

Método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo es un método numérico que permite resolver problemas físicos y matemáticos que son complejos de evaluar con exactitud, mediante la simulación de variables aleatorias. El método fue llamado así por su analogía con los juegos de ruleta de los casinos, sobre todo el del Principado de Monte Carlo, ya que la ruleta es un generador simple de números aleatorios.

La importancia actual del método Montecarlo se basa en la existencia de problemas que tienen difícil solución por métodos exclusivamente analíticos o numéricos, pero que dependen de factores aleatorios o se pueden asociar a un modelo probabilística artificial (resolución de integrales de muchas variables, minimización de funciones, etc.). Gracias al desarrollo de las computadoras y su aumento en la velocidad de procesamiento las simulaciones de Monte Carlo permiten resolver problemas cada día más complejos y con menor error. En estos métodos el error aproximadamente $N^{-1/2}$, donde N es el número de pruebas y, por tanto, ganar una cifra decimal en la precisión implica aumentar N en 100 veces. La base es la generación de números aleatorios de los que nos serviremos para calcular probabilidades. El aplicar un buen generador de estos números así como un conjunto estadístico adecuado sobre el que trabajar son las primeras dificultades que se presentan a la hora de utilizar este método.

Ejemplo

Una aplicación inmediata del método, es el cálculo de las integrales definidas de curvas muy complejas.

Si se considera un caso muy sencillo:

$$\int_0^1 x^2 dx$$

La curva es:

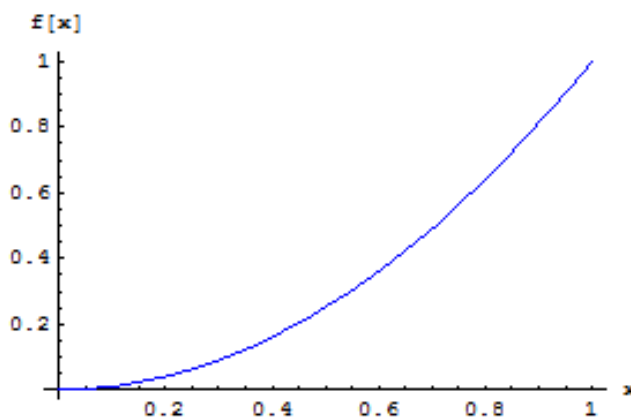


Figura 1. Curva descrita por la función $f(x) = x^2$

En general se considera que el área se encuentra inscrita en un cuadrado de área $A=1$. Podremos considerar en el cuadrado de área 1 un número N de puntos aleatorios (x, y) , y un número N' que aparecen dentro de la superficie a determinar.

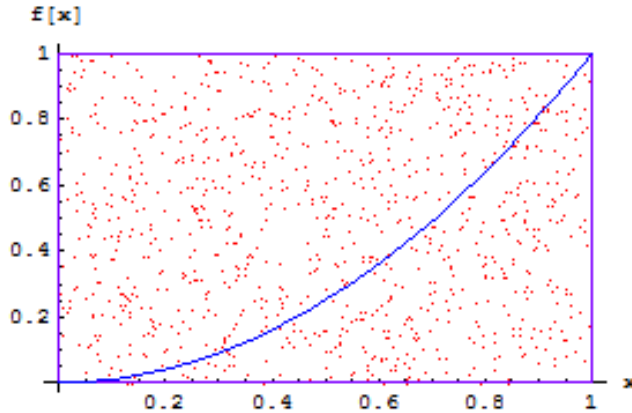


Figura 2. Generación de N puntos aleatorios para el cálculo del área bajo la curva.

Para obtener el valor bajo la curva: $\frac{N'}{N} = \frac{S}{A}$

Donde S es el área bajo la curva.

Precisión en el cálculo

El procedimiento tiene N puntos aleatorios de los que N' resultan corresponder al área que se desea calcular.

$$S = A \cdot \frac{N'}{N}$$

Luego S es proporcional a la probabilidad de que un punto aleatorio caiga en la superficie. Se estima esa probabilidad como:

$$\hat{p} = \frac{N'}{N}$$

Que será la probabilidad de N' éxitos en N intentos y que viene dada por la distribución binomial:

$$P(N' \text{ aciertos en } N) = \binom{N}{N'} \cdot p^{N'} \cdot q^{N-N'}$$

La distribución binomial se puede aproximar mediante una normal cuando $N \cdot p > 5$ y $N \cdot q > 5$.

La distribución normal por la que se aproxima tendrá una media $\mu = N \cdot p$ y una varianza $\sigma^2 = N \cdot p \cdot q$.

Además para una distribución normal $N(\mu, \sigma^2)$ y se sabe que con esta distribución, el 95% de las observaciones se encuentran en el intervalo:

$$(\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma)$$

Con lo que suponiendo $N \cdot p > 5$ y $N \cdot q > 5$ se tiene que el intervalo de confianza al 95% del número de aciertos N' en S estará:

$$(N \cdot p - 2\sqrt{N \cdot p \cdot q}, N \cdot p + 2\sqrt{N \cdot p \cdot q})$$

Tamaño de la simulación

En el ejemplo se sabe que:

$$\int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3} = 0.333\dots$$

y se calcula el área bajo la curva mediante:

$$S = A \cdot \frac{N'}{N}$$

Por ejemplo si se requiere estimar S con 2 cifras significativas correctas, entonces en el intervalo.

$$S \in (0.3250, 0.3349)$$

Esto equivale a que el número de aciertos N' con un 95% de confianza:

$$N' \in (x_i, x_d) = (0.3250 \cdot N, 0.3349 \cdot N)$$

Y si la distribución normal se ha aproximado mediante una normal:

$$B(N, p) \approx N(\mu, \sigma^2)$$

Para una variable aleatoria $Z \equiv N(0,1)$, tenemos que:

$$\Phi(z_d) = P(Z \leq z_d) = 0.975$$

$$z_d = 1.96 \approx 2$$

entonces tendremos que siendo $p = \frac{1}{3}$:

$$z_d = 1.96 = \frac{x_d - \mu}{\sigma} = \frac{0.3349 \cdot N - N \cdot p}{\sqrt{N \cdot p \cdot q}}$$

$$N = 347813 \text{ simulacioness}$$

Es importante observar que como se menciona, para obtener el valor bajo la curva en general se considera que el área se encuentra inscrita en un cuadrado de área 1, por tanto:

Sea la integral definida en un intervalo $[a, b]$ de $\int_a^b f(x) dx$, siendo $f(x)$ una función de integración muy compleja, entonces se efectúa el siguiente cambio de variable $y = \frac{x-a}{b-a}$, $dx = dy(b-a)$ y se sustituye en la función a integrar definida $\int_a^b f(x) dx$ quedando una función a integrar definida en un intervalo $[0, 1]$ de la forma $\int_0^1 h(y) dy$ con $h(y) = f(y(b-a) + a)(b-a)$.

Se generan las variables aleatorias u_i , n veces que se quiera, todos en un intervalo $[0, 1]$ que se sustituyen en la ecuación:

$$\frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(u_i(b-a) + a) \approx \int_a^b f(x) dx$$

Por supuesto la aproximación mejorará mientras N sea más grande. Sin embargo, es posible realizar la integración sin que se requiera considerar que el área se encuentra inscrita en el cuadrado de área 1.

Otro ejemplo:

Considerar la función $f(x) = x(1-x)(\sin(100x(1-x)))^2$ y se desea sacar el área bajo esta curva en el intervalo de $x \in [0, 1]$. La gráfica de la curva es la siguiente:

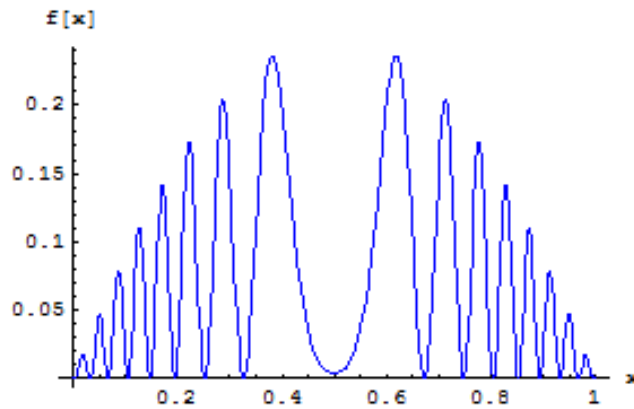


Figura 3. Gráfica de la curva descrita por la función $f(x) = x(1-x)(\text{sen}(100x(1-x)))^2$.

Se generan $N = 1000$ puntos aleatorios en un área de valor $A = 0.2356$. La gráfica de la simulación es la siguiente:

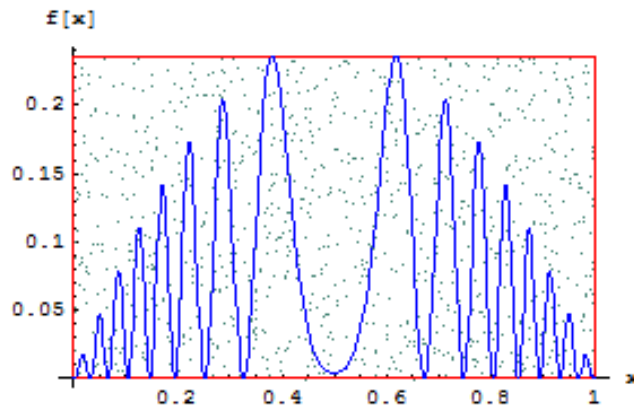


Figura 4. Generación de 1000 puntos aleatorios para el cálculo del área bajo la curva.

El número total de puntos que están bajo la curva es $N' = 299$, por tanto el valor del área estimada es:

$$S = A \frac{N'}{N} = 0.2356 \left(\frac{299}{1000} \right) = 0.07044$$

El valor de la integral calculada analíticamente es de 0.07544.

Utilizando $N=5,000$ puntos aleatorios generados, se obtiene $N'=1550$, una estimación de 0.07304. Utilizando $N=10,000$ puntos aleatorios generados, se obtiene $N'=3245$, una estimación de 0.07645. Utilizando $N=100,000$ puntos aleatorios generados, se obtiene $N'=3245$, una estimación de 0.07596.

Aplicación del método de Monte Carlo en las simulaciones del transporte de fotones en medios turbios.

Las simulaciones Monte Carlo pueden ser utilizadas tanto para aplicaciones de diagnóstico como terapéuticas. Por ejemplo la reflectancia difusa simulada puede ser utilizada para deducir las propiedades ópticas de los tejidos, mientras que la absorción de la energía óptica dentro de un tejido puede ser simulada para calcular la dosis de luz para la PDT, entre otras aplicaciones.

Las simulaciones requieren de ciertos parámetros de entrada, esto es las propiedades ópticas del tejido:

- Coeficiente de absorción (μ_a). El cual está descrito como el inverso de la distancia promedio que un fotón puede recorrer en el tejido antes de ser absorbido. Expresado por la densidad de partículas absorbentes contenidas en un volumen por la sección eficaz de absorción de las partículas.
- Coeficiente de esparcimiento(μ_s). El cual está descrito como el inverso de la distancia promedio que un fotón puede recorrer en el tejido antes de ser sufrir un evento de esparcimiento. Expresado por la densidad de partículas esparsivas contenidas en un volumen multiplicada por la sección eficaz de esparcimiento de las partículas.
- Coeficiente de anisotropía (g). Descrito como el coseno promedio del ángulo que forman las partículas al cambiar de dirección después de un evento de esparcimiento. Está definido en un intervalo de $[-1, 1]$, donde -1 es retro esparcimiento y 1 es esparcimiento hacia el frente, ambos anisotrópicos y 0 es un esparcimiento isotrópico.

Además de estas propiedades, se requiere conocer el índice de refracción del medio de donde se incide la luz y el del tejido, además del número de fotones que se van a simular. En general, se realizan simulaciones considerando medios con una sola capa, sin embargo para realizar una aproximación más exacta de lo que ocurre en los tejidos biológicos, se suele utilizar estas simulaciones en tejidos con múltiples capas, en donde se debe considerar las propiedades ópticas de cada una de las capas. En la figura 1, se muestra el diagrama de flujo básico del método.

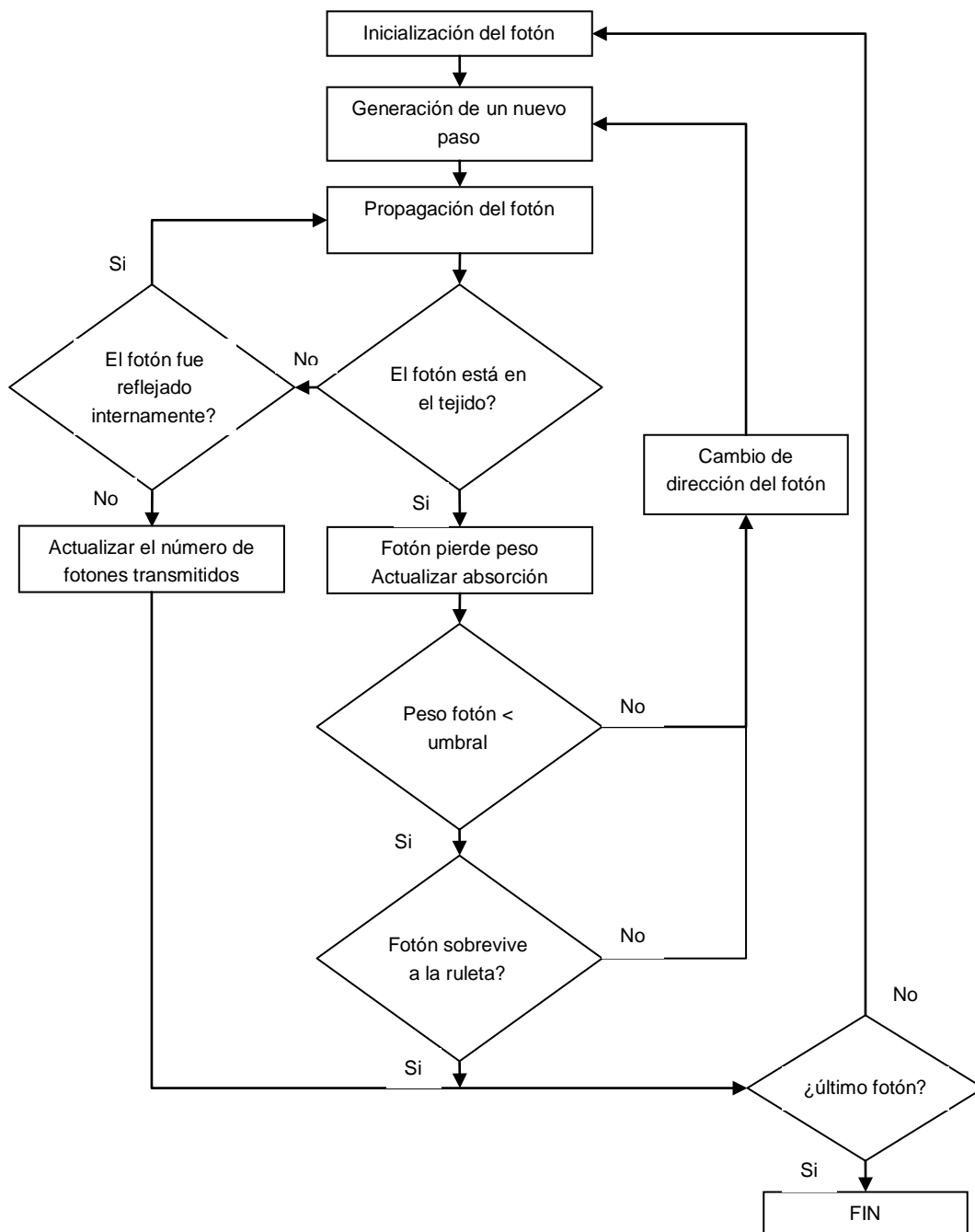


Figura 1. Diagrama de flujo del algoritmo general del método de Monte Carlo.

La técnica de Monte Carlo posee una gran flexibilidad para la resolución de problemas de transporte de fotones en medios turbios de cualquier albedo y función de esparcimiento. Se describe a continuación la idea de un programa básico del método de Monte Carlo para la propagación de fotones en un medio con ciertas propiedades ópticas.

Monte Carlo simple (mc321)

La idea básica del método, es que los fotones son lanzados de una fuente a un medio seminfinito sin fronteras (esto es seminfinito sobre el plano de incidencia y no sobre el eje de incidencia); este medio tiene ciertas propiedades ópticas que describen las interacciones de los fotones en el medio para obtener la distribución del ritmo de fluencia. El programa inicia lanzando N fotones a los que se asigna un valor inicial de 1, al cual se le llama "peso". Posteriormente, cada fotón tomará pasos entre las interacciones con el tejido los cuales están basados en la probabilidad del movimiento del fotón antes de que ocurra algún evento de absorción o esparcimiento. Durante cada paso que el fotón se propaga, depositará una fracción de su peso inicial en una posición definida por una malla que acumulará este peso de cada uno de los N fotones lanzados; la malla se define mediante un arreglo $A[ir]$, donde r es la distancia de la fuente e i es un índice para recorrer la malla. Después de que todos los fotones han sido propagados, cada $A[ir]$ contiene un peso acumulado de fotones absorbidos y así, dividiendo cada $A[ir]$ por el número total de fotones (N) y por el volumen de ese depósito particular ($V[ir]$) produce la concentración $C[ir]$ [cm^{-3}] de fotones absorbidos.

$$C[ir] = \frac{A[ir]}{NV[ir]}$$

Dividiendo $C[ir]$ por el coeficiente de absorción produce el ritmo de fluencia relativa $F[ir]$ [cm^{-2}].

$$F[ir] = \frac{C[ir]}{\mu_a}$$

Los arreglos están organizados en depósitos localizados como una función de la distancia r de la fuente descrita en tres geometrías: capas esférica $F_{\text{esf}}[ir]$, cilíndrica $F_{\text{cil}}[ir]$ y plana $F_{\text{pla}}[ir]$. En la figura 2 se muestra una idea de la forma en la que se considera el arreglo de la malla que contiene estos "depósitos" o "bins" en coordenadas cartesianas.

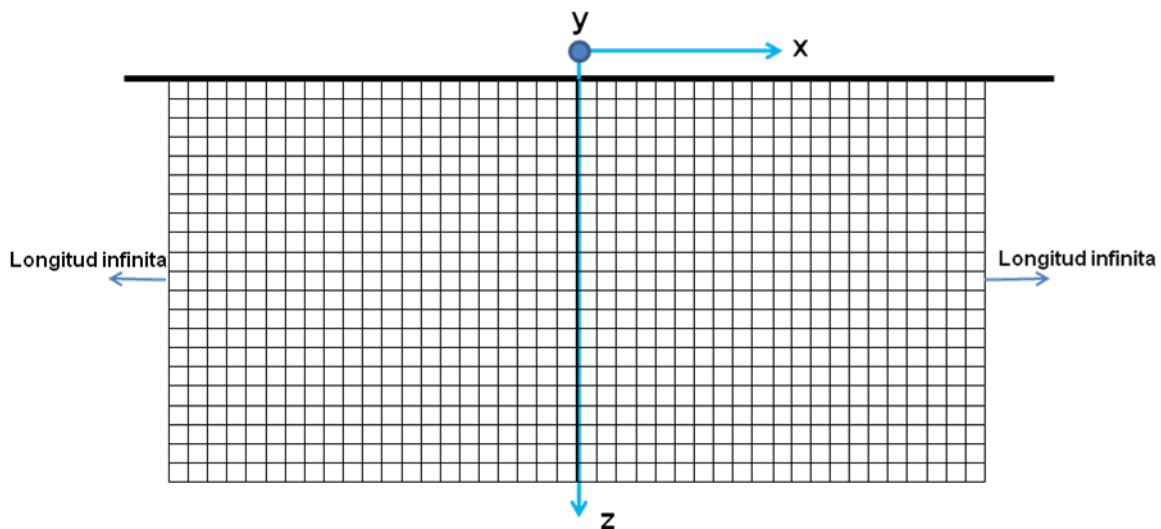


Figura 2. Descripción del tejido con la malla de "depósitos" o "bins" en coordenadas cartesianas.

La descripción de los arreglos en las coordenadas cilíndricas y esféricas en un poco más complicada, sin embargo es muy útil para observar la distribución del peso de los fotones absorbidos. Para el caso de los depósitos en coordenadas cilíndricas se puede observar la siguiente figura en la que se muestran las superficies coordenadas, esto es al fijar cada una de las coordenadas de un punto.

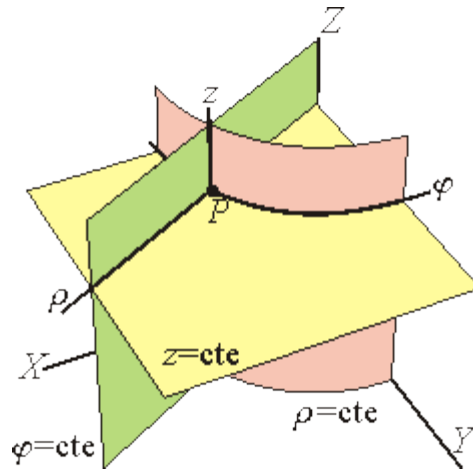


Figura 3. Superficies coordenadas para el sistema de coordenadas cilíndrico. Se puede observar que cuando se fija el radio se obtienen cilindros rectos verticales, al fijar el ángulo se obtiene semiplanos verticales y finalmente al fijar z se obtienen planos horizontales.

Para el caso de los depósitos en coordenadas cilíndricas se puede observar en la figura 4 como sería la distribución de las superficies coordenadas que forman la malla.

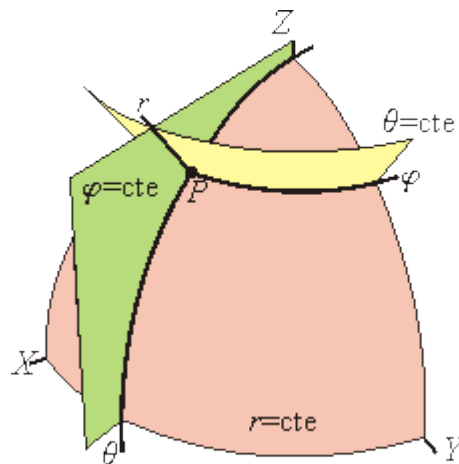


Figura 4. Superficies coordenadas para el sistema de coordenadas esféricas. Se puede observar que cuando se fija el radio se obtienen esferas con centro en el origen de las coordenadas, al fijar el ángulo polar se obtiene conos rectos con vértice en el origen y finalmente al fijar el ángulo acimutal se obtienen semiplanos verticales.

Lanzamiento de fotones

En cada lanzamiento de un nuevo fotón se incrementa el contador de fotones, se inicia el peso del fotón (W) en 1 y su estado se coloca como “vivo”. Después de que el programa determina que el fotón debe de ser terminado, el estado se coloca en “muerto”.

Cada fotón es lanzado en la posición (x,y,z) . La trayectoria inicial del fotón es descrita por el vector de trayectoria (u_x, u_y, u_z) , que cita la proyección de la trayectoria en las coordenadas x,y & z . En coordenadas esféricas, la trayectoria es descrita por el ángulo de deflexión respecto al eje z (θ) y el ángulo acimutal alrededor del eje z (ϕ).

Se pueden lanzar fotones de tres diferentes tipos de fuentes

Lanzamiento de fotones colimados

El lanzar fotones colimados involucra el colocar la trayectoria de los fotones en una sola dirección (puede ser el eje z) entrando al tejido en el origen. Para este caso, se tiene la trayectoria inicial de los fotones en una sola dirección, esto es, en un solo eje, por lo que, para el caso de incidencia paralela al eje z , el vector de trayectoria se inicia como $(0,0,1)$.

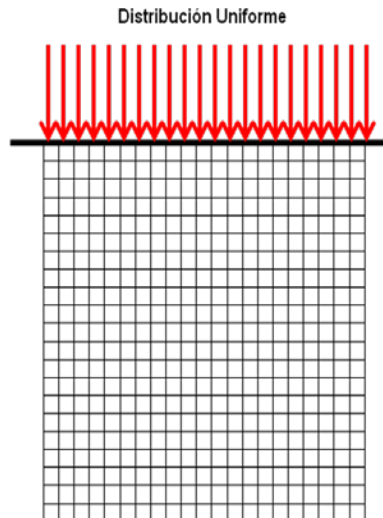


Figura 5. Distribución de los fotones al utilizar una fuente plana colimada de radio infinito.

Lanzamiento de una fuente puntual isotrópica

El lanzar fotones de una fuente puntual isotrópica, se requiere colocar esta fuente en un punto (x,y,z) ya sea dentro o fuera del tejido. Posteriormente se debe de asegurar que la distribución de los fotones sea uniforme de forma radial, esto es que los fotones salgan de la fuente en todas direcciones con la misma probabilidad. En la figura 6 se muestra la idea de esta fuente isotrópica.

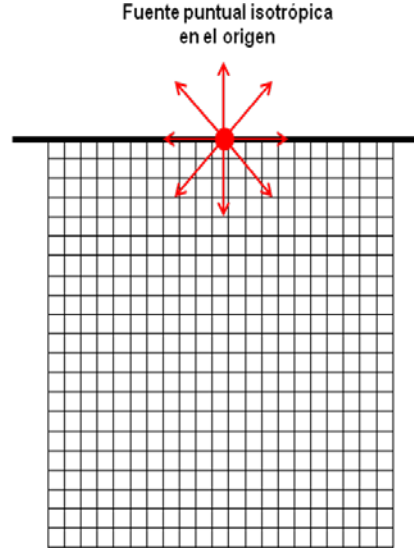


Figura 6. Distribución de los fotones al utilizar una fuente puntual isotrópica, en este caso colocada en el origen de las coordenadas cartesianas.

Para la fuente el valor inicial theta es colocado aleatoriamente al seleccionar un valor para $\cos(\theta)$, llamado $\cos\theta$ entre -1 y 1 (correspondiente a 180° y 0° con respecto al eje z).

$$\cos(\theta) = 2rnd - 1$$

El valor inicial ψ se coloca aleatoriamente entre 0 y 2π .

$$\psi = 2\pi rnd$$

El término $\sin\theta$ es una variable relacionada a $\cos\theta$, de la siguiente manera:

$$\sin(\theta) = \sin(1 - \cos^2(\theta))$$

Los valores $\cos\theta$, $\sin\theta$ y ψ son usados para proyectar el vector de trayectoria en los eje x, y, z para producir los valores ux , uy & uz . El vector de trayectoria (ux, uy, uz) tienen unidades de longitud.

$$ux = \sin(\theta) \cos(\psi)$$

$$uy = \sin(\theta) \sin(\psi)$$

$$uz = \cos(\theta)$$

Lanzamiento de un haz de radio finito

Cuando se considera lanzar un haz colimado de radio finito, la posición del lanzamiento de los fotones debe variar de una forma aleatoria para que se logre una distribución parcial uniforme de los fotones lanzados.

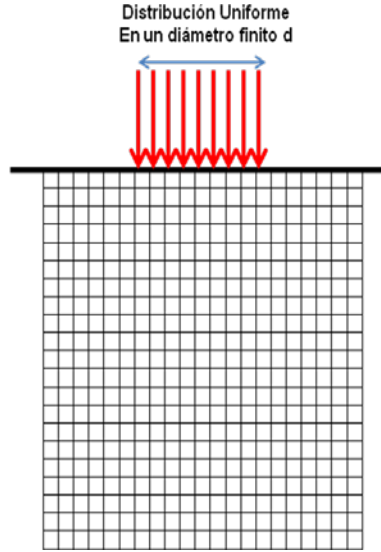


Figura 7. Distribución de los fotones al utilizar una fuente plana colimada de diámetro finito.

Considerando un haz de radio a , la probabilidad de lanzar un fotón en una posición radial r es $p(r)$:

$$p(r) = \frac{2\pi r}{\pi a^2} = \frac{2r}{a} \quad : \quad \int_0^a p(r) dr = 1$$

El método de Monte Carlo para seleccionar r de $p(r)$ utilizando un número aleatorio rnd , uniformemente distribuido entre 0 y 1 inclusive es:

$$rnd = \int_0^r p(r) dr = \frac{r^2}{a^2}$$

Reacomodando la ecuación anterior para resolver r en función de rnd . La expresión resultante permitiría la selección de la posición radial r para el lanzamiento de un fotón basándose en un número aleatorio rnd .

$$r = a\sqrt{rnd}$$

Los fotones serán lanzados uniformemente en el plano x - y dentro del radio a . Una vez seleccionada la magnitud radial r , se tiene que seleccionar el ángulo ϕ de tal forma que las coordenadas radiales (r, ϕ) definen el punto de lanzamiento. Entonces el ángulo ϕ será especificado por un segundo número aleatorio.

$$\varphi = 2\pi rnd$$

Con esto se selecciona las posiciones x & y utilizando las coordenadas radiales.

$$x = r \cos(\varphi)$$

$$y = r \sin(\varphi)$$

Por ejemplo, en la figura se observa la selección aleatoria de la posición para el lanzamiento de fotones de un haz circular uniforme de diámetro 1 mm (radio de 0.5 mm). El eje y es la irradiancia $E(r)$ [mm^{-2}] el cual es igual a $p(r)/(2\pi r) = 1/(\pi a^2) = 1.2732$. Cada uno de los puntos es la irradiancia que se observa en 0.01 mm.

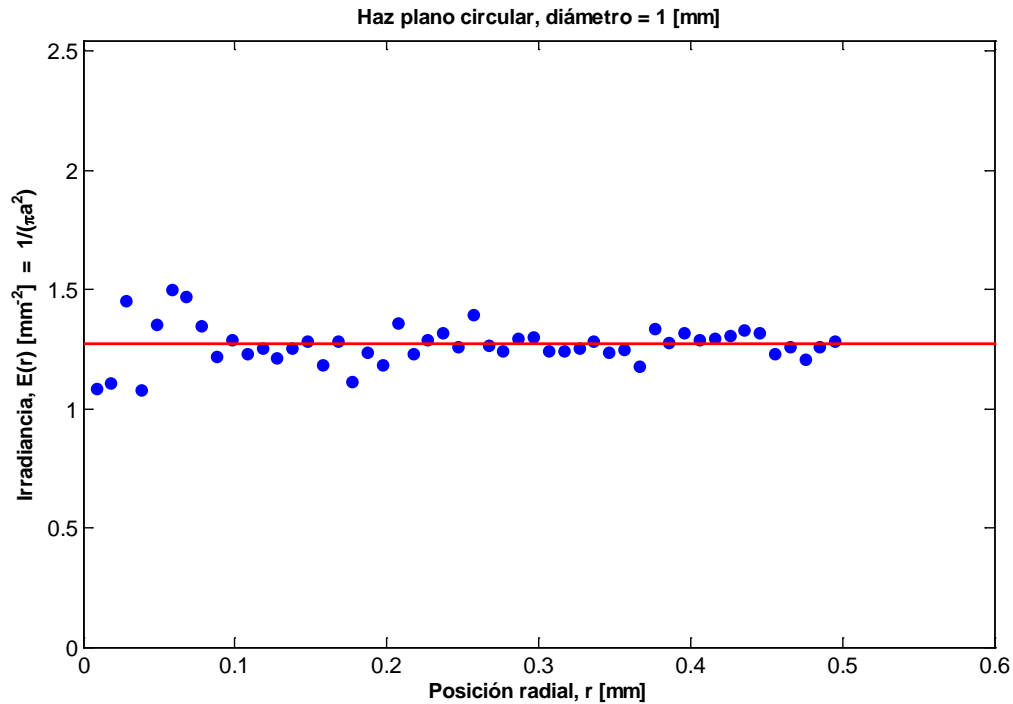


Figura 8. Distribución de fotones simulados para un haz plano uniforme de diámetro 1 mm. Se muestra la línea que equivale a la irradiancia normalizada calculada de forma analítica con valor 1.2732 [mm^{-1}]. Cada uno de los puntos representa la distribución de la irradiancia de los fotones simulados (30,000) con un espacio de 0.01 mm.

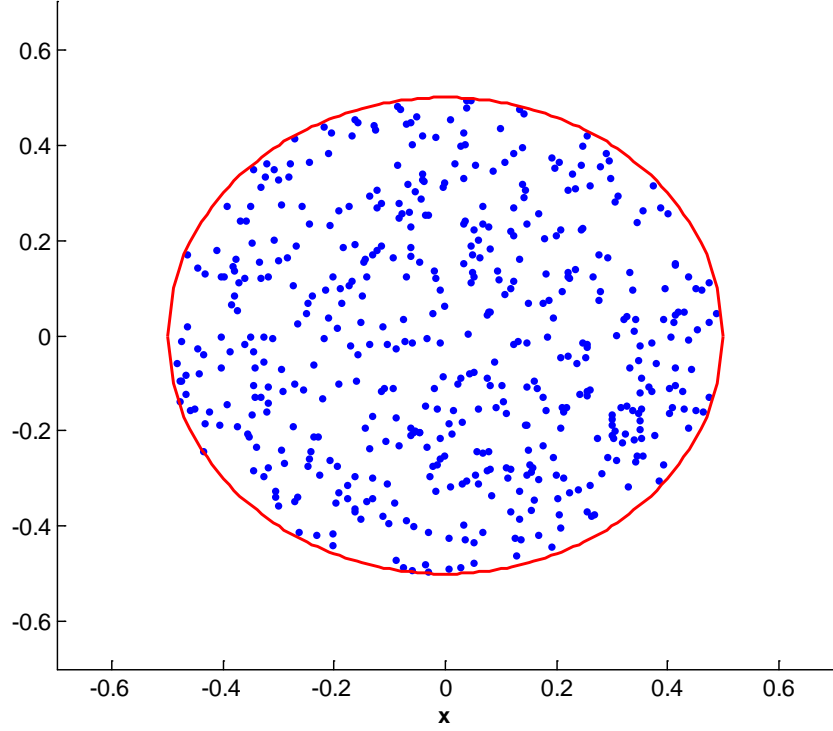


Figura 9. Distribución de los fotones simulados que son lanzados sobre el plano x-y. Se muestran solo 500 de los fotones simulados. En rojo se muestra la circunferencia que limita la distribución.

Perfil de un haz Gaussiano

Supongamos que se tiene un haz gaussiano con una irradiancia relativa $E(r)$ [mm^{-2}], con un radio de cintura b , esto es que $E(b) = (1/e)E(0)$.

$$E(r) = \frac{\exp(-r^2 / b^2)}{\pi b^2}$$

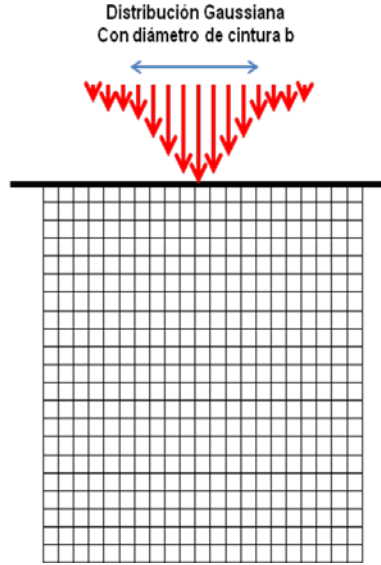


Figura 10. Distribución de los fotones al utilizar una fuente gaussiana de radio de cintura b .

La función de densidad de probabilidad describe el perfil del haz como una función de posición radial r .

$$p(r) = \frac{\exp(-r^2/b^2)}{\pi b^2} 2\pi r = \frac{\exp(-r^2/b^2)}{b^2} 2r, \quad \text{donde} \quad \int_0^\infty p(r) dr = 1$$

El primer término es la función Gaussiana que describe la dependencia radial de la irradiancia del haz a lo largo de la dimensión radial. El segundo término describe los anillos de integración sobre el plano de sección transversal del haz. El producto de estos dos términos produce la función de densidad de probabilidad $p(r)$ cuya integración sobre $r=0$ a infinito es igual a 1. La función de distribución $F(r)$ es la integral de $p(r)$ para $r=0$ a r_1 .

$$F(r_1) = \int_0^{r_1} p(r) dr = 1 - \exp\left(-\frac{r_1^2}{b^2}\right)$$

Ahora, aplicando la misma lógica a la función de densidad de probabilidad para un número aleatorio, $p(rnd)=1$. Se debe cumplir que:

$$\int_0^1 p(rnd) d(rnd) = 1$$

Por lo que $p(rnd)$ está normalizada. La función de distribución $F(rnd_1)$ es:

$$F(rnd_1) = \int_0^{rnd_1} p(rnd) d(rnd) = rnd_1$$

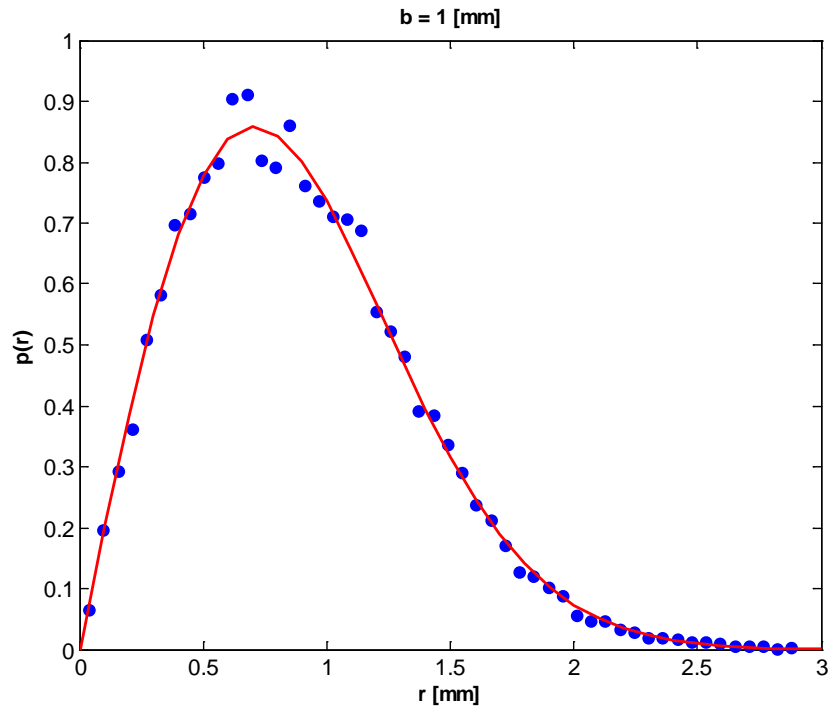
Igualando las dos funciones de distribución $F(rnd_1) = F(r_1)$, produce:

$$rnd_1 = 1 - \exp\left(-\frac{r_1^2}{b^2}\right)$$

Reordenando la ecuación anterior para resolver para r_1 en función de rnd_1 .

$$r_1 = b\sqrt{-\ln(1 - rnd_1)}$$

Las siguientes figuras muestran la generación de $p(r)$ y $E(r)$ utilizando las ecuaciones mostradas anteriormente. Los puntos indican los valores de los histogramas al ejecutar 10,000 números aleatorios para rnd_1 , esto es la distribución de los fotones sobre r de forma gaussiana. Las líneas continuas indican las expresiones analíticas para $p(r)$ y $E(r)$.



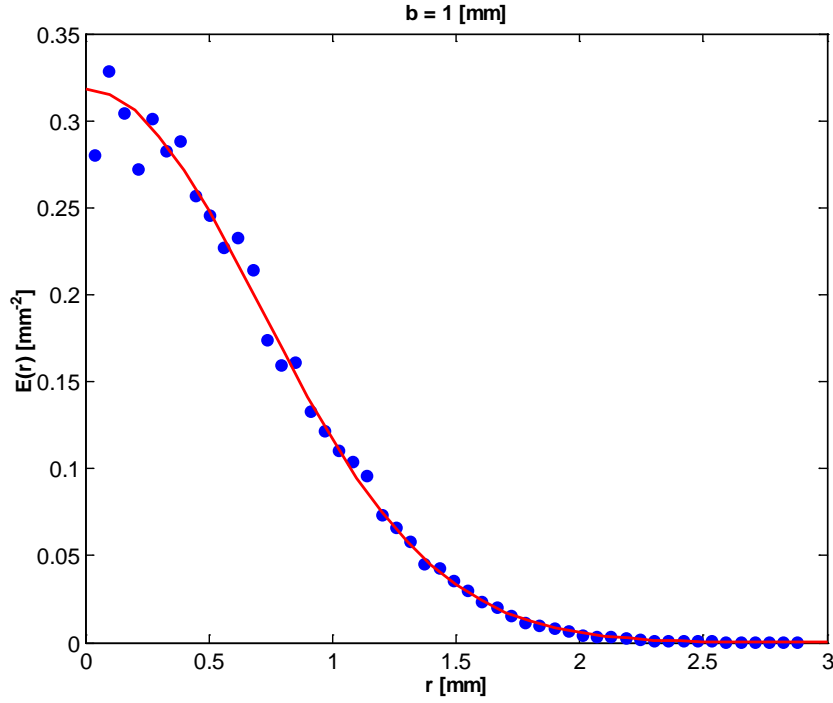


Figura 11. Figura que muestra la distribución de los 10,000 fotones simulados para $p(r)$ y $E(r)$.

Después del lanzamiento de los fotones, a cada fotón se le permite saltar a una nueva posición, perder una fracción de su peso debido a la absorción, cambiar de trayectoria debido al esparcimiento y finalmente comprobar si el fotón debe morir.

Salto a una nueva posición

El fotón toma un paso de una longitud determinada al muestrear la función de densidad de probabilidad exponencial para el tamaño del paso s del movimiento, antes de que el fotón interactúe con el tejido.

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

Cuyo valor promedio es $s = 1/\mu_t$. Un valor aleatorio es especificado y usado para muestrear $p(s)$:

$$s = -\frac{\log(rnd)}{\mu_t}$$

La posición actual (x,y,z) es actualizada por la proyecciones de s en cada uno de los ejes.

Pérdida del peso del fotón por absorción

La primera interacción que tiene el fotón es perder una fracción de su peso inicial debido a la absorción y dejarlo depositado en la malla en esa posición, que acumulará el peso de todos los fotones simulados.

El albedo es igual a la probabilidad fraccional de ser esparcido y $1-\text{albedo}$ la de ser absorbido. Entonces, si una fracción del peso del fotón es absorbido esto se calcula mediante $1-\text{albedo}$, y el peso actual del fotón es reducido por la misma cantidad, así que debe actualizarse. El peso sobrante será esparcido por la siguiente sección.

La fracción del peso inicial que el fotón pierde es acumulada en tres diferentes depósitos asociados con los arreglos esférico, cilíndrico y plano ($C_{\text{sph}}[ir]$, $C_{\text{cyl}}[ir]$ y $C_{\text{pla}}[ir]$) donde ir es un índice que denota la distancia (r) de la fuente al depósito. El valor de r es diferente en las tres dimensiones de acumulación. Si el valor del índice ir excede el número máximo NR, entonces el peso del fotón absorbido es depositado en el último depósito el cual sirve como un depósito de desborde. La suma de todos los depósitos incluyendo el de desborde debe de sumar uno para que se respete la conservación de energía. En este caso solo se utiliza el arreglo plano, pues el modelo de difusión solo verifica el ritmo de fluencia en el eje de incidencia de la luz.

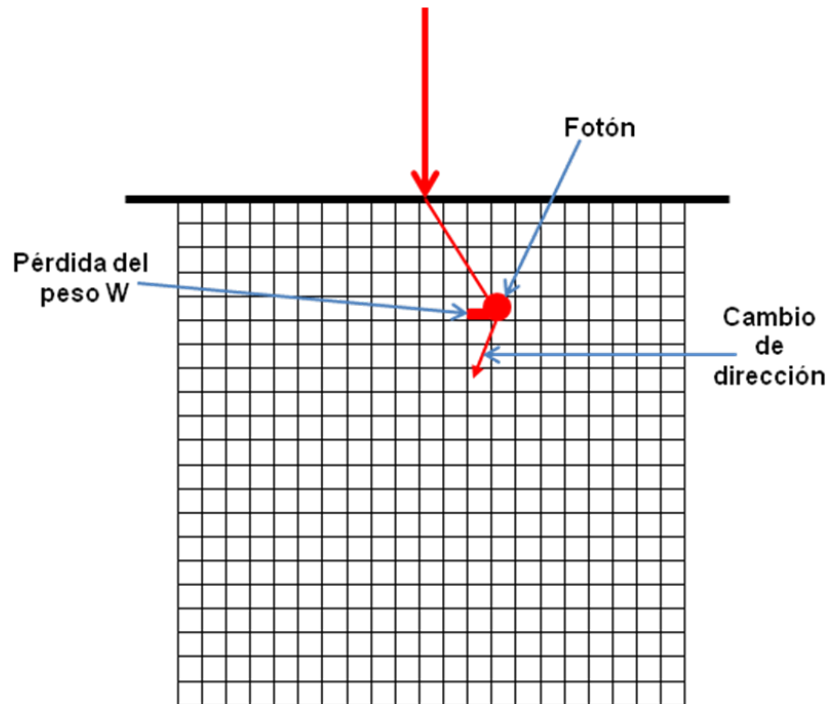


Figura 12. Movimiento del fotón por la malla del tejido, en donde pierde una fracción de su peso W el cual se deposita en un "bin" de la malla, para posteriormente cambiar de dirección.

Cambio de trayectoria debido al esparcimiento

El peso restante del fotón se esparce en una nueva trayectoria. Si la anisotropía es igual a cero, entonces el esparcimiento es isotrópico. Si $g > 0$, el programa usa la función de esparcimiento de Henyey-Greenstein. En este paso, hay cuatro secciones:

- Muestrear el ángulo de deflexión (θ)
- El ángulo de deflexión (θ) describe como el fotón se desvía de su trayectoria original. Un número aleatorio selecciona una opción del valor $\cos(\theta)$.
- Muestrear al ángulo azimutal (ψ). La deflexión se asume para ser dirigida con la misma probabilidad en un ángulo azimutal ψ . Un número aleatorio selecciona una opción para ψ el cual es usado para generar los valores de coseno y seno.
- Calcular la nueva trayectoria, basado en el coseno y seno de θ y ψ .
- Finalmente se actualiza la trayectoria.

Finalización del fotón mediante la ruleta

La decisión de desechar o no el fotón se realiza utilizando un algoritmo conocido como ruleta. Si el peso del fotón W , toma un valor menor a un umbral (en este caso de 0.01), entonces la supervivencia del fotón es decidida de la siguiente forma: se obtiene un número aleatorio y si es menor que un valor determinado, el fotón es desechado, de otra forma, el peso del fotón es incrementado por un factor $1/\text{umbral}$ (o 10 veces, en este caso) y el fotón continua propagándose. En este caso, el método permite que 9 de cada 10 fotones se excluyan, pero el fotón sobreviviente se le da un mayor peso para conservar adecuadamente la energía total.

Los pasos descritos se repiten hasta que el último fotón sea lanzado y posteriormente se genera un archivo con los datos del ritmo de fluencia relativo F/P [cm^{-2}], donde F [W cm^{-2}] es el ritmo de fluencia y P es la potencia de la fuente [W], junto con r [cm] que es la distancia de la fuente (en profundidad).

Almacenar los datos en un archivo

El último paso después de lanzar todos los fotones es salvar los resultados en archivos para graficar los resultados.

Número de fotones			
Tamaño del "bin" [cm]			
Última fila está desbordada			
r [cm]	$F_{\text{esf}}[\text{cm}^{-2}]$	$F_{\text{cil}}[\text{cm}^{-2}]$	$F_{\text{pla}}[\text{cm}^{-2}]$
Datos	Datos	Datos	Datos

Los arreglos $C_{\text{sph}}[\text{ir}]$, $C_{\text{cyl}}[\text{ir}]$ y $C_{\text{pla}}[\text{ir}]$ tienen la cantidad de peso de fotones absorbido. Dividiendo ese peso por el número total de fotones y por el volumen del "shell" produce la concentración de

fotones absorbidos en un "bin" relativo al número total de fotones lanzados $[\text{cm}^{-3}]$. El volumen del "shell" es diferente para cada una de las geometrías.

Dividiendo cada una de las concentraciones de los "bins" por el coeficiente de absorción produce la fluencia relativa $F/P [\text{cm}^{-2}]$, donde $F [\text{W cm}^{-2}]$ es el ritmo de fluencia y $P [\text{W}]$ es la fuente de luz.

Ejemplo

Se realizó una simulación con los siguientes parámetros para el tejido:

Coeficiente de Absorción: 12.20 cm^{-1}

Coeficiente de Esparcimiento: 173.50 cm^{-1}

Coeficiente de Anisotropía: 0.93

Índice de Refracción: 1.50

Número de fotones simulados: 10,000 fotones

Tamaño del depósito o "bin": 0.01 cm

El programa inicia pidiendo estos parámetros al usuario:

Número de fotones a lanzar N =

[Coef. de absorcion] mua =

[Coef. de esparcimiento] mus =

[Coef. de anisotropia] g =

[Indice de refracción] nt =

Tipo de Fuente:

(1)Puntual isotrópica

(2)Colimada

(3)Haz finito

-->

El programa se ejecuta mostrando el porcentaje de avance en la simulación. Finalmente se pide el nombre del archivo con el que se van a guardar los datos (el cual debe de ser menor a 8 caracteres), y se crea con extensión .OUT. El archivo de resultado se observa así:

Número de fotones = 100000.000000

Tamaño del paquete = 0.00500 [cm]

Parámetros del tejido

Coef. de Absorcion: 12.200000

Coef. de Esparcimiento: 173.500000

Coef. de Anisotropia: 0.930000

Indice de Refracción: 1.500000

La última fila esta desbordada. Ignorarla

r [cm]	Fsph [1/cm2]	Fcyl [1/cm2]	Fpla [1/cm2]
0.00250	1.367e+04	1.434e+02	1.968e+00

0.00750 1.542e+03 2.363e+01 1.441e+00
 ...

En la figura 16 se muestra el resultado de la simulación tomando en cuenta la malla con coordenadas esféricas, cilíndricas y esféricas. Se muestra la gráfica semi-logarítmica en el eje y, se observa que el ruido estadístico se vuelve significativo cuando F/P cae por debajo de 0.001, esto es a una distancia de 0.35 cm de la fuente.

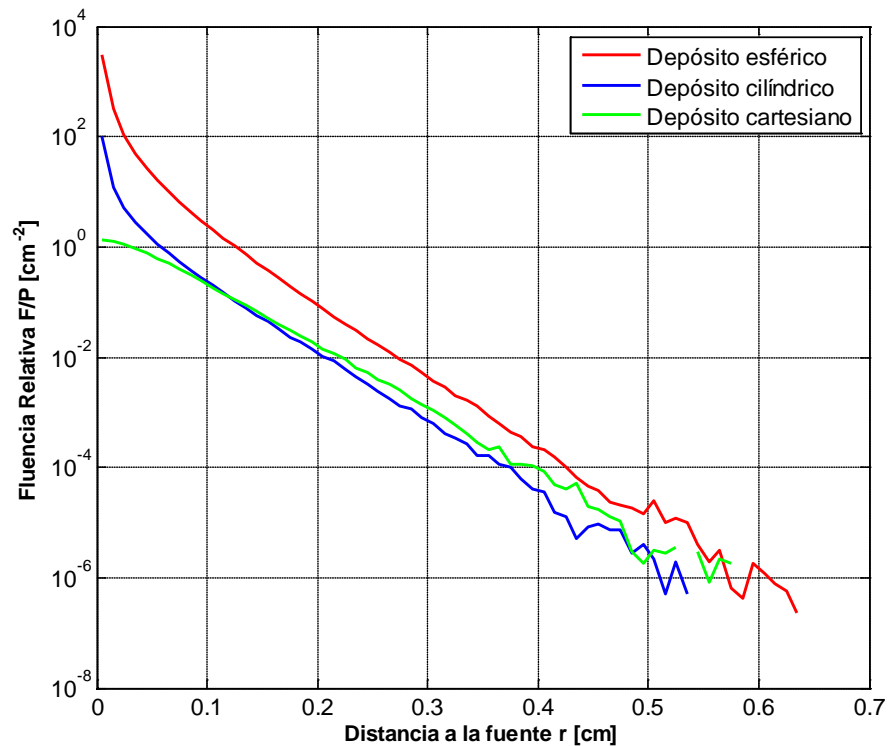


Figura 13. Gráfica de la simulación Monte Carlo de la fluencia Relativa con respecto a la distancia de la fuente tomando en cuenta las mallas en coordenadas esféricas, cilíndricas y esféricas.

Monte Carlo resuelto en tiempo (trmc.c)

La ley de Beer para la supervivencia de fotones en un medio absorbente se puede expresar como:

$$\text{supervivencia} = \exp(-\mu_a L)$$

donde:

μ_a es el coeficiente de absorción [cm^{-1}]

L es la longitud de la trayectoria de fotón [cm]

En un medio esparsivo la longitud de camino del fotón no es un camino recto, pero la ley de Beer se mantiene. Independientemente de que tan complejo sea el camino, el camino está dado por:

$$L = ct$$

donde:

c es la velocidad de la luz en el medio

t es el tiempo [s]

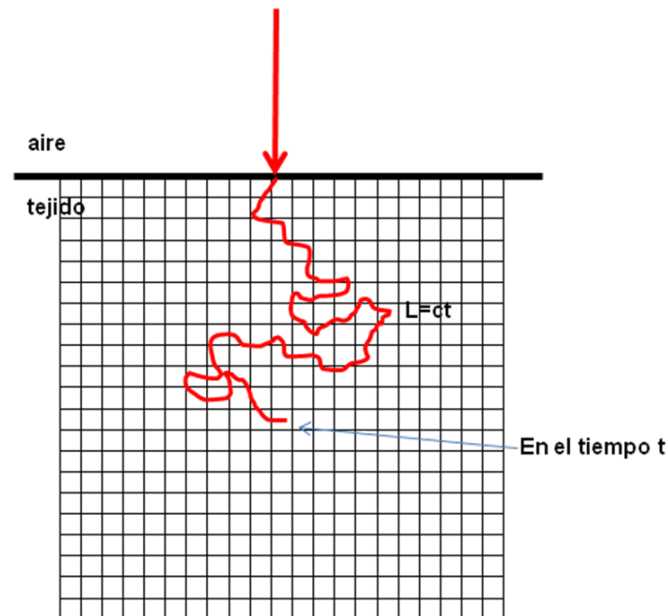


Figura 14. Comportamiento de un fotón en el tejido en la simulación resuelta en tiempo.

En cualquier punto de tiempo, se puede calcular la probabilidad de supervivencia de fotones mediante la expresión $\exp(-\mu_a L) = \exp(-\mu_a ct)$.

Concentración relativa y ritmo de fluencia

En las simulaciones de Monte Carlo resueltas en tiempo, se guarda la distribución espacial resuelta en tiempo de los fotones expresado ya sea como una concentración de energía (C [J cm^{-3}]) o una

tasa de fluencia instantánea (F [W cm^{-2}]).relativa al impulso de energía (U_0 [J]) de la fuente en el tiempo cero.

$$\text{concentración relativa} = \frac{C(r,t)}{U_0} \quad [\text{cm}^{-3}]$$

$$\text{ritmo de fluencia relativo} = \frac{F(r,t)}{U_0} = \frac{cC(r,t)}{U_0} \quad [\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}]$$

Si se desea hacer el conteo de C como [fotones cm^{-3}] o F como [fotones $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$], entonces simplemente se multiplica el resultado de la simulación de Monte Carlo, C/U_0 o F/U_0 , por el valor de una de las fuentes expresadas como el número de fotones, por ejemplo un impulso de 1J a 532 nm:

$$\begin{aligned} U_0 &= (1J) / (hc / \lambda) \\ &= (1J) / \left((6.262 \times 10^{-34} \text{ Js}) (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}) / (532 \times 10^{-9} \text{ m}) \right) \\ &= 2.7 \times 10^{18} \quad \text{fotones} \end{aligned}$$

Separación de variables de la distribución espacial y la absorción de fotones

Lo anterior se calculó como si no hubiera absorción, esto es $\mu_a = 0$, utilizando la simulación Monte Carlo resuelta en tiempo. Si se desea considerar la absorción, entonces $C(r,t)$ o $F(r,t)$ es multiplicado por un término adicional, $\exp(-\mu_a ct)$. La siguiente ecuación expresa el ritmo de fluencia en términos de la distribución espacial en un medio esparsivo sin ninguna absorción y el término de absorción de fotones:

$$F(r,t) = cC_{\text{sinabsorción}}(r,t) \exp(-\mu_a ct)$$

donde:

$cC_{\text{sinabsorción}}(r,t)$ es la distribución espacial

$\exp(-\mu_a ct)$ es la absorción espacial.

Hay una separación de variables de la distribución espacial resuelta en tiempo y la absorción de fotones resuelta en tiempo. La simulación de Monte Carlo se ejecuta sin ninguna absorción y posteriormente se puede agregar cualquier absorción deseada al escalar el resultado por $\exp(-\mu_a ct)$.

Pasos de la simulación

Lanzamiento de los fotones

El primer paso es el lanzamiento de los fotones. En este caso se considera que los fotones son lanzados de una fuente puntual isotrópica en 3 dimensiones contabilizada utilizando coordenadas cartesianas.

- Se incrementa el contador de fotones ($i_{\text{fotón}}$)
- El camino libre total del fotón se inicia a cero (L)
- Se pone en cero el índice de tiempo (i_t)
- La posición inicial del fotón se coloca en el origen de la fuente
- La trayectoria inicial del fotón (u_x, u_y, u_z) se aleatoriza para simular una fuente puntual isotrópica. Los valores de (u_x, u_y, u_z) representan a proyección de la trayectoria del fotón en los ejes x, y, z respectivamente. El vector de trayectoria se inicia de forma aleatoria en coordenadas esféricas (θ, ϕ) y luego se convierte en un vector de coordenadas cartesianas (u_x, u_y, u_z).

Salto/pérdida del fotón a su nueva posición

En este paso se mueve el fotón en un paso de tamaño $s = -\ln(rnd) / \mu_s$. Si el paso causa que L exceda la longitud de trayectoria LT[it] asociado con el punto de tiempo deseado T[it], entonces una unidad del peso del fotón se "deja" en el arreglo de datos $C_{\text{esf}}[\text{ir}][\text{it}]$.

Se permite que el fotón realice un paso parcial (s_1) para alcanzar exactamente $L = \text{LT}[\text{it}]$.

El apuntador [ir] al "bin" espacial local del fotón es determinado.

El "bin" local $C_{\text{esf}}[\text{ir}][\text{it}]$ se incrementa en 1.

Entonces la posición del fotón es actualizada basada en el paso completo s. La longitud de la trayectoria total (L) se incrementa en un paso s.

Cambio de dirección del fotón debido al esparcimiento

El peso del fotón restante se esparce y cambia de dirección a una nueva trayectoria. Si la anisotropía es igual a 0, entonces el esparcimiento es isotrópico. Si $g > 0$ entonces el programa utiliza la función de Henyey-Greenstein, la cual fue originalmente introducida por Henyey y Greenstein para mimetizar el esparcimiento de luz de las estrellas distantes debido al polvo espacial, y se observó que la misma función permite describir el esparcimiento de la luz en los tejidos biológicos.

Las cuatro secciones del cambio de dirección son:

1. Muestrear el ángulo de deflexión (theta)
2. Este ángulo describe como el fotón se deflecta de su trayectoria actual. Un número aleatorio selecciona un valor para el coseno de theta y se calcula además el seno del ángulo.

3. Muestrear el ángulo acimutal (ψ)
4. Se asume que la deflexión/desviación está dirigida con igual probabilidad en cualquier ángulo azimutal (ψ). Un número aleatorio selecciona una opción para ψ que se utiliza para calcular los valores del seno y el coseno de dicho ángulo.

Calcular la nueva trayectoria

La nueva trayectoria (u_{xx} , u_{yy} , u_{zz}) se calcula basándose en los senos y cosenos de los ángulo calculados y la trayectoria anterior (u_x , u_y , u_z).

Actualizar la nueva trayectoria

Verificar si el fotón está vivo

Finalmente, el programa revisa si la longitud total de trayectoria del fotón excede la máxima longitud de trayectoria bajo consideración: $L \geq L_{\max}$. Si lo es, el fotón debe terminarse. Entonces se lanza otro fotón, en caso de que se trate del último fotón de la simulación entonces se procede a guardar los datos obtenidos.

Posteriormente se guardan los datos de la simulación en columnas de acuerdo a la distancia recorrida en cada uno de los tiempos establecidos (uno para cada columna).

Número de fotones			
Tamaño del "bin" [cm]			
Última fila está desbordada			
r [cm]	tiempo 1	tiempo 2	...tiempo n
Datos	Datos	Datos	Datos

Ejemplo:

Se realizó una simulación con los siguientes parámetros para el tejido:

Coeficiente de Esparcimiento: 100.0 cm^{-1}

Coeficiente de Anisotropía: 0.90

Índice de Refracción: 1.33

Número de fotones simulados: 1,000 fotones

Tamaño del depósito o "bin": 0.06 cm

El programa no es interactivo, pues los datos se colocan en el mismo código, los datos de salida se generan en un archivo con nombre trmc.out.

Se muestra a continuación un segmento del archivo de salida trmc.out:

```

number of photons = 1000.000000
dr = 0.06000 [cm]
last row is overflow. Ignore last row.
Output is fluence rate F [W/(cm2 s)].
r [cm]      0.050 ns    0.100 ns    0.500 ns    1.000 ns
0.0300      6.643e+10   6.643e+10   0.000e+00   0.000e+00
0.0900      5.905e+10   7.382e+09   7.382e+09   0.000e+00
0.1500      5.713e+10   2.525e+10   1.329e+09   0.000e+00
0.2100      5.694e+10   1.966e+10   2.712e+09   6.779e+08
...

```

Los datos para cuatro puntos en el tiempo (0.050, 0.100, 0.500 y 1.000 ns) se muestran en la figura 15 mostrados en puntos.

Hay que notar que el impulso original que viaja a la velocidad de la luz alcanza ~ 0.8 cm a 0.050 ns para lo cual el resultado de la simulación Monte Carlo muestra una densidad de fotones insignificante más allá de 1 cm y no hay densidad de fotones a más allá de 1.2 cm. Cuando se realiza el análisis por medios analíticos como la teoría de difusión, está predice que algunos fotones pueden llegar a densidades mayores a 1.2 cm, lo cual no es posible. La teoría de difusión "sobre predice" la penetración de la densidad delantera de fotones, esto es, la región más profunda cerca de la profundidad alcanzada por la porción superviviente del impulso original viajando a la velocidad de la luz.

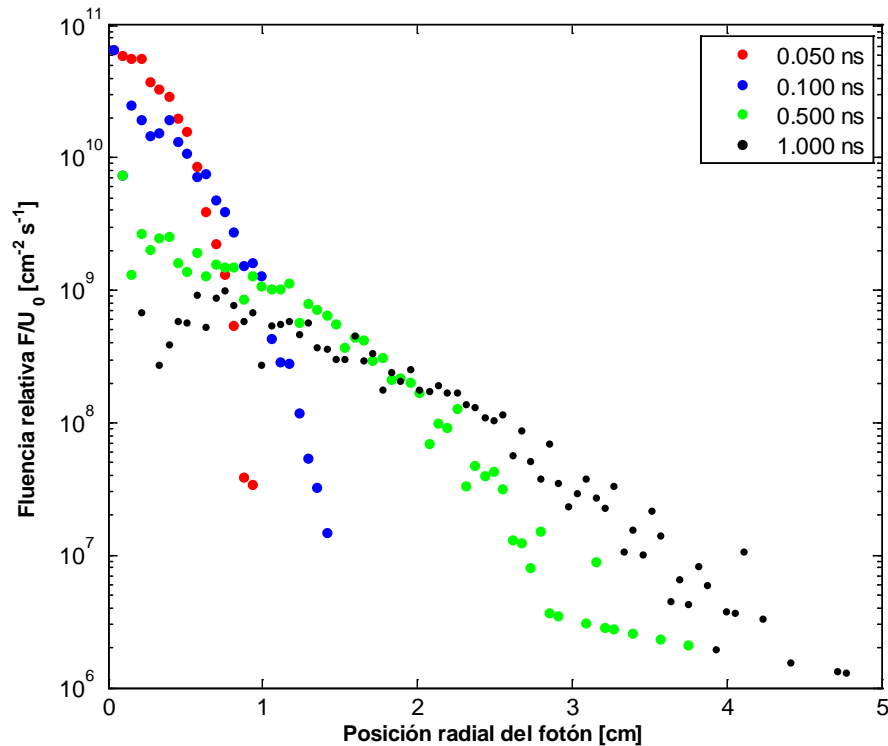


Figura 15. Grafica de la simulación de Monte Carlo resuelta en tiempo. Se observa la distancia que recorren los fotones en 4 tiempos diferentes con su respectiva fluencia relativa.

Monte Carlo mcsb

Esta simulación es un paso intermedio entre la simulación mc321 y mcml, pues utiliza los mismos principios del mc321, pero con estrategias de programación que permiten incrementar la velocidad del procesamiento y el almacenamiento de los datos, pero siguiendo los principios básicos de la simulación.

Las cantidades que se consideran en la simulación son: la absorción A en una malla cilíndrica, de la cual se puede obtener la Fluencia F al dividir entre el coeficiente de absorción, la Reflectancia Especular S y la Reflectancia Difusa E.

En el caso de que los índices de refracción del medio externo y el tejido son n_1 y n_2 respectivamente, la reflectancia especular se calcula mediante la expresión.

$$R_{sp} = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2}$$

Y se quita cierta parte del peso del fotón:

$$W = 1 - R_{sp}$$

La reflectancia difusa se calcula con todos los fotones que salen del medio después de haber pasado por algunos eventos de esparcimiento en el tejido. En la siguiente sección (Monte Carlo multicapa) se detalla como se realiza la simulación de la reflectancia difusa.

De la misma forma que el programa mc321, al realizar la ejecución se piden los parámetros:

```
Número de fotones a lanzar N =
[Coef. de absorcion]      mua =
[Coef. de esparcimiento] mus =
[Coef. de anisotropia]    g =
[Indices de refracción]:
(medio)                   n1 =
(externo)                  n2 =
Tipo de Fuente:
(0)Haz colimado
(1)Gaussiana
(2)Puntual isotrópica
-->
```

y dependiendo de la fuente seleccionada se toman los parámetros

```

{{HAZ COLIMADO}}
[Radio fuente] [cm] radius =
[Posición z] (0,%.2lf) zs =

{{GAUSSIANA}}
[Radio fuente] [cm] radius =
[Distancia axial (cintura)] [cm] waist =
[Distancia focal en z] [cm] zs =

{{PUNTUAL ISOTRÓPICA}}
[Posición x] (0,%.2lf) xs =
[Posición y] (0,%.2lf) ys =
[Posición z] (0,%.2lf) zs =

```

Usando las propiedades:

Coeficiente de Absorción: 0.82 cm^{-1}
 Coeficiente de Esparcimiento: 13.4 cm^{-1}
 Coeficiente de Anisotropía: 0.91
 Índice de Refracción externo: 1.48
 Índice de Refracción interno: 1.55

Número de fotones simulados: 780,000 fotones
 Tamaño del depósito o "bin": 0.1 cm

Fuente haz colimado en el origen (0,0,0)
 Radio de la fuente: 8 cm

Al finalizar la ejecución se pide el número de simulación para generar un archivo con el nombre: mcOUTxx.out, donde xx es el número de simulación. El archivo de salida queda entonces:

```

8.200e-01  mua, coeficiente de absorcion [1/cm]
13.4000    mus, coeficiente de esparcimiento [1/cm]
0.9100     g, anisotropia [-]
1.5500     n1, indice de refracción del tejido
1.4800     n2, indice de refracción del medio externo
0          Fuente
8.0000     radius, radio del haz plano o radio 1/e del haz Gaussiano
[cm]
0.0000     waist, ancho de 1/e del foco [cm]
0.0000     xs, posicion en x de la fuente isotropica [cm]
0.0000     ys, posicion y
0.0000     zs, posicion z
80         NR

```

```

80      NZ
0.10000      dr
0.10000      dz
7.8e+05      Nfotones
5.337167e-04      Specular reflectance
8.977186e-01      Absorbed fraction
1.017474e-01      Escaping fraction
0.0      0.06667      0.15556      0.25333      0.35238      0.45185      0.55152
      0.65128      0.75111      0.85098      0.95088      1.05079      1.15072
      1.25067      1.35062      1.45057      1.55054      1.65051      1.75048
      1.85045      1.95043      2.05041      2.15039      2.25037      2.35035
      2.45034      2.55033      2.65031      2.75030      2.85029      2.95028
      3.05027      3.15026      3.25026      3.35025      3.45024      3.55023
      3.65023      3.75022      3.85022      3.95021      4.05021      4.15020
      4.25020      4.35019      4.45019      4.55018      4.65018      4.75018
      4.85017      4.95017      5.05017      5.15016      5.25016      5.35016
      5.45015      5.55015      5.65015      5.75014      5.85014      5.95014
      6.05014      6.15014      6.25013      6.35013      6.45013      6.55013
...

```

Estos datos se pueden ingresar a un programa en MATLAB lookmcsb.m, el cual permite obtener un mapa del ritmo de fluencia relativo en el plano x-z junto con el ritmo de fluencia en profundidad sobre el eje z.

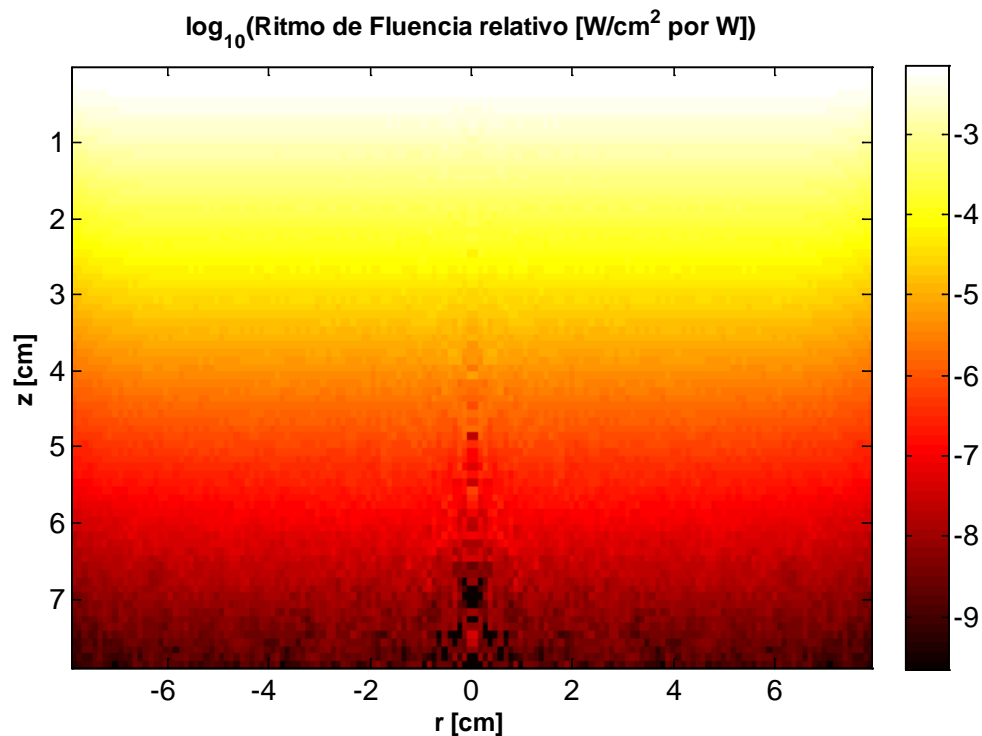


Figura 16. Mapa del ritmo de fluencia relativo sobre el plano x-z de la simulación de Monte Carlo.

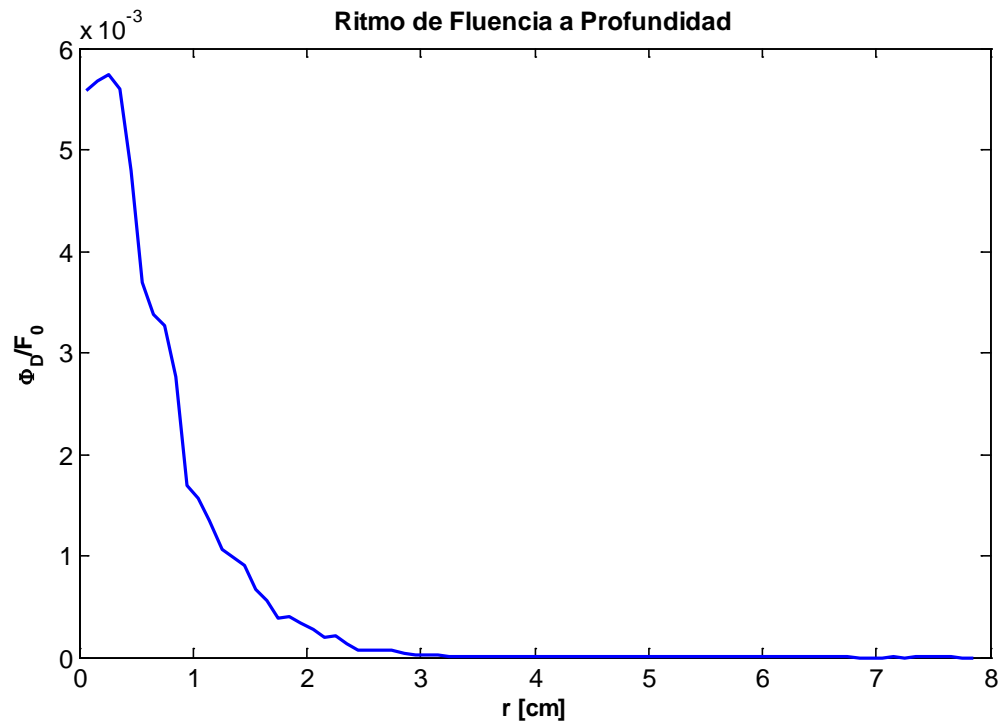


Figura 17. Ritmo de fluencia a profundidad sobre el eje z de la simulación de Monte Carlo.

Monte Carlo mcfluor, fluorescencia

Si se considera el siguiente problema simple, un haz tipo lápiz colimado, irradia un tejido de manera ortogonal a su superficie. La luz penetra el tejido y experimenta múltiples eventos de esparcimiento que cambian la dirección de los fotones. Cada fotón tiene una trayectoria inicial que apunta hacia abajo del tejido, pero después de varios eventos de esparcimiento la trayectoria del fotón se vuelve aleatoria. Todos los fotones experimentan una transición de un lanzamiento direccionado inicial a uno aleatorio. Una vez que todas las trayectorias están aleatorizadas, el flujo neto de luz está direccionada a lo largo de gradientes de concentraciones de fotones. Gran parte de la fluorescencia ocurre durante esta transición y ya que el método de Monte Carlo permite modelar esta transición, el Método es ideal para modelar la fluorescencia.

Una descripción matemática del problema describe la densidad del flujo de escape de fluorescencia J_f [W/cm²], en una posición r en la superficie del tejido.

$$J_f(r) = P_0 \int_{\text{volumen}} T_x(r') \varepsilon C(r') Y T_f(r, r') dV(r')$$

donde

r' es un vector que especifica la posición del volumen incremental en el tejido [cm].

$dV(r')$ es el volumen incremental a r' del volumen de integración [cm³].

P_0 es la potencia incidente del haz de excitación [W].

$T_x(r')$ es el transporte de la fuente en la longitud de onda de excitación tal que produce el ritmo de fluencia local en r' [cm⁻²].

ε es el coeficiente de extinción del fluoróforo en r' [cm⁻¹ M⁻¹].

$C(r')$ es la concentración de fluoróforo en r' [M]

Y es la potencia producida, W de fluorescencia por W de excitación absorbido por el fluoróforo [W/W].

$T_f(r, r')$ es el transporte de fluorescencia de r' para producir la densidad de energía de escape en la superficie del tejido en el punto r [cm⁻²].

$J_f(r)$ es la densidad de flujo de escape de fluorescencia en la superficie en la posición r [W cm⁻²]

El factor de transporte T_x da cuenta de como el haz es lanzado en el tejido, por ejemplo como un haz colimado o un haz Gaussiano enfocado, incluyendo la consideración de cualquier reflectancia especular en la superficie aire/tejido, y como la luz de excitación se propaga a través del tejido. El factor agrupante εC es el coeficiente de absorción del fluoróforo en la longitud de onda de excitación, definido utilizando la base e para que la transmisión T a través del longitud del trayecto L esta dado por $T = \exp(-\varepsilon CL)$. Hay que notar que usualmente se reporta el coeficiente de

extinción utilizando base 10 para que $T = 10^{-\varepsilon CL}$, para que el ε mostrado aquí sea igual al de la literatura por $\ln(10)$, esto es 2.3 veces más grande. El factor Y es la potencia producida de Watt de fluorescencia por W de excitación absorbido por el fluoróforo. El volumen incremental de la integración, dV , tiene unidades de cm^3 . El producto $P_0 T_x \varepsilon C Y dV$ tiene unidades de potencia [W] y funciona como una fuente puntual isotrópica de fluorescencia. El factor de transporte T_f toma en cuenta como esta fluorescencia se distribuye a través del tejido y escapa en la superficie, incluyendo la consideración de la reflectancia total interna en la superficie aire/tejido. El resultado final es la densidad de flujo de escape J_f [W/cm^2].

De manera similar, el ritmo de fluencia F_f [W/cm^2] en la posición r en el tejido esta expresada como:

$$F_f(r) = P_0 \int_{\text{volumen}} T_x(r') \varepsilon C(r') Y T_f(r, r') dV(r')$$

donde en este caso $T_f(r, r')$ indica el transporte de fluorescencia local generada en la posición r' a un punto de observación r en el medio para producir el ritmo de fluencia $F_f(r)$ [W/cm^2]. La única diferencia entre las dos ecuaciones es que la primera calcula el escape de fotones a la superficie mientras que la segunda calcula la concentración de fotones en una posición dentro del tejido. Ya que las unidades de J_f y F_f son las mismas, la ecuación se ve idéntica. Solo el factor $T_f(r, r')$ difiere entre las dos ecuaciones.

La solución Monte Carlo

Para implementar las ecuaciones utilizando una simulación Monte Carlo, se puede aprovechar el programa utilizado en el programa mcsb. En el primer paso, se lanza y propaga los fotones de excitación en un medio con propiedades ópticas en la longitud de onda de excitación produciendo el resultado estadístico neto para el factor de transporte $T_x(r')$ [cm^{-2}]. El programa no especifica P_0 , pero en su lugar se le refiere como "potencia incidente". Por lo tanto, se obtiene el factor $T_x(r')$ que puede ser llamado el ritmo de fluencia de excitación por Watt de potencia incidente $F_x(r')$ [W/cm^2 por W de potencia incidente]. Esta es la luz de excitación distribuida que va a excitar la fluorescencia.

Después, el programa considera la fluorescencia que se genera de un fondo uniforme de concentración de fluoróforos a través del medio. Entonces la simulación lanza los fotones de fluorescencia en el medio, con las propiedades ópticas apropiadas para la longitud de onda de emisión de fluorescencia. Los fotones de fluorescencia son lanzados como fuentes puntuales isotrópicas de la posición r' . El resultado es la respuesta al impulso $T_f(r, r')$ [$\text{W}/\text{cm}^2/\text{W}$]. Esta respuesta al impulso es multiplicada por la fluorescencia asociado con el volumen incremental $dV(r')$, el cual es $T_x(r') \varepsilon C Y dV(r')$ [W por W de potencia incidente]. El resultado

$T_x(r') \varepsilon C Y dV(r') T_f(r, r')$ es la contribución incremental de $F_f(r)$ del volumen incremental $dV(r')$.

De forma iterativa el programa lanza la fluorescencia de cada volumen incremental $dV(r')$, multiplicando el resultado por la potencia de fluorescencia local en $dV(r')$ y acumula estas contribuciones en un ritmo de fluencia final total de fluorescencia $F_f(r')$ [W/cm^2 / W]. De manera

similar, durante estos cálculos iterativos , la densidad de flujo de fluorescencia $J_f(r')$ [W/cm² / W] también es acumulada. Estas acumulaciones de valores son equivalentes a la integración en las ecuaciones mostradas.

Se debe notar que, como en los casos anteriores, a pesar de que los fotones se propagan en coordenadas cartesianas, los resultados se almacenan en coordenadas cilíndricas, dada la simetría cilíndrica del problema. Los resultados se reportan como $J_f(r)$ y $F_f(r,z)$, donde z es la coordenada que apunta hacia el tejido y r la coordenada radial.

Finalmente, el programa considera la fluorescencia que es generada de una pequeña heterogeneidad de un fluoróforo extra. Esta heterogeneidad está caracterizada como una fluorescencia extra en un volumen V_h en una posición específica $r_h=(x_h, y_h, z_h)$ con ϵ_h , C_h & Y_h . El programa determina la potencia de la fuente de fluorescencia para ser $T_x(r_h)\epsilon_h C_h Y_h V_h$ [W/W]. La respuesta al impulso se obtiene lanzando una fuente puntual isotrópica de fluorescencia en $r'=(0,0,z_h)$ para producir $T_f(r',r'')$ donde r'' es la posición de un punto de observación relativo a la fuente de fluorescencia. Los puntos de observación son colocados a lo largo de el eje x con $y=0$. El r'' es igual a la línea de la heterogeneidad en r_h hacia algún punto de observación r relativo a lo largo del eje x (con $y=0$). A esta línea se le llama r_{ho} . Luego la contribución de la heterogeneidad de fluorescencia a la fluorescencia observada en una posición es determinada por:

$$F_f(r) = T_x(r_h)\epsilon_h C_h Y_h V_h T_f(r', r_{ho})$$

Donde $T_f(r', r_{ho})$ es la respuesta al impulso $F(z,r)$ [W/cm² / W] después de haber sido lanzado la fuente puntual isotrópica en $(0,0,z_h)$.

De manera similar, la contribución de la heterogeneidad fluorescente a la densidad de flujo de escape observada en la posición r en la superficie a lo largo del eje x ($y=0$) está determinada por:

$$J_f(r) = T_x(r_h)\epsilon_h C_h Y_h V_h T_f(r', r_{ho})$$

Donde $T_f(r', r_{ho})$ es la $J(r)$ obtenida tras lanzar una fuente puntual isotrópica en $(0,0,z_h)$.

Se observa que este programa calcula la fluorescencia de una pequeña heterogeneidad que es elegida para tener una forma esférica. El programa puede ser adaptado para considerar la contribución de varias heterogeneidades. La superposición de muchas heterogeneidades pueden producir la respuesta a una gran región irregular de fluorescencia extra sobre la fluorescencia de fondo. Se debe tomar en cuenta que el problema de la heterogeneidad rompe la simetría cilíndrica. Otra advertencia es que la absorción añadida de este fluoróforo no debería aumentar significativamente los coeficientes de absorción para la excitación y fluorescencia. De lo contrario, ya no se tiene un problema homogéneo para la propagación de la emisión de excitación y fluorescencia y se debe modificar el programa para considerar la absorción local de la heterogeneidad.

Ejemplo

Al ejecutar el programa mcfluor se muestra el siguiente menú para poder ingresar los valores de los parámetros del medio:

```
Número de fotones a lanzar N =
<< Parametros opticos del medio >>
[Coef. de absorcion]      [cm^-1] mua =
[Coef. de esparcimiento] [cm^-1] mus =
[Coef. de anisotropia]      g =
[Indices de refracción]:
(medio)                    n1 =
(externo)                   n1 =
>>Tipo de Fuente:
(0)Haz colimado
(1)Gaussiana
(2)Puntual isotrópica
-->
```

y dependiendo de la fuente seleccionada se toman los parámetros

```
{{HAZ COLIMADO}}
[Radio fuente]            [cm] radius =
[Posición z] (0,%.2lf)      zs =

{{GAUSSIANA}}
[Radio fuente]            [cm] radius =
[Distancia axial (cintura)] [cm] waist =
[Distancia focal en z]     [cm]      zs =

{{PUNTUAL ISOTRÓPICA}}
[Posición x] (0,%.2lf)      xs =
[Posición y] (0,%.2lf)      ys =
[Posición z] (0,%.2lf)      zs =
```

Posteriormente el programa pide los parámetros de fluorescencia del medio:

```
<<Parametros fluorescencia de fondo del medio>>
[Coef. de absorcion]      muaf =
[Coef. de esparcimiento]  musf =
[Coef. de anisotropia]    gf =
[Coef. de extinción x Conc.] eC =
[Eficiencia cuántica]      Y =
```

Y además del fluorescencia de la heterogeneidad:

```

<<Parametros de un fluoroforo en el medio>>
[Pos. en x] (0,%.2lf)          xh =
[Pos. en y] (0,%.2lf)          yh =
[Posición en z]                zh  =
[Coef. de extinción x Conc.]   heC =
[Eficiencia cuantica]          hY  =
[Radio fluoroforo]             hrad =
[# Archivo]                    =

```

Usando las propiedades:

Coeficiente de Absorción: 0.5 cm^{-1}
 Coeficiente de Esparcimiento: 20 cm^{-1}
 Coeficiente de Anisotropía: 0.75
 Índice de Refracción externo: 1.33
 Índice de Refracción interno: 1.38

Número de fotones simulados: 1,00,000 fotones
 Tamaño del depósito o "bin": 0.05 cm

Fuente haz colimado en el origen (0,0,0)
 Radio de la fuente: 1 cm

Coeficiente de Absorción fluorescencia medio: 0.2 cm^{-1}
 Coeficiente de Esparcimiento fluorescencia medio: 5 cm^{-1}
 Coeficiente de Anisotropía fluorescencia medio: 0.90
 Coeficiente de extinción x Conc fluorescencia medio: 0.1 cm^{-1}
 Eficiencia cuántica fluorescencia medio: 1

Coeficiente de Absorción fluoróforo: 0.2 cm^{-1}
 Coeficiente de Esparcimiento fluoróforo: 5 cm^{-1}
 Coeficiente de Anisotropía fluoróforo: 0.90
 Coeficiente de extinción x Conc fluoróforo: 0.2
 Eficiencia cuántica fluoróforo: 1
 Radio del fluoróforo: 0.1 cm
 Localización del fluoróforo (x,y,z): (0.5,0.5,0.5) cm

Al finalizar la ejecución se pide el número de simulación para generar cuatro archivos con el nombre: MCOUtxxww.dat, donde xx es el número de simulación ingresada por el usuario y ww va de 01 a 04. Los archivos 01 y 02 contienen la información del ritmo de fluencia de excitación y de fluorescencia de fondo del medio, mientras que en los archivos 03 y 04 se tiene la información de la heterogeneidad. Los archivos se pueden ingresar al archivo de Matlab lookmcsbfluor.m para obtener los resultados en gráficas como se muestra en las siguientes figuras.

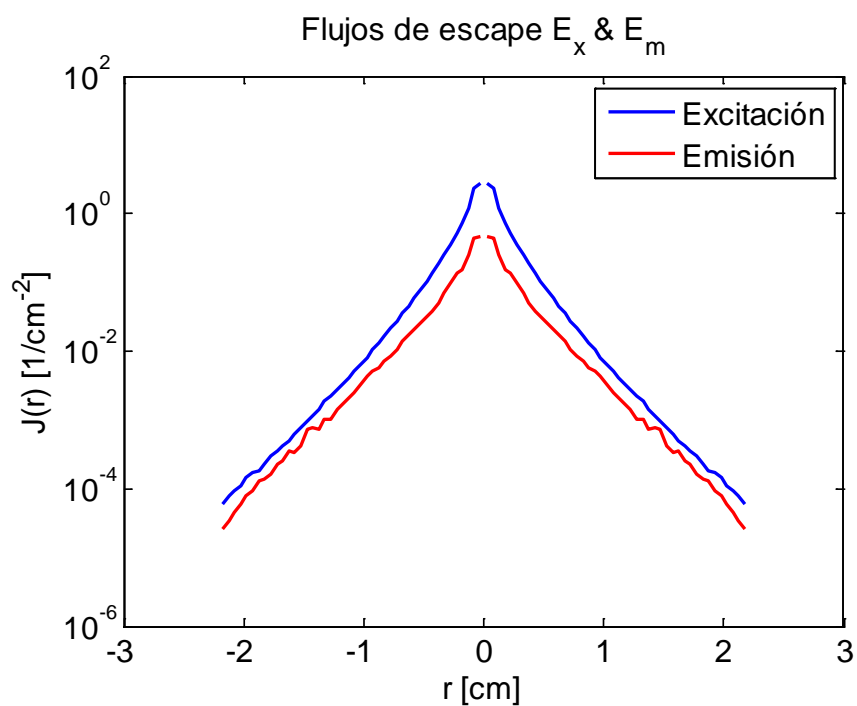


Figura 18. Flujos de escape para la excitación y la emisión de fluorescencia, en función de la distancia r .

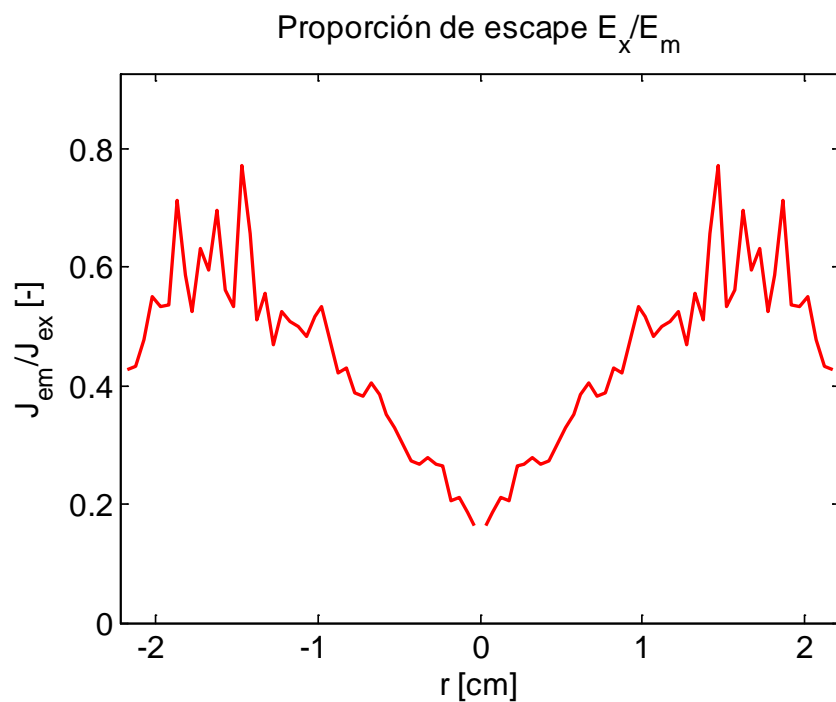


Figura 19. Proporción de escape de emisión contra excitación en función de la distancia r .

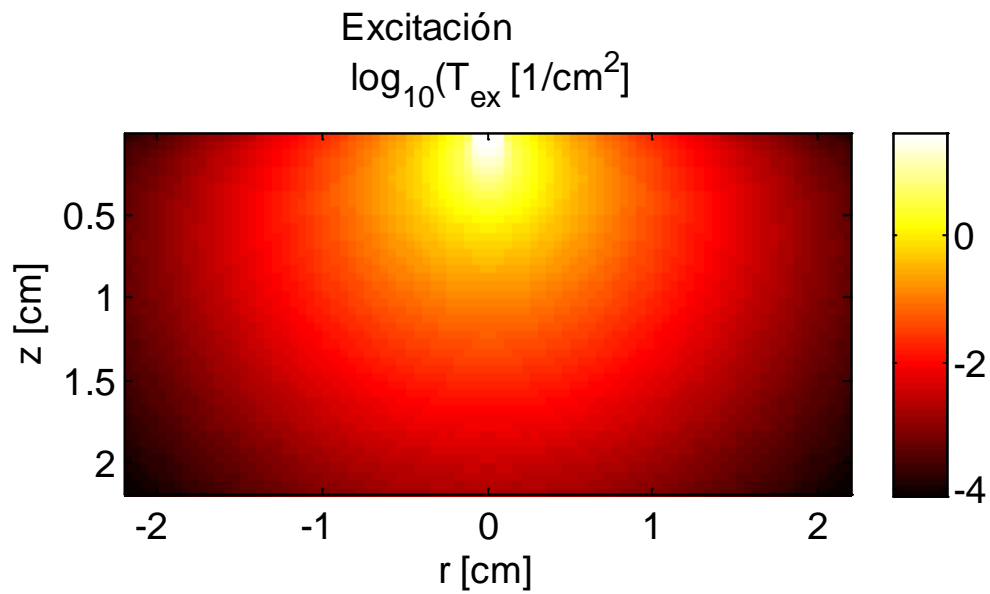


Figura 20. Ritmo de fluencia de excitación en el medio.

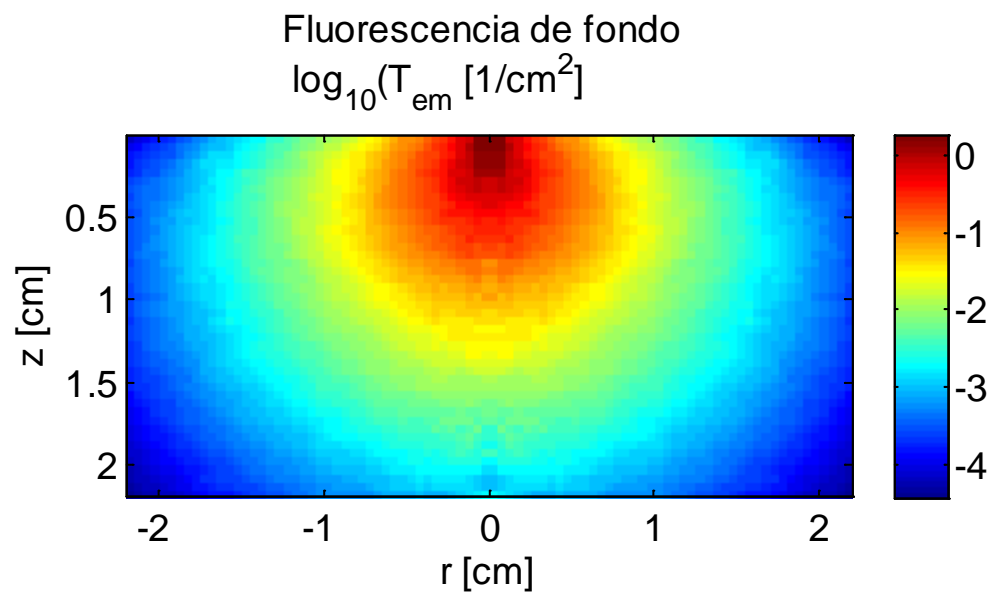


Figura 21. Ritmo de fluencia de fluorescencia de fondo en el medio.

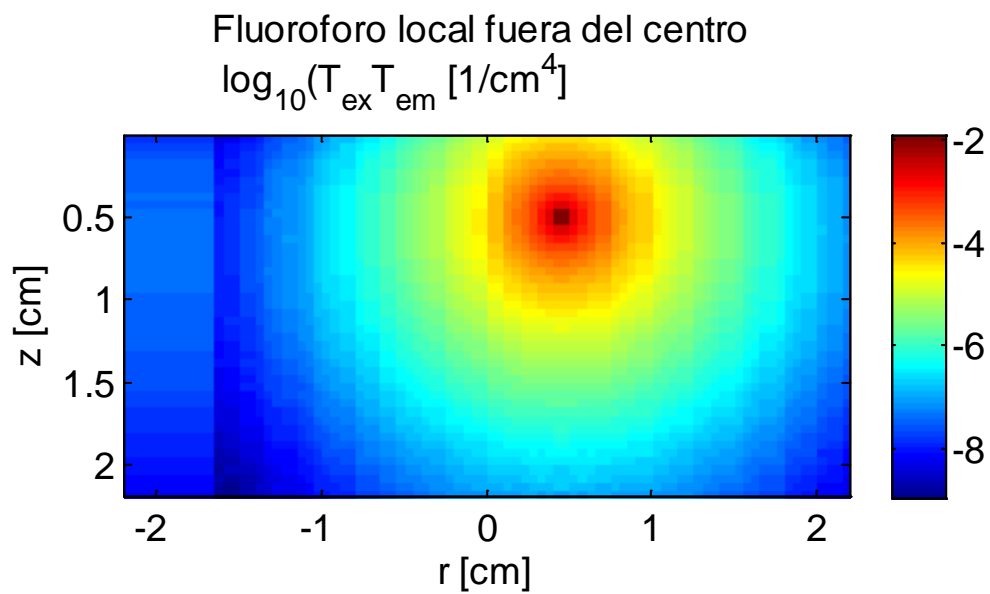


Figura 22. Ritmo de fluencia de la fluorescencia del fluoróforo o heterogeneidad en el medio.

Monte Carlo Multi Capa

En todas las aplicaciones del método de Monte Carlo, se construye un modelo estocástico en el que el valor esperado de la variable aleatoria (o la combinación de varias variables) es equivalente al valor de la cantidad física a ser determinada. Este valor esperado es entonces estimado al promediar múltiples muestras independientes que representan las variables aleatorias mencionadas. Para la construcción de una serie de muestras independientes, se utilizan números aleatorios que siguen la distribución de la variable a ser estimada.

Las simulaciones Monte Carlo de la propagación de fotones ofrecen una aproximación flexible pero rigurosa del transporte de fotones en medios turbios. El método describe reglas locales de la propagación de fotones que son expresadas, en el caso más simple, como distribuciones de probabilidad que describen el tamaño del paso del movimiento del fotón entre los sitios de interacción del fotón con el tejido y los ángulos de deflexión en la trayectoria del fotón cuando ocurre un evento de esparcimiento. La simulación puede salvar múltiples cantidades físicas de forma simultánea. Sin embargo, el método es de naturaleza estadística y se basa en el cálculo de la propagación de un gran número de fotones. Como resultado se requiere de un tiempo considerable de cálculo.

El número de fotones requerido depende en lo que se está buscando, la precisión y la resolución espacial requerida. Por ejemplo, para solo averiguar la reflectancia difusa total de un tejido de propiedades ópticas específicas, típicamente se utiliza alrededor de 3000 fotones para obtener un resultado adecuado. Para trazar la distribución espacial de fotones en un problema simétrico cilíndrico, al menos se requiere de 10,000 fotones para lograr un resultado aceptable. Para el trazado de la distribución espacial de fotones en un problema tridimensional más complejo como un haz de diámetro finito que irradia un tejido con un vaso sanguíneo, los fotones requeridos podrán exceder los 100,000 fotones.

Otro aspecto importante en esta clase de simulaciones es que no se considera a la luz como un fenómeno ondulatorio y se ignoran algunas características como la fase y la polarización. En lugar de ello, en esta simulación se quiere predecir el transporte de energía radiante en medios turbios. Los fotones son esparcidos múltiples veces por la mayoría de los tejidos, por lo que la fase y la polarización se aleatorizan rápidamente y no desempeñan un papel importante en el transporte de energía. Sin embargo las simulaciones Monte Carlo son capaces de contabilizar la fase y la polarización y tratar estos fenómenos ondulatorios de forma estadística.

Las simulaciones Monte Carlo están basadas en las propiedades ópticas macroscópicas que se asume se extienden uniformemente sobre pequeñas unidades del volumen del tejido. El camino libre medio entre los sitios de interacción fotón-tejido típicamente tienen una longitud de 10-1000 μm , siendo 100 μm un valor típico en el espectro visible.

En la simulación, cada paso del fotón es variable e igual a $-\ln(\xi)/(\mu_a + \mu_s)$ donde ξ es un número aleatorio y μ_a y μ_s son los coeficientes de absorción y esparcimiento respectivamente. El peso del fotón disminuye de su valor inicial 1 conforme se mueve a través del tejido, y es igual a a^n

después de n pasos. Cuando un fotón golpea la superficie y una fracción del peso del fotón escapa como reflectancia y lo que resta del peso es internamente reflejado y continua con su propagación. Eventualmente, el fotón pierde peso debajo de cierto nivel y la simulación para ese fotón se finaliza.

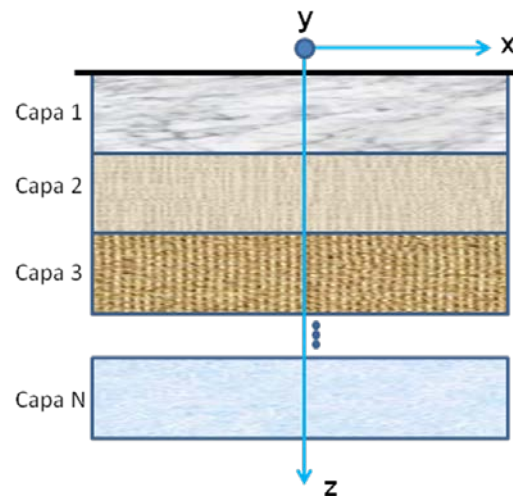


Figura 23. Esquema en coordenadas cartesianas de la configuración del tejido con múltiples capas.

Descripción del problema y del sistema de coordenadas

La simulación Monte Carlo describe el transporte de un fotón de un haz infinitamente delgado que incide de forma perpendicular en un tejido de múltiples capas. Cada una de las capas es infinitamente ancha y está descrita por los siguientes parámetros:

- Espesor en cm
- Índice de refracción
- Coeficiente de absorción μ_a [cm^{-1}]
- Coeficiente de esparcimiento μ_s [cm^{-1}]
- Coeficiente de anisotropía

También se proporcionan los índices de refracción del medio donde incide el haz y el del medio inferior al tejido. A pesar de que en la realidad el tejido no es infinitamente ancho, se puede considerar que es mucho mayor que la extensión espacial de la distribución de los fotones.

Las cantidades que se simulan son:

- Absorción $A(r,z)$
- Fluencia $\phi(r,z)$
- Reflectancia $R(r, \alpha)$
- Transmitancia $T(r, \alpha)$

La simulación propaga los fotones en tres dimensiones, guardando el peso de los fotones absorbido (J cm^{-3} por J de energía irradiada, esto es cm^{-3}) por cada elemento de la malla del arreglo espacial. La fluencia (J cm^{-2} por J de energía irradiada, esto es cm^{-2}) al dividir la energía la absorción A por el coeficiente de absorción.

Se considera un modelo cilíndrico simétrico, por lo que se elige el salvar la absorción de fotones en un arreglo bidimensional $A(r,z)$, a pesar de que la simulación de propagación de fotones se realiza en tres dimensiones.

Se utilizan tres sistemas de coordenadas al mismo tiempo. Un sistema de coordenadas cartesiano se utiliza para trazar los paquetes de fotones. El origen de este sistema coordenado es el punto de incidencia en la superficie del tejido, el eje z es siempre la normal a la superficie apuntando hacia dentro del tejido y el plano x - y es la superficie del tejido.

Un sistema de coordenadas cilíndricas se utiliza para guardar la absorción interna de los fotones $A(r,z)$ donde r & z son las coordenadas radial y axial del respectivamente. Tanto el sistema cartesiano como el cilíndrico comparten el mismo origen y el eje z . La coordenada r se utiliza también para la reflectancia $R(r, \alpha)$ y la transmitancia $T(r, \alpha)$, donde α es el ángulo entre la dirección del fotón saliente y la normal de las superficies del tejido. Finalmente un sistema de coordenadas esférico móvil, cuyo eje z está alineado dinámicamente con la dirección de propagación del fotón, es utilizado para muestrear el cambio en la dirección de propagación del fotón. En este sistema de coordenadas, el ángulo de deflexión θ y el acimutal ψ debido al esparcimiento son muestreados en primer lugar. Después la dirección del fotón es actualizada en términos de los cosenos directores en el sistema de coordenadas cartesiano.

Para la absorción de los fotones se coloca una rejilla homogénea bidimensional en las direcciones r y z . La separación entre cada elemento de la rejilla es Δr y Δz . El número total de elementos de la rejilla es N_r y N_z . Para la reflectancia y la transmitancia se utiliza otra rejilla con las direcciones r y α . Esta rejilla puede compartir la dirección r con la rejilla de absorción. Por lo que solo se requiere colocar la rejilla en la dirección α . En la simulación siempre se selecciona un intervalo de $[0, \pi/2]$. El número total de elementos es N_α , por lo que la separación entre los elementos de la rejilla es $\Delta\alpha = \pi/(2 N_\alpha)$.

Muestreo de las variables aleatorias

Considerando una variable aleatoria χ , la cual es necesaria en la simulación Monte Carlo de la propagación de fotones en el tejido. Esta variable puede ser el tamaño de paso variable que un fotón tendrá entre los sitios de interacción de fotones con el tejido, o el ángulo de desviación que un fotón esparcido puede experimentar debido a un evento de esparcimiento. Hay una función de densidad de probabilidad que define la distribución de χ en el intervalo (a,b) .

$$\int_a^b p(\chi) d\chi = 1$$

Para simular la propagación, se quiere ser capaz de elegir un valor de χ repetidas veces y aleatoriamente en un generador de números aleatorios, ξ , el cual está distribuido uniformemente sobre un intervalo (0,1). La función de distribución acumulada es:

$$F_{\xi}(\xi) = \begin{cases} 0 & \xi \leq 0 \\ \xi & 0 < \xi < 1 \\ 1 & \xi > 1 \end{cases} \quad 2$$

Para muestrear una función distribuida no uniformemente $p(\chi)$, se asume que existe una función no decreciente $\chi = f(\xi)$, que mapea $\xi \in (0,1)$ a $\chi \in (a,b)$. Las variables χ y ξ tiene un mapeo uno a uno. Esto subsecuentemente lleva a la siguiente igualdad de probabilidades.

$$P\{f(0) < \chi \leq f(\xi_1)\} = P\{0 < \xi \leq \xi_1\}$$

ó

$$P\{a < \chi \leq \chi_1\} = P\{0 < \xi \leq \xi_1\}$$

De acuerdo a la definición de funciones de distribución acumulada , la ecuación anterior puede ser cambiada a una ecuación de funciones de distribución acumulada:

$$F_{\chi}(\chi_1) = F_{\xi}(\xi_1)$$

Expandiendo la función de distribución acumulada $F_{\chi}(\chi_1)$ en términos de la correspondiente función de densidad de probabilidad para el lado izquierdo de la ecuación anterior y utilizando la ecuación 2 para el lado derecho, entonces:

$$\int_a^{\chi_1} p(\chi) d\chi = \xi_1 \quad \xi_1 \in (0,1)$$

Esta ecuación se utiliza para resolver χ_1 para obtener la función $f(\xi_1)$. Si la función $\chi = f(\xi)$ se asume como no creciente, una derivación similar dará lugar a la contraparte de la ecuación anterior como:

$$\int_a^{\chi_1} p(\chi) d\chi = 1 - \xi_1 \quad \xi_1 \in (0,1)$$

Sin embargo, dado que $1 - \xi_1$ y ξ_1 tienen la misma distribución, pueden ser intercambiadas. Por lo que las ecuaciones anteriores son equivalentes. El proceso total puede verse en la figura. La clave para la selección de χ utilizando ξ es igualar la probabilidad que ξ está en el intervalo $[0, \xi_1]$ con la probabilidad de que χ está en el intervalo $[a, \chi_1]$. Se debe observar que las áreas sombreadas bajo

las curvas $p(\chi)$ y $p(\xi)$ son iguales a la unidad, como es apropiado para las funciones de densidades de probabilidad. El resultado es un mapeo de uno a uno entre los límites superiores ξ_1 y χ_1 basado en la igualdad de las áreas sombreadas. El proceso de transformación de $\chi_1 = f(\xi_1)$ se muestra por las flechas. Para cada ξ_1 una χ_1 es seleccionado para que las funciones de distribución acumulada de ξ_1 y χ_1 tengan el mismo valor.

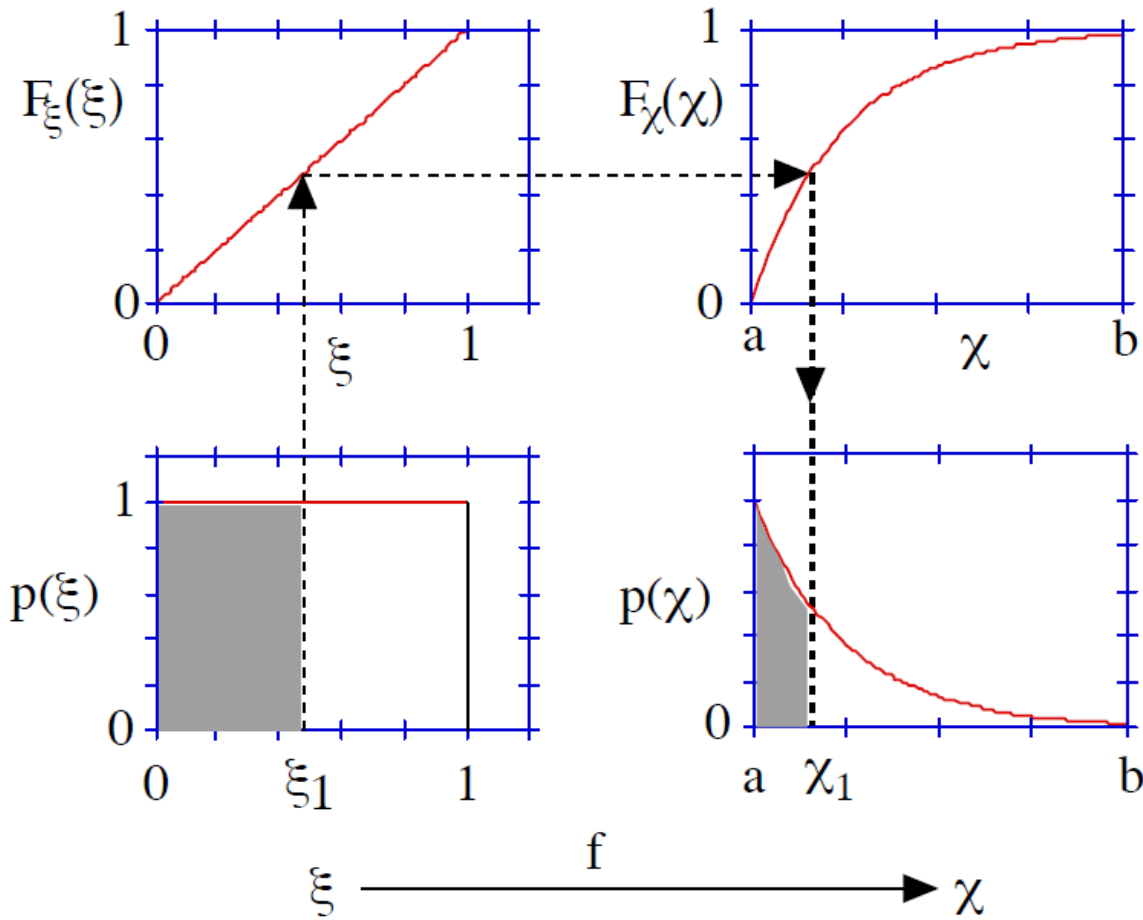


Figura 24. Proceso de mapeo de las variables.

Reglas para la propagación de fotones

Lanzamiento del fotón

A cada fotón se le asigna un peso W igual a 1. el fotón ingresa al tejido de forma ortogonal al tejido en el origen, el cual corresponde a un haz tipo lápiz.

La posición actual del fotón es especificada por las coordenadas cartesianas (x,y,z) . La dirección actual del fotón es especificada por un vector unitario \mathbf{r} , el cual puede ser equivalentemente descrito por los cosenos directores (μ_x, μ_y, μ_z)

$$\mu_x = r \bullet x$$

$$\mu_y = r \bullet y$$

$$\mu_z = r \bullet z$$

Donde **x**, **y** & **z**, son los vectores unitarios a lo largo de cada eje. La posición del fotón es iniciado a cero, y los cosenos directores se colocan a (0, 0, 1). Cuando el fotón es lanzado, si hay un "mismatch" en la frontera del tejido, ocurre cierta reflectancia especular. Si los índices de refracción del medio externo y el tejido son n_1 y n_2 respectivamente, entonces la reflectancia especular R_{sp} es:

$$R_{sp} = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2}$$

Finalmente el peso del fotón debe disminuirse por R_{sp} y reportarse en el archivo de salida.

$$W = 1 - R_{sp}$$

Tamaño del paso del fotón

El tamaño del paso del fotón es calculado basándose en el muestreo de la distribución de probabilidad para el camino libre $s \in [0, \infty]$. De acuerdo a la definición de coeficiente de interacción $\mu_t = \mu_a + \mu_s$, la probabilidad de interacción por unidad de longitud de paso en el intervalo $(s', s' + ds')$ es:

$$\mu_t = \frac{-dP\{s \geq s'\}}{P\{s \geq s'\} ds'}$$

o

$$d\left(\ln\left(P\{s \geq s'\}\right)\right) = -\mu_t ds'$$

La ecuación anterior puede ser integrada sobre s' en el intervalo $(0, s_1)$ y lleva a una distribución exponencial, donde se utiliza $P\{s \geq s'\} = 1$:

$$P\{s \geq s'\} = \exp(-\mu_t s_1) \quad (3.7)$$

La ecuación anterior puede ser re-arreglada para producir la función de distribución de probabilidad del camino libre:

$$P\{s < s_1\} = 1 - \exp(-\mu_t s_1)$$

Esta función de distribución acumulada puede ser asignada a un número aleatorio ξ . La ecuación puede arreglarse para proporcionar un medio de escoger el tamaño del paso.

$$s_1 = \frac{-\ln(1 - \xi)}{\mu_t}$$

O sustituyendo ξ por $(1 - \xi)$:

$$s_1 = \frac{-\ln(\xi)}{\mu_t}$$

Esta ecuación proporciona un camino libre medio entre los sitios de interacción fotón-tejido de $1/\mu_t$ ya que el promedio estadístico de $-\ln(\xi)$ es 1.

En medio turbio multi-capa, el fotón puede experimentar un paso libre sobre las capas del medio antes de que exista una interacción. En este caso la contra parte de la ecuación 3.7 se convierte en:

$$P\{s \geq s_{sum}\} = \exp\left(-\sum_i \mu_{ti} s_i\right)$$

donde i es el índice de la capa, μ_{ti} es el coeficiente de interacción para la i -ésima capa, y s_i es el tamaño del paso en la capa i -ésima. El tamaño del paso total s_{sum} es:

$$s_{sum} = \sum_i s_i$$

La suma sobre todas las capas en las cuales el fotón ha viajado. La ecuación anterior no toma en cuenta ni la reflexión ni la transmisión en las fronteras ya que son procesadas de forma separada. La ecuación de muestreo se obtiene al igualar la ecuación anterior a ξ

$$\sum_i \mu_{ti} s_i = -\ln(\xi)$$

Como puede observarse el método de muestreo involucra el cálculo de una función logarítmica, la cual consume tiempo de cálculo, por lo que es común que se busquen otros métodos para evitar el cálculo de una función logarítmica.

Mover el fotón

Una vez que el paso del fotón fue especificado, el fotón está listo para moverse en el tejido. La posición del fotón es actualizada por:

$$x \leftarrow x + \mu_s s$$

$$y \leftarrow y + \mu_s s$$

$$z \leftarrow z + \mu_s s$$

Las flechas indican la sustitución de las cantidades. Las variables en el lado izquierdo tienen los nuevos valores, y las variables del lado derecho los valores anteriores.

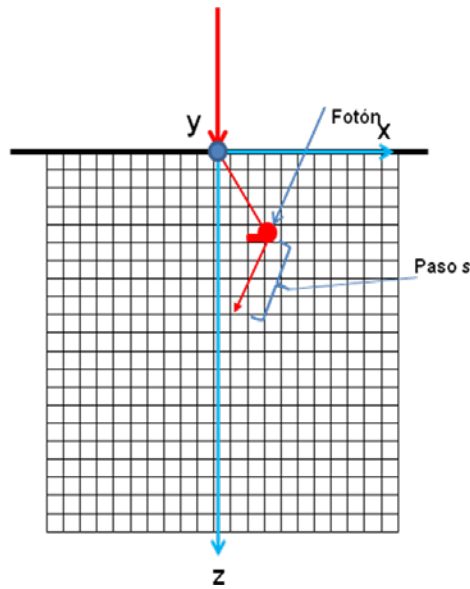


Figura 25. Descripción del cambio de dirección del fotón en el tejido mediante el paso s .

Absorción del fotón

Una vez que el fotón se mueve un paso, se debe de calcular la atenuación del peso del fotón debido a la absorción por la interacción con el sitio. Una fracción del peso del fotón actual, W , se depositará en el elemento de la malla local. La cantidad de peso depositado se calcula:

$$\Delta W = W \frac{\mu_a}{\mu_t}$$

El peso total acumulado $A(r,z)$ depositado en el elemento local de la malla es actualizado al añadir ΔW , así como el peso del fotón se actualiza al restar esta cantidad.

Esparcimiento del fotón

Una vez que el fotón se movió y depositó algo de su peso, sucede el esparcimiento del fotón. Habrá un ángulo de desviación $\theta \in [0, \pi)$ y un acimutal $\psi \in [0, 2\pi)$ que serán muestreados estadísticamente. La distribución de probabilidad para el coseno del ángulo de desviación, $\cos\theta$, esta descrito por la función de esparcimiento }, propuesta por Henyey-Greenstein:

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

donde la anisotropía g equivale a $\langle \cos\theta \rangle$ y tiene un valor entre -1 y 1. Valores de g entre 0.3 y 0.98 para los tejidos son usuales, pero un valor aproximado a 0.9 es muy frecuente en el espectro visible. La selección del $\cos\theta$ expresada en función de la variable aleatoria ξ es:

$$\cos\theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left\{ 1 + g^2 - \left[\frac{1 - g^2}{1 + g^2 - 2g\xi} \right]^2 \right\} & g > 0 \\ 2\xi - 1 & g = 0 \end{cases}$$

Después se muestrea el ángulo acimutal, el cual está uniformemente distribuido sobre el intervalo 0 a 2π .

$$\psi = 2\pi\xi$$

Una vez que se obtuvieron estos ángulos, se calcula la nueva dirección del fotón:

$$\mu'_x = \frac{\sin\theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_x \mu_z \cos\psi - \mu_y \sin\psi) + \mu_x \cos\theta$$

$$\mu'_y = \frac{\sin\theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_x \mu_z \cos\psi - \mu_x \sin\psi) + \mu_y \cos\theta$$

$$\mu'_z = -\sin\theta \cos\psi \sqrt{1 - \mu_z^2} + \mu_z \cos\theta$$

Si el ángulo del fotón está muy cercano a la normal de la superficie del tejido $|\mu_z| > 0.9999$, se pueden utilizar las siguientes ecuaciones:

$$\mu'_x = \sin\theta \cos\psi$$

$$\mu'_y = \sin\theta \sin\psi$$

$$\mu'_z = \text{SIGN}(\mu_z) \cos\theta$$

donde $\text{SIGN}(\mu_z)$ regresa 1 cuando μ_z es positivo y -1 cuando es negativo. Finalmente se actualiza la posición del fotón. Ya que se ven involucrados trigonometrías y estas requieren de un tiempo largo de cálculo, en la programación del método se utilizan otras funciones.

Reflexión o transmisión en las fronteras

Durante su viaje por el tejido, el fotón puede tocar una de las fronteras del tejido con el medio externo (por ejemplo aire) y el fotón puede escapar del tejido o ser reflejado internamente. En este programa se utilizan dos aproximaciones.

En primer lugar se calcula un paso acortado s_1 :

$$s_1 = \begin{cases} (z - z_0) / \mu_z & \mu_z < 0 \\ (z - z_1) / \mu_z & \mu_z > 0 \end{cases}$$

Donde z_0 y z_1 son las coordenadas en z para las fronteras superior e inferior de la capa actual. El paso s_1 es la distancia entre la posición del fotón actual y la frontera en la dirección de la propagación del fotón. Ya que la dirección del fotón es paralela con la frontera cuando μ_z es cero, el fotón no golpeará la frontera. La ecuación anterior no incluye el caso cuando μ_z es cero. Se mueve el fotón a la frontera sin que sufra ninguna interacción con el tejido. El paso del fotón restante que se toma en el próximo paso es actualizado a $s \leftarrow s - s_1$. El fotón viajará el paso restante si es internamente reflejado.

Posteriormente, se calcula la probabilidad de que el fotón sea internamente reflejado, el cual depende del ángulo de incidencia α_i , en la frontera, donde $\alpha_i=0$ significa una incidencia ortogonal, El valor se calcula:

$$\alpha_i = \arccos(|\mu_z|)$$

La ley de Snell indica la relación entre el ángulo de incidencia α_i , el de transmisión α_t , y los índices de refracción del medio donde se encuentra el fotón n_i y a donde se transmite n_t .

$$n_i \sin \alpha_i = n_t \sin \alpha_t$$

La reflectancia interna se calcula mediante la ley de Fresnel.

$$R(\alpha_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(a_i - a_t)}{\sin^2(a_i + a_t)} + \frac{\tan^2(a_i - a_t)}{\tan^2(a_i + a_t)} \right]$$

Luego se determina si el fotón se refleja internamente al generar un número aleatorio ξ y comparándolo con la reflectancia interna.

Si $\xi \leq R(\alpha_i)$, entonces el fotón se refleja internamente

Si $\xi > R(\alpha_i)$, entonces el fotón escapa del tejido.

Si el fotón se refleja internamente, permanece en la superficie y se actualiza sus cosenos directores al invertir la componente z.

$$(\mu_x, \mu_y, \mu_z) \leftarrow (\mu_x, \mu_y, -\mu_z)$$

En este punto, el paso restante debe de ser revisado de nuevo. Si es lo suficientemente largo para golpear la otra frontera, se repite el proceso anteriormente descrito. Si golpea una interfaz tejido-tejido se efectúan los pasos que se describen en la sección siguiente. En otro caso, si el paso es lo suficientemente pequeño para permanecer en la capa del tejido se procesa la absorción y el esparcimiento.

Por otro lado, si el fotón escapa del tejido, se debe de incrementar la reflectancia o la transmitancia del elemento de la rejilla en particular (r, α_i) , actualizándolas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} R_d(r, \alpha_i) &\leftarrow R_d(r, \alpha_i) + W & z = 0 \\ T_i(r, \alpha_i) &\leftarrow T_i(r, \alpha_i) + W & z \text{ es la parte inferior del tejido} \end{aligned}$$

Una vez que el fotón sale del tejido, el trazado del fotón termina.

Una aproximación alternativa a lo que se presento también se puede utilizar. En lugar de considerar un evento todo o nada de reflexión interna, se considera una reflexión parcial. Una fracción $1 - R(\alpha_i)$ del peso del fotón escapa exitosamente del tejido e incrementa los arreglos o de reflectancia o de transmitancia, por ejemplo $R_d(r, \alpha_i) \leftarrow R_d(r, \alpha_i) + W(1 - R(\alpha_i))$. el resto del peso del fotón será reflejado y se actualiza su peso $W \leftarrow WR(\alpha_i)$.

Reflexión o transmisión entre las interfaces de las capas

Si el paso del fotón es lo suficientemente largo para golpear la interfaz tejido/tejido, este paso puede hacer que el fotón cruce varias capas del tejido. Se considera que el fotón intenta realizar un paso de tamaño s en el tejido 1 con parámetros μ_{a1} , μ_{s1} , n_1 , pero golpea la interfaz del tejido 2 con μ_{a2} , μ_{s2} , n_2 después de un paso acortado s_1 . De la misma forma que en el paso anterior, el fotón se mueve sin interacciones y el restante se actualiza $s \leftarrow s - s_1$. Después se determina estadísticamente si el paquete de fotones se refleja o transmite de acuerdo a las ecuaciones de Fresnel. Si el paquete de fotones es reflejado, se procesa de la misma forma que en la sección

anterior. Sin embargo si el fotón se transmite a la siguiente capa del tejido, continua su propagación en lugar de ser terminado. El paso restante tiene que ser convertido de acuerdo a las nuevas propiedades de la capa:

$$s \leftarrow \frac{s\mu_{t1}}{\mu_{t2}}$$

Donde μ_{t1} y μ_{t2} son los coeficientes del tejido 1 y 2. El paso del fotón s es de nuevo revisado para otro cruce con una frontera o interfaz. El proceso se repite hasta que el paso sea lo suficientemente pequeño para que el fotón quede en una capa de tejido. Finalmente se procesa la absorción y el esparcimiento.

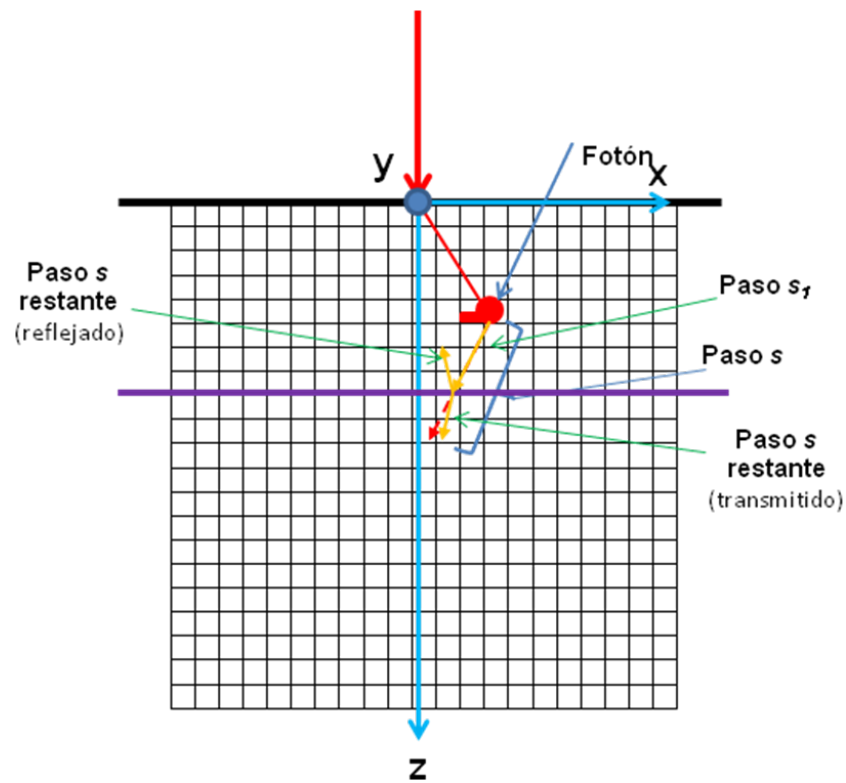


Figura 26. Se ilustra que es lo que sucede cuando un fotón golpea una frontera o interfaz y la longitud del paso s es mayor. Posterior a efectuar el semipaso s_1 , el fotón puede o reflejarse o transmitirse y seguir con la longitud del paso restante.

Finalización del fotón

Un fotón como se observó en las secciones anteriores puede ser terminado al salir del tejido por reflectancia o transmitancia, pero para un fotón que sigue propagándose en el tejido, si el peso del fotón después de varias interacciones, disminuye por debajo de un valor umbral (por ejemplo 0.0001), entonces que se mantenga propagando entregará muy poca información a menos de que se pretenda observar los últimos pasos del fotón. Sin embargo, se requiere de una terminación adecuada para asegurar la conservación de la energía (o el número de fotones), sin desviar la

$$W = \begin{cases} mW & \xi \leq 1/m \\ 0 & \xi > 1/m \end{cases}$$

Ejemplo

#	índice refracción	coef. abs. [cm ⁻¹]	coef. esp. [cm ⁻¹]	anisotropía	espesor [cm]
	1				
1	1.34	0.68	254.0	0.95	0.155
2	1.40	1.09	122.0	0.94	0.200
3	1.44	1.00	669.0	0.77	1.000
	1.37				

En el caso de este programa se requiere de generar un archivo con extensión .mci en donde se colocarán los parámetros para la simulación. El archivo tiene el siguiente formato (Los comentarios en el archivo se inician con el símbolo #):

51

```

1.0                # version del archivo
1                # numero de ejecuciones

#### DATOS ESPECIFICOS PARA EJECUCION 1 [Modelo esofago normal @630 nm]
#InParm           # Parametros de entrada. Se utilizan cm.
xamp13.mco  A      # Nombre de archivo de salida, ASCII.
1000000         # Num. de fotones
0.005 0.01      # dz, dr [cm]
200  500  1     # Num. of dz, dr, da.

3                # Numero de capas
#n      mua    mus    g      d      # Una linea para las propiedades de cada capa
1                # n para el medio superior
1.34  0.68  254.0 0.950 0.155 # capa 1 capa de la mucosa
1.40  1.09  122.0 0.941 0.200 # capa 2 capa del musculo
1.44  1.00  669.0 0.770 1.000 # capa 3 capa del tejido adiposo
1.37                # n para el medio debajo

#FIN DEL ARCHIVO

```

El archivo creado se coloca de preferencia en la misma carpeta que el archivo ejecutable mcml. al ejecutarlo se muestra la siguiente línea:

Ingresar el nombre del archivo (o . para salir):

Se escribe el nombre del archivo con extensión .mci y se presiona "Enter" para comenzar la simulación. Al terminar el programa crea un archivo con el mismo nombre del de propiedades, pero con extensión .mco, el cual incluye todos los resultados de la simulación.

Este archivo.mco puede ingresarse a Matlab y abrirse con la función diseñada getmcml('archivo.mco') el cual mostrará los resultados en forma gráfica de la simulación. En las siguientes figuras se muestran los resultados obtenidos para el ritmo de fluencia F, la reflectancia R, la transmitancia T y un mapeado en 2D del ritmo de fluencia en la área de análisis del tejido.

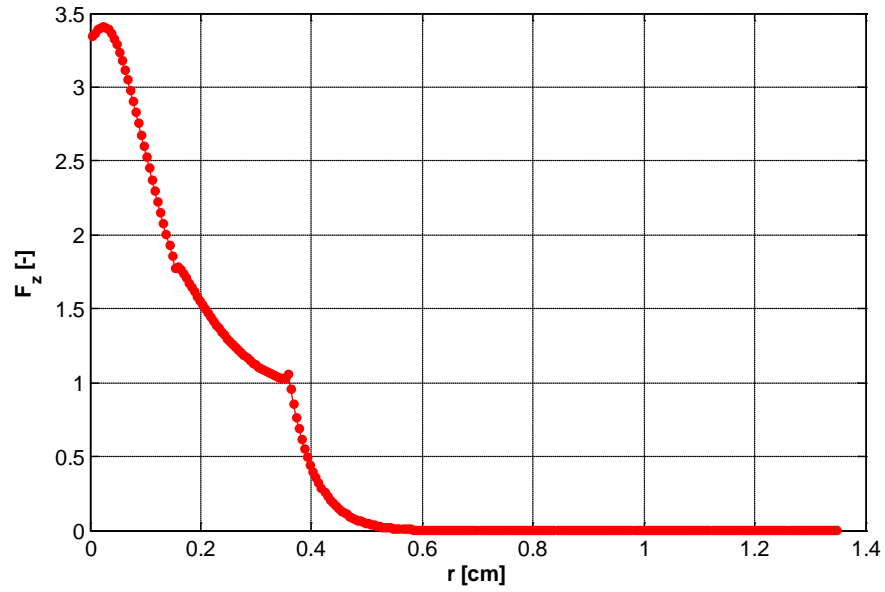


Figura 27. Ritmo de fluencia F obtenido de la simulación sobre el eje z con respecto a la distancia de la fuente. Se observa los puntos en donde se localizan las interfaces de las capas del tejido.

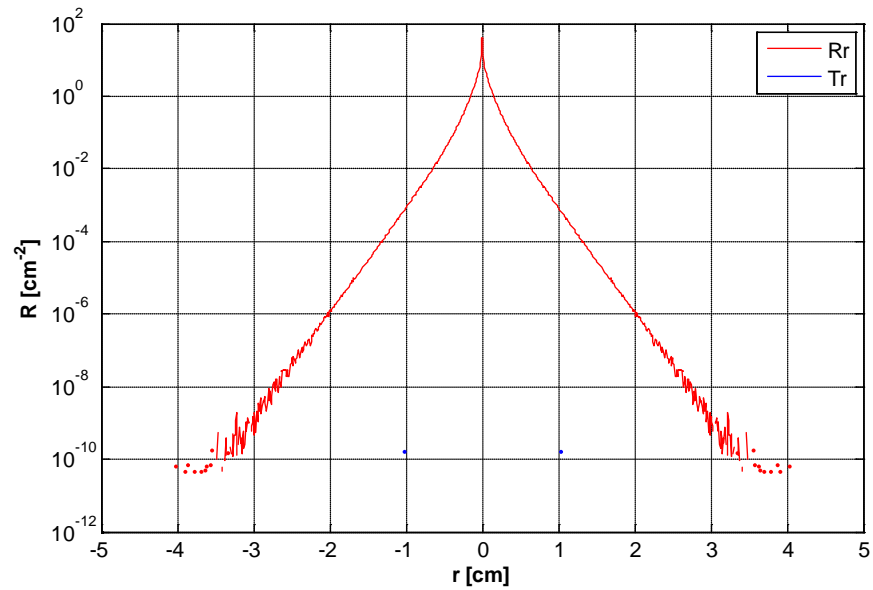


Figura 28. Reflectancia difusa obtenida en la frontera superior del tejido y la transmisión de luz en la frontera inferior. Se observa que el valor de la transmisión es cero.

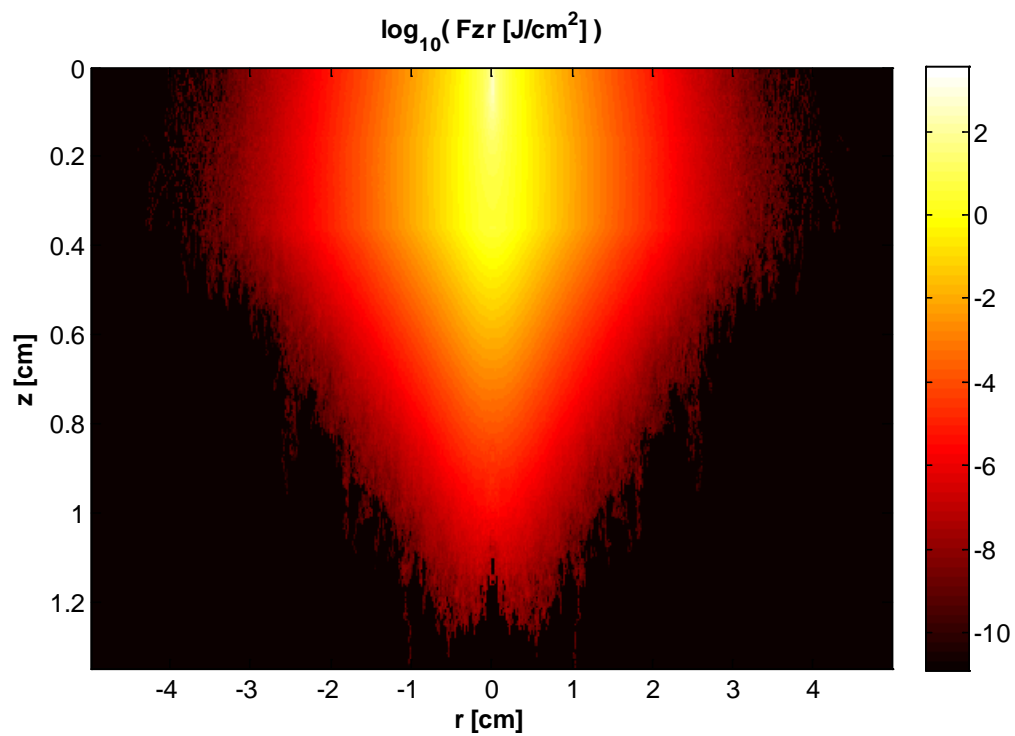


Figura 29. Mapa del ritmo de fluencia en 2D de un corte sobre el plano x-z.

Convolución de haces de fotones de tamaño finito

El resultado de la simulación mcml es para un haz infinitamente delgado que incide a la cormal a la superficie. Esta respuesta se le llama respuesta al impulso. Sin embargo los haces reales tienen un tamaño finito, el cual puede ser simulado por medio de Monte Carlo, sin embargo se requiere de un gran número de fotones para obtener una respuesta con varianza aceptable y esto requiere de un mayor tiempo de cálculo. Sin embargo dado que el sistema que se está tratando es lineal e invariante. Entonces, si se asume que el haz de fotones de tamaño finito es colimado, la respuesta de un haz de fotones infinitamente delgado será una función de Green del sistema del tejido y la respuesta del haz de tamaño finito pueda ser calculada de la convolución de la función de Green de acuerdo al perfil del haz del tamaño finito.

Hay que observar que estas respuestas pueden ser la distribución de absorción interna, de la reflectancia o de la absorción. Se denota las respuestas como $C(x,y,z)$, a pesar de que no se trate de una función de tres variables en las tres coordenadas. Tal degeneración debido a la simetría se discutirá posteriormente. Se va a denotar la función de Green como $G(x,y,z)$. Ya que el haz de fotones es normalmente incidente en la superficie, esta función $G(x,y,z)$ posee simetría cilíndrica. Si el haz de fotones colimado como la fuente tiene un perfil de intensidad $S(x,y)$, las repuestas puede ser obtenidas a través de la convolución:

$$C(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x', y - y', z) S(x', y') dx' dy' \quad (1a)$$

O a través de la transformación de variables con $x''=x-x'$ & $y''=y-y'$:

$$C(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(x'', y'', z) S(x - x'', y - y'') dx'' dy'' \quad (1b)$$

En la ecuación (1a), la función de Green es una función de la distancia entre el punto de origen (x',y') y el de observación (x,y) , donde la distancia es:

$$d' = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2} \quad (2)$$

Si el perfil de intensidad $S(x',y')$ de la fuente tiene también simetría cilíndrica, $S(x', y')$ es solo una función del radio del punto fuente (x',y') con respecto al origen del sistema de coordenada, donde el radio es:

$$r = \sqrt{x'^2 + y'^2} \quad (3)$$

Entonces la ecuación (1a) puede ser reformulada considerando estas simetrías:

$$C(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G\left(\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}, z\right) S\left(\sqrt{x'^2 + y'^2}\right) dx' dy' \quad (4a)$$

De manera similar, la ecuación (1b) puede reescribirse:

$$C(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G\left(\sqrt{x'^2 + y'^2}, z\right) S\left(\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}\right) dx' dy' \quad (4b)$$

Dada su simetría cilíndrica, el problema puede ser manejado de forma más sencilla en un sistema de coordenadas cilíndricas:

$$C(r, z) = \int_0^{\infty} S(r') r' \left[\int_0^{2\pi} G\left(\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}, z\right) d\theta' \right] dr' \quad (5a)$$

$$C(r, z) = \int_0^{\infty} G(r'', z) r'' \left[\int_0^{2\pi} S\left(\sqrt{r^2 + r''^2 - 2rr'' \cos \theta''}, z\right) d\theta'' \right] dr'' \quad (5b)$$

La ecuación (5b) es mejor de utilizar en el cálculo ya que su integración sobre θ'' es independiente de z . Esta integración tiene que ser calculada una vez para todas las profundidades. En algunos casos, la integral en θ'' puede ser expresada analíticamente, entonces la integral bidimensional se convierte en una unidimensional.

La transformación de las variables se muestra en la figura 23. El primer sistema de coordenadas (r', θ', z) tiene un origen en el centro de la fuente, como se muestra en la figura 23a y en la ecuación (5a). El punto de observación está en $(r, 0)$. Una región incremental de la fuente está localizada en (r', θ') y tiene un valor de $S(r')$. La distancia entre el punto fuente y el de observación es igual a:

$$\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}$$

El segundo sistema de coordenadas (r'', θ'', z) tiene un origen en el centro de observación, como se muestra en la figura 23b y en la ecuación (5b). La fuente está centrada en $(r, 0)$. Una región incremental de la fuente está localizada en (r'', θ'') y tiene un valor de $S(d'')$, donde d'' es igual a

$$\sqrt{r^2 + r''^2 - 2rr'' \cos \theta''}$$

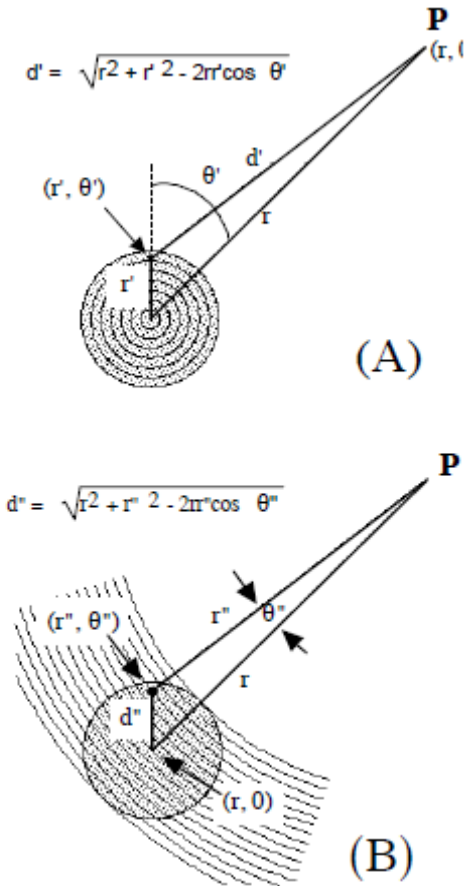


Figura 30. Ilustración de la transformación entre los dos sistemas de coordenadas. El círculo punteado es la fuente láser y P es el punto de observación. Las líneas circulares representan esquemáticamente la integración en (5a) & (5b).

Convolución con haces gaussianos

En el caso de los haces gaussianos, si se ignora la divergencia, la convolución mostrada anteriormente puede ser aplicada. Si el radio $1/e^2$ del haz gaussiano está denotado por R, el perfil de intensidad del haz es:

$$S(r') = S_0 \exp\left(-2(r'/R)^2\right) \quad (6)$$

Donde la intensidad en el centro ($r=0$), S_0 , está relacionado a la potencia total P por:

$$S_0 = 2P / (\pi R^2) \quad (7)$$

Sustituyendo en la ecuación (5b) la convolución se convierte en:

$$C(r, z) = S(r) \int_0^\infty G(r'', z) \exp\left(-2(r''/R)^2\right) \left[\int_0^{2\pi} \exp\left(4rr'' \cos \theta'' / R^2\right) d\theta'' \right] r'' dr'' \quad (8)$$

La integración en los paréntesis cuadrados recuerda a la representación integral de la función de Bessel modificada:

$$I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \sin \theta) d\theta \quad (9a)$$

La cual puede reescribirse como:

$$I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos \theta) d\theta \quad (9b)$$

La ecuación (8) puede escribirse al sustituir la ecuación (9b):

$$C(r, z) = S(r) \int_0^\infty G(r'', z) \exp\left(-2(r''/R)^2\right) I_0(4rr''/R^2) 2\pi r'' dr'' \quad (10)$$

Donde I_0 es la función Bessel modificada de orden cero.

Convolución con haces planos

Si el haz de fotones es homogéneo con un radio R y colimado, la función de la fuente se vuelve

$$S(r') = \begin{cases} P / (\pi R^2) & r' \leq R \\ 0 & r' > R \end{cases} \quad (11)$$

Donde P es la potencia total del haz. Sustituir la ecuación (11) en la (7b), la convolución se vuelve:

$$C(r, z) = P / (\pi R^2) \int_0^\infty G(r'', z) I_\theta(r, r'') 2\pi r'' dr'' \quad (12)$$

Donde la función $I_\theta(r, r'')$ es:

$$I_\theta(r, r'') = \begin{cases} 1 & R \geq r + r'' \\ \frac{1}{\pi} \arccos\left(\left(r^2 + r''^2 - R^2\right) / (2rr'')\right) & |r - r''| \leq R < r + r'' \\ 0 & R < |r - r''| \end{cases} \quad (13)$$

De la ecuación (13) y la figura (26b), los límites de la integración en la ecuación (12) puede ser cambiada en un región finita:

$$C(r, z) = P / (\pi R^2) \int_a^{r+R} G(r'', z) I_\theta(r, r'') 2\pi r'' dr'' \quad (14a)$$

donde:

$$a = \max(0, r - R) \quad (14b)$$

donde la función max toma el más grande de los dos argumentos.

Las líneas circulares en la figura (26b) ilustra el segundo caso en la ecuación (13) donde el punto de observación P está fuera de la fuente. Cuando el punto P está fuera de la fuente, el primer caso de la ecuación (13) nunca se satisface.

Un caso especial de un haz plano circular, se deja que R tienda a infinito, lo que representa un haz plano infinito. En este caso la potencia total P también se acerca a infinito, pero se puede utilizar la densidad de potencia para describir la intensidad del haz. La convolución para este caso puede ser acompletada al dejar simplemente que $R \rightarrow \infty$ y $P / (\pi R^2) \rightarrow S$, donde S es la densidad de potencia o irradiancia (W/cm^2), en la ecuación (14). $I_\theta(r, r'')$ será 1 por lo que la ecuación (14) es:

$$C(r, z) = S \int_0^\infty G(r'', z) 2\pi r'' dr'' \quad (15)$$

Ejemplo:

Al ejecutar el programa CONV, se muestra los siguiente en la línea de comandos.

Menu principal (h para ayuda) =>

Para mostrar los comandos disponibles se presiona la letra "h" y se da enter. Se muestra la siguiente información detallando los comandos principales del programa:

```
i = Ingresar el nombre del archivo de salida de la simulacion MCML.
b = Especificiar el tipo de haz de incidencia.
r = Resolucion de la convolucion.
e = Error de convolucion.
oo = Datos de salida original.
oc = Datos de salida de la convolucion.
co = Salida de contorno de los datos originales.
cc = Salida de contorno de los datos convulocionados.
```

so = Escaneo de salida de los datos originales.
sc = Escaneo de salida de los datos convulocionados.
q = Salir

* [[Los comandos distinguen mayusculas y minusculas]]

Se mostrará a continuación los detalles de cada comando.

Comando "i"

Al ingresar en esta parte del menú, se debe proporcionar el nombre del archivo de salida de la simulación del programa mcml. Al ingresar se muestra lo siguiente en la línea de comandos:

Ingresa el nombre de archivo de la salida de mcml (o presionar . para quitar):

Se debe ingresar el nombre como archivo.mco. Al escribir el nombre del archivo y presionar enter, el programa regresa al menú de forma automática. En caso de que el archivo seleccionado no se encuentre, el programa seguirá pidiendo que se ingrese un nombre de archivo. En caso de que el archivo exista, pero no sea un archivo de salida .mco, el programa se cerrará.

Comando "b"

Al ingresar a este comando, se pide que se ingrese el tipo y parámetros del haz incidente. Al escribir b y presionar enter el sistema muestra lo siguiente:

Perfil del haz: p =plano, g = Gaussiano. q=salir

Posteriormente dependiendo de si selecciona un haz gaussiano o plano se pide que se ingrese el parámetro de energía del haz (para ambos haces):

Energía total del haz plano [J]:

Y el radio del haz en el caso del haz plano:

Radio del haz plano [cm]:

O el radio de cintura del haz Gaussiano:

Radio 1/e2 del haz Gaussiano [cm]:

Se recomienda que el radio del haz sea al menos 3 veces la separación de la rejilla en la dirección r, utilizada en la simulación mcml. Se muestra al final los parámetros ingresados:

Potencia Total: 1 J, & radio: 1 cm

Comando "r"

Este comando es utilizado para cambiar la separación de la rejilla y el número de elementos en ella en la dirección r de la convolución. Ya que toma los valores del archivo de mcml ingresado, no es necesario ingresar a este comando a menos de que se requiera cambiar los datos. El máximo radio de convolución no debe de ser mayor que el del archivo de salida mcml para obtener buenos resultados. El comando muestra los valores leídos del archivo y los que se desean ingresar.

```
Resolución actual:      0.1 cm & número de puntos: 100
Resolución de entrada en la dirección r [cm].
Ingresar el número de puntos en la dirección r:
```

Comando "e"

El cálculo de la convolución es realizado de forma iterativa. La iteración se detiene cuando la diferencia entre el nuevo estimado y el viejo de la integración es una parte pequeña del nuevo estimado. Esta pequeña proporción puede ser controlada por el usuario mediante este comando. Este valor está entre 0 y 1. Valores pequeño proporcionan mejores resultados pero mayores tiempos de cálculo y viceversa. Normalmente se recomienda utilizar un valor entre 0.001 y 0.1. El valor por defecto es 0.1.

```
Error de convolución relativo
Valor actual es  0.1 (0.001-0.1 es recomendado):
```

Comando "oo"

En este comando se permite obtener los datos originales del archivo de salida de la simulación mcml en varios formatos, los cuales se muestran en el menú del comando.

```
>Datos de salida original (h para ayuda) => h
```

Al presionar h se muestra el menú de opciones:

```
I   = Parametros de entrada de mcml
3   = reflectancia, absorcion, & transmitancia
AL  = absorcion vs capa [-]
Az  = absorcion vs z [1/cm]
Arz = absorcion vs r & z [1/cm3]
Fz  = fluencia vs z [-]
Frz = fluencia vs r & z [1/cm2]
Rr  = Reflectancia difusa vs radio r [1/cm2]
Ra  = Reflectancia difusa vs angulo alpha [1/sr]
Rra = Reflectancia difusa vs radio & angulo a [1/(cm2 sr)]
```

Tr = transmitancia vs radio r [1/cm2]
 Ta = transmitancia vs angulo alpha [1/sr]
 Tra = transmitancia vs radio & angulo [1/(cm2 sr)]
 K = Formato Keijzer
 Q = Regresar al menu principal
 * nombre de archivo de entrada: xxxx.mco

Al presionar el comando, el programa pedirá que se ingrese el nombre del archivo de salida con los datos, por ejemplo para la reflectancia difusa contra el radio:

Ingresar el nombre del archivo de salida con extensión .Rr (o . para salir):

En estos comando se "desmenuza" el archivo de salida mcm1 para tener los datos de cada una de las cantidades requeridas en archivos por separado. Todos los comando indican cual es la cantidad de salida y en que unidades. En el caso del comando "K" se trata de obtener el archivo de salida con el formato del programa desarrollado por Marleen Keijzer desarrollado en PASCAL. En el caso de salidas de arreglos unidimensionales (por ejemplo "AZ") el archivo de salida presenta dos columnas, la primera es la variable independiente (z) y la segunda es la cantidad física (Absorción A(z)). En el caso de arreglos bidimensionales (por ejemplo "Arz"). Las dos primeras son las coordenadas r & z respectivamente y la tercera muestra la Absorción A(r,z).

Comando "oc"

Con este comando, se pueden obtener los valores de salida de la convolución.

>Datos de salida convolucionados (h para ayuda) => h

Al presionar h se despliega el menú:

Arz = Absorcion vs r & z [J/cm3]
 Frz = Fluencia vs r & z [J/cm2]
 Rr = Reflectancia difusa vs radio r [J/cm2]
 Rra = Reflectancia difusa vs radio & angulo [J/(cm2 sr)]
 Tr = Transmitancia vs radio r [J/cm2]
 Tra = Transmitancia vs radio & angulo [J/(cm2 sr)]
 Q = Salir al menu principal
 * ingresar el nombre del archivo: xxxx.mco

De la misma forma que en el comando "oo", el programa pide el archivo de salida con una extensión específica para guardar los valores de convolución obtenidos y así mismo, en los arreglos unidimensionales se crean archivos con dos columnas que indican la variable independiente y la cantidad convolucionada y en el caso de los arreglos bidimensionales, las dos cantidades de las coordenadas cilíndricas en las dos primeras columnas y los valores convolucionados en la tercera.

Comando "co"

Una de las formas de representar los datos de salida de la simulación, es mediante curvas de contorno. En este comando es posible obtener varias de las cantidades simuladas (de los arreglos bidimensionales) en este formato de contornos

>Salida de contorno de los datos de mcml (h para ayuda) => h

Al presionar h se despliega el menú:

```
A = Absorcion vs r & z [J/cm3]
F = Fluencia vs r & z [J/cm2]
R = Reflectance difusa vs radio vs angulo [J/(cm2 sr)]
T = Transmitancia vs radio vs angulo [J/(cm2 sr)]
Q  = Salir al menu principal
* Ingresar nombre de archivo: xxxx.mco
```

Ya que solo se aceptan arreglos bidimensionales, solo hay cuatro cantidades físicas disponibles. Una vez que se inicie un comando, el programa mostrará el archivo de salida y los isovalores de la gráfica de contorno. El intervalo de de la cantidad física se muestra y los isovalores son proporcionados por el usuario. Se pueden ingresar tantos isovalores como se quieran, la única limitante es la memoria del sistema.

Ingresar el nombre del archivo de salida con extension .iso (o . para salir): isov.iso

El intervalo de los valores es 0.543213 a 2000.095134.

Ingresar un isovalor o presionar . para terminar: 100

Ingresar un isovalor o presionar . para terminar: 10

Ingresar un isovalor o presionar . para terminar: 1

Ingresar un isovalor o presionar . para terminar: .

Comando "cc"

De la misma forma que en el comando "co", con "cc" se obtienen los datos para las gráficas de contorno de los datos convolucionados.

>Contornos de salida de los datos convolucionados (h para ayuda) => h

Al presionar h se despliega el menú:

```
A = Absorcion vs r & z [J/cm3]
F = Fluencia vs r & z [J/cm2]
R = Reflectance difusa vs radio vs angulo [J/(cm2 sr)]
T = Transmitancia vs radio vs angulo [J/(cm2 sr)]
```

```
Q    = Salir al menu principal
* Ingresar nombre de archivo: xxxx.mco
```

Comando "so"

Una de las formas de representar arreglos bidimensionales es escribir los datos en dos columnas, donde ambas representan la cantidad física como función de una de las variables independientes. La otra variable esta fija en un cierto valor el cual es seleccionado por el usuario. Este formato se le puede llamar salida por barrido.

```
>Análisis (escaneo) de los datos mcml (h para ayuda): h
```

```
Ar = Absorcion vs r @ z fija [J/cm3]
Az = Absorcion vs z @ r fija [J/cm3]
Fr = Fluencia vs r @ z fija [J/cm2]
Fz = Fluencia vs z @ r fija [J/cm2]
Rr = Reflectancia difusa vs r @ angulo fijo [J/(cm2 sr)]
Ra = Reflectancia difusa vs angulo @ r fijo [J/(cm2 sr)]
Tr = Transmitancia vs r @ angulo fijo [J/(cm2 sr)]
Ta = Transmitancia vs angulo @ r fijo [J/(cm2 sr)]
Q    = Salir
* input filename: xxxxxx.mco
```

Por ejemplo al seleccionar Ar se presenta:

```
Ingresar el nombre del archivo de salida con extension .Ars (o . para salir): Arfijo.Ars
```

```
separación de la rejilla en z es 0.1 cm
Ingresar índice con z fija (0-99):
```

El programa muestra cual es la separación de la rejilla y después el número de elementos de la rejilla en la dirección z (en este caso 100). El programa creará un archivo con dos columnas. La primera es r y la segunda es la absorción (z está fija en el punto donde se haya seleccionado).

Comando "sc"

De la misma forma que en el comando "so", este comando fija una de las cantidades para mostrar los valores de la cantidad física en ese punto.

```
>Análisis (escaneo) de los datos convolucionados (h para ayuda): h
```

```
Ar = Absorcion vs r @ z fija [J/cm3]
Az = Absorcion vs z @ r fija [J/cm3]
```


Fr = Fluencia vs r @ z fija [J/cm2]
 Fz = Fluencia vs z @ r fija [J/cm2]
 Rr = Reflectancia difusa vs r @ angulo fijo [J/(cm2 sr)]
 Ra = Reflectancia difusa vs angulo @ r fijo [J/(cm2 sr)]
 Tr = Transmitancia vs r @ angulo fijo [J/(cm2 sr)]
 Ta = Transmitancia vs angulo @ r fijo [J/(cm2 sr)]
 Q = Salir
 * input filename: xxxxxx.mco

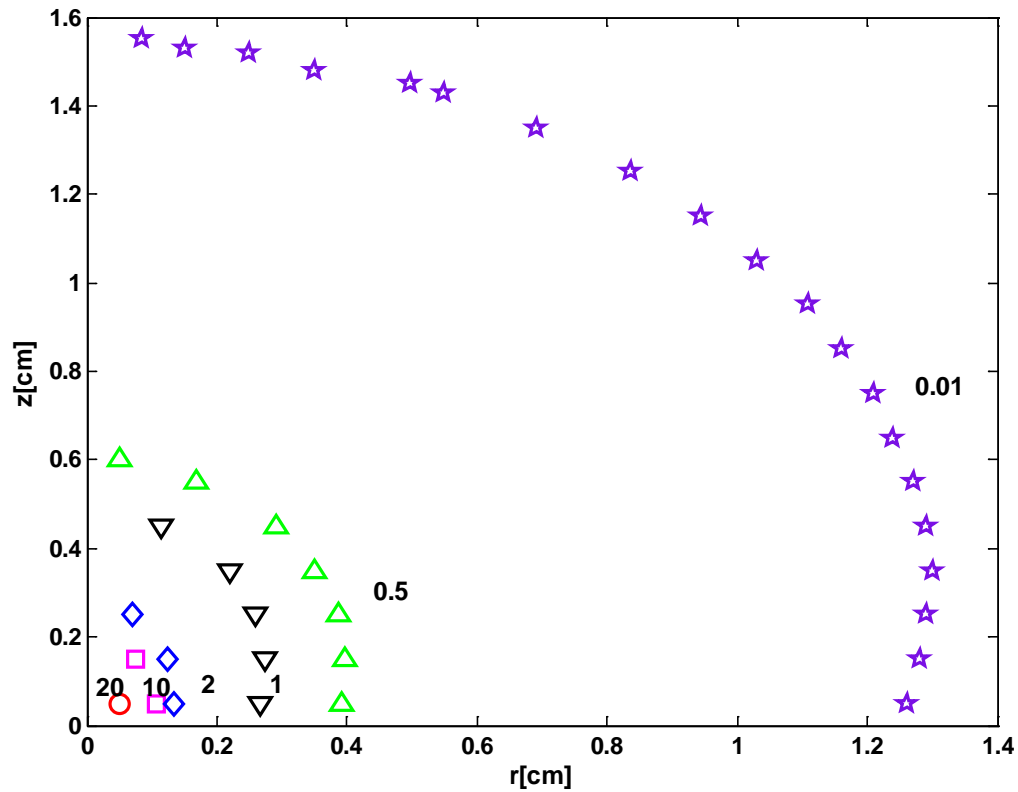


Figura 31. Gráfica de contornos de absorción con respecto a las coordenadas r & z . Se muestran los valores de 0.01, 0.5, 1, 2, 10 y 20 cm^{-3} .