die Zylinderschalenquelle wie auch die Kugelschalenquelle involviert. Diese Quelltypen sind jedoch auch für den Bereich der Biomedizinischen Optik interessant. Mit diesen lassen sich beispielsweise isotrop abstrahlende Fasern realistischer nachbilden als mit einer idealisierten Punktquelle. An dieser Stelle soll für das nichtstreuende Medium die Fluenz für eine Kugelschalenquelle ermittelt werden, da diese etwas später für einen Vergleich benötigt wird. Die Zylinderschalenquelle wird im nächsten Unterkapitel für den allgemeinen Fall des anisotrop streuenden Mediums betrachtet. Die Lösungen für derartige Schalenquellen sind prinzipiell über das jeweilige Faltungsintegral gegeben. Für die Kugelschale würde sich ein relativ kompliziertes Dreifachintegral ergeben. Deutlich einfacher hingegen gestaltet sich der Weg über die kugelsymmetrische Fouriertransformation. Die Kugelschalenquelle mit Radius r_s

$$S(r) = \frac{\delta(r - r_s)}{4\pi r^2} \tag{6.22}$$

lautet im transformierten Bereich

$$S(k) = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r \frac{\delta(r - r_s)}{4\pi r^2} \sin(kr) \mathrm{d}r = \frac{\sin(r_s k)}{r_s k}. \tag{6.23}$$

Durch Multiplikation mit der Fluenz für eine diracförmige Quelle und Anwendung der inversen Transformation entsteht vorerst

$$\phi_{sph}(r) = \frac{1}{2\pi^2 r r_s} \int_0^\infty \frac{1}{k} \arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right) \sin(r_s k) \sin(rk) \mathrm{d}k. \tag{6.24}$$

Unter Verwendung eines Additionstheorems der trigonometrischen Funktionen kann dieses Integral auf die Form der inversen Transformation zur Ermittlung der planarsymmetrischen Fluenz (6.7) gebracht werden. Damit erhält man

$$\begin{aligned} \phi_{sph}(r) &= \frac{1}{8\pi^2 r r_s} \int_{-\infty}^\infty \arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right) \frac{e^{jk(r-r_s)} - e^{jk(r+r_s)}}{k} \mathrm{d}k \\ &= \frac{E_1(\mu_a|r - r_s|) - E_1(\mu_a|r + r_s|)}{8\pi r r_s}. \end{aligned} \tag{6.25}$$

6.2 Fluenz für ein infinites streuendes Medium

Zur Bestimmung der Fluenz für ein anisotrop streuendes Medium wird von dem Differentialgleichungssystem (5.13) ausgegangen. Im nächsten Schritt werden die Legendre-Momente in der Entwicklung

$$\phi_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n(k)e^{jkx}\mathrm{d}k \tag{6.26}$$

angesetzt. Die Entwicklung des Quellterms wird direkt aus Gleichung (6.2) übernommen. Die planaren P_N Gleichungen reduzieren sich damit auf ein System von $N+1$ linearen Gleichungen

$$\frac{n+1}{2n+1}jk\phi_{n+1}(k) + \frac{n}{2n+1}jk\phi_{n-1}(k) + \mu_{an}\phi_n(k) = S(k)\delta_{n,0}. \tag{6.27}$$

In Matrizenschreibweise resultiert das System

$$\mathbf{Q}\left[\phi_0(k), \phi_1(k), ..., \phi_N(k)\right]^T = [1, 0, ..., 0]^T \tag{6.28}$$

mit der symmetrischen Tridiagonalmatrix

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mu_a & jk & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ jk & 3\mu_{a1} & j2k & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & j2k & \ddots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \cdots & \cdots & \ddots & \ddots & jNk \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & jNk & (2N+1)\mu_{aN} \end{pmatrix} \tag{6.29}$$

als Systemmatrix. Die Fluenz lässt sich elegant mit der Carmer'schen Regel

$$\phi_0(k) = \frac{\det(\mathbf{Q}_0)}{\det(\mathbf{Q})}, \tag{6.30}$$

extrahieren. Die Matrix $\mathbf{Q}_0$ ist eine weitere symmetrische Tridiagonalmatrix, welche sich durch den Ersatz der ersten Spalte der Matrix $\mathbf{Q}$ mit dem Lösungsvektor $[1, 0, ..., 0]^T$ ergibt. Die Fluenz im transformierten Bereich besitzt die Struktur der gebrochenrationalen Funktion

$$\phi_0(k) = \frac{a_{N-1}k^{N-1} + a_{N-3}k^{N-3} + \cdots + a_0}{b_{N+1}k^{N+1} + b_{N-1}k^{N-1} + \cdots + b_0}. \tag{6.31}$$

Mit Hilfe der vollständigen Induktion kann gezeigt werden, dass sich die benötigten Determinanten nach der Rekursionsformel

$$\mathcal{D}_{n+1}(k) = (2n+1)\mu_{an}\mathcal{D}_n(k) + (nk)^2\mathcal{D}_{n-1}(k) \tag{6.32}$$

berechnen lassen. Der nächste Schritt besteht in der Integration der algebraischen Lösung nach Gleichung (6.26). Die Singularitäten der Funktion $\phi_0(k)$ liegen auf der imaginären Achse der komplexen Zahlenebene. Ferner gilt deg $|\mathbf{Q}|$ = deg $|\mathbf{Q}_0|$+2. Damit sind die Bedingungen zur Anwendung des Residuensatzes erfüllt, womit die Integration durch

$$\phi_n(x) = j \sum_i \mathcal{R}\mathrm{es}\{\phi_n(\xi) e^{j\xi x}, \alpha_i\} \tag{6.33}$$

ersetzt werden kann. Die Fluenz im transformierten Bereich wird auf die Partialbruchform

$$\phi_0(k) = \frac{1}{b_{N+1}} \frac{a_{N-1}k^{N-1} + a_{N-3}k^{N-3} + \cdots + a_0}{(k^2+\nu_1^2)(k^2+\nu_2^2) \times \cdots \times (k^2+\nu_{\frac{N+1}{2}}^2)} = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{k^2+\nu_i^2} \tag{6.34}$$

gebracht. Die Werte für A_i und ν_i lassen sich wie folgt über die rekursive Darstellung der Determinanten bestimmen. Mit den Startwerten $\mathcal{D}_0(\kappa) = 0$ und $\mathcal{D}_1(\kappa) = 1$ ist für $n = 1, 2, ...N$ über

$$\mathcal{D}_{n+1}(\kappa) = (2n+1)\mu_{an}\mathcal{D}_n(\kappa) - \kappa n^2 \mathcal{D}_{n-1}(\kappa) \tag{6.35}$$

das erste rekursiv definierte Polynom

$$P(\kappa) = \mathcal{D}_{N+1}(\kappa) = \sum_{l=0}^{\frac{N-1}{2}} a_{2l}\kappa^l \tag{6.36}$$

gegeben. Ein zweites Polynom ergibt sich mit $\mathcal{D}_0(\kappa) = 1$ und $\mathcal{D}_1(\kappa) = \mu_a$ zu

$$Q(\kappa) = \mathcal{D}_{N+1}(\kappa) = \sum_{l=0}^{\frac{N+1}{2}} b_{2l}\kappa^l. \tag{6.37}$$

Die Polynomgleichung $Q(\kappa) = 0$ liefert insgesamt $(N+1)/2$ reellwertige und positive Wurzeln κ_i. Mit Hilfe dieser erhält man dann $\nu_i = \sqrt{\kappa_i}$ sowie die Partialbruchkoeffizienten

$$A_i = \frac{1}{b_{N+1}} \frac{P(\kappa_i)}{\prod\limits_{n \neq i} (\kappa_n - \kappa_i)}. \tag{6.38}$$

Für den höchsten Polynomkoeffizienten gilt

$$b_{N+1} = \prod_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} (2l-1)^2 = \frac{1}{2^{N-1}} \left[\frac{N!}{(\frac{N-1}{2})!} \right]^2. \tag{6.39}$$

Mit der Darstellung der Fluenz in Partialbruchform bleibt die direkte Berechnung der Residuen erspart. Stattdessen bringt die Entwicklung der eindimensionalen Greenschen Funktion aus der Diffusionstheorie

$$G(x) = \frac{e^{-\nu_1|x|}}{2D\nu_1} = \frac{1}{2\pi D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{jkx}}{k^2+\nu_1^2} \mathrm{d}k \tag{6.40}$$

die Fluenz der planaren P_N Gleichungen zu

$$\phi_0(x) = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{2} \frac{e^{-\nu_i|x|}}{\nu_i}. \tag{6.41}$$

Erneut wird Beziehung (6.12) verwendet, um Ergebnisse einer planarsymmetrischen Anordnung auf den kugelsymmetrischen Raum zu übertragen. Für die dreidimensionale Fluenz gilt dann

$$\phi_0(r) = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} A_i \frac{e^{-\nu_i r}}{4\pi r}. \tag{6.42}$$

Die exakte Lösung für die Fluenz der RTE entspricht einer Überlagerung unendlich vieler Greenscher Funktionen aus der Diffusionstheorie mit modifizierten Konstanten. Um das Ergebnis für beliebige Dimensionen zur erhalten, wird die Lösung der dimensionsabhängigen Diffusionsgleichung verwendet. Die s-dimensionale Fluenz lautet im transformierten Bereich

$$\phi_0^{(s)}(k) = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{k^2 + \nu_i^2}, \tag{6.43}$$

wobei $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + \cdots + k_s^2}$ der Betrag des s-dimensionalen Wellenvektors ist. Die inverse Fouriertransformation wird über die verallgemeinerte Hankeltransformation (6.20) ermittelt. Im Kapitel 3.1 wurde eine ganz ähnliche Rücktransformation durchgeführt. Mit Verwendung dieses Ergebnisses ist

$$\phi_0^{(s)}(r) = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{(2\pi)^{m+1}} \left(\frac{\nu_i}{r}\right)^m K_m(\nu_i r), \quad m = s/2 - 1 \tag{6.44}$$

die s-dimensionale Fluenz für ein streuendes Medium. Die Fluenz verursacht von einer isotropen Linienladung wird zu

$$\phi_0(\rho) = \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{2\pi} K_0(\nu_i \rho). \tag{6.45}$$

Aufgrund zahlreicher Vergleiche zwischen der analytischen Lösung und der Monte Carlo Methode lässt sich folgern, dass die Fluenz der P_N Gleichungen für Ordnungen $N \leq 7$ in relevanten Anwendungsfällen praktisch gleich der exakten Lösung ist. Die Wurzeln der Polynomgleichungen sind bis zur 4. Ordnung formelmäßig erfassbar [49]. Für die P_7 Gleichungen gilt es die Polynomgleichung

$$\lambda^4 + \alpha\lambda^3 + \beta\lambda^2 + \gamma\lambda + \varepsilon = 0, \tag{6.46}$$

mit $\alpha = b_6/b_8$, $\beta = b_4/b_8$, $\gamma = b_2/b_8$ und $\varepsilon = b_0/b_8$ zu lösen. Im ersten Schritt wird eine reellwertige Wurzel der kubischen Gleichung

$$s^3 - \frac{1}{2}\beta s^2 + \frac{1}{4}(\alpha\gamma - 4\varepsilon)s + \frac{1}{8}\varepsilon(4\beta - \alpha^2) - \frac{1}{8}\gamma^2 = 0 \tag{6.47}$$

benötigt. Definiert man

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{12}\beta^2 - \frac{1}{4}(\alpha\gamma - 4\varepsilon), \\ q &= -\frac{1}{108}\beta^3 + \frac{1}{24}\beta(\alpha\gamma - 4\varepsilon) + \frac{1}{8}\varepsilon(4\beta - \alpha^2) - \frac{1}{8}\gamma^2, \end{aligned} \tag{6.48}$$

findet sich mit der bereits vorgestellten Formel von Cardano die Wurzel

$$s = 2\sqrt{\frac{p}{3}}\cos\Big(\frac{\varphi}{3}\Big) + \frac{\beta}{6}, \tag{6.49}$$

wobei

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{3q}{2p}\sqrt{\frac{3}{p}}\right). \tag{6.50}$$

Weiterhin werden die Größen

$$\begin{aligned} a_{1,2} &= \frac{1}{2}\left(\alpha \pm \sqrt{8s + \alpha^2 - 4\beta}\right), \\ b_{1,2} &= s \pm (\alpha s - \gamma)(8s + \alpha^2 - 4\beta)^{-1/2}, \end{aligned} \tag{6.51}$$

für die Lösung zweier quadratischer Gleichungen

$$\lambda^2 + a_i\lambda + b_i = 0, \quad i = 1, 2, \tag{6.52}$$

verwendet. Damit ergeben sich die insgesamt 4 benötigten Wurzeln durch Lösen von zwei quadratischen Gleichungen.
Die exakte Fluenz der RTE ist eine Überlagerung aus der Greenschen Funktion der Diffusionstheorie mit modifizierten Konstanten. Ist die Antwort der Diffusionsgleichung auf die Kugelschalenquelle bekannt, so ist simultan auch die Lösung innerhalb der Transporttheorie gegeben. Mit $A_1 = 1/D$ und $\nu_1 = \mu_{\mathit{eff}}$ wird direkt das Umkehrintegral

$$\phi_{sph}(r) = \frac{1}{2\pi^2 r r_s}\int_0^\infty \frac{A_1}{k^2 + \nu_1^2}\sin(r_s k)\sin(rk)\mathrm{d}k. \tag{6.53}$$

angesetzt. Die Verwendung eines Additionstheorems der trigonometrischen Funktionen und ein Vergleich zur Wellendarstellung der eindimensionalen Greenschen Funktion der DE bringt als Lösung innerhalb der Diffusionstheorie

$$\Phi_{sph}(r) = \frac{e^{-\mu_{\mathit{eff}}|r - r_s|} - e^{-\mu_{\mathit{eff}}|r + r_s|}}{8\pi\mu_{\mathit{eff}} D r r_s} \tag{6.54}$$

und damit innerhalb der Transporttheorie

$$\phi_{sph}(r) = \frac{1}{8\pi r r_s}\sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{A_i}{\nu_i}(e^{-\nu_i|r - r_s|} - e^{-\nu_i|r + r_s|}). \tag{6.55}$$

Etwas schwieriger gestaltet sich die Lösung für die Zylinderschalenquelle mit Radius ρ_s

$$S(\rho) = \frac{\delta(\rho - \rho_s)}{2\pi\rho} \tag{6.56}$$

über den transformierten Bereich. Wesentlich schneller ergibt sich die Lösung durch einen Rückblick auf ein Zwischenergebnis des homogenen Zylinders. Die Aufgabenstellung für die Zylinderschalenquelle ist innerhalb der Diffusionstheorie ein zweidimensionales Problem ohne jegliche azimutale Abhängigkeit. Die gesuchte Fluenz findet sich durch Lösung der Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\Phi_{cyl}(r) + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\Phi_{cyl}(r) - \mu_{eff}^2\Phi_{cyl}(r) = -\frac{1}{D}\frac{\delta(\rho - \rho_s)}{2\pi\rho}. \tag{6.57}$$

Die Lösung dieser Gleichung kann unmittelbar ohne weitere Rechnung angegeben werden. Diese entspricht Gleichung (4.24) für den Fall $m = 0$ und unter Berücksichtigung des Faktors 2π. Damit gilt für die Zylinderschalenquelle innerhalb der Diffusionstheorie

$$\Phi_{cyl}(r) = \frac{1}{2\pi D} I_0(\mu_{eff}\rho_<) K_0(\mu_{eff}\rho_>). \tag{6.58}$$

Für die Transporttheorie findet sich die Überlagerung

$$\phi_{cyl}(\rho) = \frac{1}{2\pi}\sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} A_i I_0(\nu_i\rho_<) K_0(\nu_i\rho_>). \tag{6.59}$$

An dieser Stelle folgt noch eine Ergänzung zur Fluenz des nicht streuenden Mediums aus dem vergangenen Unterkapitel. Die dort hergeleiteten Ergebnisse sind in den Lösungen für das streuende Medium für $\mu_s = 0$ und $N \to \infty$ enthalten. Daraus folgt für die Fluenz im transformierten Bereich das Resultat

$$\phi_0^{(n)}(k) = \lim_{N\to\infty} \frac{a_{N-1}k^{N-1} + a_{N-3}k^{N-3} + \cdots + a_0}{b_{N+1}k^{N+1} + b_{N-1}k^{N-1} + \cdots + b_0} = \frac{1}{k}\arctan\left(\frac{k}{\mu_a}\right). \tag{6.60}$$

Die Dimension ist hierbei durch den Wellenvektor $\vec{k}$ festgelegt. Für die eindimensionale Fluenz wurde dieser Grenzwert für unterschiedliche Ordnungen und zwei verschiedenen Absorptionskoeffizienten ausgewertet.

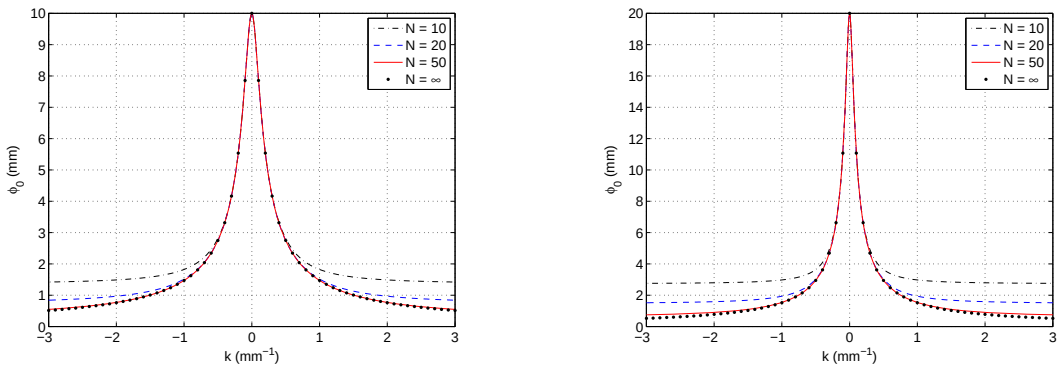

Abbildung 6.1: Absorption $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$ (links) und $\mu_a = 0.05\,\mathrm{mm}^{-1}$ (rechts).

Der Quotient aus den rekursiv definierten Polynomen konvergiert mit zunehmender Ordnung gegen den exakten Grenzwert. Den Abbildungen ist die Abhängigkeit des Konvergenzverhaltens von der Absorption des Mediums zu entnehmen. Ähnliche Konvergenzbedingungen liegen auch im allgemeineren Fall des streuenden Mediums vor. Der durchgeführte Test mit Hilfe des exakten Grenzwertes ist für die Überprüfung der Rekursionsformeln zur Bestimmung der Determinanten wichtig.
Als nächstes wird ein nicht streuendes Medium mit einer Absorption von $\mu_a = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ betrachtet. In den folgenden Abbildungen ist das Ergebnis der Fluenz verursacht von verschiedenen isotrop abstrahlenden Quellen zu sehen. Zusätzlich ist in den Abbildungen auch die Lösung der Diffusionsgleichung enthalten.

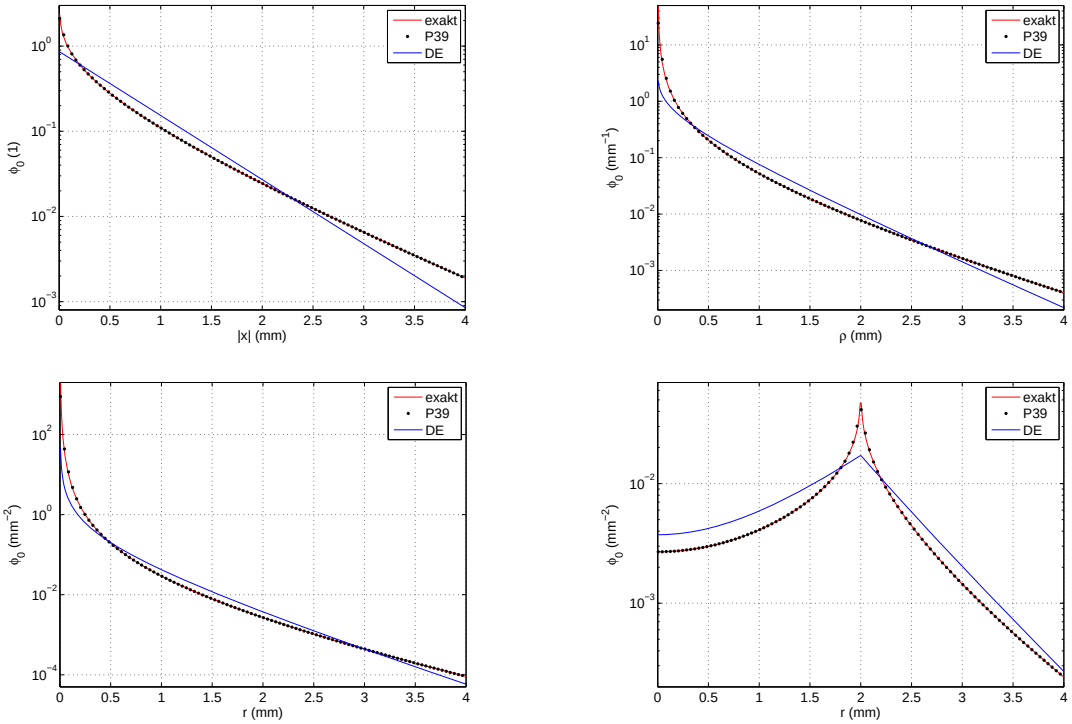

Abbildung 6.2: Fluenz verursacht von einer unendlich ausgedehnten flächenhaften Quelle (oben links), einer Linienquelle (oben rechts), einer Punktquelle (unten links) sowie einer Kugelschalenquelle mit Radius $r_s = 2\,\mathrm{mm}$ (unten rechts).

Die Fluenz ermittelt über die P_N Gleichungen konvergiert in allen Fällen gegen die exakte Lösung der RTE. Neben den rekursiv definierten Polynomgleichungen ergibt sich gleichzeitig eine Kontrollmöglichkeit der iterierten Nullstellen des Nennerpolynoms der Übertragungsfunktion. Die Diffusionstheorie hingegen schneidet innerhalb dieser Vergleiche äußerst unbefriedigend ab.
Für das allgemeine streuende Medium mit beliebigem Anisotropiefaktor bildet von nun ab lediglich die Monte Carlo Methode eine Referenz. Für eine isotrop abstrahlende Punktquelle wird die Fluenz innerhalb eines streuenden Mediums mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $g = 0.9$ simuliert. Als Phasenfunktion wird die Henyey-Greenstein Funktion verwendet.

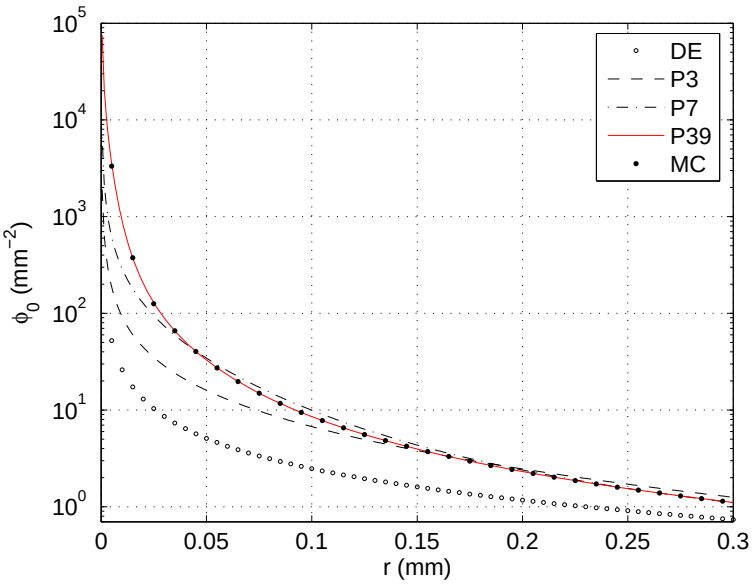

Abbildung 6.3: Fluenz für eine punktförmige Quelle im infiniten Medium.

Wie aus Abbildung 6.3 ersichtlich ist, sind für geringere Abstände zur isotropen Punktquelle höhere Ordnungen unumgänglich. Dieser Effekt verringert sich mit steigender Absorption aufgrund des besseren Konvergenzverhaltens der analytischen Lösung. Desweiteren stellt sich mit sinkendem Anisotropiefaktor ein schlechteres Konvergenzverhalten der analytischen Lösung ein. Für eine verzehnfachte Absorption wird im nächsten Vergleich der Einfluss des Anisotropiefaktors untersucht.

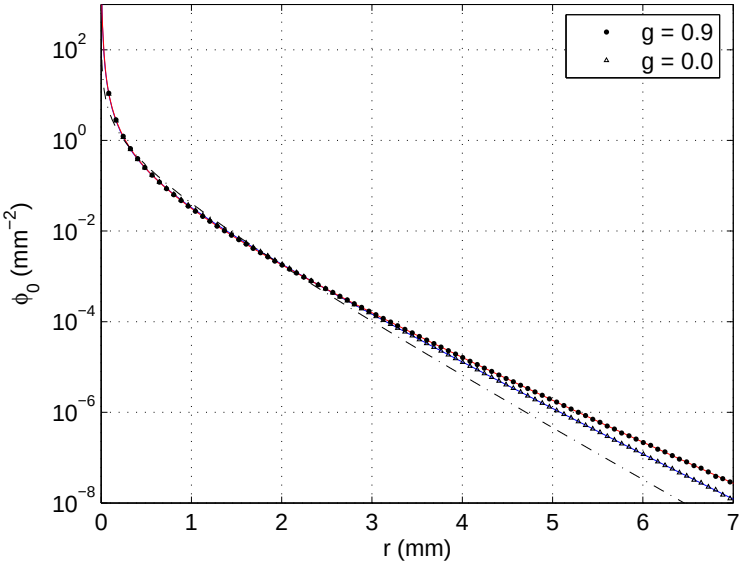

Abbildung 6.4: Fluenz für eine punktförmige Quelle im infiniten Medium mit unterschiedlichen Anisotropiefaktoren.

Die Fluenz der P_5 Gleichungen (Linien) als auch die Monte Carlo Methode (Symbole) ergeben für beide Anisotropiefaktoren identische Resultate. Die Diffusionstheorie (gestrichelte Linie) bricht bei dieser hohen Absorption über den gesamten Bereich zusammen.
Die zeitabhängige Fluenz ergibt sich mit Verwendung komplexwertiger Absorptionsmomente und anschließender inverser Fouriertransformation. Abbildung 6.5 zeigt eine Gegenüberstellung der Fluenz der analytischen Lösung (Linien), der Monte Carlo Methode (Symbole) sowie der Diffusionsgleichung (gestrichelte Linien). Als Phasenfunktion kommt erneut die Henyey-Greenstein Funktion zum Einsatz.

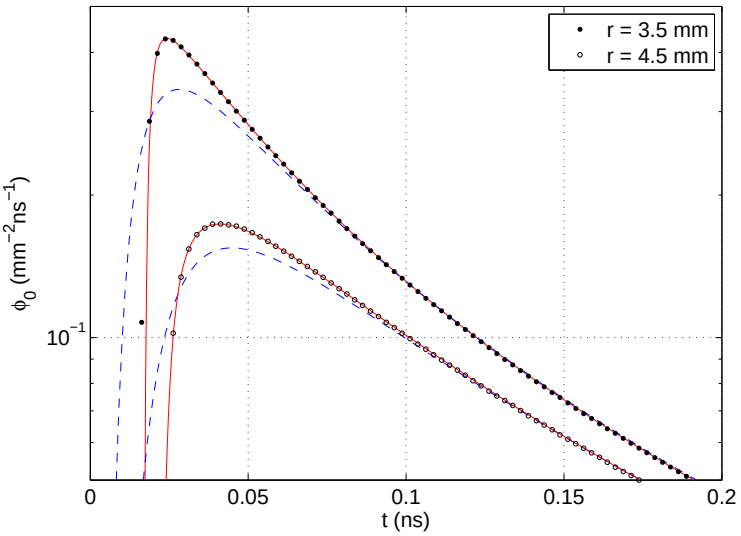

Abbildung 6.5: Vergleich der zeitaufgelösten Fluenz im infiniten kugelsymmetrischen Medium für eine Absorption von $\mu_a = 0.01\,\mathrm{mm}^{-1}$, einem reduzierten Streukoeffizient von $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und einem Anisotropiefaktor von $g = 0.9$. Der Brechungsindex des streuenden Mediums beträgt $n = 1.4$.

Die analytische und numerische Lösung stimmt auch im zeitabhängigen Fall sehr gut überein. Die Diffusionstheorie divergiert für die kleinen Zeitwerte. Desweiteren ergeben sich durch die relativ kleinen Abstände zur isotropen Quelle Probleme in der Anwendung dieser vereinfachten Theorie.

Die analytischen Lösungen für die Fluenz der RTE wurden in [50] veröffentlicht und ein MATLAB-Script auf der Internetseite [35] zur Verfügung gestellt.

6.2.1 Alternative Lösung für das isotrop streuende Medium

Die rekursive Beziehung (6.32) zur Bestimmung der Determinanten soll für das isotrop streuende Medium näher untersucht werden. Die Absorptionsmomente sind in diesem Fall unabhängig von der diskreten Variable n und werden zu $\mu_{an} = \mu_t$. Beginnend mit der beidseitigen Division durch den Term $\mu_t \mathcal{D}_n(k)$ und der Definition der Größe

$$\mathcal{R}_n(k) = \frac{\mathcal{D}_{n+1}(k)}{\mu_t \mathcal{D}_n(k)} \tag{6.61}$$

entsteht die folgende modifizierte Rekursionsformel

$$\mathcal{R}_{n-1}(k) = \frac{n^2 \left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{2n+1-\mathcal{R}_n(k)} \,. \tag{6.62}$$

Für $n = 1$ ergibt sich mit den Startwerten die Entwicklung

$$\mathcal{R}_0(k) = \frac{\mathcal{D}_1(k)}{\mu_t \mathcal{D}_0(k)} = \frac{\mu_a}{\mu_t} = \cfrac{\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{3 - \cfrac{4\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{5 - \cfrac{9\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{7 - \cfrac{16\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{\cdots}}}} \tag{6.63}$$

in Form eines Kettenbruches. Im Grenzfall $N \to \infty$ geht zum einen das System der P_N Gleichungen exakt in die RTE über, zum anderen strebt die skizzierte Kettenbruchentwicklung gegen einen Ausdruck des inversen hyperbolischen Tangens

$$1 - \frac{j\frac{k}{\mu_t}}{\operatorname{artanh}\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)} = \cfrac{\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{3 - \cfrac{4\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{5 - \cfrac{9\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{7 - \cfrac{16\left(j\frac{k}{\mu_t}\right)^2}{\cdots}}}} \tag{6.64}$$

was in [22] nachzuschlagen ist. Zwischen dem Startwert und der Kettenbruchentwicklung besteht ein Gleichheitszeichen. Die sich ergebende Bestimmungsgleichung

$$\frac{\mu_s}{k} \arctan\left(\frac{k}{\mu_t}\right) = 1 \tag{6.65}$$

ist die Eigenwertgleichung der RTE für das isotrop streuende Medium. Während der nachfolgenden Betrachtungen spielt die Lösung dieser Gleichung eine zentrale Rolle. Die RTE des isotrop streuenden Mediums ist durch

$$\tau\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\tau)+\mu_t\psi(x,\tau)=\frac{\mu_s}{2}\int_{-1}^{1}\psi(x,\tau')\mathrm{d}\tau'+\frac{\delta(x)}{2} \tag{6.66}$$

gegeben. Eine Fouriertransformation bezüglich der Ortskoordinate resultiert in der Darstellung

$$\psi(k,\tau)=\frac{\mu_s}{2}\frac{1}{\mu_t+jk\tau}\int_{-1}^{1}\psi(k,\tau')\mathrm{d}\tau'+\frac{1}{2}\frac{1}{\mu_t+jk\tau}. \tag{6.67}$$

Mit der Integration über den Winkelbereich $|\tau|\leq 1$ und die Verwendung der Definitionsgleichung der Fluenz (6.6) ergibt sich diese im transformierten Bereich zu

$$\phi_0(k)=\frac{1}{k}\arctan\left(\frac{k}{\mu_t}\right)\left[1-\frac{\mu_s}{k}\arctan\left(\frac{k}{\mu_t}\right)\right]^{-1}. \tag{6.68}$$

Die Nullstellen des Nenners fallen mit den Eigenwerten der Gleichung (6.65) zusammen, deren Art und Lage analysiert werden sollen. Die linke Seite von (6.65) nimmt für $k\in\mathbb{R}$ ausschließlich Werte aus dem offenen Intervall $]0,\mu_s/\mu_t[$ an. Da $\mu_s/\mu_t<1$ ist, kann es keine reelle Lösung geben. Für die Suche nach Lösungen auf der imaginären Achse kann beispielsweise $\lambda=\pm jk/\mu_t$ gesetzt werden. Es entsteht die modifizierte Eigenwertgleichung

$$\frac{\operatorname{artanh}\lambda}{\lambda}=\frac{\mu_t}{\mu_s}=1+\frac{\mu_a}{\mu_s}. \tag{6.69}$$

Die linke Seite dieser Gleichung ist aufgrund der obigen Substitution unabhängig von den optischen Eigenschaften geworden und in Abbildung 6.6 dargestellt.

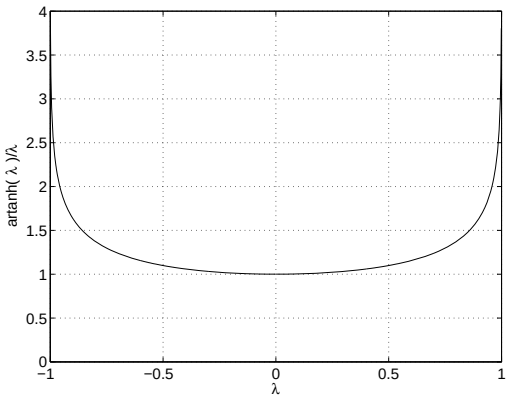

Abbildung 6.6: Kennlinie der Eigenwertgleichung.

Dem Bild sind stets zwei symmetrisch gelegene Schnittpunkte für den physikalisch sinnvollen Fall $\mu_a > 0$ und $|\lambda| < 1$ zu entnehmen. Weiterhin sind durch diese Kennlinie entsprechende Startwerte für eine Eigenwertbestimmung vorgegeben. In Abbildung 6.7 ist die obere komplexe Zahlenhalbebene mit der Lage eines Eigenwertes sowie einer geschlossenen Kurve zu sehen.

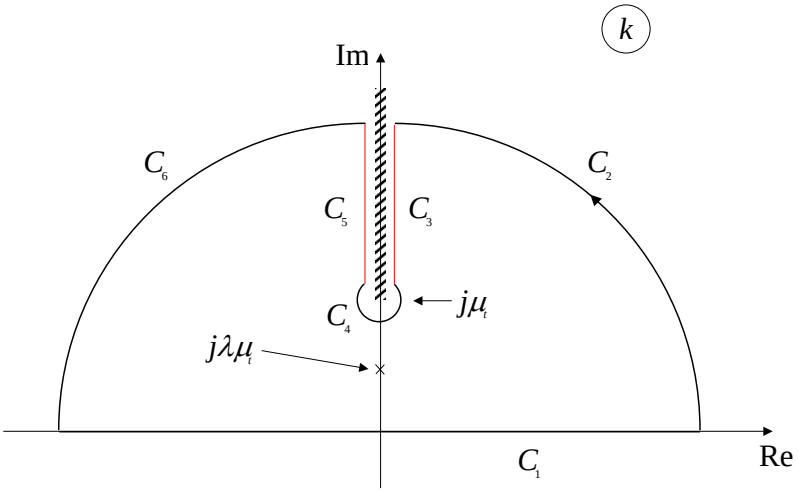

Abbildung 6.7: Komplexe Zahlenebene mit Integrationsweg.

Der Weg entlang dieser Kurve spart den markierten Teilbereich $\mathrm{Im}\{k\} \geq \mu_t$ auf der imaginäre Achse aus, da der Arkustangens an den Stellen $k = \pm j\mu_t$ nicht definiert ist. Die inverse Fouriertransformation kann entlang der geschlossenen Kurve und der Verwendung des Residuensatzes erfolgen. Allerdings sind Teilintegrale mit nicht verschwindenden Anteil im Endergebnis zu berücksichtigen. Die eigentliche inverse Fouriertransformation entspricht der Integration entlang der Teilkurve C_1. In mathematischer Schreibweise wird die Inverse zu

$$\phi_0(x) = j\mathcal{R}\mathrm{es}\{\phi_0(\xi)e^{j\xi x}, j\lambda\mu_t\} - \frac{1}{2\pi}\sum_{i=2}^{6}\int_{C_i}\phi_0(k)e^{jkx}\mathrm{d}k. \tag{6.70}$$

In einem Fachbuch aus dem Neutronentransport [2] wird gezeigt, dass lediglich die Kurvenintegrale entlang der rot gekennzeichneten Wege C_3 und C_5 vom Endergebnis subtrahiert werden müssen. Die Auswertung des Residuums an der Stelle $k = j\lambda\mu_t$ ist der leichtere Teil dieser Aufgabe und korrespondiert mit der Lösung für $x > 0$. Aufgrund der vorliegenden Symmetrie ist gleichzeitig auch die Lösung für $x < 0$ bekannt. Dieser Anteil der Fluenz konvergiert asymptotisch für große Abstände zur Quelle gegen die exakte Lösung der RTE. Aus [49] entnimmt man für eine komplexwertige Funktion $f(z) = g(z)/h(z)$ mit den Eigenschaften $g(z_0) \neq 0$, $h(z_0) = 0$ und $h'(z_0) \neq 0$ die Berechnungsvorschrift

$$\mathcal{R}\mathrm{es}\{f(z), z_0\} = \lim_{z\to z_0}(z - z_0)f(z) = \frac{g(z_0)}{h'(z_0)}. \tag{6.71}$$

Die hier vorliegende Fluenz erfüllt all diese Eigenschaften. Mit der ersten Ableitung des Arkustangens und einer algebraischen Vereinfachung findet sich für $x > 0$ der Ausdruck

$$\phi_{asy}(x) = j\mathcal{R}\mathrm{es}\left\{ \frac{\dfrac{\arctan(\xi/\mu_t)e^{j\xi x}}{\xi}}{1-\mu_s\dfrac{\arctan(\xi/\mu_t)}{\xi}}, \xi = j\lambda\mu_t \right\} = \frac{\mu_t^2\lambda(1-\lambda^2)}{\mu_t\lambda^2-\mu_a}\frac{e^{-\lambda\mu_t x}}{\mu_s}. \tag{6.72}$$

Wegen der geraden Symmetrie resultiert

$$\phi_{asy}(x) = \frac{\mu_t^2\lambda(1-\lambda^2)}{\mu_t\lambda^2-\mu_a}\frac{e^{-\lambda\mu_t|x|}}{\mu_s}. \tag{6.73}$$

Im zweiten Teil ist die Auswertung von Kurvenintegralen gefordert. Der Weg C_3 wird durch die Parametrisierung $k = \sigma + j\xi$ mit $\mu_t < \xi < \infty$ und $\sigma \in \mathbb{R}^+$ beschrieben. Für C_5 gilt dann entsprechend $k = -\sigma + j\xi$ mit $\infty < \xi < \mu_t$. Es ist zu beachten, dass sich die Durchlaufrichtung der Kurve mit der gewählten Parametrisierung geändert hat. Die Beiträge werden im späteren Endergebnis positiv gewichtet. Weiterhin ist der zweiseitige Grenzwert für $\xi > \mu_t$

$$\lim_{\sigma\to 0}\ln\frac{\mu_t-\xi\pm j\sigma}{\mu_t+\xi\mp j\sigma} = \ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right| \pm j\pi \tag{6.74}$$

zu bilden. Aufgrund der entstandenen Phasendifferenz heben sich die Anteile entlang von C_3 und C_5 gegenseitig nicht auf. Für die Fluenz gelten die Grenzwerte

$$\begin{aligned}
\phi_o(0^+ + j\xi) &= \frac{-\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right| - j\pi}{2\xi + \mu_s\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right| + j\mu_s\pi}\ , \\
\phi_o(0^- + j\xi) &= \frac{-\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right| + j\pi}{2\xi + \mu_s\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right| - j\mu_s\pi} = \phi_o^*(0^+ + j\xi).
\end{aligned} \tag{6.75}$$

Der Gesamtbeitrag der zwei Kurvenintegrale wird als transienter Anteil bezeichnet. Etwas später wird die Bedeutung dieses Anteils aufgezeigt. Durch Einsetzen der Grenzwerte in die Kurvenintegrale entsteht

$$\begin{aligned}
\phi_{trans}(x) &= \frac{1}{2\pi}\int_{\mu_t}^{\infty}\phi_o(0^+ + j\xi)e^{-\xi x}j\mathrm{d}\xi - \frac{1}{2\pi}\int_{\mu_t}^{\infty}\phi_o(0^- + j\xi)e^{-\xi x}j\mathrm{d}\xi \\
&= -\frac{1}{\pi}\int_{\mu_t}^{\infty}\mathrm{Im}\{\phi_o(0^+ + j\xi)\}e^{-\xi x}\mathrm{d}\xi = \int_{\mu_t}^{\infty}\frac{2\xi e^{-\xi x}}{\left(2\xi + \mu_s\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right|\right)^2 + (\mu_s\pi)^2}\mathrm{d}\xi.
\end{aligned} \tag{6.76}$$

Das Endergebnis wird aus $\phi_0(x) = \phi_{asy}(x) + \phi_{trans}(x)$ gebildet. Der Übergang von der Planarsymmetrie auf das kugelsymmetrische Medium wird über Gleichung (6.12) vollzogen und ergibt für das isotrop streuende Medium den Ausdruck

$$\phi_0(r) = \frac{\mu_t^3\lambda^2(1-\lambda^2)}{\mu_t\lambda^2 - \mu_a}\frac{e^{-\mu_t\lambda r}}{2\pi\mu_s r} + \frac{1}{4\pi r}\int_{\mu_t}^{\infty} \frac{e^{-\xi r}}{\left(1 + \frac{\mu_s}{2\xi}\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right|\right)^2 + \left(\frac{\mu_s\pi}{2\xi}\right)^2}\mathrm{d}\xi. \tag{6.77}$$

Verglichen mit der Fluenz aus (6.42) besitzt diese Darstellung entscheidende Vorteile. Anstatt sehr vieler Polynomnullstellen wird lediglich ein einziger, sehr einfach zu bestimmender Eigenwert benötigt. Die numerische Integration des transienten Anteils ist völlig unproblematisch und lässt sich mit der Substitution $\xi = \tan u$ auf das Intervall $\arctan\mu_t \leq u \leq \pi/2$ begrenzen. Es liegt ein sehr gutes Konvergenzverhalten sowohl für sehr kleine, als auch sehr große Abstände zur isotropen Quelle vor. Die Lösung ist mit sehr wenig Aufwand programmiert und ermöglicht die Auswertung der exakten Fluenz für 1000 Abstände unter einer Sekunde.
Es folgt ein Vergleich mit der Fluenz aus einer Monte Carlo Simulation. Das isotrop streuende Medium wird durch die optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $\mu_s = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ charakterisiert. Mit dem Newton-Verfahren ergibt sich der benötigte Eigenwert zu $\lambda = 0.5029405749$.

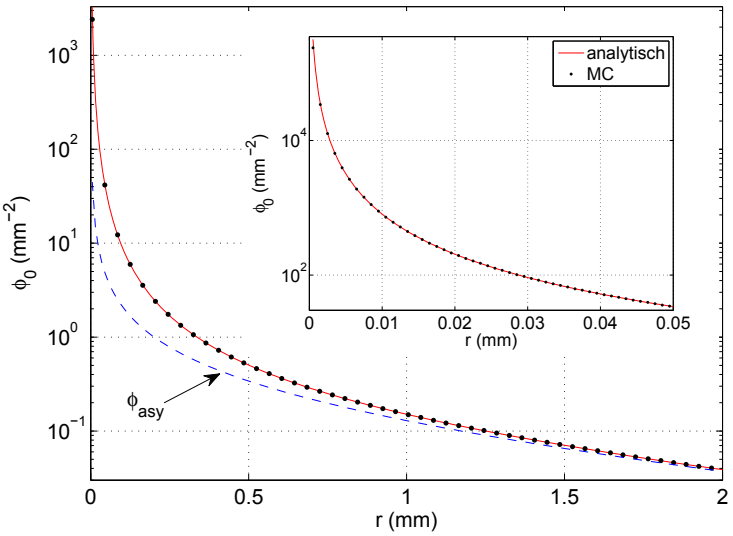

Abbildung 6.8: Fluenz im unendlich ausgedehnten isotrop streuenden Medium mit erhöhter Absorption.

Für alle Orte stellt sich eine sehr gute Übereinstimmung beider Methoden ein. Ferner ist für größer werdende Abstände der Übergang des asymptotischen Anteils gegen die exakte Lösung zu sehen. Bemerkenswert ist, dass dieser Anteil für ein nicht absorbierendes Medium in die Greensche Funktion aus der Diffusionstheorie übergeht. Das verwendete Medium besitzt eine erhöhte Absorption. Die Konvergenz der Lösung

mit den vielen Polynomnullstellen verschlechtert sich bei abnehmender Absorption. Die hier abgeleitete Lösung bleibt von diesem Effekt unberührt. Für die Monte Carlo Methode sind bei sinkender Absorption längere Rechenzeiten für eine gleichbleibend gute Statistik erforderlich. In einen weiteren Vergleich wird die Absorption des oben verwendeten Mediums auf $\mu_a = 0.005\,\mathrm{mm}^{-1}$ abgesenkt und der Abstand zur Quelle weiter verringert. Der Eigenwert nimmt jetzt den Wert $\lambda = 0.1219261135$ an.

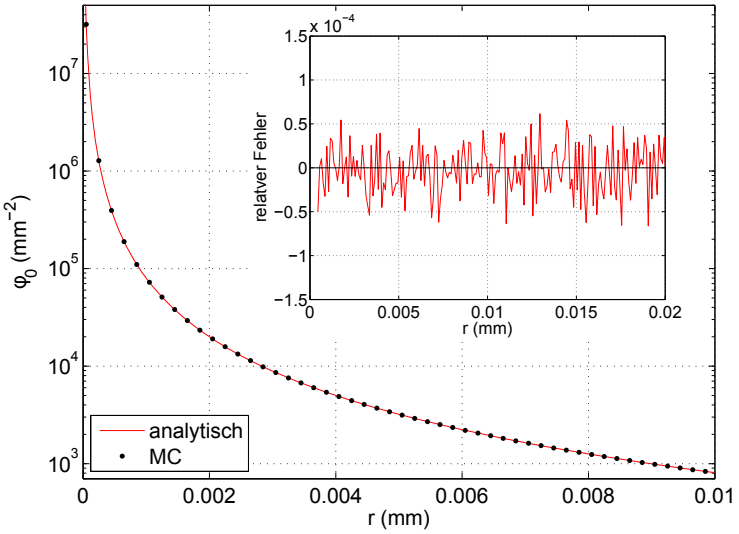

Abbildung 6.9: Fluenz im unendlich ausgedehnten isotrop streuenden Medium mit relativ geringer Absorption.

Die analytische und numerische Lösung konvergiert auch bei niedriger Absorption und sehr geringen Abständen zur gleichen Fluenz. Der Inset zeigt die relativen Unterschiede zwischen beiden Verfahren. Unter Berücksichtigung der relativ geringen Absorption ist zum Erreichen dieser Statistik für die Monte Carlo Methode eine Simulationsdauer von mehreren Tagen notwendig.
In einem letzten Vergleich wird die Fluenz verursacht von einer isotrop abstrahlenden Zylinderschalenquelle betrachtet. Die benötigte Gleichung lässt sich mit den Gedankengängen des zurückliegenden Kapitels zu

$$\phi_{cyl}(\rho) = \frac{\mu_t^3\lambda^2}{\pi\mu_s}\frac{1-\lambda^2}{\mu_t\lambda^2-\mu_a} I_0(\mu_t\lambda\rho_<)K_0(\mu_t\lambda\rho_>) + \frac{1}{2\pi}\int_{\mu_t}^{\infty} \frac{I_0(\xi\rho_<)K_0(\xi\rho_>)}{\left(1+\frac{\mu_s}{2\xi}\ln\left|\frac{\mu_t-\xi}{\mu_t+\xi}\right|\right)^2 + \left(\frac{\mu_s\pi}{2\xi}\right)^2}\mathrm{d}\xi \tag{6.78}$$

ermitteln. Das isotrop streuende Medium weist die optischen Parameter $\mu_a = 0.01\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $\mu_s = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ auf. Der sich ergebende Eigenwert lautet $\lambda = 0.1716617793$. Die Fluenz beider Methoden ist in der nachfolgenden Abbildung 6.10 gegenübergestellt.

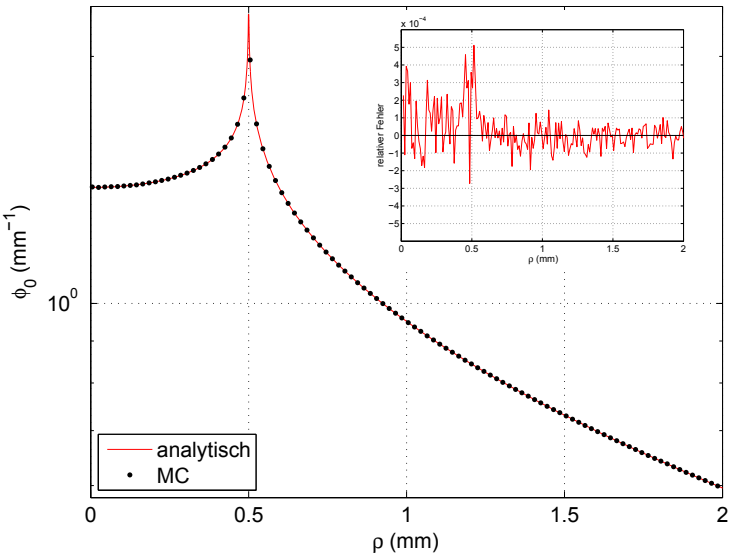

Abbildung 6.10: Fluenz für eine Zylinderschalenquelle mit Radius $\rho_s = 0.5\,\mathrm{mm}$ innerhalb eines isotrop streuenden Mediums.

Die Abbildung und der darin enthaltene Inset belegen die sehr gute Übereinstimmung zwischen der analytischen und numerischen Methode. Für diesen Vergleich wurden innerhalb der Monte Carlo Methode insgesamt $3.6{\cdot}10^9$ Photonen über 3 Tage simuliert. Die Berechnungszeit der analytischen Methode liegt im Millisekundenbereich.

6.3 Eigenwertmethode

Die Eigenwertmethode ermöglicht die Diagonalisierung von Matrizen und eignet sich daher zur Entkopplung von Differentialgleichungssystemen. Dieses Verfahren erweist sich als besonders effizient, falls die zugrundeliegende Systemmatrix eine symmetrische Tridiagonalgestalt besitzt. Nachfolgend wird diese Methode auf das System der gekoppelten P_N Gleichungen angewendet. Zu Beginn wird die Systemmatrix in zwei Teilmatrizen

$$\mathbf{Q} = \mathbf{S}^2 + jk\mathbf{R} \tag{6.79}$$

gesplittet. Die Matrix $\mathbf{S}$ aus $\mathbb{R}^{(N+1)\times(N+1)}$ ist eine Diagonalmatrix mit den Elementen

$$S_{nn'} = \sqrt{(2n+1)\mu_{an}}\delta_{nn'}. \tag{6.80}$$

Für die Tridiagonalmatrix $\mathbf{R}$ gelten

$$R_{nn'} = n\delta_{n',n-1} + (n+1)\delta_{n',n+1}. \tag{6.81}$$

Das System aus (6.28) lässt sich unter Verwendung der eingeführten Größen in der Form

$$\mathbf{S}\vec{\phi}(k) + jk\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\vec{\phi}(k) = \mathbf{S}^{-1}\vec{e}_N \tag{6.82}$$

mit $\vec{e}_N = (1, 0, ..., 0) \in \mathbb{R}^{N+1}$ schreiben. Durch die Substitution $\mathbf{S}\vec{\phi}(k) = \mathbf{T}\vec{\varphi}(k)$ entsteht das vollständig entkoppelte System

$$\vec{\varphi}(k) + jk\mathbf{W}\vec{\varphi}(k) = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\vec{e}_N, \tag{6.83}$$

mit $\mathbf{W} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{T}$ als Diagonalmatrix. Die Diagonalelemente entsprechen den Eigenwerten der charakteristischen Gleichung

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{S}^{-1} - \lambda\mathbf{E}) = 0. \tag{6.84}$$

An dieser Stelle wird auf die besonderen Eigenschaften der Matrix $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{S}^{-1}$ hingewiesen. Es handelt sich um eine symmetrische Tridiagonalmatrix mit dem Aussehen

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & 0 & \beta_2 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & \beta_2 & \ddots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \cdots & \cdots & \ddots & 0 & \beta_N \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_N & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.85}$$

mit $\beta_n = n/\sqrt{(2n-1)(2n+1)\mu_{an-1}\mu_{an}}$. Die oben angegebene charakteristische Gleichung dieser Matrix geht aus der rekursiv definierten Darstellung

$$p_{n+1}(\lambda) = -\lambda p_n(\lambda) - \beta_n^2 p_{n-1}(\lambda) \tag{6.86}$$

als das Polynom $p(\lambda) = p_{N+1}(\lambda)$ hervor. Die Initialwerte dieser Rekursion bilden die Polynome $p_0(\lambda) = 1$ und $p_1(\lambda) = -\lambda$. Derartige Matrizen besitzen stets reelle Eigenwerte mit einfacher Vielfachheit [49]. In Anwendung dieser Matrixstruktur auf die P_N Gleichungen weisen alle auftretenden charakteristischen Polynome die Symmetrieeigenschaft $p(-\lambda) = p(\lambda)$ auf. Demnach ergeben sich bei betragsmäßiger Betrachtung lediglich $(N+1)/2$ anstatt $N+1$ verschiedene Eigenwerte. Ist $\vec{v}_i$ der zum Eigenwert λ_i gehörende Eigenvektor mit den Komponenten $\langle n|v_i\rangle$, so entsteht für $-\lambda_i$ ein Vektor mit alternierenden Komponenten $(-1)^n\langle n|v_i\rangle$. In den nachfolgenden Betrachtungen werden die Eigenwerte $\lambda_i > 0$ mit ihren zugehörigen Eigenvektoren durch die Indizes $i = 0, 1, ..., (N-1)/2$ erfasst. Es kann gezeigt werden, dass die hier auftretenden positiven Eigenwerte λ_i mit den Wurzeln κ_i des rekursiv definierten Polynoms aus (6.37) im Verhältnis $\lambda_i = 1/\sqrt{\kappa_i}$ stehen. Die erforderlichen Eigenvektoren sind allgemein aus dem homogenen System $(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{S}^{-1} - \lambda\mathbf{E})\vec{v} = \vec{0}$ zu ermitteln. Aus Gründen des damit verbundenen Aufwands wird diese Prozedur etwas später unter Ausnutzung bisheriger Ergebnisse elegant umgangen, wodurch sich diese Methode auf effiziente Art und Weise realisieren lässt. In den obigen Matrizengleichungen beschreibt $\mathbf{T}$ die Transformationsmatrix, welche die zueinander orthogonalen und normierten Eigenvektoren $\vec{v}_i$ beinhaltet. Unter diesen Umständen ist die transponierte Matrix $\mathbf{T}^T$ gleich ihrer Inversen $\mathbf{T}^{-1}$. Die formale Lösung des entkoppelten Systems wird zu

$$\vec{\varphi}(k) = (\mathbf{E} + jk\mathbf{W})^{-1}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\vec{e}_N. \tag{6.87}$$

Der Deutlichkeit halber werden die auftretenden Matrizenprodukte etwas ausführlicher betrachtet. Die Inverse zu einer Diagonalmatrix ist wieder eine Diagonalmatrix mit den Kehrwerten der ursprünglichen Diagonalelemente. Für $\mathbf{S}^{-1}$ bedeutet dies konkret

$$S^{-1}_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{(2n+1)\mu_{an}}}\delta_{nn'}. \tag{6.88}$$

Von rechts beginnend findet sich das Produkt

$$\mathbf{S}^{-1}\vec{e}_{N+1} = \frac{1}{\sqrt{\mu_a}}\vec{e}_N. \tag{6.89}$$

Das Ergebnis der nächsten Multiplikation ergibt einen Spaltenvektor bestehend aus den ersten Komponenten der Eigenvektoren

$$\mathbf{T}^{-1}\vec{e}_N = \mathbf{T}^T\vec{e}_N = \begin{pmatrix} \langle v_0|0\rangle \\ \langle v_1|0\rangle \\ \vdots \\ \langle v_N|0\rangle \end{pmatrix}. \tag{6.90}$$

Der Lösungsvektor des abgebildeten Systems folgt aus

$$\vec{\varphi}(k) = \frac{1}{\sqrt{\mu_a}} \begin{pmatrix} \frac{1}{1+j\lambda_0 k} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+j\lambda_1 k} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{1+j\lambda_N k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle v_0|0\rangle \\ \langle v_1|0\rangle \\ \vdots \\ \langle v_N|0\rangle \end{pmatrix} \tag{6.91}$$

und beinhaltet die Komponenten

$$\varphi_n(k) = \frac{1}{\sqrt{\mu_a}} \frac{\langle v_n|0\rangle}{1 + j\lambda_n k}. \tag{6.92}$$

Die Lösung des ursprünglichen Systems entsteht aus $\vec{\phi}(k) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{T}\vec{\varphi}(k)$ und resultiert in den Legendre-Momenten

$$\phi_n(k) = \frac{1}{\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{N} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{1 + j\lambda_i k}, \tag{6.93}$$

welche nach geradzahliger und ungeradzahliger Ordnung zu trennen sind. Ferner wird die Eigenschaft der alternierenden Komponenten für die Indizes $i = (N+1)/2, ..., N$ ausgenutzt. Für jedes gerade n erhält man daraufhin

$$\phi_n(k) = \frac{2}{\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{1 + (\lambda_i k)^2}, \tag{6.94}$$

für n ungerade hingegen

$$\phi_n(k) = \frac{-jk2}{\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \lambda_i \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{1 + (\lambda_i k)^2}. \tag{6.95}$$

Über die inverse Fouriertransformation (6.26) ergeben sich die ortsabhängigen Legendre-Momente für n gerade zu

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i} e^{-\frac{|x|}{\lambda_i}} \tag{6.96}$$

und für ein ungerades n zu

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i} \mathrm{sgn}(x) e^{-\frac{|x|}{\lambda_i}}. \tag{6.97}$$

Durch das Einsetzen eines Legendre-Moments $\phi_n(x)$ in die n-te P_N Gleichung (5.13) kommt die charakteristische Gleichung für die Komponenten der Eigenvektoren

$$\beta_n\langle n-1|v\rangle + \beta_{n+1}\langle n+1|v\rangle = \lambda\langle n|v\rangle \tag{6.98}$$

mit β_n aus (6.85) und den Randwerten $\beta_{-1} = \beta_{N+1} = 0$ zum Vorschein. Durch diese Beziehung lässt sich mit der Kenntnis einer einzigen Komponente auf alle noch fehlenden rückschließen. Innerhalb der Fachliteratur zur linearen Algebra werden sehr ähnliche Rekursionsbeziehungen in Bezug auf Stabilität diskutiert. Die hier vorliegende Beziehung erweist sich in aufsteigender Realisierung bereits nach wenigen Iterationen als

äußerst instabil. Durch deren Verwendung in absteigender Form lässt sich dieser Effekt verhindern. Die hergeleiteten Legendre-Momente könnten theoretisch gesehen bereits an dieser Stelle zur Strahldichteberechnung herangezogen werden. Im Gegensatz zu den Eigenwerten sind die erforderlichen Eigenvektoren noch nicht direkt zugänglich und müssten numerisch z. B. mit MATLAB bestimmt werden. Es folgt deshalb die bereits erwähnte Ermittlung der Eigenvektoren unter Verwendung zurückliegender Ergebnisse.
In Kapitel 6.2 wurde die Fluenz des anisotrop streuenden Mediums unabhängig von Eigenvektoren hergeleitet. Da die Fluenz nicht von der Art des gewählten Lösungsweges abhängen darf, geht aus einem Vergleich zwischen den Darstellungen (6.41) und (6.96) die erste Komponente

$$\langle 0|v_i\rangle = \sqrt{\frac{\mu_a A_i}{2}}\lambda_i \tag{6.99}$$

hervor. Zu beachten ist, dass innerhalb dieses Vergleiches für beide Darstellungen der Summenindex die Werte $i = 0, 1, ..., (N-1)/2$ durchläuft. Zur Realisierung einer Abwärtsrekursion werden als Startwerte die Komponenten $\langle N|v_i\rangle$ benötigt. Das Legendre-Moment $\phi_N(x)$ aus (6.97) beinhaltet die Produkte aus den ersten und letzten Vektorkomponenten. Darüber hinaus lässt sich auch dieses Moment unabhängig von Eigenvektoren über die Cramer'sche Regel

$$\phi_N(k) = \frac{\det(\mathbf{Q}_N)}{\det(\mathbf{Q})} \tag{6.100}$$

aus dem System (6.28) extrahieren. Ein weiterer Vergleich liefert dann eine Bedingung zur Auffindung der gesuchten Komponenten. Die Determinante des Zählers ist im Gegensatz zur Fluenz sehr einfach auszuwerten und geschlossen in der Form

$$\det(\mathbf{Q}_0) = -(jk)^N N! \tag{6.101}$$

darstellbar. Das Nennerpolynom bleibt in Verbindung mit der Cramer'schen Regel stets erhalten, wodurch das gesuchte Moment als

$$\phi_N(k) = -jk\frac{(jk)^{N-1}N!}{b_{N+1}k^{N+1} + b_{N-1}k^{N-1} + \cdots + b_0} = -jk\sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}}\frac{B_i}{k^2+\nu_i^2} \tag{6.102}$$

geschrieben werden kann. Die Abspaltung eines Faktors jk ist wegen der ungeraden Ordnung des Zählerpolynoms erforderlich und wird anschließend über den Differentationssatz der Fouriertransformation [20] kompensiert. Eine Partialbruchzerlegung bringt die Koeffizienten

$$B_i = \frac{1}{b_{N+1}}\frac{\nu_i^{N-1}N!}{\prod_{n\neq i}(\nu_n^2 - \nu_i^2)}, \tag{6.103}$$

wodurch sich das Legendre-Moment der höchsten Ordnung zu

$$\phi_N(x) = \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}}\frac{B_i}{2}\mathrm{sgn}(x)e^{-\nu_i|x|} \tag{6.104}$$

ergibt. Der zweite Vergleich zwischen beiden möglichen Darstellungen resultiert in den Komponenten

$$\langle N|v_i\rangle = (2\kappa_i)^{\frac{N-1}{2}} \left(\frac{N-1}{2}\right)! \sqrt{\frac{(2N+1)\mu_{aN}}{2P(\kappa_i)\prod_{n\neq i}(\kappa_n-\kappa_i)}}, \tag{6.105}$$

wobei $P(\kappa)$ das rekursiv definierte Polynom aus (6.36) ist und κ_i den Nullstellen der Gleichung (6.37) entsprechen. Zu beachten ist, dass die Komponenten in der angegebenen Darstellung vollständig auf Ergebnissen des Kapitels 6.2 basieren. Mit deren Kenntnis sind nun über die charakteristische Gleichung (6.98) alle anderen Komponenten in Form einer stabilen Abwärtsrekursion festgelegt. Die auf diese Art und Weise ermittelten Eigenvektoren sind automatisch normiert und bilden das für die Herleitung vorausgesetzte Orthonormalsystem.
Eine alternative Darstellung der kugelsymmetrischen Fluenz aus (6.42) findet sich mit Verwendung von Beziehung (6.12) zu

$$\phi_0(r) = \frac{1}{2\pi\mu_a r}\sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle 0|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i^2} e^{-\frac{r}{\lambda_i}}. \tag{6.106}$$

Die Legendre-Momente höherer Ordnung für das sphärisch symmetrische Medium sind nicht einfach über eine Differentation bestimmbar. Es wird sich jedoch zeigen, dass sämtliche rekursive Beziehungen dieses Unterkapitels in unveränderter Art und Weise übernommen werden können. Das praktische Vorgehen zur Ermittlung der Legendre-Momente unter Verwendung der Eigenwertmethode soll nochmals stichpunktartig für eine vorgegebene Ordnung N aufgezeigt werden. Die Stichpunkte sind in der angegebenen Reihenfolge abzuarbeiten.

- Bestimmung der Nullstellen des rekursiven Polynoms $Q(\kappa)$ aus (6.37).
- Für jede Nullstelle ist der rekursiv definierte Polynomwert $P(\kappa_i)$ auszuwerten.
- Mit κ_i und $P(\kappa_i)$ lassen sich die Vektorkomponenten $\langle N|v_i\rangle$ aus Gleichung (6.105) berechnen.
- Ermittlung der noch fehlenden Vektorkomponenten über die charakteristische Gleichung (6.98).
- Zur Kontrolle der ermittelten Eigenvektoren lassen sich die beiden Bedingungen $|\vec{v}_i| = 1$ und $\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j = \delta_{ij}$ numerisch sehr einfach überprüfen.

Im nächsten Kapitel erfolgt eine konkrete Anwendung der vorgestellten Gleichungen anhand der kugelsymmetrischen Strahldichte in Diffusionsapproximation.

6.4 Strahldichte im kugelsymmetrischen Medium

Zur Bestimmung der Strahldichte für das infinite dreidimensionale Medium ist die RTE

$$\vec{\Omega}\cdot\nabla\psi(\vec{r},\vec{\Omega})+\mu_t\psi(\vec{r},\vec{\Omega})=\mu_s\int\limits_{4\pi}f(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}')\psi(\vec{r},\vec{\Omega}')\mathrm{d}\Omega'+S(\vec{r},\vec{\Omega}) \tag{6.107}$$

zu betrachten. Im Gegensatz zur Berechnung der Fluenz ist hier kein Rückschluss von der planaren Strahldichte auf das entsprechende kugelsymmetrische Pendant möglich. Für den kugelsymmetrischen Raum kann für das im allgemeinen sehr komplizierte Skalarprodukt $\vec{\Omega}\cdot\nabla\psi(\vec{r},\vec{\Omega})$ eine vereinfachte Darstellung gefunden werden. Es wird der Kosinus des Winkels zwischen dem normierten Ortsvektor und dem Einheitsvektor $\vec{\Omega}$ der Betrachtungsrichtung definiert. Mit Verwendung von $\vec{\Omega}=(\Omega_x,\Omega_y,\Omega_z)^T$ ergibt sich

$$\tau_r=\frac{\vec{\Omega}\cdot\vec{r}}{r}=\Omega_x\frac{x}{r}+\Omega_y\frac{y}{r}+\Omega_z\frac{z}{r}. \tag{6.108}$$

Das Skalarprodukt aus Nabla-Operator und dem Orientierungsvektor kann allgemein als

$$\vec{\Omega}\cdot\nabla\psi=\Omega_x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\Omega_y\frac{\partial\psi}{\partial y}+\Omega_z\frac{\partial\psi}{\partial z} \tag{6.109}$$

geschrieben werden. Im obigen Skalarprodukt treten die partiellen Ableitungen der Strahldichte nach den kartesischen Koordinaten auf. Bei Ausnutzung sphärischer Symmetrie wird jedoch für die Strahldichte der funktionale Zusammenhang $\psi=\psi(r,\tau_r)$ verwendet. Mit Hilfe des totalen Differentials erhält man den Zusammenhang

$$\begin{aligned}\vec{\Omega}\cdot\nabla\psi&=\frac{\partial\psi}{\partial r}\left(\Omega_x\frac{\partial r}{\partial x}+\Omega_y\frac{\partial r}{\partial y}+\Omega_z\frac{\partial r}{\partial z}\right)+\frac{\partial\psi}{\partial\tau_r}\left(\Omega_x\frac{\partial\tau_r}{\partial x}+\Omega_y\frac{\partial\tau_r}{\partial y}+\Omega_z\frac{\partial\tau_r}{\partial z}\right)\\&=\frac{\partial\psi}{\partial r}\vec{\Omega}\cdot\nabla r+\frac{\partial\psi}{\partial\tau_r}\vec{\Omega}\cdot\nabla\tau_r.\end{aligned} \tag{6.110}$$

Die Anwendung des Nabla-Operators auf den Betrag des Ortsvektors ist $\nabla r=\frac{\vec{r}}{r}$. Etwas aufwendiger gestaltet sich die Anwendung dieses Operators auf den eingeführten Kosinus des Winkels zwischen dem Ortsvektor und der Betrachtungsrichtung. Mit den Rechenregeln aus der Vektoranalysis [49] ergibt sich

$$\begin{aligned}\nabla\tau_r=\nabla\left(\frac{\vec{\Omega}\cdot\vec{r}}{r}\right)&=\left(\vec{\Omega}\cdot\nabla\right)\frac{\vec{r}}{r}=\left(\Omega_x\frac{\partial}{\partial x}+\Omega_y\frac{\partial}{\partial y}+\Omega_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\frac{\vec{r}}{r}\\&=\Omega_x\frac{\vec{e}_x r^2-x\vec{r}}{r^3}+\Omega_y\frac{\vec{e}_y r^2-y\vec{r}}{r^3}+\Omega_z\frac{\vec{e}_z r^2-z\vec{r}}{r^3}=\frac{\vec{\Omega}-\tau_r\vec{r}}{r}\end{aligned} \tag{6.111}$$

$$\Rightarrow\quad\vec{\Omega}\cdot\nabla\psi=\tau_r\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{1-\tau_r^2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\tau_r}. \tag{6.112}$$

Die RTE nimmt unter Ausnutzung sphärischer Symmetrie die Form

$$\tau_r \frac{\partial}{\partial r}\psi(r,\tau_r) + \frac{1-\tau_r^2}{r}\frac{\partial}{\partial \tau_r}\psi(r,\tau_r) + \mu_t\psi(r,\tau_r) = \mu_s \int\limits_{4\pi} f(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}')\psi(r,\tau_r')\mathrm{d}\Omega' + S(r,\tau_r) \tag{6.113}$$

an. Für die Herleitung der P_N Gleichungen wird wie im planarsymmetrischen Medium vorgegangen. Die Strahldichte wird erneut nach den Legendre Polynomen entwickelt und in Form der Reihe [51]

$$\psi(r,\tau_r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi}\phi_n(r)P_n(\tau_r) \tag{6.114}$$

angesetzt. Das zugehörige P_N Gleichungssystem ergibt sich durch Multiplikation von (6.113) mit $P_m(\tau_r)$, einer Integration über τ_r und der Berücksichtigung des Skalarprodukts der Legendre Polynome zu

$$\frac{n+1}{2n+1}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{n+2}{r}\right)\phi_{n+1}(r) + \frac{n}{2n+1}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{n-1}{r}\right)\phi_{n-1}(r) + \mu_{an}\phi_n(r) = S(r)\delta_{n,0}. \tag{6.115}$$

Der isotrope Anteil $\phi_0(r)$ dieses Systems ist in Kapitel 6.2 explizit berechnet worden. Ein direkter Übergang von Planarsymmetrie auf den kugelsymmetrischen Raum ist lediglich für dieses Moment möglich. Für höhere Ordnungen sind die Legendre-Momente aus den sphärisch symmetrischen P_N Gleichungen zu bestimmen. Dies ist ein entscheidender Unterschied zu der einfacheren SP_N Theorie. Das oben angegebene P_N Gleichungssystem wurde anfangs bis zur Ordnung $N = 5$ explizit über die Methode der variierten Konstante gelöst. Die dabei ermittelten Momente lassen auf den allgemeinen Ansatz

$$\phi_n(r) = \frac{1}{2\pi\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i^3} k_n\left[\frac{r}{\lambda_i}\right] \tag{6.116}$$

schließen. Wird dieser unter Berücksichtigung der Ableitung

$$k_n'(x) = -k_{n+1}(x) + \frac{n}{x}k_n(x) \tag{6.117}$$

sowie der Rekursionsformel

$$k_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x}k_n(x) + k_{n-1}(x) \tag{6.118}$$

für die modifizierten sphärischen Besselfunktionen der zweiten Art in das System der P_N Gleichungen eingesetzt, findet sich exakt die charakteristische Gleichung (6.98) der eindimensionalen Momente wieder. Alternativ dazu kann auch die vollständige Induktion zum Auffinden des angegebenen Ergebnisses angesetzt werden. Den Induktionsanfang bilden die ersten beiden Legendre-Momente. Danach lässt sich die n-te

Differentialgleichung nach dem Moment $\phi_{n+1}(r)$ über die Variation der Konstanten auflösen. Als Endresultat ergeben sich die als richtig angenommenen Beziehungen. Als Beispiel soll nun die Strahldichte in Diffusionsapproximation nach dem angegebenen Schema 6.3 extrahiert werden.
Die beiden rekursiven Polynome aus Kapitel 6.2 lauten

$$\begin{aligned} P(\kappa) &= 3\mu_{a1}, \\ Q(\kappa) &= 3\mu_a\mu_{a1} - \kappa. \end{aligned} \tag{6.119}$$

Aus $Q(\kappa) = 0$ bestimmt man die einzige Lösung $\kappa_0 = 3\mu_a\mu_{a1}$. Als nächstes wird der Polynomwert $P(\kappa_0) = 3\mu_{a1}$ bestimmt. Mit diesen Werten ergibt sich aus (6.105) die Vektorkomponente $\langle 1|v_0\rangle = 1/\sqrt{2}$. Die charakteristische Gleichung (6.98) bringt $\langle 0|v_0\rangle = 1/\sqrt{2}$, wodurch sich der normierte Eigenvektor

$$\vec{v}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6.120}$$

findet. Der Eigenwert zu diesem Eigenvektor lautet $\lambda_0 = 1/\sqrt{\kappa_0} = 1/\mu_{\mathit{eff}}$. Die ermittelten Parameter werden in Gleichung (6.116) berücksichtigt und liefern für die beiden Momente das Resultat

$$\begin{aligned} \phi_0(r) &= \frac{e^{-\mu_{\mathit{eff}} r}}{4\pi D r}, \\ \phi_1(r) &= \frac{e^{-\mu_{\mathit{eff}} r}}{4\pi r^2}(1 + \mu_{\mathit{eff}} r). \end{aligned} \tag{6.121}$$

Zum Erhalt dieser Darstellungen sind die auftretenden modifizierten sphärischen Besselfunktionen durch $k_0(x) = x^{-1}e^{-x}$ und $k_1(x) = (x^{-1} + x^{-2})e^{-x}$ zu ersetzen. Die Strahldichte in Diffusionsapproximation findet sich aus Beziehung (6.114) zu

$$\psi(r, \tau_r) = \frac{1}{4\pi}\phi_0(r) + \frac{3}{4\pi}\phi_1(r)\tau_r. \tag{6.122}$$

In der soeben demonstrierten Art und Weise lassen sich effizient Legendre-Momente von sehr hoher Ordnung ($N > 100$) ermitteln.
Bisher noch unbekannt ist ein analytischer Ausdruck für die Strahldichte innerhalb der SP_N Theorie. Zur dessen Ermittlung bilden die Legendre-Momente der eindimensionalen P_N Gleichungen die Basis. Alle geradzahligen Momente werden in dieser Theorie über Beziehung (6.12) direkt in den dreidimensionalen Raum überführt und lauten

$$\phi_n(r) = \frac{1}{2\pi\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i^3} k_0\left[\frac{r}{\lambda_i}\right]. \tag{6.123}$$

Für ein ungerades n ist die Ableitung einer Exponentialfunktion in den kugelsymmetrischen Raum zu überführen. Die folgende Zwischenrechnung soll diese Überführung aufzeigen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{-\frac{|x|}{\lambda_i}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[\frac{-1}{2\pi r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} e^{-\frac{r}{\lambda_i}}\right] = \frac{1}{2\pi\lambda_i^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} k_0\left[\frac{r}{\lambda_i}\right] = -\frac{1}{2\pi\lambda_i^3} k_1\left[\frac{r}{\lambda_i}\right]. \tag{6.124}$$

Die ungeradzahligen Legendre-Momente erhalten demnach die Form

$$\phi_n(r) = \frac{1}{2\pi\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle vi|0\rangle}{\lambda_i^3} k_1\left[\frac{r}{\lambda_i}\right]. \tag{6.125}$$

In komprimierter Darstellung lässt sich

$$\phi_n(r) = \frac{1}{2\pi\sqrt{(2n+1)\mu_a\mu_{an}}} \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{\langle n|v_i\rangle\langle v_i|0\rangle}{\lambda_i^3} \begin{cases} k_0(r/\lambda_i), & n \text{ gerade} \\ k_1(r/\lambda_i), & n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{6.126}$$

schreiben. Diese Momente werden in der Reihendarstellung (6.114) berücksichtigt und bilden mit dieser die Strahldichte innerhalb der SP_N Theorie.
Die hergeleiteten analytischen Ausdrücke werden über die Monte Carlo Methode [52] auf Korrektheit überprüft. In Abbildung 6.11 die Strahldichte für verschiedene Theorien verursacht von einer isotrop abstrahlenden Punktquelle im infiniten Medium aufgezeigt.

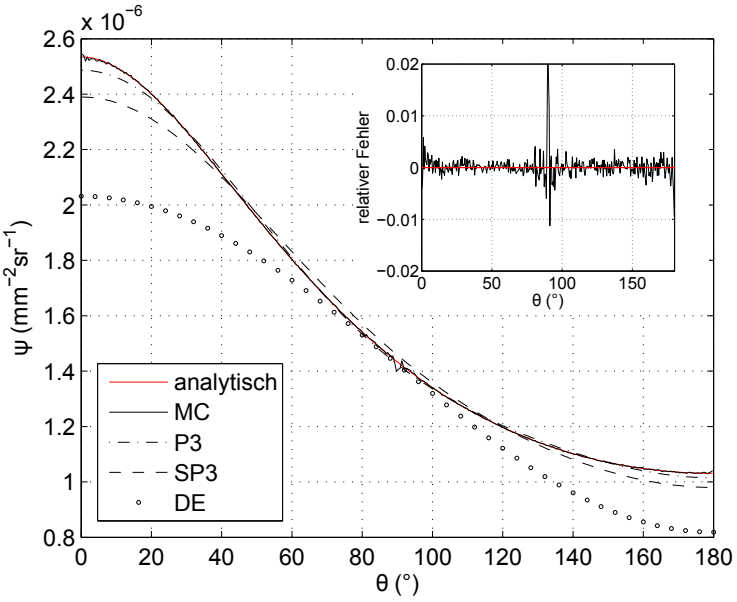

Abbildung 6.11: Strahldichte im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.1\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 2.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $g = 0$. Der Abstand zur isotropen Quelle beträgt $r = 10\,\mathrm{mm}$.

Das Schaubild und der Inset zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der analytischen Lösung und der Monte Carlo Simulation auf. Der mittelwertfreie relative Unterschied zwischen beiden Methoden ist auch ein Hinweis auf die Qualität der generierten Zufallszahlen innerhalb der Monte Carlo Simulation. Die Höhe der Rauschamplitude verringert sich mit zunehmender Simulationsdauer. Für die vorliegende Statistik beträgt diese mehrere Tage. Mit der analytischen Lösung lässt sich die Strahldichte

für 180 verschiedene Winkel in ≈ 1 s berechnen. Innerhalb dieses Vergleichs schneiden die Lösungen der P_3 und SP_3 Gleichungen im Gegensatz zur Diffusionstheorie und unter Berücksichtigung der Komplexität der RTE nicht schlecht ab. Es existiert jedoch eine Abhängigkeit von den optischen und geometrischen Parametern. In Abbildung 6.12 ist die winkelaufgelöste Strahldichte bei veränderten Parametern dargestellt.

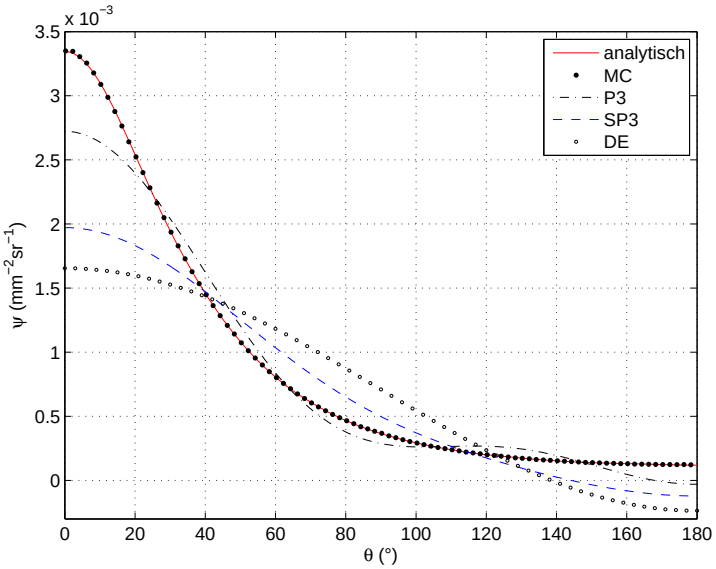

Abbildung 6.12: Strahldichte im infiniten Medium mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 0.5\,\mathrm{mm}^{-1}$, $\mu_s' = 1.0\,\mathrm{mm}^{-1}$ und $g = 0.9$. Der Abstand zur isotropen Quelle beträgt $r = 2\,\mathrm{mm}$.

Anhand dieses Schaubildes sind die Konsequenzen der mathematisch einfacheren SP_N Theorie einzusehen. Während die Strahldichte aus den P_3 Gleichungen tendenziell zur exakten Lösung konvergiert, erweist sich die Strahldichte der SP_3 Gleichungen als verbesserte Diffusionstheorie. Eine Erhöhung der Approximationsordnung bringt im Falle der SP_N Theorie keine signifikante Verbesserung mit sich.

6.4.1 Ähnlichkeitsrelation innerhalb der P_N Theorie

In der Transporttheorie besteht ein Skalierungsprinzip zwischen der Absorption, der Streuung und der resultierenden Strahldichte [53]. Dieses Prinzip soll für die Fluenz und Strahldichte innerhalb der P_N Theorie hergeleitet werden. Bei Skalierung der Absorption und der Streuung um einen gemeinsamen Faktor $\sigma \in \mathbb{R}$ ergeben sich skalierte Absorptionsmomente n-ter Ordnung mit $\tilde{\mu}_{an} = \sigma \mu_{an}$. Die Fluenz der eindimensionalen P_N Gleichungen im transformierten Bereich wurde in Kapitel 6.2 zu

$$\phi_0(k) = \frac{\det(\mathbf{Q}_0)}{\det(\mathbf{Q})} = \frac{\mathcal{P}(k)}{\mathcal{Q}(k)} \tag{6.127}$$

bestimmt. Innerhalb der Tridiagonalmatrix (6.29) ergeben sich infolge der Skalierung die Diagonalelemente $Q_{n,n'} = \sigma(2n+1)\mu_{an}\delta_{n,n'}$. Zur erneuten Auswertung der N-reihigen Determinanten wird von der Regel

$$\det(\sigma\mathbf{A}) = \sigma^N \det(\mathbf{A}) \tag{6.128}$$

Gebrauch gemacht. Es findet sich die Fouriertransformierte der eindimensionalen skalierten Fluenz zu

$$\tilde{\phi}_o(k) = \frac{\sigma^N \mathcal{P}\left(\frac{k}{\sigma}\right)}{\sigma^{N+1}\mathcal{Q}\left(\frac{k}{\sigma}\right)} = \frac{1}{\sigma}\phi_o\left(\frac{k}{\sigma}\right). \tag{6.129}$$

Aus der eindimensionalen Fluenz im transformierten Bereich ergibt sich über

$$\phi_0(r) = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^\infty k\phi_0(k)\sin(kr)\mathrm{d}k \tag{6.130}$$

das kugelsymmetrische Pendant im Ortsbereich. Durch Anwendung dieser Beziehung auf die skalierte Fluenz entsteht der Zusammenhang

$$\tilde{\phi}_0(r) = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^\infty k\frac{1}{\sigma}\phi_0\left(\frac{k}{\sigma}\right)\sin(kr)\mathrm{d}k, \tag{6.131}$$

welcher sich mit der Substitution $k = \sigma\xi$ auf die Form

$$\tilde{\phi}_0(r) = \frac{\sigma^2}{2\pi^2\sigma r}\int_0^\infty \xi\phi_0(\xi)\sin(\sigma r\xi)\mathrm{d}\xi \tag{6.132}$$

überführen lässt. Als Ergebnis findet sich der Ausdruck für die skalierte Fluenz mit

$$\tilde{\phi}_0(r) = \sigma^2\phi_0(\sigma r). \tag{6.133}$$

Die gleichzeitige Skalierung des Absorptions- und Streukoeffizienten um einen gemeinsamen Faktor $\sigma \in \mathbb{R}$ wirkt sich demnach linear auf die Ortsabhängigkeit und quadratisch auf die Stärke der Fluenz aus. Für die dreidimensionale Strahldichte folgt unmittelbar der Zusammenhang

$$\tilde{\psi}_0(r,\tau_r) = \sigma^2\psi_0(\sigma r,\tau_r). \tag{6.134}$$

Im Frequenzbereich entsteht die Strahldichte

$$\tilde{\psi}(r,\tau_r,\omega) = \sigma^2\psi(\sigma r,\tau_r,\omega/\sigma) \tag{6.135}$$

mit skalierter Kreisfrequenz. Durch Anwendung des Ähnlichkeitssatzes der Fouriertransformation [20] findet sich direkt die Beziehung

$$\tilde{\psi}(r,\tau_r,t) = \sigma^3\psi(\sigma r,\tau_r,\sigma t) \tag{6.136}$$

für die Strahldichte der zeitabhängigen RTE.

Die analytischen Lösungen für die Strahldichte der RTE wurden in [54] veröffentlicht.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit beinhaltet die Herleitung analytischer Lösungen der Strahlungstransfergleichung (RTE) und deren Approximationen. Nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen der Diffusions- und Transporttheorie erfolgte der Einstieg in die dimensionsabhängige Diffusionsgleichung (DE) des unendlich ausgedehnten homogenen Mediums. Die Greensche Funktion dieser Gleichung wurde einerseits für weiterführende Betrachtungen innerhalb der Diffusionstheorie und andererseits für die Analyse von Approximationen höherer Ordnung benötigt. Die Bestimmung eines entsprechenden Ausdrucks erfolgte über die Fouriertransformation. Im Hinblick auf Anwendungen theoretischer Modelle innerhalb der Biomedizinischen Optik war es erforderlich geworden, das unendlich ausgedehnte homogene Medium durch eine axial geschichtete lateral unbegrenzte Struktur zu ersetzen. Nach der expliziten Lösung der dreidimensionalen DE für ein vierschichtiges Medium wurde eine rekursiv definierte Berechnungsvorschrift in Abhängigkeit der Schichtenanzahl formuliert. Die Validierung der ermittelten Greenschen Funktion erfolgte zum einen für bis zu drei Schichten durch eine in der Literatur vorliegende analytische Lösung und zum anderen durch die Monte Carlo Methode. Ferner wurde die zu Beginn angesetzte isotrop abstrahlende Punktquelle durch zwei verschiedene lateral ausgedehnte Quellen modifiziert und die sich ergebende Reflektanz eines dreischichtigen Mediums mit der Monte Carlo Methode verglichen. Als nächstes erfolgte die Lösung der DE für den axial geschichteten Quader und Zylinder. Innerhalb der Literatur waren analytische Lösungen zu diesen Anordnungen bis maximal drei Schichten verfügbar. Für das Zylindermodell wurden verschiedene Vergleiche zwischen der in dieser Arbeit hergeleiteten Lösung und der in der Literatur verfügbaren Methode mit dem Ergebnis einer exzellenten Übereinstimmung angestellt. Im Rahmen einer Veröffentlichung wurde dann die Lösung für ein 7-schichtiges Zylindermodell mit der Monte Carlo Methode validiert. Zur Modellbildung bestimmter Körperteile war ein Wechsel auf radial geschichtete Geometrien erforderlich. Um beispielsweise die Krümmung von Extremitäten genauer berücksichtigen zu können, sind Lösungen der DE für radial geschichtete Zylindergeometrien interessant. In der Literatur konnten keine analytischen Lösungen für derartig geschichtete Modelle gefunden werden. Die seither zu diesen Zwecken verwendeten Modelle waren entweder homogene Geometrien oder ein axial geschichtetes semi-infinites Medium bestehend aus zwei Schichten. In dieser Arbeit wurde die DE für die konzentrisch angeordneten Kugeln und den radial geschichteten Zylinder in Abhängigkeit der Schichtenanzahl gelöst.
Die Vergleiche zwischen der Diffusions- und Transporttheorie zeigten, dass die DE innerhalb ihres Gültigkeitsbereiches eine gute Approximation der komplizierteren RTE darstellt. Um weitere Verbesserungen zu erzielen, wurde in den nachfolgenden Betrach-

tungen die DE durch die *Simplified Spherical Harmonics* Gleichungen (SP_N Gleichungen) ersetzt. Zu dieser Approximation höherer Ordnung, welche einem System aus gekoppelten Diffusionsgleichungen entspricht, lagen in der Literatur keinerlei analytische Ausdrücke vor. Die Lösung erfolgte seither numerisch mit der Finiten-Differenzen-Methode und der Methode der finiten Elemente. Als erstes wurde die Greensche Funktion der SP_N Gleichungen für das unendlich ausgedehnte Medium bestimmt und über die Finite-Differenzen-Methode validiert. Darauf aufbauend erfolgte in Kombination mit der homogenen Lösung und unter Berücksichtigung der zu dieser Theorie gehörenden Randbedingungen die Ermittlung analytischer Lösungen für die homogene Kugel und das semi-infinite Medium. Für letztere Geometrie erfolgte wieder ein Vergleich für die Fluenz und die Reflektanz mit der Finiten-Differenzen-Methode. Desweiteren fand eine Gegenüberstellung mit der Monte Carlo Methode und der Diffusionstheorie statt, um die resultierenden Verbesserungen infolge der eingeführten SP_N Theorie aufzuzeigen.
Das letzte Kapitel befasst sich mit analytischen Lösungen der RTE für die Fluenz und Strahldichte in einem homogenen Medium mit unendlicher Ausdehnung. Basierend auf den eindimensionalen P_N Gleichungen erfolgte unter Verwendung der Fouriertransformation die Herleitung eines rekursiv definierten Ausdrucks für die Fluenz innerhalb eines streuenden Mediums für verschiedene Quellendistributionen. Für das isotrop streuende Medium wurde darüber hinaus ein alternativer Ausdruck durch Lösen einer Eigenwertgleichung und Auswertung eines komplexen Kurvenintegrals bestimmt. Zur Ermittlung von Ergebnissen der zeitabhängigen RTE folgte ein Übergang auf die komplexwertige Absorption und eine sich anschließende inverse Fouriertransformation. Die Anwendung der Eigenwertmethode und die Berücksichtigung von Ergebnissen aus der Fluenzberechnung erbrachten einen rekursiv definierten Ausdruck für die Strahldichte im kugelsymmetrischen Medium. Durch Gegenüberstellungen der hergeleiteten Lösungen mit der Monte Carlo Methode wurden diese erfolgreich validiert.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Vergleiche zwischen den analytischen Ausdrücken und den entsprechenden numerischen Methoden bestätigen ganz klar die Bedeutung und Wichtigkeit analytischer Lösungen hinsichtlich Genauigkeit und Rechenzeit. Innerhalb der Diffusionstheorie besteht auf jeden Fall die Möglichkeit der Auffindung weiterer analytischer Lösungen für komplexere Geometrien. Für Anwendungen in der Endoskopie könnten Hohlzylinderstrukturen von Interesse sein. Darüber hinaus kann die DE für eine Fülle von anderweitigen Quellen gelöst werden.
Für die SP_N Gleichungen stellt eine wichtige Erweiterung deren Lösung für ein geschichtetes Modell dar. Dieses Vorhaben lässt sich basierend auf den Ergebnissen dieser Arbeit und mit Einarbeitung der entsprechenden Randbedingungen zwischen den Schichten direkt umsetzen.
Die wichtigste und zugleich schwierigste Aufgabenstellung ist die Herleitung weiterer analytischer Lösungen der RTE. Ein analytischer Ausdruck zur dreidimensionalen RTE für ein semi-infinites Medium wäre mit dem Gedanke an nichtinvasive Anwendungen in der Medizin bereits ein beträchtlicher Fortschritt.

Literaturverzeichnis

[1] K.M. Case, P.F. Zweifel, and GC Pomraning. Linear transport theory. *Physics Today*, 21:72, 1968.

[2] JJ Duderstadt and WR Martin. Transport theory. A Wiley-Interscience Publication, 1979.

[3] T.J. Farrell, M.S. Patterson, and B. Wilson. A diffusion theory model of spatially resolved, steady-state diffuse reflectance for the noninvasive determination of tissue optical properties in vivo. *Medical Physics*, 19(4):879–888, 1992.

[4] L.C.L. Chin, A.E. Worthington, W.M. Whelan, and I.A. Vitkin. Determination of the optical properties of turbid media using relative interstitial radiance measurements: Monte Carlo study, experimental validation, and sensitivity analysis. *Journal of Biomedical Optics*, 12:064027, 2007.

[5] L.C.L. Chin, B. Lloyd, W.M. Whelan, and I.A. Vitkin. Interstitial point radiance spectroscopy of turbid media. *Journal of Applied Physics*, 105(10):102025, 2009.

[6] A. Ishimaru. *Wave Propagation and Scattering in Random Media: Multiple scattering, turbulence, rough surfaces, and remote sensing.* Academic Pr, 1978.

[7] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer.* Dover Pubns, 1960.

[8] JCJ Paasschens. Solution of the time-dependent Boltzmann equation. *Physical Review E*, 56(1):1135–1141, 1997.

[9] A.D. Klose and E.W. Larsen. Light transport in biological tissue based on the simplified spherical harmonics equations. *Journal of Computational Physics*, 220(1):441–470, 2006.

[10] A. Kienle. *Lichtausbreitung in biologischem Gewebe.* Dissertation, Universität Ulm, 1995.

[11] M.S. Patterson, B. Chance, and B.C. Wilson. Time resolved reflectance and transmittance for the noninvasive measurement of tissue optical properties. *Applied Optics*, 28(12):2331–2336, 1989.

[12] A. Kienle. Light diffusion through a turbid parallelepiped. *Journal of the Optical Society of America A*, 22(9):1883–1888, 2005.

[13] M. Chu, K. Vishwanath, A.D. Klose, and H. Dehghani. Light transport in biological tissue using three-dimensional frequency-domain simplified spherical harmonics equations. *Physics in Medicine and Biology*, 54:2493, 2009.

[14] S.R. Arridge. Optical tomography in medical imaging. *Inverse Problems*, 15:R41, 1999.

[15] E.L. Hull and T.H. Foster. Steady-state reflectance spectroscopy in the P_3 approximation. *Journal of the Optical Society of America A*, 18(3):584–599, 2001.

[16] A.J. Welch. Optical-thermal response of laser-irradiated tissue. 1995.

[17] F. Martelli, S. Del Bianco, A. Ismaelli, and G. Zaccanti. *Light Propagation Through Biological Tissue and Other Diffusive Media: Theory, Solutions, and Software*. SPIE Press, 2010.

[18] R.C. Haskell, L.O. Svaasand, T.T. Tsay, T.C. Feng, M.S. McAdams, and B.J. Tromberg. Boundary conditions for the diffusion equation in radiative transfer. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(10):2727–2741, 1994.

[19] A. Kienle, M.S. Patterson, N. Dögnitz, R. Bays, G. Wagniνres, and H. van den Bergh. Noninvasive determination of the optical properties of two-layered turbid media. *Applied Optics*, 37(4):779–791, 1998.

[20] T. Frey and M. Bossert. *Signal- und Systemtheorie*. Vieweg + Teubner Verlag, 2008.

[21] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger. Conduction of heat in solids. 1959.

[22] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. Dover publications, 1964.

[23] E. Zauderer. *Partial differential equations of applied mathematics*. Wiley New York, 1989.

[24] A.H. Barnett. A fast numerical method for time-resolved photon diffusion in general stratified turbid media. *Journal of Computational Physics*, 201(2):771–797, 2004.

[25] Y. Lu, B. Zhu, H. Shen, J.C. Rasmussen, G. Wang, and E.M. Sevick-Muraca. A parallel adaptive finite element simplified spherical harmonics approximation solver for frequency domain fluorescence molecular imaging. *Physics in Medicine and Biology*, 55:4625, 2010.

[26] J. Sikora, A. Zacharopoulos, A. Douiri, M. Schweiger, L. Horesh, S.R. Arridge, and J. Ripoll. Diffuse photon propagation in multilayered geometries. *Physics in Medicine and Biology*, 51:497, 2006.

[27] F. Martelli, A. Sassaroli, S. Del Bianco, Y. Yamada, and G. Zaccanti. Solution of the time-dependent diffusion equation for layered diffusive media by the eigenfunction method. *Physical Review E*, 67(5):56623, 2003.

[28] F. Martelli, A. Sassaroli, S.D. Bianco, and G. Zaccanti. Solution of the time-dependent diffusion equation for a three-layer medium: application to study photon migration through a simplified adult head model. *Physics in Medicine and Biology*, 52:2827, 2007.

[29] I.N. Sneddon. *Fourier transforms*. Dover Pubns, 1995.

[30] J.M. Tualle, H.L. Nghiem, D. Ettori, R. Sablong, E. Tinet, and S. Avrillier. Asymptotic behavior and inverse problem in layered scattering media. *Journal of the Optical Society of America A*, 21(1):24–34, 2004.

[31] A. Liemert and A. Kienle. Bioluminescent light diffusion in a four-layered turbid medium. *Medical Laser Application*, 2010.

[32] A. Liemert and A. Kienle. Light diffusion in N-layered turbid media: steady-state domain. *Journal of Biomedical Optics*, 15:025003, 2010.

[33] A. Liemert and A. Kienle. Light diffusion in N-layered turbid media: frequency and time domains. *Journal of Biomedical Optics*, 15:025002, 2010.

[34] A. Liemert and A. Kienle. Light diffusion in N-layered turbid media. *Proceedings of SPIE*, 7369:73690F, 2009.

[35] [`http://www.uni-ulm.de/ilm/index.php?id=10020200`].

[36] AP Prudnikov, Y.A. Brychkov, and OI Marichev. *Integrals and Series. Vol. 3. Direct Laplace Transforms*. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1992.

[37] B.W. Pogue and M.S. Patterson. Frequency-domain optical absorption spectroscopy of finite tissue volumes using diffusion theory. *Physics in Medicine and Biology*, 39:1157, 1994.

[38] A. Sassaroli, F. Martelli, D. Imai, and Y. Yamada. Study on the propagation of ultra-short pulse light in cylindrical optical phantoms. *Physics in Medicine and Biology*, 44:2747, 1999.

[39] SR Arridge, M. Cope, and DT Delpy. The theoretical basis for the determination of optical pathlengths in tissue: temporal and frequency analysis. *Physics in Medicine and Biology*, 37:1531, 1992.

[40] A. Liemert and A. Kienle. Light diffusion in a turbid cylinder. I. Homogeneous case. *Optics Express*, 18(9):9456–9473, 2010.

[41] A. Liemert and A. Kienle. Light diffusion in a turbid cylinder. II. Layered case. *Optics Express*, 18(9):9266–9279, 2010.

[42] J. Sikora, A. Zacharopoulos, A. Douiri, M. Schweiger, L. Horesh, S.R. Arridge, and J. Ripoll. Diffuse photon propagation in multilayered geometries. *Physics in Medicine and Biology*, 51:497, 2006.

[43] PS Brantley and EW Larsen. The simplified P_3 approximation. *Nuclear Science and Engineering*, 134(1), 2000.

[44] M. Frank, A. Klar, E.W. Larsen, and S. Yasuda. Time-dependent simplified P_N approximation to the equations of radiative transfer. *Journal of Computational Physics*, 226(2):2289–2305, 2007.

[45] J.B. Domínguez and Y. Bérubé-Lauzière. Diffuse light propagation in biological media by a time-domain parabolic simplified spherical harmonics approximation with ray-divergence effects. *Applied Optics*, 49(8):1414–1429, 2010.

[46] V.A. Markel. Modified spherical harmonics method for solving the radiative transport equation. *Waves in Random and Complex Media*, 14(1):13–19, 2004.

[47] G.W. Faris. P_N approximation for frequency-domain measurements in scattering media. *Applied Optics*, 44(11):2058–2071, 2005.

[48] A. Liemert and A. Kienle. Analytical solutions of the simplified spherical harmonics equations. *Optics Letters*, 35(20):3507–3509, 2010.

[49] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, and H. Muehlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch Verlag, 2008.

[50] A. Liemert and A. Kienle. Analytical solution of the radiative transfer equation for infinite-space fluence. *Physical Review A*, 83(1):015804, 2011.

[51] T. Khan and A. Thomas. Comparison of P_N or spherical harmonics approximation for scattering media with spatially varying and spatially constant refractive indices. *Optics Communications*, 255(1-3):130–166, 2005.

[52] F. Martelli, M. Bassani, L. Alianelli, L. Zangheri, and G. Zaccanti. Accuracy of the diffusion equation to describe photon migration through an infinite medium: numerical and experimental investigation. *Physics in Medicine and Biology*, 45:1359, 2000.

[53] A. Kienle and M.S. Patterson. Determination of the optical properties of turbid media from a single Monte Carlo simulation. *Physics in Medicine and Biology*, 41:2221, 1996.

[54] A. Liemert and A. Kienle. Analytical Green's function of the radiative transfer radiance for the infinite medium (accepted). *Physical Review E*.

Auflistung der Publikationen

Publikationen in peer-reviewed Journals

- A. Liemert and A. Kienle, *Light diffusion in N-layered turbid media: steady-state domain,* Journal of Biomedical Optics, **15** 025003 (2010)
- A. Liemert and A. Kienle, *Light diffusion in N-layered turbid media: frequency and time domains,* Journal of Biomedical Optics, **15** 025003 (2010)
- A. Liemert and A. Kienle, *Light diffusion in a turbid cylinder. I Homogeneous case,* Opt. Express, **18** 9456–9473 (2010)
- A. Liemert and A. Kienle, *Light diffusion in a turbid cylinder. II Layered case,* Opt. Express, **18** 9266–9279 (2010)
- A. Liemert and A. Kienle, *Bioluminescent light diffusion in a four-layered turbid medium,* Medical Laser Application, **25** 161–165 (2010)
- A. Liemert and A. Kienle, *Analytical solutions of the simplified spherical harmonics equations,* Opt. Lett., **35** 3507–3509 (2010).
- A. Liemert and A. Kienle, *Analytical solution of the radiative transfer equation for infinite-space fluence,* Phys. Rev. A., **83** 015804 (2011).
- A. Liemert and A. Kienle, *Analytical Green's function of the radiative transfer radiance for the infinite medium,* Phys. Rev. E, (accepted) (2011).

Konferenzbeiträge

- A. Liemert and A. Kienle, *Light diffusion in N-layered turbid media,* Proceedings of SPIE, **7369** 73690F (2009)
- M. Jäger, A. Liemert, F. Foschum and A. Kienle, *Non-invasive determination of the optical properties of brain using a neural network,* Proceedings of SPIE, **7369** 73691K (2009)
- A. Kienle and A. Liemert, *Light Diffusion in Turbid Media of Different Geometries in the Steady-State, Frequency, and Time Domains,* OSA Proceedings Series, BSuD41 (2010)
- D. Strat, A. Liemert, W. Strauss and A. Kienle, *Cancer Diagnostics using Spatially Resolved Fluorescence-Based Optical Imaging,* Proceedings of SPIE, **7555** 73690-19 (2010)
- F. Martelli, G. Zaccanti, A. Liemert, A. Kienle, M. Schweiger, E.L. Arridge, S. Prepara, A. Jelzow, H. Wabnitz, N. Zolek and A. Liebert, *Comparison of independent forward solvers for photon migration through layered media,* Proceedings of SPIE, 7896-92 (2011)

- A. Liemert and A. Kienle, *Analytical solutions of the radiative transfer equation for the fluence and radiance in infinite turbid media,* Proceedings of SPIE, (2011) (submitted)

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Prof. Dr. rer. nat. Alwin Kienle für die ausgezeichnete Betreuung und Unterstützung bedanken. Durch die Bearbeitung dieses interessanten Themas wurde mir ein kleiner Einblick in die mathematischen Methoden der theoretischen Physik gewährt.

Für die Begutachtung der Dissertation danke ich den Herren Prof. Dr. rer. nat. Raimund Hibst und Prof. Dr. rer. nat. Peter Unger.

Ganz herzlich möchte ich mich außerdem bei allen anderen Mitarbeitern des Instituts, insbesondere Herrn Dipl. Phys. Florian Voit, für ihre Unterstützung bedanken.

Bei Dr. Fabrizio Martelli und Dr. Alexander Klose bedanke ich mich für die zur Verfügung gestellten Lösungen zu ihren Methoden, durch welche ich die in dieser Arbeit hergeleiteten Lösungen erfolgreich validieren konnte.

Meiner Mama danke ich für ihr Verständnis und ihre Unterstützung in nicht immer ganz einfachen Jahren.