Simulación del esparcimiento de la luz en medios biológicos mediante el método Monte Carlo

González Trujillo, J., Pérez Cortés, M.¹ y Méndez Gamboa, J.²

Fecha de recepción: 19 de septiembre de 2007

Fecha de aceptación: 12 de junio de 2008

RESUMEN

Se analizó el esparcimiento de la luz visible dentro de medios biológicos a través de la Ecuación de Transferencia Radiativa (ETR). Para resolverla se desarrolló un código de cálculo basado en un método de Monte Carlo. Se obtuvo de esta manera, una solución a la ETR en régimen temporal. Se simuló la llamada geometría de *Slab* que se refiere a una configuración geométrica en la que el espacio es dividido por dos planos verticales e infinitos, formando una región de ancho L entre ellos en la que se encuentra un medio biológico que se caracteriza mediante el número de capas y sus coeficientes asociados. Para este trabajo, se consideró un medio biológico de 7 capas para simular la piel humana.

Palabras clave: esparcimiento de luz, medios biológicos, método Monte Carlo.

Light scattering simulation in biological media by Monte Carlo method

ABSTRACT

Scattering of visible light within biological media were analyzed through the Transfer Radiative Equation (TRE). A calculation code was developed based on the Monte Carlo method for its resolution. A solution of the TRE in temporary regime was obtained. A so-called slab geometry was simulated, that is, a geometric configuration in which the space is divided by two vertical and infinite planes, forming a region of width=L between them and inside a biological medium that is characterized by the number of layers and their associated coefficients. This work considered a 7 layer biological medium to simulate human skin.

Keywords: light scattering, biological medium, Monte Carlo method.

¹ Profesor Investigador. Cuerpo Académico de Ingeniería Física. Facultad de Ingeniería-UADY. Email: mperez.cortes@uady.mx

² Profesor Investigador. Cuerpo Académico de Ingeniería Física. Facultad de Ingeniería-UADY

INTRODUCCIÓN

La formación de imágenes para uso biomédico ha tenido gran auge en los últimos años. Diversas técnicas como la Tomografía por Emisión de Positrones TEP, Imágenes de Resonancia Magnética IRM y la Tomografía Axial Computarizada TAC (Elaloufi et al., 2007; Tuchin, 2000; T. Yates et al, 2005) han permitido obtener imágenes de alta resolución del interior del cuerpo humano; sin embargo, dichas técnicas utilizan energías ionizantes que pueden dañar a los tejidos estudiados (US FDA, 2008).

Para resolver este inconveniente se utiliza la luz visible que, debido a sus bajas energías, no causa ningún daño a la muestra estudiada. No obstante, la luz es absorbida y esparcida por la muestra después de haber recorrido distancias relativamente pequeñas dentro de la misma. Cabe señalar que tanto la absorción como el esparcimiento, se dan de manera anisotrópica dentro de dichos medios (Tuchin, 2000).

Es por ello que en numerosas técnicas de Imagenología Óptica se utiliza el método de dominiotemporal que consiste básicamente en utilizar los fotones que hayan recorrido distancias pequeñas dentro del medio y, por lo tanto, que hayan permanecido un corto tiempo dentro del mismo, para la formación de imágenes. Estas técnicas de imagenología son conocidas como Tomografía de Óptica Difusa (DOT, por sus siglas en inglés) y muchas de ellas han sido aplicadas en estudios clínicos sobre la detección del cáncer de pecho, formación de imágenes del cerebro y monitoreo de infantes (Yates et al., 2005; Taroni et al., 2005; Hebden et al., 2001; Hall et al., 1997; Tanifuji et al., 2005; Hebden et al., 1997; Van Houten et al., 1996). En las técnicas DOT se utiliza un algoritmo para la reconstrucción de las imágenes, siendo éste uno de los factores más importantes para obtener imágenes de alta resolución.

La mayoría de los trabajos y técnicas presentadas utilizan la aproximación del esparcimiento para el estudio de la propagación de la luz dentro de los medios turbios, que consiste en considerar este fenómeno como un fenómeno de difusión, como en el caso para la difusión del calor. Sin embargo, dicha aproximación únicamente es válida para escalas temporales y espaciales pequeñas, es decir, dicha aproximación es válida para longitudes de la estructura por capas (*slab*) mayores a la longitud de

transporte l_{tr} y para tiempos mayores a $\frac{c_v}{l_{tr}}$, donde

 C_v es la velocidad de la luz en el medio estudiado.

Por ello resulta necesario estudiar la propagación de la luz a través de la Ecuación de Transferencia Radiativa (ETR) en régimen temporal. En dicha ecuación se involucran los coeficientes de absorción μ_a y de esparcimiento μ_s y el factor de anisotropía g (Ishimaru, 1997). Estos coeficientes dependen de numerosos factores como las propiedades del medio y la longitud de onda de la luz incidente.

En este trabajo, se analizó el comportamiento de la luz visible dentro de un medio turbio, como los medios biológicos, que se caracteriza por sus respectivos coeficientes μ_a , μ_s y g. Lo anterior se realizó a través de una simulación por computadora, basada en el método de Monte Carlo que permitió resolver la ETR para una geometría de *Slab* en régimen temporal. Se realizó también una comparación de los resultados obtenidos de la transmitancia con la aproximación del esparcimiento, con el fin de validar el código desarrollado.

METODOLOGÍA

Coeficiente de Absorción

En escala microscópica la absorción puede describirse de la siguiente manera: cuando se envía una onda electromagnética hacia el átomo, un fotón de frecuencia ν estimula el paso de un electrón de energía ε_1 hacia un nivel de energía ε_2 de tal forma

que
$$\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \hbar v$$
 donde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ siendo h la

constante de Planck. Esta transición del electrón hacia un nivel superior de energía implica la absorción del fotón incidente. Por otra parte, si se considera una escala macroscópica, la absorción puede ser vista como la disipación de la energía del rayo luminoso en forma de calor. Tomando en cuenta esta última descripción, se puede considerar un flujo de energía radiativa monocromática I_v propagándose en un medio absorbente y en la dirección \vec{u} , en un punto inicial s. Sobre una longitud ds, una fracción dI_v de la energía será absorbida. Por lo tanto, se puede escribir de manera general:

$$dI_{\nu}(s+ds,\vec{u},t) = -\mu_a I_{\nu}(s,\vec{u},t)$$
(1)

donde V es la frecuencia del haz luminoso y t el tiempo.

El coeficiente μ_a introducido en la ecuación (1) es llamado el coeficiente de absorción monocromático. Su unidad, en el SI, es el m⁻¹. Vale la pena mencionar que a su inverso $l_a = 1/\mu_a$, se le llama recorrido libre medio de absorción; y representa la distancia promedio que los fotones recorrerían dentro de un medio absorbente antes de ser completamente absorbidos.

Coeficiente de Esparcimiento

El proceso de esparcimiento que tiene una fracción de la energía I_{ν} que se propaga en la dirección \vec{u} , además, avanza hacia una dirección \vec{u}' diferente de \vec{u} . El coeficiente de esparcimiento monocromático μ_s se introduce de la misma forma que para la absorción, donde su inverso es $l_s = \frac{1}{\mu_s}$ y cuyas unidades están dadas en m. Dicho coeficiente representa la distancia media que un fotón recorre antes de ser esparcido hacia una dirección diferente a su dirección inicial.

Como es de imaginarse dentro de un medio biológico se combinan ambos fenómenos (absorción y esparcimiento) al mismo tiempo, logrando que la intensidad luminosa decaiga rápidamente en distancias relativamente pequeñas. Esto fue estudiado en un principio por Pierre Burger en 1729 y continuado por Johann Heinrich Lambert en 1760. El coeficiente que se introduce en la ley de Burgerlambert es una combinación de μ_a y μ_s (Tushin, 2000; Ishimaru, 1997)

Parámetro de Anisotropía

Antes de definir el parámetro de anisotropía se debe introducir el concepto de función de fase. Cuando ocurre el esparcimiento de la luz, la energía de ésta es redistribuida en todo el espacio; la función $p_v(\vec{u},\vec{u'})$ describe esta redistribución. En efecto, la función de fase media representa la probabilidad de que un flujo de energía que llega a un elemento de volumen dV a través de un ángulo sólido $d\Omega'$ cuyo eje es paralelo a la dirección $\vec{u'}$, sea difundido hacia el ángulo sólido $d\Omega$ con eje paralelo a la dirección \vec{u} . Existen numerosas normalizaciones de la función de fase (Ishimaru, 1997). Se ha escogido la siguiente:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{0}^{4\pi} p_{\nu}(\vec{u}, \vec{u}') d\Omega' = 1$$
 (2)

Por otro lado el factor o parámetro de anisotropía mide el grado de anisotropía del esparcimiento. Se define como el promedio del ángulo de esparcimiento ponderado por la función de fase y su valor varía entre -1 y 1 (figura 1).

$$g = \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{4\pi} p_{\nu} (\vec{u}', \vec{u}) \vec{u} \cdot \vec{u}' d\Omega$$
(3)



Figura 1. Esparcimiento de la luz mediante una partícula esférica

La ecuación de Transferencia Radiativa (ETR), ecuación 4 (Lihong V. y Hsin-i W., 2007), es una ecuación integro-diferencial que rige el comportamiento de la luz visible dentro de medios altamente dispersivos como el caso de la atmósfera y tejidos biológicos.

González Trujillo, J. et al. / Ingeniería 12-2 (2008) 57-65

$$\left[\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}+u\cdot\nabla\right]L_{\nu}(s,\hat{u},t)=-(\mu_{a}-\mu_{s})L_{\nu}(s,\hat{u},t)+\frac{\mu_{s}}{4\pi}\int_{0}^{4\pi}p_{\nu}(\hat{u},\hat{u}')L_{\nu}(s,\hat{u},t)d\Omega'.$$
 (4)

Para resolverla se utilizó un método numérico basado en un método de Monte Carlo que proporciona una solución aproximada de la ETR en régimen temporal. En todas las aplicaciones del método Monte Carlo se construye un modelo estocástico en el cual el valor esperado de una variable aleatoria (o una combinación de varias variables) equivale al valor de la cantidad física que se desea determinar. El valor esperado se obtiene promediando múltiples muestras independientes las cuales representan la variable aleatoria introducida anteriormente. Las series de muestras independientes se construyen a partir de número aleatorios. (Lux y Koblinger, 1991)

Se prestó particular interés a una geometría de tipo *Slab* que se refiere a una configuración geométrica en la que el espacio es dividido por dos planos verticales e infinitos, formando una región de ancho L entre ellos, en la que se encuentra un medio biológico (Figura 2). En dicho medio, se introduce un impulso luminoso de duración infinitamente corta y de una única longitud de onda. Se trata, entonces, de un impulso láser ideal propagándose dentro del medio biológico de izquierda a derecha.



Figura 2. Geometría del Slab.

Como se mencionó con anterioridad, se utiliza un método de Monte Carlo (MC) para la simulación del fenómeno (figura 3). El impulso láser que se propaga dentro del *Slab* se discretiza en *N* paquetes de fotones a los que se les asigna una posición, dirección y luminancia iniciales. Se observa la "historia" de cada grupo de fotones dentro del medio de la siguiente manera:

1. Se asignan los valores iniciales de posición, dirección y luminancia.

La luminancia de cada grupo esta dada por

 $L_N = \frac{L_{inc}}{N}$, donde L_{inc} es la luminancia total

del impulso láser y N el número de repeticiones, cada disparo del láser expulsa un paquete de fotones por lo que tenemos N paquetes de fotones. En este caso se estudia una onda plana con incidencia normal propagándose del medio 1 al medio 3 a través del medio dentro del S*lab*.

2. Se elige una distancia aleatoria recorrida por el grupo de fotones.

El fotón o grupo de fotones recorrerá una cierta distancia σ' dentro del medio antes de ser esparcido de nuevo por el medio biológico. La distancia estará dada por la siguiente relación:

$$\sigma' = -\frac{1}{\mu_s} \ln(1-x) \tag{5}$$

Donde x es una variable aleatoria cuyo valor se encuentra en el intervalo [0,1].

3. Se modifica la luminancia y la posición del grupo.

Se modifica la posición del fotón. Al recorrer una distancia σ' dentro el medio, la luminancia del fotón disminuirá y estará dada por:

$$L_N = L_{ini} \exp(-\mu_a \cdot \sigma') \tag{6}$$

4. Se verifica si el grupo de fotones no ha salido del *slab*.

Si el grupo de fotones ya salió del *slab*, se toma el siguiente grupo y se comienza desde el paso 1. Si el grupo de fotones se encuentra aún dentro del medio se procede como sigue: 5. Se elige un ángulo de esparcimiento de la función de fase $p(\theta)$ y se repite el procedimiento a partir del paso 2.

La función de fase representa la densidad de probabilidad del ángulo de esparcimiento. Una definición más rigurosa de dicha función puede encontrarse en (Ishimaru, 1997).

Existen diversas expresiones para la función de fase siendo la de Henyey-Greenstein la que mejor describe a los medios biológicos (Elaloufi et al., 2007):

$$p(\theta) = \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g\cos\theta)^{\frac{3}{2}}}$$
(7)



Figura 3. Diagrama de flujo del método de Monte Carlo utilizado para la simulación de la propagación de un impulso láser dentro de medios altamente dispersivos.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se calcularon los valores de transmitancia y reflectancia en régimen temporal para una geometría del *Slab* en tres dimensiones. Las curvas presentadas en las figuras 4 y 5 representan dichos valores. El valor típico, para el factor de anisotropía en el visible y cercano infrarrojo (NIR), para la piel humana es 0.9. (Chen, 2007) reporta que el valor para el coeficiente de absorción de la piel es de 2.1 ± 0.5 cm⁻¹ en el rango de 600 a 800 nm, mientras que el coeficiente de esparcimiento depende de la longitud de onda del rayo incidente de acuerdo con la relación

 $\mu_s(\lambda) = a\lambda^{-w}$, donde *a* y *w* dependen principalmente de las características del medio como la talla característica del difusor o partícula causante del esparcimiento.

En este trabajo se fijaron los siguientes valores para los coeficientes anteriores: $\mu_a = 2.1 \times 10^2 \text{ m}^{-1}$ $\mu_s = 2.97 \times 10^3 \text{ m}^{-1} \text{ y } g = 0.9$. Con estos valores se simula entonces un corte laminar (Slab) homogéneo de piel humana de 1 cm. de espesor.



Figura 4. Transmitancia en régimen temporal para un Slab de 1 cm. de espesor definido por los coeficientes $\mu_a = 2.1 \times 10^2 \text{ m}^{-1}, \ \mu_s = 2.97 \times 10^3 \text{ m}^{-1} \text{ y } g = 0.9$

La curva de transmitancia (figura 4) presenta las siguientes características:

- 1. Durante 3.3×10^{-11} s aproximadamente, el número de fotones transmitidos es nulo debido a que se requiere un tiempo mínimo para que la luz atraviese el *slab*. Los fotones que no son esparcidos por el medio biológico lo atraviesan en línea recta (fotones balísticos), éstos fotones, viajando a velocidad c $(3 \times 10^{10} \text{ cm/s})$ tardan 3.3×10^{-11} s en atravesar el *slab*. Se puede observar que la contribución de estos fotones es muy pequeña.
- 2. Se alcanza un valor máximo para la transmitancia en $t = 6.3 \times 10^{-11}$ s aproximadamente. El esparcimiento de un fotón ocasiona que éste recorra una distancia mayor dentro del medio y, por lo tanto, le tome más tiempo salir del mismo.
- 3. La transmitancia tiende a cero. Los fotones que son sumamente esparcidos tardarán mucho en salir del medio y serán fuertemente absorbidos por el mismo. Esto ocasiona que la intensidad de los mismos tienda a cero cuando $t \rightarrow \infty$.

González Trujillo, J. et al. / Ingeniería 12-2 (2008) 57-65



Figura 5. Reflectancia en régimen temporal para un Slab de 1 cm de espesor definido por los coeficientes $\mu_a = 2.1 \times 10^2 \text{ m}^{-1}, \ \mu_s = 2.97 \times 10^3 \text{ m}^{-1} \text{ y } g = 0.9$.

El máximo que presenta la reflectancia en el tiempo t = 0, a partir de este máximo, la intensidad decae hasta hacerse nula en un tiempo de 8×10^{-11} s. Los fotones que contribuyen al decaimiento son fotones que son esparcidos en sentido contrario a su dirección inicial (*backscattering*) y por lo tanto tardan más

tiempo en salir del medio. La disminución en la intensidad de estos fotones se debe a que recorren una mayor distancia dentro del medio biológico. La figura 6 muestra la comparación entre la aproximación de la difusión y el método de MC utilizado en este trabajo.

González Trujillo, J. et al. / Ingeniería 12-2 (2008) 57-65



Figura 6. Comparación entre el método de Monte Carlo y la aproximación de la difusión para un *slab* de 4 mm. de espesor y cuyos coeficientes son: $\mu_a = 0$, $\mu_s = 2.97 \times 10^3$ m⁻¹ y g = 0.9.

La aproximación de la difusión es valida para $L \gg l_{tr}$ y para $t \gg \frac{c_v}{l_{tr}}$ donde l_{tr} es la longitud de transporte. Como se puede observar en la figura 6, el comportamiento que presentan ambas curvas es similar siendo el máximo y el decaimiento a cero las dos características más importantes.

CONCLUSIONES

El uso de la luz visible para la formación de imágenes biomédicas requiere el uso de algoritmos que tomen en cuenta el tiempo de propagación de la misma dentro de los medios biológicos. Dicho tiempo de propagación depende de numerosos factores tales como el tamaño de la muestra y los diversos coeficientes que caracterizan la muestra.

La ETR puede ser resuelta a través de métodos numéricos como el método de Monte Carlo, que proporciona una solución aproximada en régimen temporal. Para grandes escalas temporales y espaciales, la ETR puede ser simplificada a una ecuación de difusión. El código desarrollado en el presente puede ser utilizado para casos en los que dicha aproximación ya no es válida; es decir, cuando el medio sea absorbente, o cuando sea demasiado grande en comparación con la longitud de transporte.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aroni P., Spinelli L., Torricelli A., Pifferi A., Danesini G. M., and Cubeddu R., (2005). Multiwavelength time domain optical mammography. Technology in Cancer Research and Treatment, **4**, 527–537.

Chen N., (2007). Controlled Monte Carlo method for light propagation in tissue of semi-infinie geometry, Applied Optics, **46**, 1597-1603.

Elaloufi R., Arridge S., Pierrat R., Carminati R., (2997). Light propagation in multilayered scattering media beyond the diffusive regime. Applied Optics, **46**, 2528-2539.

González Trujillo, J. et al. / Ingeniería 12-2 (2008) 57-65

Grosenick D., Moesta K. T., Wabnitz H., Mucke J., Stroszczynski C., Macdonald R., Schlag P. M., and Rinneberg H., (2003). Time domain optical mammography: initial clinical results on detection and characterization of breast tumors, Applied Optics, **42**, 3170–3186.

Hall D. J., Hebden J. C., and Delpy D. T., (1997). Imaging very-lowcontrast objects in breastlike scattering media with a timeresolved method, Applied Optics, **36**, 7270–7276.

Hebden J. C., Gibson A., Yusof R. M., Everdell N., Hillman E. M. C., Delpy D. T., Arridge S. R., Austin T., Meek J. H., and Wyatt J. S., (2002). Three-dimensional optical tomography of the premature infant brain, Physics in Medicine and Biology, **47**, 4155–4166.

Hebden J. C., Veenstra H., Dehghani H., Hillman E. M. C., Schweiger M., Arridge S. R., and Delpy D. T., (2001). Three-dimensional time-resolved optical tomography of a conical breast phantom, Applied Optics, **40**, 3278–3287.

Ishimaru A. (1997). Wave Propagation and Scattering in Random Media, IEEE Press, USA.

Lihong V. y Hsin-i W. (2007). Biomedical Optics, Principles and Imaging, Wiley Inter-Science, New Jersey, USA.

Lux I. y Koblinger L. (1991). Monte Carlo particle transport methods: Neutron and Photon Calculations, CRC Press, Boca Raton, USA.

Tanifuji T., Ohtomo T., Ohmori D., and Ishikawa T., (2005). Timeresolved reflectance of an optical pulse in adult heads based on the finite difference time domain (FDTD) analysis, Optical Review, **12**, 42–45.

Tuchin V. (2000). Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical diagnostics, vol TT38, (SPIE Press), Washington, USA.

US FDA, US Food and Drug Administration, Radiological Health Program, <u>http://www.fda.gov/cdrh/radhealth/products/medicalxray.html</u>. Fecha de captura: mayo de 2008.

Yates T., Hebden J. C., Gibson A., Everdell N., Arridge S. R., and Douek M., (2005). Optical tomography of the breast using a multichannel time-resolved imager, Physics in Medicine and Biology, **50**, 2503–2517.

Van Houten J. P., Benaron D. A., Spilman S., and Stevenson D. K., (1996). Imaging brain injury using time-resolved near-infrared light scanning, Pediatric Research, **39**, 470–476.

Este documento se debe citar como:

González Trujillo, J., Pérez Cortés, M. y Méndez Gamboa, J. (2008). Simulación del esparcimiento de la luz en medios biológicos mediante el método Monte Carlo. Ingeniería, Revista Académica de la FI-UADY, 12-2, pp. 57-65, ISSN: 1665-529X