

Estudio del transporte de luz por medio del algoritmo de Metrópolis.

J. D. Mazo-Vásquez^{a,*}

^aInstituto de Física, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

ARTICLE INFO

Keywords:

Algoritmo de Metrópolis

Dispersión de fotones

Ley de Beer-Lambert-Bouger.

Resumen

Los métodos de Monte Carlo son de gran utilidad para el modelamiento de sistemas físicos y sociales. En este trabajo se presenta una introducción al método de Metrópolis aplicado a la propagación de partículas de luz en una capa semi-infinita de material, a través de la descripción del algoritmo y las consideraciones para la dispersión de dichas partículas en el material. Se analizaron la absorbancia, reflectancia difusa y transmitancia como funciones del ancho de la capa y de los parámetros del medio, además del patrón formado por las partículas al escapar del medio en función del parámetro de anisotropía. Los resultados concuerdan con los obtenidos por otros autores y con lo predicho por la ley de Beer-Lambert-Bouger bajo ciertas condiciones.

1. Introducción

Los métodos de Monte Carlo son una herramienta de vital utilidad para el modelamiento de fenómenos, tanto naturales como sociales. De gran importancia resulta ser el algoritmo de Metrópolis para implementar generación de eventos aleatorios de acuerdo a diferentes distribuciones de probabilidad. Entre una de las aplicaciones se destaca el método para simular la propagación de luz en medios ópticos, estudiado inicialmente por Jacques y Wang [1] para analizar la interacción entre láseres y tejidos orgánicos. Esta implementación del algoritmo de Metrópolis aplicado a la electrodinámica y la ciencia de materiales ha conllevado a considerables desarrollos en diferentes campos, desde la espectroscopia en el infrarrojo cercano (*Near Infrared Spectroscopy* - NIRS) para el estudio de materiales multicapas y tejidos inhomogéneos [2, 3], hasta en el campo de la medicina para detección de enfermedades vasculares [4] y la identificación de lesiones cutáneas y pigmentos en la piel [5].

El método para simular la propagación de luz consiste en una serie de reglas para determinar el movimiento de las partículas de luz en el medio, las cuales se expresan como distribuciones de probabilidad para la determinación del paso y la dirección de dispersión, además de la probabilidad de que los fotones sean absorbidos. En estos procesos las partículas se asumen de naturaleza corpuscular y no ondulatoria, por lo que se ignoran los efectos cuánticos. Por otro lado, el método puede adaptarse para tener en cuenta los efectos de polarización de la luz, o diferentes geometrías que comprendan distintas fuentes de luz, entre otros factores [6].

Este trabajo tiene como objetivo describir el método de Metrópolis aplicado al transporte de fotones en una capa óptica y el análisis de las variables físicas resultantes del proceso, además tiene la intención de discutir algunos resultados asociados al cálculo de los coeficientes de transmitancia, absorbancia y reflectancia difusa y la comparación con el valor predicho por la ley de Beer-Lambert-Bouger. El algoritmo

descrito en este proyecto tiene algunas variaciones respecto a los discutidos en las referencias [1, 6], especialmente en lo relacionado con el proceso de absorción. Este documento se organiza de la siguiente manera: en la sección 2 se describe el método y las principales consideraciones para la simulación, posteriormente en la sección 3 se muestran y discuten los resultados obtenidos al realizar la simulación. Finalmente, en la sección 4 se presentan las conclusiones.

2. Marco teórico y descripción del método

Consideramos una capa de material de ancho d con un coeficiente de atenuación lineal σ_t tal que $\sigma_t = \sigma_a + \sigma_s$ donde σ_a y σ_s son los coeficientes lineales de absorción y dispersión, respectivamente. Al hacer incidir un haz de fotones perpendicularmente sobre el medio, dichas partículas interactúan con los electrones presentes en los átomos de la red cristalina del material y sufren procesos de dispersión o absorción. Definiendo la transmitancia T , la reflectancia difusa R y la absorbancia A como el cociente entre el número de fotones que son transmitidos, reflejado a la superficie de incidencia o absorbidos, respectivamente, se puede entonces caracterizar el comportamiento del medio y sus propiedades ópticas, entre las cuales se destaca la ley de Beer-Lambert-Bouger [7] que relaciona el coeficiente de transmitancia T y el ancho de la capa como

$$T = e^{-\sigma_a d}. \quad (1)$$

Para simular el proceso de propagación de un fotón en el medio, se hace incidir una de estas partículas desde el origen de coordenadas con una dirección de propagación inicial dada por el vector unitario $\vec{v} = (0, 0, 1)$, con el cual se supone que el fotón seguirá una trayectoria a lo largo de la dirección \hat{z} hasta atravesar el medio; al incidir sobre el medio, esta partícula será dispersada hacia el interior, será absorbida o será dispersada al medio desde el cual incidió. Como el proceso de dispersión es aleatorio, primero se determina la distancia será lanzado mediante la expresión

$$\lambda = -\frac{\ln(\rho)}{\sigma_t}, \quad (2)$$

*Correo electrónico

juan.mazov@udea.edu.co (J.D. Mazo-Vásquez)

ORCID(s): 0000-0002-8561-6036 (J.D. Mazo-Vásquez)

donde ρ es un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo $(0, 1]$ [6], garantizando así que, para un valor de ρ , la distancia de a la cual será dispersado el fotón es menor si la probabilidad de interacción por unidad de longitud σ_t aumenta. De acuerdo al valor obtenido para λ se define la longitud de frontera d_{bound} para determinar si el fotón saldrá del medio por alguna de las fronteras, concretamente

$$d_{bound} = \begin{cases} \frac{d-z}{v_z} & \text{si } v_z > 0 \\ \frac{-z}{v_z} & \text{si } v_z < 0 \end{cases}, \quad (3)$$

en el caso en que $\lambda > d_{bound}$ el fotón escapa del medio, si $v_z > 0$ contribuye al coeficiente de transmitancia, mientras que si $v_z < 0$ contribuye a la reflectancia difusa. Si $\lambda < d_{bound}$ podría suceder que la energía del fotón coincida con la diferencia entre dos niveles energéticos de un electrón de la red cristalina y por tanto sea absorbido. Para efectos de la simulación, teniendo en cuenta el algoritmo de Metrópolis, el proceso de absorción ocurre con una probabilidad τ , de modo que si $\tau < \sigma_a/\sigma_t$, entonces el fotón es absorbido y, en el caso contrario, esta partícula puede continuar propagándose. En caso de que el fotón continúe su trayectoria en el medio, es decir que es dispersado, la dirección de propagación se obtiene como el producto de una rotación en un ángulo θ respecto a la dirección original y una rotación en un ángulo azimutal ϕ , tal como se observa en la figura 1. El coseno del ángulo $\theta \in [0, \pi]$ se obtiene haciendo uso de la función de dispersión de Henyey-Greenstein [8]

$$\cos(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1-g^2}{1-2g\xi} \right)^2 \right] & \text{si } g \neq 0 \\ 2\xi - 1 & \text{si } g = 0 \end{cases}, \quad (4)$$

donde g es el factor de anisotropía tal que, $g = 0.0$ indica dispersión isotrópica y $g = 1.0$ indica que no hay desviación en la dirección de propagación. Esta función se usa para modelar la dispersión de la luz debido a la presencia de partículas pequeñas (como las nubes de polvo interestelar, por ejemplo [8]). La fórmula de Henyey-Greenstein requiere la generación de un número aleatorio $\xi \in [0, 1)$, con lo cual se le añade la componente de aleatoriedad al ángulo de dispersión. El ángulo de desviación azimutal ϕ se obtiene como un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $[0, 2\pi)$. La nueva dirección de propagación \vec{v}_{rot} se calcula como la rotación del vector \vec{v} al rededor de un vector \vec{k} determinado como una combinación lineal de los vectores ortonormales $\vec{w}_1 = (1 - v_z^2)^{-1/2}(-v_y, v_x, 0)$ y $\vec{w}_2 = (1 - v_z^2)^{-1/2}(v_x v_z, v_y v_z, v_z - 1)$, los cuales general el plano perpendicular a \vec{v} (ver figura 1). A partir de la fórmula de rotación de un vector \vec{v} al rededor de otro vector \vec{k} [9]

$$\vec{v}_{rot} = \vec{v} \cos(\theta) + \sin(\theta) (\vec{k} \times \vec{v}) + \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{v}), \quad (5)$$

se obtienen las componentes del vector \vec{v}_{rot} como

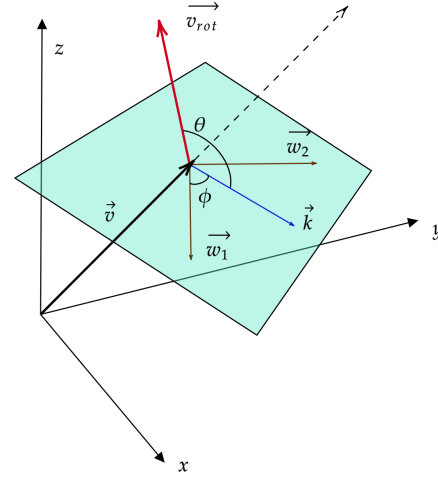


Figura 1: Esquema de la rotación en la dirección de dispersión del fotón. El vector \vec{v} es rotado en un ángulo θ respecto a un vector \vec{k} en el plano perpendicular a \vec{v} . El vector \vec{k} resulta ser una combinación lineal de los vectores ortonormales \vec{w}_1 y \vec{w}_2 generadores del plano.

$$\begin{aligned} v_{rot,x} &= v_x \cos(\theta) + \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{1 - v_z^2}} [v_x v_z \cos(\phi) + v_y \sin(\phi)], \\ v_{rot,y} &= v_y \cos(\theta) + \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{1 - v_z^2}} [v_y v_z \cos(\phi) - v_x \sin(\phi)], \\ v_{rot,z} &= v_z \cos(\theta) + \sin(\theta) \cos(\phi) \sqrt{1 - v_z^2}. \end{aligned}$$

Luego del proceso de dispersión, la posición de los fotones se actualiza como

$$\vec{r} = \vec{r} + \vec{v}_{rot} (\vec{v}_{rot} \cdot \vec{r}),$$

de esta manera, el método anteriormente descrito se realiza para cada partícula tantas veces como sea necesario mientras que cada una de estas se propaga dentro del medio sin ser absorbidas. Una representación gráfica del proceso de propagación del haz de fotones se presenta en la figura 2, se ilustra también una representación del patrón formado por los fotones al ser transmitidos; en la sección de resultados se analiza la dispersión de dicho patrón. Los coeficientes de reflectancia difusa, transmitancia y absorbancia, se calculan como el número de fotones que fueron dispersados por la frontera de incidencia, transmitidos o absorbidos, respectivamente, dividido por el número total de fotones incidentes N_v .

3. Resultados y discusión

A partir del método descrito en la sección anterior se realizaron varias simulaciones para comprobar si con el método se obtienen resultados que concuerdan con las observaciones físicas. En primer lugar se compararon los resultados con el método descrito en relación con los obtenidos por H. C. van de Hulst [10], observándose que el error relativo en todos los casos es menor a 1%.

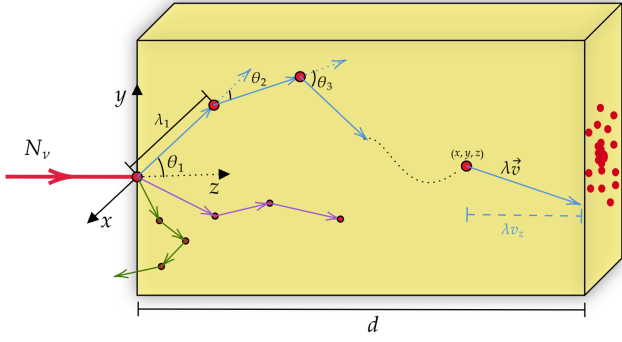


Figura 2: Representación gráfica de los distintos procesos que ocurren en la simulación del transporte de fotones. Un haz de N_v fotones incide sobre una capa de material semi-infinito de espesor d . Luego de distintos procesos de dispersión, los fotones pueden regresar al medio original al cruzar la frontera de incidencia, atravesar el medio o ser absorbidos por un electrón.

	T	R	A
Resultado	0.66178	0.09715	0.24106
C. H. van de Hulst	0.66096	0.09739	0.24165
% Error relativo	0.124	0.245	0.244

Cuadro 1

Comparación de resultados obtenidos entre una 50 simulaciones con 10000 fotones cada una y los resultados obtenidos por van de Hulst [10] con los parámetros $d = 0.02$, $\sigma_a = 10.0$, $\sigma_s = 90.0$, $g = 0.75$.

Se analizó el comportamiento de la transmitancia en función del ancho de la capa, con el propósito de verificar si con el modelo da cuenta de lo predicho por la ley de Beer-Lambert-Bouguer. Los resultados que se presentan en la figura 3 se realizaron para un total de 10000 fotones, $g = 0.75$ y dos posibles valores para σ_s (0.0 o 5.0), la figura 3(a) para $\sigma_a = 0.8$ y 3(b) para $\sigma_a = 1.5$. Las líneas continuas corresponden al valor obtenido para la transmitancia a través de la ley de Beer-Lambert-Bouguer. Se puede notar que cuando el coeficiente de dispersión es nulo, el valor de la transmitancia concuerda con la predicción teórica, sin embargo, cuando $\sigma_s \neq 0$, la transmitancia decae más rápidamente como consecuencia de los efectos de la dispersión de fotones. Adicionalmente, cuando el coeficiente de absorción σ_a se hace más grande, se observa que la transmitancia se hace menor, debido a que, como fue descrito en el método, los fotones tienen mayor probabilidad de ser absorbidos en el proceso de propagación. Los resultados obtenidos muestran que, cuando se consideran los efectos de dispersión, los valores de transmitancia no se ajustan a la ley de Beer-Lambert-Bouguer, como consecuencia de la aparición de reflectancia difusa. El hecho de que los fotones tengan la posibilidad de ser dispersados hacia el medio desde el cual inciden conlleva a desviaciones a la ley teórica que no pueden ser removidas analíticamente [7].

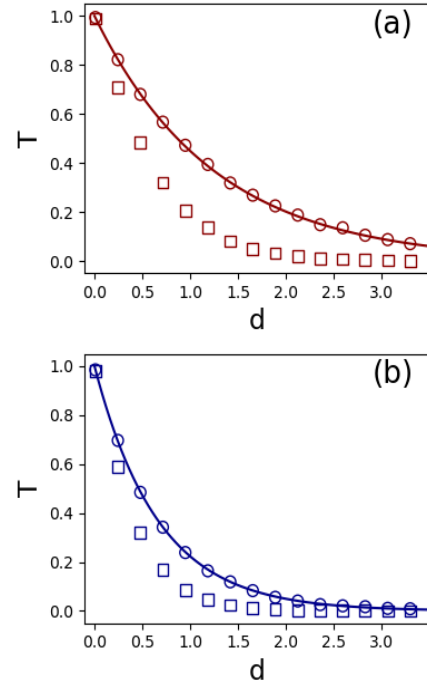


Figura 3: Transmitancia T como función del ancho de la capa óptica con $g = 0.75$, $N_v = 10000$. Líneas continuas corresponden al valor predicho por la ley de Beer-Lambert-Bouguer. Círculos y cuadros representan los resultados de la simulación para $\sigma_s = 0.0$ y $\sigma_s = 5.0$, respectivamente. Figura (a) para $\sigma_a = 0.8$, (b) $\sigma_a = 1.5$.

Resultados para absorbancia y reflectancia difusa en función del ancho del medio se presentan en la figura 5 para $g = 0.75$, $N_v = 10000$ y distintos valores para σ_s . De las figuras 5(a) y 5(b) se encuentra que la absorbancia es una función creciente respecto al ancho de la capa; cuando $\sigma_s = 0.0$ la condición para que haya absorción se reduce a $\tau < 1$, lo cual siempre sucede, de modo que, a menos que los fotones sean transmitidos o dispersados por la frontera inicial en la primera iteración, estos serán absorbidos. Así, mientras mayor es el espesor del medio, es menos probable que las partículas puedan escapar en la primera iteración y por tanto serán absorbidas. Esto explica también el comportamiento de la reflectancia difusa (ver figuras 5(c) y 5(d)) cuando se desprecia la dispersión, en tales casos R tiende a cero sin importar el ancho de la capa. El valor de la reflectancia difusa presenta ciertas variaciones cuando $\sigma_s \neq 0.0$, tendiendo a determinado valor dependiente de σ_a cuando d se hace más grande. La reflectancia difusa se debe a que, cuando solo hay efectos de absorción, los fotones tienen la posibilidad de la dispersión hacia atrás (*backward scattering*), originada por la isotropía del medio, que causa que el ángulo θ tome valores en el intervalo $[0, \pi]$.

Para entender el efecto de la isotropía del medio se analizaron los resultados de los patrones formados por los fotones en el plano xy al atravesar el medio. La figura 4 presenta el patrón anteriormente descrito y los histogramas correspondientes a la dispersión de partículas a lo largo de la dirección \hat{x} para tres valores del parámetro g . Se puede observar que el

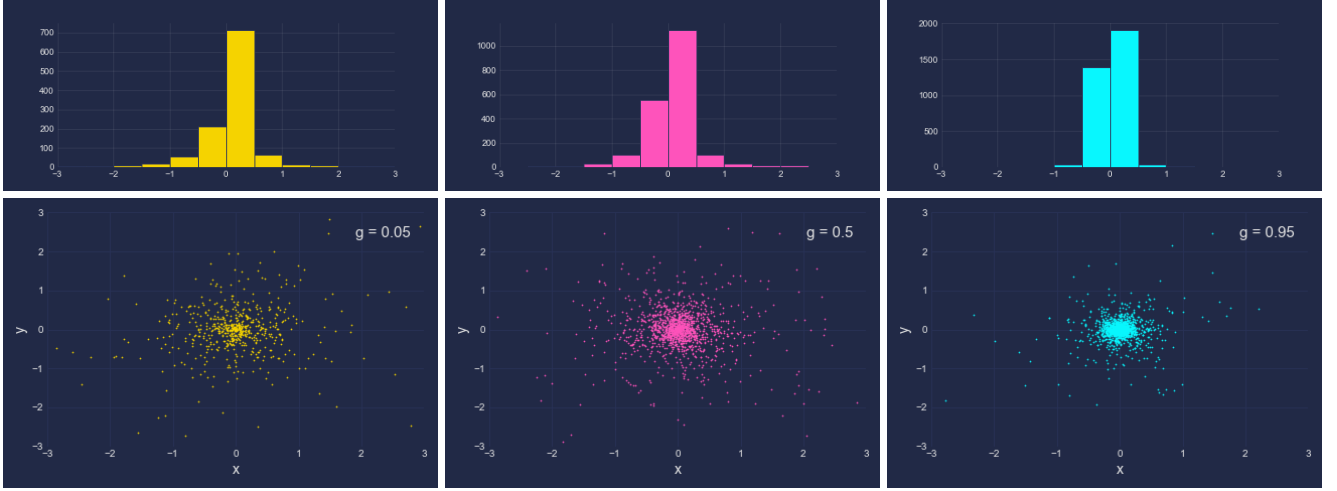


Figura 4: Patrones formados por los fotones que logran transmitirse luego de atravesar el medio óptico para distintos valores del parámetro g . Se ha incluido un histograma con 16 bins en el rango de $[-4, 4]$ para analizar la distribución espacial en la dirección \hat{x} . Los cálculos se realizaron con $N_v = 10000$, $\sigma_a = 1.0$, $\sigma_s = 2.0$.

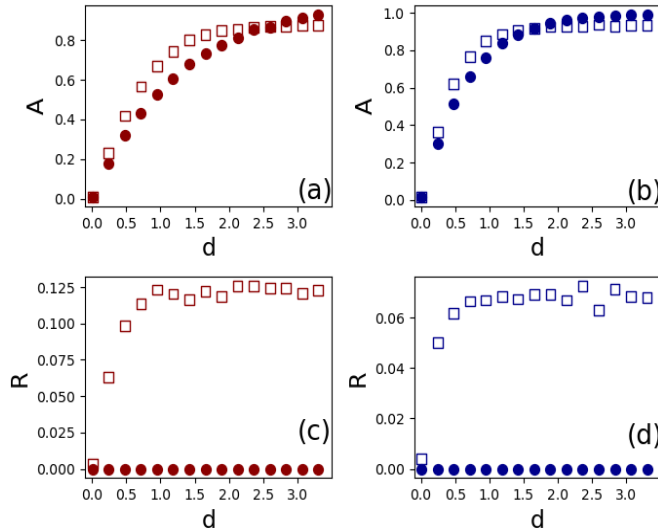


Figura 5: Absorbancia A y reflectancia difusa R transmisión como función del ancho de la capa óptica con $g = 0.75$, $N_v = 10000$. Círculos y cuadros representan los resultados de la simulación para $\sigma_s = 0.0$ y $\sigma_s = 5.0$, respectivamente. Figuras [(a), (c)] para $\sigma_a = 0.8$, [(b), (d)] $\sigma_a = 1.5$.

número de fotones que son transmitidos disminuye cuando aumenta la isotropía del medio, es decir, cuando $g \rightarrow 0$. Este hecho es una consecuencia directa de que, si el medio es más isotrópico, la trayectoria media de las partículas es mayor antes de escapar y, por tanto, experimentan más procesos de dispersión que pueden terminar en absorción o reflectancia difusa. Los histogramas presentados en la figura 4 fueron realizados con 16 bins en el rango $[-4, 4]$, y muestran que la mayoría de las partículas que atraviesan el medio quedan localizadas cerca del punto $(0, 0, d)$, como si en promedio los procesos de dispersión fuesen realizados con $g = 1.0$.

4. Conclusiones

En conclusión, utilizando el algoritmo de Metrópolis y, considerando la fórmula de dispersión de Henyey-Greenstein, se simuló el transporte de fotones en un medio semi-infinito con determinado espesor. Los resultados obtenidos mediante el método aquí descrito concuerdan con los obtenidos por H. C. van de Hulst [10] con un error relativo menor al 1 %. Se encontró que, si se desprecian los efectos de la probabilidad de dispersión por unidad de longitud, la transmitancia como función del ancho del medio concuerda con la ley de Beer-Lambert-Bouger, además, se observó que el efecto de la reflectancia difusa conduce a las desviaciones en dicha ley.

La dispersión de las partículas que logran transmitirse se relaciona con la isotropía del medio; los resultados indican que la mayoría de los fotones terminan localizados cerca del punto $(0, 0, d)$, mostrando así que la dirección de incidencia de los fotones induce una dirección preferencial para la propagación.

Referencias

- [1] B. C. Wilson and G. Adam, *Medical Physics* **10**, 824 (1983).
- [2] *Computer Methods and Programs in Biomedicine* **47**, 131 (1995).
- [3] M. Hiraoka, M. Firbank, M. Essenpreis, M. Cope, S. R. Arridge, P. van der Zee, and D. T. Delpy, in *Photon Migration and Imaging in Random Media and Tissues*, Vol. 1888, edited by B. Chance and R. R. Alfano, International Society for Optics and Photonics (SPIE, 1993) pp. 149 – 159.
- [4] W. Liu, W. Chen, X. Fang, Y. Li, and T. Li, *Journal of Biophotonics* **12**, e201900148 (2019).
- [5] D. Gareau, S. Jacques, and J. Krueger, in *Photonic Therapeutics and Diagnostics X*, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, Vol. 8926, edited by A. Mandelis, B. Choi, Brian, J. F. Wong, G. J. Tearney, H. W. Kang, J. F. Ilgner, K. W. Gregory, N. Kollias, H. Zeng, and L. Marcu (2014) p. 89260V.
- [6] S. L. Jacques and L. Wang, “Monte carlo modeling of light transport in tissues,” in *Optical-Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue*,

edited by A. J. Welch and M. J. C. Van Gemert (Springer US, 1995)
pp. 73–100.

- [7] T. G. Mayeröhfer, S. Pahlow, and J. Popp, *ChemPhysChem* **21**, 2029 (2020).
- [8] L. C. Henyey and J. Greenstein, *The Astrophysical Journal* **93**, 70 (1940).
- [9] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, 1980).
- [10] H. C. van de Hulst, *Multiple Light Scattering* (Academic Press, 1980).