

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗ ΑΣΚΗΣΗ 4:

***3-Δ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΦΩΤΟΣ
ΣΕ ΙΣΤΟΥΣ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ
MONTE CARLO***

1. Σκοπός

Ο σκοπός της άσκησης αυτής είναι να γίνει μελέτη των ιδιοτήτων των βιολογικών ιστών και της αλληλεπίδρασης του φωτός με αυτούς. Η μελέτη θα γίνει με την χρήση μίας προσομοίωσης βιολογικού δείγματος και την υλοποίηση της στατιστικής μεθόδου *Monte Carlo* σε ηλεκτρονικό υπολογιστή.

Η μέθοδος *Monte Carlo* είναι μία πολύ διαδεδομένη και χρήσιμη μέθοδος μοντελοποίησης της αλληλεπίδρασης των βιολογικών ιστών με το φως. Στην άσκηση αυτή θα υλοποιήσουμε έναν αλγόριθμο της παραπάνω μεθόδου και με την βοήθεια αυτού θα προσδιορίζουμε κάποια βασικά μακροσκοπικά χαρακτηριστικά του ιστού-μοντέλου που θα έχουμε εισάγει.

2. Θεωρία

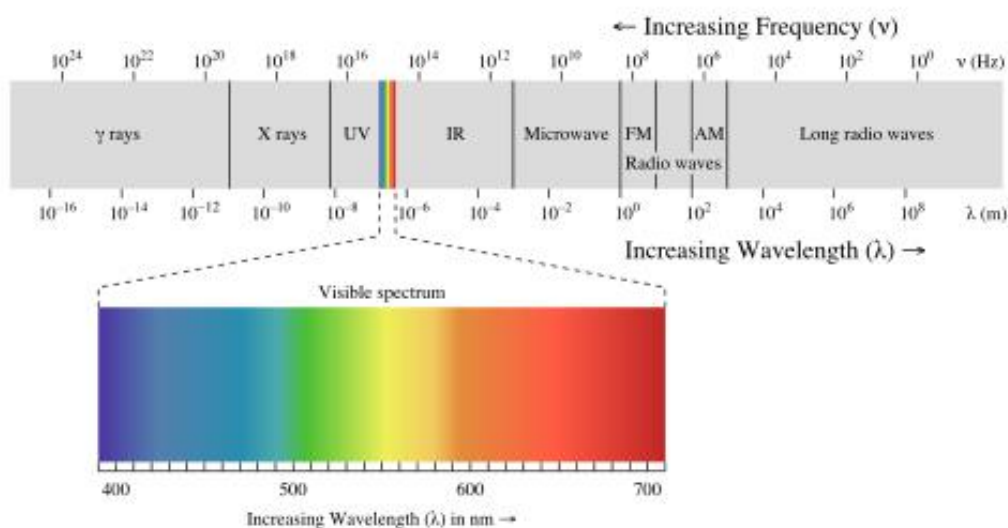
2.1. Εισαγωγή

Στην Βιοϊατρική η γνώση των οπτικών ιδιοτήτων των βιολογικών ιστών είναι πολύ μεγάλης σημασίας. Αυτό επειδή η κατανόηση του τρόπου διάδοσης του φωτός μέσα στο ανθρώπινο σώμα είναι απαραίτητη τόσο για θεραπευτικές, όσο και για διαγνωστικές μεθόδους που χρησιμοποιούν φως *laser*. Ενδεικτικά παραδείγματα τέτοιων τεχνικών είναι η φωτοδυναμική θεραπεία καρκινικών όγκων αλλά και όλες οι μέθοδοι οπτικής απεικόνισης.

Όπως καταλαβαίνουμε λοιπόν για να εφαρμοστούν οι παραπάνω Βιοϊατρικές τεχνικές με επιτυχία είναι αναγκαίος ο προσδιορισμός των οπτικών παραμέτρων που χαρακτηρίζουν τους υπό εξέταση ιστούς. Ένας τρόπος για να το πετύχουμε είναι η κατασκευή ενός εικονικού μοντέλου του ιστού βασισμένου στην υπάρχουσα θεωρία, και ο προσδιορισμός των ζητούμενων παραμέτρων έτσι ώστε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης να συμπίσουν με τις μακροσκοπικές μετρήσεις που γίνονται στο εργαστήριο. Η μέθοδος *Monte Carlo* υλοποιεί αυτήν ακριβώς την λογική. Πριν όμως προχωρήσουμε στην υλοποίηση του αλγορίθμου, θα περιγράψουμε εν συντομία το θεωρητικό υπόβαθρο πάνω στο οποίο στηρίζεται.

2.2. Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα

Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία αποτελείται από ταλαντευόμενα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία και ανάλογα με το μήκος κύματος (ή την συχνότητα) χωρίζεται στις εξής περιοχές: τις ραδιοσυχνότητες, τα μικροκύματα, την υπέρυθρη ακτινοβολία, το ορατό, το υπεριώδες και τις ακτίνες *X* και *γ*. Όλα τα είδη της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας διαδίδονται τόσο στο κενό, όσο και στην ύλη, ενώ ταξινομημένες κατά αυξανόμενο μήκος κύματος (ή μειούμενη συχνότητα) σχηματίζουν το λεγόμενο ηλεκτρομαγνητικό φάσμα, όπως φαίνεται στην Εικόνα (2.2.1).



Εικόνα (2.2.1): Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα

Λόγω της κυματικής του φύσης το φως μπορεί να περιγραφεί από ένα μήκος κύματος λ και μια συχνότητα f . Τα μεγέθη αυτά συνδέονται με τη σχέση $c = \lambda \cdot f$ όπου $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{sec}^{-1}$ είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Η οπτική ακτινοβολία είναι η περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος που βρίσκεται μεταξύ των ακτίνων X και των μικροκυμάτων. Υποδιαιρείται σε τρεις κύριες περιοχές, οι οποίες με τις σειρά τους χωρίζονται σε υποπεριοχές, όπως δείχνει ο παρακάτω πίνακας:

ΟΠΤΙΚΟ ΦΑΣΜΑ		
Υπεριώδες (UV)	185nm - 400nm	UVC: 185nm - 280nm
		UVB: 280nm - 320nm
		UVA: 320nm - 400nm
Ορατό (VIS)	400nm - 780nm	Χρώματα της Ίριδας
Υπέρυθρο (IR)	780nm - 10.6μm	IRA: 780nm - 1400nm
		IRB: 1400nm - 3000nm
		IRC: 3000nm – 10.6μm

Αυτές οι υποπεριοχές ομαδοποιούν τα μήκη κύματος με παρόμοιες βιολογικές επιδράσεις στους ιστούς.

2.3. Αλληλεπίδραση φωτός με βιολογικούς ιστούς

Η μελέτη της διάδοσης του φωτός στους ιστούς, αποτελεί το κεντρικό πρόβλημα για τις περισσότερες ιατρικές και βιοϊατρικές εφαρμογές των *lasers*. Όταν μια δέσμη *laser* προσπίπτει σε έναν ιστό, υπάρχουν τέσσερις πιθανές αλληλεπιδράσεις:

Το προσπίπτον φως της δέσμης μπορεί να υποστεί ανάκλαση και να μην προκαλέσει καμία μεταβολή στον ιστό. Συνήθως το ποσοστό που ανακλάται είναι το 3 - 5 % του προσπίπτοντος φωτός και οφείλεται στους διαφορετικούς δείκτες διάθλασης του αέρα και του ιστού.

Το υπόλοιπο της δέσμης διαδίδεται μέσα στον ιστό, σκεδάζεται πολλαπλά και ένα μέρος της απορροφάται. Η ακτινοβολία που απορροφάται από τον ιστό μπορεί να προκαλέσει τη θέρμανση του, φωτοχημικές αντιδράσεις ή/και εκπομπή φθορισμού. Το ποσοστό του απορροφούμενου και σκεδαζόμενου φωτός εξαρτάται από το μήκος κύματος του *laser* και τις οπτικές ιδιότητες του ιστού. Τέλος, ορισμένα μήκη κύματος μπορούν να διέλθουν μέσα από τον ιστό χωρίς να προκαλέσουν κανένα θερμικό ή άλλο αποτέλεσμα, ο ιστός δηλαδή είναι διάφανος γι' αυτά τα μήκη κύματος.

Οι βασικές οπτικές παράμετροι για τη μελέτη της διάδοσης φωτεινής ακτινοβολίας σε μαλακό ιστό είναι: ο συντελεστής απορρόφησης μ_a , ο συντελεστής σκέδασης μ_s , ο δείκτης διάθλασης n και ο βαθμός ανισοτροπίας g .

Ο συντελεστής απορρόφησης μ_a εκφράζει πόσο έντονα απορροφά το υλικό. Έχει διαστάσεις αντιστρόφου μήκους και η αντίστροφη ποσότητα $1/\mu_a$ εκφράζει τη μέση ελεύθερη διαδρομή μέχρι να συμβεί απορρόφηση.

Ο συντελεστής σκέδασης μ_s εκφράζει πόσο έντονα σκεδάζει το υλικό. Έχει επίσης διαστάσεις αντιστρόφου μήκους ενώ το $1/\mu_s$ δηλώνει τη μέση ελεύθερη διαδρομή που διανύει το φωτόνιο μέχρι να σκεδαστεί.

Ο ολικός συντελεστής εξασθένησης μ_t ισούται με το άθροισμα των συντελεστών απορρόφησης και σκέδασης. Το $1/\mu_t$ δηλώνει τη μέση ελεύθερη διαδρομή που διανύει το φωτόνιο μέχρι να σκεδαστεί ή να απορροφηθεί.

Βάθος Διείσδυσης ορίζεται το πάχος του ιστού στο οποίο το μέτρο της έντασης της φωτεινής ακτινοβολίας ελαττώνεται στο $1/e$ (37%) της αρχικής προσπίπτουσας τιμής. Το βάθος διείσδυσης είναι το αντίστροφο του ολικού συντελεστή εξασθένησης μ_t .

Ο δείκτης διάθλασης n είναι ο λόγος της ταχύτητας του φωτός στο κενό προς την ταχύτητα του φωτός στο συγκεκριμένο υλικό. Ισχύει προφανώς πάντα $n \geq 1$. Τυπικές τιμές του δείκτη n για διάφορα μέρη του δέρματος φαίνονται στον πίνακα της Εικόνας (3.2.1).

Η συνάρτηση φάσης: Γνωρίζουμε ότι κατά το φαινόμενο της σκέδασης δεν είναι όλες οι διευθύνσεις το ίδιο πιθανές. Ο βιολογικός ιστός θεωρείται σαν ένα μέσο που

κυριαρχεί η εμπρόσθια σκέδαση, τα φωτόνια δηλαδή σκεδάζονται κυρίως σε γωνίες μικρότερες από 90° σε σχέση με την αρχική τους διεύθυνση.

Στην έρευνα έχουν προταθεί πολλές συναρτήσεις που να περιγράφουν την πιθανότητα σκέδασης του φωτονίου σε γωνία θ σε σχέση με την αρχική του διεύθυνση. Ενδεικτικά αναφέρουμε την απλή *Henyey-Greenstein*, την *delta-Eddington* και την τροποποιημένη *Henyey-Greenstein*. Η συνάρτηση που χρησιμοποιούμε στην άσκησή μας είναι η απλή *Henyey-Greenstein*, η οποία δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$p(\theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1-g^2}{(1+g^2-2g\cos\theta)^{3/2}} \quad (1.3.1)$$

$$\text{όπου ισχύει } \int_0^\pi p(\theta) 2\pi \sin\theta d\theta = 1 \text{ και } \int_0^\pi p(\theta) 2\pi \cos\theta \sin\theta d\theta = g.$$

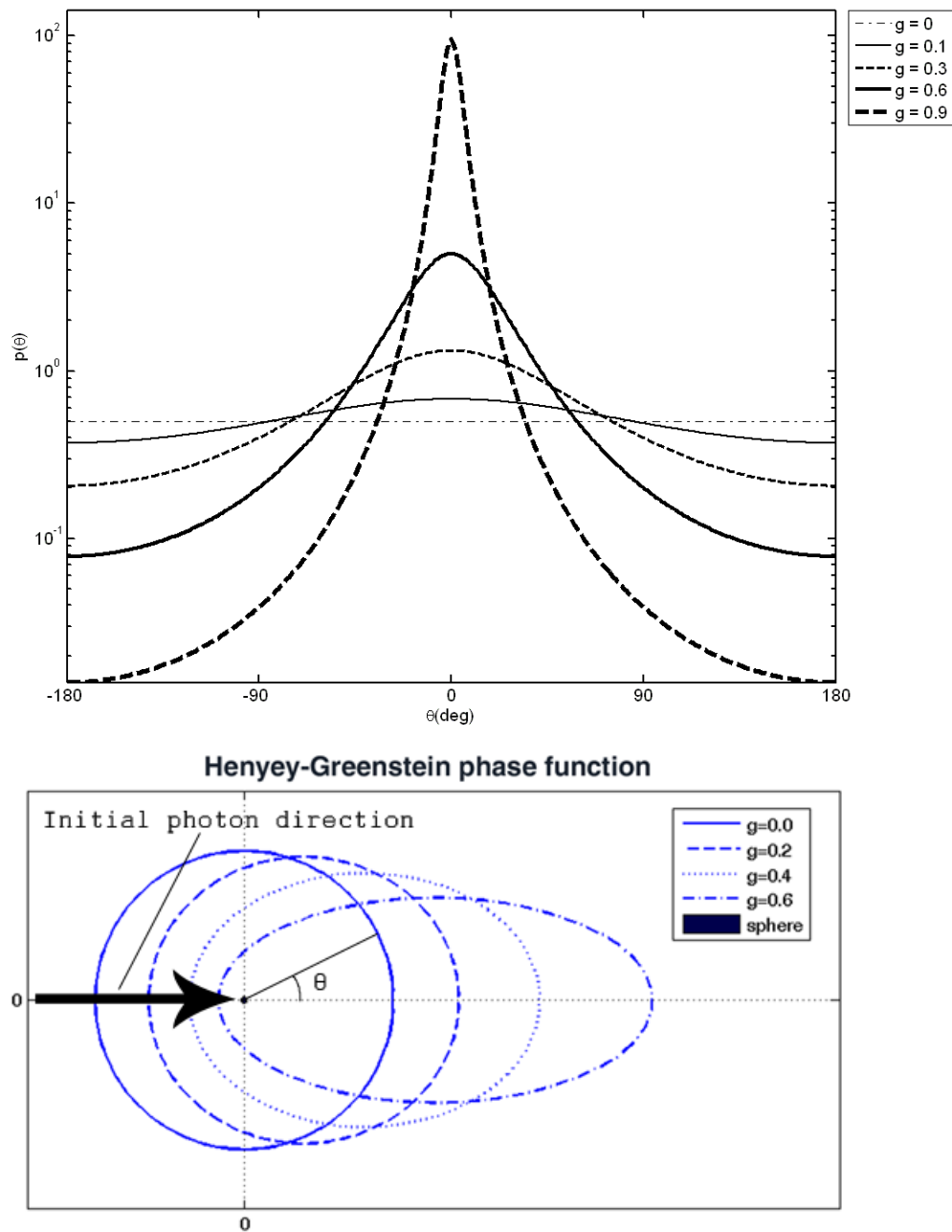
Ο βαθμός ανισοτροπίας g υποδηλώνει την ασυμμετρία στην περίπτωση της σκέδασης και οι τιμές που μπορεί να λάβει είναι $-1 < g < 1$. Όταν $0 < g \leq 1$ κυριαρχεί η *εμπρόσθια σκέδαση* (πιθανότερη γωνία σκέδασης οι 0°), με $g = 0$ η σκέδαση είναι *ισότροπη* (όλες οι γωνίες σκέδασης είναι το ίδιο πιθανές) και όταν $-1 < g \leq 0$ κυριαρχεί η *οπισθοσκέδαση* (πιθανότερη γωνία σκέδασης οι 180°).

Όταν $g = 1$ όλα τα φωτόνια σκεδάζονται προς τα εμπρός ($\theta = 0^\circ$), και ουσιαστικά περιγράφει ένα υλικό που **δεν σκεδάζει**. Όταν $g = -1$ όλα τα φωτόνια ανακλώνται προς τα πίσω ($\theta = 180^\circ$), ωστόσο αυτή η περίπτωση δεν συναντάται στην πραγματικότητα. Τυπικές τιμές του συντελεστή g για διάφορα μέρη του δέρματος φαίνονται στον πίνακα της *Εικόνας (3.2.1)*. Από τις τιμές αυτές καταλαβαίνουμε ότι η σκέδαση στους ιστούς είναι *εντόνως εμπρόσθια*.

Από το συνδυασμό του συντελεστή σκέδασης μ_s και του βαθμού ανισοτροπίας g προκύπτει μια άλλη οπτική παράμετρος για την περιγραφή της σκέδασης, ο ενεργός συντελεστής σκέδασης $\mu'_s = \mu_s \cdot (1-g)$.

Η απορρόφηση και η σκέδαση του φωτός καθορίζουν την χωρική κατανομή της ακτινοβολίας μέσα στον ιστό και κατ' επέκταση τα επαγόμενα βιολογικά αποτελέσματα. Οι συντελεστές απορρόφησης και σκέδασης για ένα υλικό δεν είναι σταθεροί αλλά μεταβάλλονται συναρτήσει του μήκους κύματος της ακτινοβολίας, και στην γενική περίπτωση δεν είναι ίσοι μεταξύ τους. Επομένως θα μπορούσαμε να διακρίνουμε τρεις περιοχές: (α) περιοχή όπου κυριαρχεί η απορρόφηση, (β) περιοχή όπου κυριαρχεί η σκέδαση και (γ) περιοχή όπου και τα δύο φαινόμενα είναι συγκρίσιμα.

Γραφική αναπαράσταση της συνάρτησης *Henyey-Greenstein* για διάφορες τιμές του g στην περίπτωση της *εμπροσθοσκέδασης* φαίνεται στις παρακάτω εικόνες.



Εικόνα (2.3.1): Η συνάρτηση φάσης *Henyey-Greenstein*. Πάνω: η κατανομή της πιθανότητας συναρτήσει της γωνίας θ , για διάφορες τιμές του g . Παρατηρούμε πως για $g = 0$ η σκέδαση είναι *ισοτροπική* (ανεξάρτητη της γωνίας θ), όπως προκύπτει και από την Σχέση (1.3.1). Αυξανόμενου του g αυξάνεται και η *ανισοτροπία* της σκέδασης. Κάτω: πολικό γράφημα της κατανομής πιθανότητας για διάφορες τιμές του g . Η αρχική διεύθυνση πρόσπτωσης των φωτονίων στην σκεδάζουσα σφαίρα υποδεικνύεται από το μαύρο βέλος.

α) Μήκη κύματος για τα οποία κυριαρχεί η απορρόφηση

Για την επιλογή της περιοχής όπου η απορρόφηση υπερτερεί έναντι της σκέδασης εφαρμόζεται το κριτήριο $\mu_a > 10 \cdot \mu_s \cdot (1 - g)$. Η συνθήκη αυτή ισχύει για μήκη κύματος $\lambda < 250\text{nm}$ και $\lambda > 2000\text{nm}$, όπου το φαινόμενο της απορρόφησης κυριαρχεί.

Η απορρόφηση του φωτός στο υπεριώδες οφείλεται στην παρουσία πρωτεϊνών και DNA, στο ορατό και στο εγγύς υπέρυθρο καθορίζεται από τη συγκέντρωση χρωμοφόρων όπως η αιμοσφαιρίνη και η μελανίνη, ενώ για μεγαλύτερα μήκη κύματος στο υπέρυθρο έντονη απορρόφηση παρουσιάζει το νερό.

Το μέγιστο απορρόφησης για τους αρωματικούς δακτυλίους των πρωτεϊνών εντοπίζεται στην περιοχή του υπεριώδους μεταξύ **260nm** και **280nm**. Η απορρόφηση της αιμοσφαιρίνης είναι ισχυρά εξαρτώμενη από το μήκος κύματος: αυξάνεται με έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα περίπου 5 από το ιώδες στο κίτρινο και ελαττώνεται κατά 10 και 100 φορές για μετάβαση από το κίτρινο στο κόκκινο ή στο εγγύς υπέρυθρο. Η απορρόφηση της μελανίνης παρουσιάζει μια συνεχή μείωση με το μήκος κύματος και ο αντίστοιχος συντελεστής ελαττώνεται κατά 5 περίπου φορές από το ιώδες προς το κοντινό υπέρυθρο. Στο νερό, η απορρόφηση αυξάνεται σημαντικά για μήκη κύματος μεγαλύτερα από **1.4μm**.

β) Μήκη κύματος για τα οποία κυριαρχεί η σκέδαση

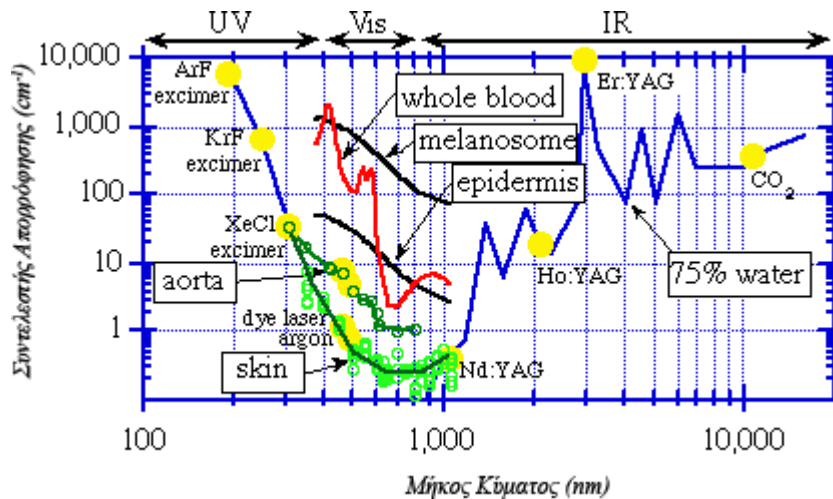
Η σκέδαση κυριαρχεί της απορρόφησης $10 \cdot \mu_a < \mu_s \cdot (1 - g)$ για μήκη κύματος στην περιοχή του ερυθρού και του κοντινού υπέρυθρου (**600 – 1200nm**). Η περιοχή αυτή χαρακτηρίζεται σαν “οπτικό παράθυρο”, περιοχή εύκολης διέλευσης της οπτικής ακτινοβολίας. Αυτό συμβαίνει γιατί στην περιοχή αυτή δεν υπάρχει έντονη απορρόφηση από τα βιολογικά μόρια των ιστών.

Η σκέδαση οφείλεται σε ασυνέχειες του δείκτη διάθλασης σε μικροσκοπικό επίπεδο, όπως η επιφάνεια των μεμβρανών των κυττάρων (λιπιδική ή υδρόφιλη) ή οι αλυσίδες του κολλαγόνου.

γ) Μήκη κύματος για τα οποία και τα δύο φαινόμενα είναι συγκρίσιμα

Για μήκη κύματος που δεν εμπίπτουν στις περιοχές που αναφέρθηκαν παραπάνω τα φαινόμενα της απορρόφησης και της σκέδασης είναι συγκρίσιμα.

Στο γράφημα της Εικόνας (2.3.1) φαίνονται οι συντελεστές απορρόφησης του αίματος, του δέρματος, της επιδερμίδας, της μελανίνης, και του νερού για διάφορα μήκη κύματος. Επίσης φαίνονται τα μήκη κύματος εκπομπής μερικών από τα πλέον χρησιμοποιούμενα *laser*.



Εικόνα (2.3.2): Ο συντελεστής απορρόφησης διαφόρων βιολογικών δειγμάτων συναρτήσει του μήκους κύματος και η εκπομπή μερικών από τα πλέον χρησιμοποιούμενα *laser*.

Από τα παραπάνω γίνεται φανερή η σπουδαιότητα των οπτικών ιδιοτήτων των ιστών για την επιλογή των παραμέτρων του *laser* που θα εξασφαλίσουν το καλύτερο δυνατό αποτέλεσμα σύμφωνα με τις ανάγκες κάθε εφαρμογής. Για παράδειγμα, αν για μια ιατρική πράξη χρειάζεται θέρμανση του ιστού, πρέπει να γνωρίζουμε ποιά μόρια του ιστού απορροφούν κυρίως και στην συνέχεια να επιλέξουμε το μήκος κύματος που απορροφάται καλύτερα από τα μόρια αυτά.

Ο νόμος των Beer - Lambert

Ιδιαίτερα μεγάλη σημασία για την ανάπτυξη μοντέλων διάδοσης του φωτός, παρουσιάζει η σύγκριση μεταξύ απορρόφησης και σκέδασης. Η εξίσωση που περιγράφει την διάδοση φωτός στους ιστούς απλοποιείται κατά πολύ όταν κυριαρχεί ένα από τα δύο φαινόμενα έναντι του άλλου. Όταν όμως η συνεισφορά των δύο φαινομένων είναι ισότιμη τότε δεν υπάρχει απλή λύση για το πρόβλημα.

Στην περίπτωση που έχουμε **μόνο απορρόφηση** ($g = 1$) ισχύει ο νόμος των *Beer - Lambert*, ο οποίος εκφράζεται με την εξίσωση:

$$I = I_o \cdot e^{-\mu_a \cdot d} \quad (1.3.2)$$

όπου I είναι η ένταση της διερχόμενης ακτινοβολίας, I_o είναι η ένταση της αρχικής (προσπίπτουσας) ακτινοβολίας, μ_a είναι ο συντελεστής απορρόφησης και d είναι το πάχος του ιστού. Στην περίπτωση που εκτός από απορρόφηση στο δείγμα μας συμβαίνει και **σκέδαση**, τότε η Σχέση (1.3.2) δεν περιγράφει επαρκώς τα φαινόμενα που συμβαίνουν και την θέση της παίρνει μια πιο πολύπλοκη εξίσωση που

ονομάζεται *Εξίσωση Διάδοσης Ακτινοβολίας (Radiative Transfer Equation – RTE)*. Η ανάλυσή της όμως ξεφεύγει από τον σκοπό της άσκησης αυτής.

3. ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ MONTE CARLO

Έχοντας ορίσει το θεωρητικό υπόβαθρο στο οποίο θα στηριχτούμε, είμαστε έτοιμοι να υλοποιήσουμε τον αλγόριθμο προσομοίωσης *Monte Carlo*. Η υλοποίηση γίνεται σε περιβάλλον Matlab. Ακολούθως θα αναλύσουμε τα επιμέρους λογικά βήματα του αλγορίθμου.

3.1. Μαθηματικά εργαλεία

Στην υλοποίηση του αλγορίθμου θα χρειαστούμε την παραγωγή κάποιων τυχαίων μεγεθών που να ακολουθούν συγκεκριμένες κατανομές πυκνότητας πιθανότητας. Βασικό εργαλείο για τον υπολογισμό των μεγεθών αυτών είναι η *μηχανή παραγωγής τυχαίων αριθμών (random number generator)* rand που περιλαμβάνεται στο πακέτο λογισμικού του matlab. Οι αριθμοί που προκύπτουν από την γεννήτρια αυτή, και από εδώ και στο εξής θα τους ονομάζουμε RND, ακολουθούν την *ομοιόμορφη κατανομή (uniform distribution)*, δηλαδή κατανέμονται με ίσες πιθανότητες στο διάστημα $[0,1]$. Οι αριθμοί RND θα μας βοηθήσουν στον υπολογισμό των υπόλοιπων τυχαίων μεγεθών που χρειαζόμαστε.

Τα μεγέθη που θα χρησιμοποιήσουμε στην άσκηση (όπως πχ η γωνία σκέδασης θ) δεν υπακούουν στην ομοιόμορφη κατανομή αλλά σε άλλες κατανομές πιθανότητας. Η μέθοδος αντιστοίχισης ενός τυχαίου αριθμού RND της ομοιόμορφης συνάρτησης πιθανότητας με έναν άλλο που υπακούει σε κάποια άλλη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ονομάζεται *αρχή της αντίστροφης κατανομής (inverse distribution method)*. Η μέθοδος αυτή εμπλέκει την εύρεση της *συνάρτησης κατανομής $F(x)$ (cumulative distribution function - CDF)* της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας που μας ενδιαφέρει. Η ανάλυση της παραπάνω τεχνικής ξεφεύγει από τον σκοπό της άσκησης αυτής και θα παραθέσουμε έτοιμα τα αποτελέσματα.

3.2. Ορισμός μοντέλου του ιστού

Το μεγαλύτερο μέρος των ιστών που καλούμαστε να μοντελοποιήσουμε αφορούν το δέρμα. Δεν είναι όμως λίγες οι περιπτώσεις που καλούμαστε να εφαρμόσουμε την μοντελοποίηση σε εσωτερικά όργανα του σώματος. Στην άσκηση αυτή θα προσομοιώσουμε την ανθρώπινη επιδερμίδα.

Για απλοποίηση των διαδικασιών θεωρούμε πως το δέρμα αποτελείται από ομογενή στρώματα, το κάθε ένα από τα οποία έχει τις δικές του ιδιότητες. Οι οπτικές παράμετροι που είναι αναγκαίοι για τον χαρακτηρισμό του δερματικού στρώματος

είναι ο συντελεστής απορρόφησης μ_a , ο συντελεστής σκέδασης μ_s , ο βαθμός ανισοτροπίας g , ο δείκτης διάθλασης n και το πάχος του στρώματος d .

Στην παρακάτω εικόνα παραθέτουμε ένα ρεαλιστικό μοντέλο του ανθρωπίνου δέρματος με 5 στρώσεις καθώς και τις τιμές των παραπάνω παραμέτρων για ακτινοβολία μήκους κύματος **633nm**. Πρέπει να τονίσουμε πως οι συντελεστές αυτοί εξαρτώνται από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας που χρησιμοποιούμε, όπως αναλύσαμε στην Παράγραφο 2.3.

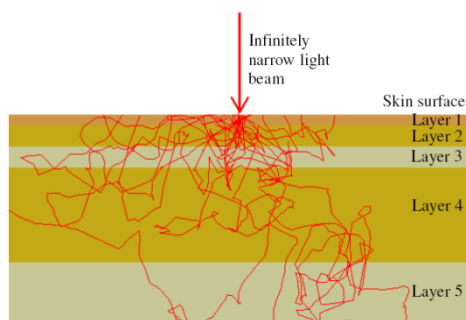
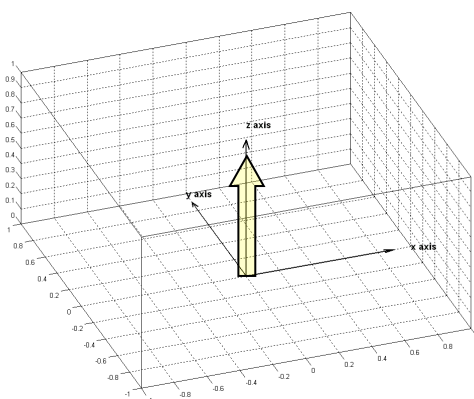


Table 1. Optical properties of five-layer skin tissue (633nm)

Layer	μ_a (cm^{-1})	μ_s (cm^{-1})	g	n	Thickness (cm)
1. epidermis	4.3	107	0.79	1.5	0.01
2. dermis	2.7	187	0.82	1.4	0.02
3. dermis with plexus superficialis	3.3	192	0.82	1.4	0.02
4. dermis	2.7	187	0.82	1.4	0.09
5. dermis with plexus profundus	3.4	194	0.82	1.4	0.06

Εικόνα (3.2.1): Ρεαλιστικό μοντέλο του ανθρωπίνου δέρματος. Στην αριστερή εικόνα φαίνεται μία τομή του μαζί με τις τροχιές μερικών φωτονίων σε 2D όπως υπολογίζονται από τον αλγόριθμο MC. Στον πίνακα δεξιά παραθέτουμε τις αντιπροσωπευτικές τιμές των οπτικών παραμέτρων κάθε στρώματος.

Πολύ σημαντικό σημείο στην μοντελοποίηση του ιστού αποτελεί και ο ορισμός των φυσικών ορίων του ιστού. Όταν κάποιο φωτόνιο εξέλθει των ορίων αυτών θεωρείται ‘εξουδετερωμένο’ και ανιχνεύεται. Στο μοντέλο μας το δέρμα αποτελείται από παράλληλα επίπεδα άπειρης επιφάνειας. Η μόνη πεπερασμένη διάσταση δηλαδή στο μοντέλο μας είναι το πάχος κατά τον άξονα z .



Εικόνα (3.2.2): Το μοντέλο του ιστού που χρησιμοποιούμε. Όλα τα φωτόνια εκτοξεύονται παράλληλα με τον z άξονα, όπως δείχνει το έντονο βέλος. Το μοντέλο αυτό προσομοιώνει ικανοποιητικά την περίπτωση λεπτού στρώματος δέρματος.

3.3. Πηγή εκπομπής φωτονίων

Αφού ορίσαμε το μοντέλο του ιστού πρέπει να καθορίσουμε την πηγή εκπομπής των φωτονίων και την θέση της σε σχέση με τον ιστό. Υπάρχουν πολλά μοντέλα πηγών όπως *ισοτροπικές* και *Γκαουσιανές* δέσμες, με την κάθε μία να περιγράφεται από την δικιά της συνάρτηση.

Στην άσκηση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε την πιο απλή μορφή πηγής, η οποία αποτελείται από μια παράλληλη δέσμη φωτονίων απειροστού εύρους κάθετη στην πρώτη οριακή επιφάνεια και με αφετηρία την θέση $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})_{i=1} = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$. Με άλλα λόγια όλα τα φωτόνια θα ξεκινούν από το ίδιο σημείο της πρώτης οριακής επιφάνειας με την ίδια αρχική διεύθυνση που θα είναι παράλληλη στον άξονα z (κάθετη στην επιφάνεια). Το μοντέλο αυτό προσομοιώνει αρκετά ικανοποιητικά την περίπτωση μιας δέσμης laser.

Στις καρτεσιανές συντεταγμένες για τον προσδιορισμό της διεύθυνσης κίνησης είναι βολικό να χρησιμοποιούμε τα διευθύνοντα συνημίτονα (a_x, a_y, a_z) που υπολογίζονται βάση των σχέσεων (1.6.5). Τα διευθύνοντα συνημίτονα ενός διανύσματος δεν είναι τίποτα άλλο από τα συνημίτονα των γωνιών που σχηματίζει με τους τρεις άξονες (x, y, z) . Έτσι η μετατόπιση ενός σημείου κατά μήκος της διεύθυνσης ενός διανύσματος κατά βήμα s βρίσκεται πολύ εύκολα μέσω των διευθυνόντων συνημιτόνων του κάνοντας χρήση των σχέσεων (1.6.2).

Εφόσον όπως είπαμε και πιο πάνω όλα τα φωτόνια ξεκινούν παράλληλα με τον z άξονα, τα αρχικά διευθύνοντα συνημίτονα θα είναι $(a_x, a_y, a_z)_{i=1} = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1})$.

3.4. Υπολογισμός τροχιάς φωτονίων

Εφόσον έχουμε ορίσει τις οπτικές ιδιότητες του ιστού, τα όρια του και την αρχική θέση και κατεύθυνσή των φωτονίων, είμαστε έτοιμοι να εκτοξεύσουμε το πρώτο φωτόνιο και να παρακολουθήσουμε την τροχιά του μέσα σε αυτόν. Ακολουθώντας επεξηγούμε τα λογικά βήματα του αλγορίθμου βάσει του σχηματικού διαγράμματος που παραθέτουμε στην τελευταία σελίδα.

APXH: Η μέθοδος *Monte Carlo* είναι όπως είπαμε στατιστική. Αυτό σημαίνει πως το αποτέλεσμα της προσομοίωσης βελτιώνεται όσο περισσότερα φωτόνια χρησιμοποιήσουμε. Πρέπει όμως να λαμβάνεται υπόψη και το υπολογιστικό κόστος μιας προσομοίωσης, οπότε ανάλογα επιλέγεται και ο κατάλληλος αριθμός φωτονίων. Στην προσομοίωσή μας θα χρησιμοποιήσουμε αριθμό φωτονίων της τάξης $N \sim 10^4$. Ο αριθμός αυτός μπορεί να μοιάζει μεγάλος αλλά δεν είναι, αν αναλογιστεί κανείς πως μία λάμπα πυρακτώσεως $100W$ εκπέμπει χονδρικά 10^{20} φωτόνια το δευτερόλεπτο. Δεδομένου όμως ότι αυτή η άσκηση έχει εκπαιδευτικό χαρακτήρα, ο αριθμός 10^4 είναι ικανοποιητικός.

Επειδή η διαδικασία υπολογισμού της τροχιάς είναι η ίδια για όλα τα φωτόνια, είτε πρόκειται για το πρώτο είτε για το τελευταίο, από εδώ και στο εξής θα αναφερόμαστε σε ένα τυχαίο φωτόνιο, έστω το j . Ο δείκτης i θα αναφέρεται στο τρέχον βήμα της τροχιάς του j -φωτονίου. Οι αρχικές του συνθήκες στο σημείο εκκίνησης ($i = 1$) θα δίνονται από την συνάρτηση της πηγής, και σύμφωνα με αυτά που είπαμε στην *Παράγραφο 3.3*, θα είναι οι ίδιες για όλα τα φωτόνια:

$$(x,y,z)_{i=1} = (0,0,0) \text{ και } (a_x,a_y,a_z)_{i=1} = (0,0,1).$$

1) Επιλογή βήματος μετατόπισης j -φωτονίου: Όπως είπαμε και στην *Παράγραφο 2.3*, η μέση ελεύθερη διαδρομή $\langle s \rangle$ μέχρι το j -φωτόνιο να απομακρυνθεί από την δέσμη λόγω σκέδασης ή απορρόφησης, ισούται με το αντίστροφο του ολικού συντελεστή εξασθένησης: $\langle s \rangle = 1/\mu_t$. Θεωρητικά το s μπορεί να λάβει οποιαδήποτε τιμή από το $-\infty$ έως το $+\infty$, ωστόσο όλες οι τιμές δεν είναι εξίσου πιθανές αλλά ακολουθούν την εξής κατανομή πιθανότητας:

$$p(s) = \mu_t \cdot \exp(-\mu_t \cdot s)$$

Η δειγματοληψία αυτής της κατανομής μπορεί να γίνει με την χρήση των τυχαίων αριθμών RND σύμφωνα με την σχέση:

$$s = \frac{-\ln(1 - RND)}{\mu_t} \quad (1.6.1)$$

2) Μετακίνηση j -φωτονίου: Η τροχιά του j -φωτονίου υπολογίζεται βήμα-βήμα ακολουθώντας μία επαναληπτική διαδικασία (*loop*) στο πρόγραμμα. Η νέα θέση $(x,y,z)_i$ του φωτονίου στο βήμα i υπολογίζεται βάση της θέσης $(x,y,z)_{i-1}$, του βήματος s_{i-1} και των διευθυνόντων συνημίτονων $(a_x,a_y,a_z)_{i-1}$ του προηγούμενου βήματος $i - 1$, σύμφωνα με τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + a_{x,i-1} \cdot s_{i-1} \\ y_i &= y_{i-1} + a_{y,i-1} \cdot s_{i-1} \\ z_i &= z_{i-1} + a_{z,i-1} \cdot s_{i-1} \end{aligned} \quad (1.6.2)$$

3) Έλεγχος αν η νέα θέση είναι εντός ορίων του ιστού: Αφού το j -φωτόνιο μετακινηθεί, γίνεται έλεγχος αν η νέα θέση του βρίσκεται εντός των ορίων του ιστού ή όχι. Αν το φωτόνιο έχει εξέλθει από τον ιστό η πορεία του τερματίζεται και ο αλγόριθμος

προχωράει στο επόμενο φωτόνιο ($j = j + 1$). Αν το τερματισμένο φωτόνιο ήταν το τελευταίο ($j = N$), τότε ο αλγόριθμος φτάνει στο τέλος του. Οι συντεταγμένες $(x,y,z)_i$ του τερματισμένου φωτονίου αποθηκεύονται σε έναν πίνακα.

4) Κριτήριο απορρόφησης j -φωτονίου: Αν το j -φωτόνιο δεν έχει βγει εκτός ορίων του ιστού, τότε πρέπει να αποφασίσουμε αν θα απορροφηθεί ή όχι. Η πρώτη λογική σκέψη είναι να οριστεί μία πιθανότητα απορρόφησης του φωτονίου, η οποία προφανώς θα εξαρτάται από τον συντελεστή απορρόφησης μ_a .

Η πιθανότητα λοιπόν να απορροφηθεί το φωτόνιο ορίζεται ίση με $P_{\text{absorb}} = \mu_a / (\mu_a + \mu_s)$ και είναι προφανώς ≤ 1 . Έτσι αν ο τυχαίος αριθμός RND συμπίσει στο παράθυρο που ορίζει η παραπάνω πιθανότητα, θα έχουμε γεγονός απορρόφησης, ειδικά θα προχωρούμε σε σκέδαση του φωτονίου.

Εκτός από αυτή την ‘ντετερμενιστική’ αντιμετώπιση χρησιμοποιείται και μια πιο ‘στοχαστική’, όπου τα φωτόνια θεωρούνται σαν ‘ενεργειακά πακέτα’, η αρχική ενέργεια W των οποίων θα λαμβάνει οποιαδήποτε τιμή μεταξύ $[0,1]$. Σε κάθε βήμα θα αφαιρείται ένα ποσοστό $\Delta W_i = \frac{\mu_a}{(\mu_a + \mu_s)} W_{i-1}$ από την ενέργεια του φωτονίου και

όταν αυτή πέσει κάτω από ένα μικρό όριο που έχουμε ορίσει, το φωτόνιο θεωρείται απορροφημένο και η πορεία του σταματάει.

Εμείς θα προτιμήσουμε την πρώτη ‘ντετερμενιστική’ μέθοδο, καθώς είναι πιο εύκολα κατανοητή και εφαρμόσιμη.

Αν λοιπόν από το παραπάνω κριτήριο προκύψει απορρόφηση, τότε το φωτόνιο θεωρείται ‘απορροφημένο’ και η πορεία του τερματίζεται. Έτσι ο αλγόριθμος προχωρά στο επόμενο φωτόνιο, εκτός και αν το τερματισμένο φωτόνιο είναι το τελευταίο οπότε το πρόγραμμα φτάνει στο τέλος του. Οι συντεταγμένες $(x,y,z)_i$ του απορροφημένου φωτονίου αποθηκεύονται σε έναν πίνακα.

5) Σκέδαση j -φωτονίου: Αν j -φωτόνιο ‘επιβιώσει’ την απορρόφηση, τότε σκεδάζεται σε μια καινούρια κατεύθυνση. Το ζητούμενο εδώ είναι ο υπολογισμός της πολικής γωνίας θ και της αζιμουθιακής γωνίας ϕ μετά την σκέδαση. Όπως είπαμε και στην Παράγραφο 2.3, η συνάρτηση φάσης που χρησιμοποιούμε είναι η απλή *Henyey-Greenstein*. Η πιθανότητα το φωτόνιο να σκεδαστεί σε κάποια γωνία θ πρέπει να υπακούει στην Σχέση (1.3.1). Έτσι χρησιμοποιώντας την αρχή της αντίστροφης κατανομής όπως και πριν, βρίσκουμε πως η σχέση που θα συνδέει το συνημίτονο της γωνίας σκέδασης θ με τον τυχαίο αριθμό RND είναι η εξής:

$$\cos\theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1-g^2}{1-g+2g \cdot RND} \right)^2 \right] & \text{εάν } g \neq 0 \\ 1 - 2 \cdot RND & \text{εάν } g = 0 \end{cases} \quad (1.6.3)$$

Η αζιμουθιακή γωνία φ θεωρείται πως κατανέμεται ομοιόμορφα στο διάστημα $[0, 2\pi]$. Έτσι θα ισχύει:

$$\varphi = 2\pi \cdot RND \quad (1.6.4)$$

6) Υπολογισμός διευθυνόντων συνημιτόνων j -φωτονίου μετά την σκέδαση: Εφόσον το φωτόνιο σκεδάζεται η κατεύθυνση κίνησής του αλλάζει, οπότε αλλάζουν και τα διευθύνοντα συνημίτονά του. Τα νέα διευθύνοντα συνημίτονα $(a_x, a_y, a_z)_i$ στο βήμα i υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες τιμές του προηγούμενου βήματος και των γωνιών σκέδασης (φ, θ) , σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} a_{x,i} &= \frac{\sin\theta \cdot (a_{x,i-1} \cdot a_{z,i-1} \cdot \cos\varphi - a_{y,i-1} \cdot \sin\varphi)}{\sqrt{1 - a_{z,i-1}^2}} + a_{x,i-1} \cdot \cos\theta \\ a_{y,i} &= \frac{\sin\theta \cdot (a_{y,i-1} \cdot a_{z,i-1} \cdot \cos\varphi + a_{x,i-1} \cdot \sin\varphi)}{\sqrt{1 - a_{z,i-1}^2}} + a_{y,i-1} \cdot \cos\theta \\ a_{z,i} &= -\sqrt{1 - a_{z,i-1}^2} \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi + a_{z,i-1} \cdot \cos\theta \end{aligned} \quad (1.6.5)$$

Οι τιμές αυτές θα χρησιμοποιηθούν στο επόμενο βήμα $i = i + 1$ του j -φωτονίου. Γνωρίζοντας λοιπόν τις νέες τιμές των γωνιών $(\varphi, \theta)_i$ και των διευθυνόντων συνημιτόνων $(a_x, a_y, a_z)_i$ μετά την σκέδαση, μπορούμε να μετακινήσουμε το φωτόνιο για ένα ακόμα βήμα s_i επαναλαμβάνοντας τα βήματα (1) έως (6). Η διαδικασία (1) έως (6) θα επαναλαμβάνεται ωσότου το j -φωτόνιο είτε να βγει εκτός ορίων ιστού (βήμα (3)), είτε να απορροφηθεί (βήμα (4)). Μόλις κάποιο από αυτά συμβεί ο αλγόριθμος προχωρά στο επόμενο φωτόνιο μέχρι να εξαντληθεί ο αριθμός των φωτονίων που είχαμε ορίσει αρχικά ($j = N$).

Στην τελευταία σελίδα φαίνεται ένα σχηματικό διάγραμμα της ροής του αλγορίθμου *Monte Carlo* που μόλις περιγράψαμε.

4. ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

Έχοντας ολοκληρώσει την ρουτίνα MONTE_CARLO.m, μπορούμε πλέον να επεξεργαστούμε τα αποτελέσματα. Το πρόγραμμα παρέχει δυνατότητα οπτικοποίησης αλλά και εξαγωγής των δεδομένων. Ακολουθεί η πειραματική διαδικασία της άσκησης αυτής:

Σημείωση: Κατά την πραγματοποίηση της άσκησης θα σας μοιραστεί ειδικό φυλλάδιο με οδηγίες.

1. Μετρήστε τον συντελεστή απορρόφησης υγρού διαλύματος συγκέντρωσης C_1 κάνοντας το γράφημα $\ln(I/I_0) = f(d)$, όπου I/I_0 ο λόγος τελικής έντασης προς την αρχική και d το πάχος του δείγματος.
2. Μετρήστε τον συντελεστή απορρόφησης υγρού διαλύματος συγκέντρωσης C_2 με την ίδια μέθοδο και βρείτε την σχέση μεταξύ των συγκεντρώσεων C_1 και C_2 .
3. Μελετήστε την σκέδαση του φωτός σε στερεό βιολογικό ιστό.
4. Συγκρίνετε τις πειραματικές του συντελεστή απορρόφησης με τις θεωρητικές τιμές που σας δίνονται. Σχολιάστε τα αποτελέσματα που βρήκατε.
5. Απαντήστε στις ερωτήσεις του φυλλαδίου.

ΣΧΗΜΑΤΙΚΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ MONTE CARLO

