

Monte Carlo simulacija transporta fotona kroz tkivo

Tičinović, Vita

Undergraduate thesis / Završni rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, Faculty of Science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:166:207358>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-19**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Science](#)



Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno-matematički fakultet

**Monte Carlo simulacija transporta fotona kroz
tkivo**

Završni rad

Vita Tičinović

Split, srpanj 2024.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno–matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Monte Carlo simulacija transporta fotona kroz tkivo

Vita Tičinović

Sveučilišni prijediplomski studij Fizika

Sažetak:

Svaki materijal određen je svojom dimenzijom te svojim optičkim svojstvima - koeficijentima apsorpcije, koeficijentima raspršenja i anizotropnim faktorom. Cilj ovog rada je simulirati prolazak svjetlosti, odnosno fotona, kroz dva sloja materijala. Tijekom prolaska kroz materijal, fotoni mogu interagirati s atomima materijala tako da se transmitiraju, rasprše ili apsorbiraju. Pomoću Monte Carlo simulacije generiramo nasumičan slobodan put paketa fotona, te računamo vrijednosti transmisije i difuzne refleksije. Transmisija i difuzna refleksija s povećanjem broja fotona u paketu pokazuju oscilirajuće ponašanje prije konvergencije u stabilne vrijednosti. Putanja fotona odražava stohastičku prirodu simulacije. Promjenom debljinom materijala transmisija se ponaša u skladu s Beer-Lamberovim zakonom, a difuzna refleksija pokazuje konvergirajuće ponašanje. Simulacija je primjenjiva na razne probleme u fizici, medicini i ostalim srodnim znanostima, jer daje dobar uvid u ponašanje fotona pri prolasku kroz slojevite strukture.

Ključne riječi: fotoni, apsorpcija, transmisija, raspršenje, Monte Carlo, stohastički pristup

Rad sadrži: 20 stranica, 13 slika, 2 tablice, 9 literaturnih navoda. Izvornik je na hrvatskom jeziku.

Mentor: izv. prof. dr. sc. Petar Stipanović

Ocjenjivači: Petar Stipanović, izv. prof. dr. sc.
Ivo Jukić, dr. sc.
Josipa Šćurla, mag. phys.

Rad prihvaćen: 11. 7. 2024.

Rad je pohranjen u Knjižnici Prirodoslovno–matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Monte Carlo simulation of photon transport through tissue

Vita Tičinović

University undergraduate study Physics

Abstract:

Each material is defined by its dimensions and optical properties - absorption coefficients, scattering coefficients, and anisotropic factor. The aim of this paper is to simulate the passage of light, or photons, through two layers of material. During their passage through the material, photons can interact with the atoms of the material by transmitting, scattering, or absorbing. Using Monte Carlo simulation, we generate a random free path of a photon packet and calculate the values of transmission and diffuse reflection. As the number of photons in the packet increases, transmission and diffuse reflection exhibit oscillatory behavior before converging to stable values. The path of photons reflects the stochastic nature of the simulation. By varying the thickness of the material, transmission behaves according to the Beer-Lambert law, while diffuse reflection shows convergent behavior. This simulation is applicable to various problems in physics, medicine, and other related sciences, as it provides a good insight into the behavior of photons as they pass through layered structures.

Keywords: photons, absorption, transmission, scattering, Monte Carlo, stochastic approach

Thesis consists of: 20 pages, 13 figures, 2 tables, 9 references. Original language: Croatian.

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Petar Stipanović

Reviewers: Petar Stipanović, Assoc. Prof. Dr.
Ivo Jukić, Dr.
Josipa Šćurla, MSc. Phys.

Thesis accepted: July 11, 2024.

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1	Uvod	1
1.1	Interakcija fotona s materijalom	1
2	Monte Carlo	3
3	Postupak rješavanja	3
4	Rezultati	7
4.1	Promjenjiv broj fotona	7
4.2	Promjenjiva debljina materijala	9
5	Zaključak	12
A	Kod za simulaciju	16

1 Uvod

Monte Carlo simulacije računalni su algoritmi koji koriste veliki broj slučajnih brojeva za rješavanje problema kada je analitičko rješenje teško ostvarivo. Metoda je nazvana po gradu Monte Carlu, poznatom po kockarnicama, zbog sličnosti s nasumičnim uzorkovanjem u igrama na sreću. Prvobitno nazvane "model uzorkovanja" u statistici, Monte Carlo metode dobile su današnji oblik 1946. godine zahvaljujući Stanisławu Ulamu i Johnu von Neumannu, koji su ih koristili za rješavanje problema difuzije neutrona u fisijskom materijalu tijekom rada na razvoju nuklearnog oružja u "Los Alamos National Laboratory-ju". [1]

U ovom radu predstaviti ćemo pojednostavljenu verziju njihovog eksperimenta i primijeniti je za simulaciju širenja svjetlosti (fotona) u tkivu.

1.1 Interakcija fotona s materijalom

Svjetlost se sastoji od kvanta svjetlosti, elementarnih čestica koje nazivamo fotonima. Fotoni nemaju masu niti električni naboj, ali mogu interagirati s materijom na različite načine.

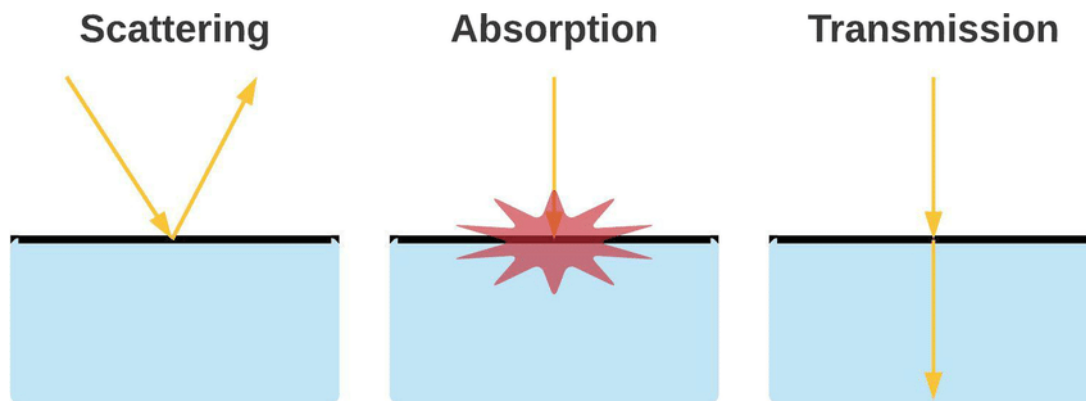
Kada svjetlost upada na materijal, fotoni se mogu apsorbirati, pri čemu predaju svoju energiju atomima materijala, a ta se energija potom oslobađa u okolinu u obliku topline. Različiti materijali pokazuju različite stupnjeve apsorpcije svjetlosti. Na primjer, prozirni materijali poput stakla propuštaju svjetlost uz minimalnu apsorpciju, dok neprozirni materijali poput metala snažno apsorbiraju svjetlost. Optičko svojstvo materijala, koje određuje mogućnost apsorpcije fotona po jedinici debljine, nazivamo apsorpcijski koeficijent i označavamo sa σ_a . [2]

Fotoni se također mogu raspršiti, pri čemu mijenjaju svoj smjer kretanja kroz materijal. Ovisno o vrsti materijala, fotoni se mogu raspršiti u nasumičnim smjerovima, što nazivamo izotropno¹ raspršenje, dok se raspršenje fotona unutar preferiranog smjera, usmjereno na izvorni smjer putanje fotona, naziva anizotropno raspršenje. Izotropno i anizotropno raspršenje razlikujemo prema faktoru g , koji je jedno od optičkih svojstava bioloških tkiva te predstavlja mjeru kutne raspodjele raspršene svjetlosti u mediju. Anizotropni faktor se kreće u rasponu od -1 do 1, gdje vrijednost $g = -1$ odgovara savršenom raspršenju unatrag, $g = 0$ odgovara izotropnom raspršenju te $g = 1$ odgovara savršenom raspršenju prema naprijed. [3] Anizotropni koeficijent stoga doprinosi i takozvanom koeficijentu raspršenja σ_r , čija je uloga analogna koeficijentu apsorpcije. Zbrojem ova dva koeficijenta određujemo koliko je vjerojatno da foton nestane unutar materijala (tj. da bude apsorbiran ili raspršen). Njihov zbroj definira novu varijablu - koeficijent izumiranja σ_t .

Konačno, ako se fotoni ne apsorbiraju niti reflektiraju, prolaze kroz materijal neometano,

¹iz grčkog jezika isos, tropos, "koji se vlada na isti način"

odnosno transmitiraju se. [2] Opisani načini interakcije fotona s materijom prikazani su na slici 1.



Slika 1: Interakcija fotona s materijom. Na slici je prikazan proces raspršenja (eng. scattering), apsorpcije (eng. absorption) i transmisije (eng. transmission). Slika preuzeta iz [4].

Tijekom prolaska svjetlosti kroz materijal, fotoni prolaze od atoma do atoma te prate nekakav nasumičan hod zbog čega neki fotoni napuste materijal na istoj strani kroz koju su i došli u materijal, a neki fotoni napuste materijal na suprotnoj strani. Fotoni koji napuste materijal na istoj strani kroz koju su i ušli u njega čine difuznu refleksiju R_d . Oni fotoni koji napuste materijal na suprotnoj strani čine transmisiju T . Transmisiju računamo prema Beer-Lambertovom zakonu

$$T = e^{-(\sigma_a + \sigma_r)x} = e^{-\sigma_t x}, \quad (1.1)$$

gdje je x udaljenost koju foton prijeđe tijekom svog puta kroz materijal. Iz (1.1) vidimo da je transmisija opisana eksponencijalnom funkcijom, te što je veća udaljenost x , to transmisija brže opada jer se tijekom puta sve više fotona apsorbira. [2]

Tijekom prolaska kroz materijal, svaki foton ima svoju "sudbinu". Dio fotona će se apsorbirati ili raspršiti odmah pri ulasku svjetlosti u materijal, dok će neki drugi fotoni prijeći puno veću udaljenost prije interakcije. Dio fotona uopće neće interagirati s atomima. Udaljenost na kojoj foton interagira s atomom predstavlja duljinu slobodnog puta, a ta je duljina nasumična. Vjerojatnost da će se foton apsorbirati ili raspršiti stoga želimo prikazati kao funkciju puta x

$$P(x) = \sigma_t e^{-\sigma_t x}, 0 < x < \infty, \quad (1.2)$$

gdje prepoznamo eksponencijalnu funkciju iz (1.1). Ovaj izraz nazivamo gustoća vjerojatnosti (eng. *Probability density function, PDF*). Slobodni put uvijek mora biti pozitivna vrijednost, jer predstavlja nekakvu udaljenost. Zanimljivost izraza (1.2) jest upravo u eksponencijalnoj ovisnosti vjerojatnosti interakcije fotona s atomom o udaljenosti. Vjerojatnost je manja kako put raste, iako bismo možda očekivali da se vjerojatnost interakcije povećava tijekom puta. [2]

2 Monte Carlo

Tijek Monte Carlo simulacije može se sažeti u nekoliko ključnih koraka. Za početak je potrebno jasno definirati problem koji želimo simulirati, uključujući identifikaciju ulaznih i izlaznih varijabli. Ulazne varijable se zatim generiraju prema odgovarajućim distribucijama. [5] Metoda koju koristimo naziva se "metoda uzorkovanja inverzne transformacije" (eng. *Inverse Transform Sampling method*) pomoću koje definiramo kumulativnu distribuciju (eng. *cumulative distribution function, CDF*). Funkcija kumulativne distribucije koristi se za opisivanje distribucije vjerojatnosti slučajnih varijabli. U našem slučaju, CDF definira vjerojatnost interakcije fotona s atomom unutar bilo koje udaljenosti manje od određene dane vrijednosti x te je dana kao

$$CDF(x) = Pr(\text{udaljenost} < x). \quad (2.1)$$

Ova metoda koristi se tako da se zamijene ulazna i izlazna varijabla CDF-a i inverznog CDF-a. Vjerojatnost, koja je izlazna varijabla CDF-a, postaje ulazna varijabla za inverzni CDF, dok ulazna varijabla CDF-a, što je udaljenost x na kojoj je foton raspršen, postaje izlazna varijabla inverznog CDF-a

$$\text{inv } CDF(\xi) = x, \quad (2.2)$$

gdje je ξ nasumičan broj uniformno raspoređen između 0 i 1. Ovo omogućuje generiranje vrijednosti x na temelju uniformnih nasumičnih vjerojatnosti. Za neke PDF-ove, kao što je (1.2), postoji analitičko rješenje za dani CDF [2]

$$PDF(x) = \sigma_t e^{-\sigma_t x}, x = -\frac{\ln(\xi)}{\sigma_t}. \quad (2.3)$$

Proces generiranja ulaznih varijabli i računanja izlaznih varijabli ponavlja se velik broj puta, ovisno o broju uzoraka koje želimo analizirati. Svako ponavljanje pruža novi skup ulaznih i odgovarajućih izlaznih varijabli, čime se osigurava da simulacija obuhvati što veći mogući broj slučajeva.

Konačno, statističke karakteristike izlaznih varijabli analiziraju se kako bi se dobio uvid u ponašanje sustava. [5] Analizirat ćemo ponašanje transmisije i difuzijske refleksije za paket fotona kroz dva materijala.

3 Postupak rješavanja

Da bismo započeli Monte Carlo simulaciju, potreban je izvor slučajnosti. Prije razvoja računala koristile su se tablice slučajnih brojeva. Danas se koriste generatori slučajnih brojeva. [1] Za

potrebe ove simulacije koristimo *ran1.c*, slučajni generator iz [6].

Modeliramo dvije ploče materijala čije su nam debljine (L_z , L_{z_2}), anizotropni faktori (g_1 , g_2) te pripadajući koeficijenti apsorpcije (σ_a , σ_{a2}) i raspršenja (σ_r , σ_{r2}) poznati. Uzimamo Kartezijev koordinatni sustav u kojem je pozitivna z-os okrenuta prema dolje. Ploče su postavljene paralelno s xy ravninom. Simuliramo paket fotona koji sadrži proizvoljno velik broj fotona, te pretpostavljamo da je izvorni smjer putujućeg paketa fotona u smjeru z-osi, tj. (0,0,1). Paket fotona ulazi u petlju (eng. *loop*), koju napušta tek kada svi fotoni napuste obe ploče ili kada su svi fotoni potpuno apsorbirani. Pri ponavljanju petlje, tijekom svake iteracije se računa pomak dr prema (2.3). Foton nakon interakcije prijeđe nasumičnu udaljenost dr do iduće interakcije. Za svaki foton, nakon svake interakcije s materijalom, računamo njegov novi položaj, kako je prikazano na slici 2.

```

36         xP = x + dr * vx;
37         yP = y + dr * vy;
38         zP = z + dr * vz;
39
40         if (zP > Lz)

```

Slika 2: Dio koda koji računa nasumičan pomak dr i nove koordinate fotona x_p, y_p, z_p

Ako se foton apsorbira unutar prve ploče, ne pratimo više ponašanje tog fotona. Nastavljamo simulaciju za preostale fotone u paketu i povećavamo brojač apsorbiranih fotona. Vjerojatnost apsorpcije dana je omjerom σ_a/σ_t . Način na koji pratimo koliko je fotona apsorbirano je dodjeljivanjem težine paketu fotona. Tijekom simulacije, kada se foton rasprši, postoji mogućnost da bude ponovno apsorbiran dok putuje kroz materijal. Pri svakom raspršenju smanjujemo težinu paketa za vjerojatnost apsorpcije. Kada težina paketa fotona postane vrlo mala, moramo odlučiti hoćemo li nastaviti simulirati taj paket ili ga zanemariti. Ova tehnika se naziva "ruski rulet" (eng. *Russian roulette*). Odluku donosimo pomoću varijable m . Ako je težina paketa ispod određenog praga (npr. 0,001), generiramo slučajni broj i uspoređujemo ga s $1/m$. Ako je slučajni broj veći od $1/m$, paket se zanemaruje; inače, težina paketa se množi s m kako bismo nadomjestili one pakete koji su se prerano apsorbirali ili prerano napustili ploče materijala. Varijabla m proizvoljno je postavljena na 6. Na ovaj način, produljujemo "životni vijek" fotona proporcionalno vjerojatnosti da paket nestane u materijalu. Implementacija ruskog ruleta prikazana je na slici 3.

```

133         if (ran1(&idum) > 1.0 / m)
134             break;
135         else
136             tezina *= m;
137         }
138
139         rasprsenje(&vx, &vy, &vz, g2);
140     }

```

Slika 3: Tehnika ruskog ruleta

Ako se foton reflektirao unutar prve ploče, on mijenja svoj smjer, pa prilagođavamo v_x, v_y i

v_z komponente brzine, a anizotropni faktor prvog materijala g_1 opisuje preferirano usmjerenje.

Novi smjer fotona računamo pomoću Henyey-Greensteinove funkcije raspršenja, koja je u kodu, koji je dan u dodatku A, predstavljena kao funkcija *rasprsenje()*. Ova funkcija dana je kao

$$p(\theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos(\theta))^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.1)$$

gdje $p(\theta)$ predstavlja vjerojatnost da se foton rasprši pod kutem odklona θ , a g anizotropni faktor. Funkcija *rasprsenje()* računa novi smjer kretanja fotona koji je određen parametrom g , kako je prikazano na slici 4. Za $g = 0$, što odgovara izotropnom raspršenju, generiraju se pomoću *ran1.c* uniformno distribuirani kutovi θ (u kodu označen kao Th) i ϕ (u kodu Fi). Kut θ je kut između prvobitnog smjera fotona i smjera raspršenog fotona, a ϕ predstavlja kut rotacije oko smjera raspršenja. Polarni i azimutalni kut određuju konačni smjer raspršenja fotona (v_x, v_y, v_z). Za $g \neq 0$, što odgovara anizotropnom raspršenju, za račun $\cos \theta$ koristi se formula

$$\cos(\theta) = \frac{1 + g^2 - f^2}{2g}, \quad (3.2)$$

gdje je f

$$f = \frac{1 - g^2}{1 - g + 2g\xi}, \quad (3.3)$$

a ξ varijabla u koju spremamo nasumično generirane brojeve. [2]

Reflektirani foton doprinosi difuznoj refleksiji (R_d) prvog materijala, stoga povećavamo njen brojač. Tijekom ovog raspršenja foton može ostati u prvoj ploči ili je može potpuno napustiti. Vjerojatnost da se foton rasprši dana je kao σ_r/σ_t .

Ako se pak foton transmitirao kroz prvu ploču, on onda putuje kroz drugu ploču, te mu povećajemo parametar transmisije (T) za prvi materijal. Kako bismo dobro procijenili točku u kojoj foton prelazi graničnu ravninu između dva sloja, računamo sjecište ravnine i pravca. Zadana ravnina je $z = Lz$, jer smo ploče postavili paralelno s xy ravninom koordinatnog sustava. Pravac smo konstruirali kroz dvije točke. Prva točka je trenutni položaj fotona označen s x, y, z , a krajnja točka je označena s x_p, y_p, z_p te predstavlja položaj fotona kada dosegne drugu ploču. Varijabla t predstavlja vrijeme potrebno da foton prijeđe granicu materijala. Između prve i druge ploče foton prelazi nasumičnu udaljenost dr , te računamo njegov novi položaj tako da on ovisi o prehodnom položaju, kako je prikazano na slici 5.

Unutar druge ploče foton se može apsorbirati, a apsorpcija fotona sada ovisi o parametrima drugog materijala, pa je vjerojatnost apsorpcije σ_{a2}/σ_{t2} . Povećavamo brojač apsorbiranih fotona. Težina paketa se smanjuje, te ako je težina manja ili jednaka 0,001, koristi se tehnika ruskog ruleta kako bi se odlučilo hoće li se simulacija nastaviti ili prekinuti. Funkcija *rasprsenje()* sada uzima faktor anizotropnosti drugog materijala g_2 te mijenja smjer kretanja fotona, što je implementirano u kodu kako je prikazano na slici 4. Konačno, oni fotoni koji se

```

36 void rasprsenje(double *vx, double *vy, double *vz, double g)
37 {
38     double ux, uy, uz;
39     double f, sTh, cTh, sTh_sFi, sTh_cFi, Kvz;
40     double Fi = 2 * M_PI * ran1(&idum);
41
42     if (g == 0)
43         cTh = 2 * ran1(&idum) - 1;
44     else
45     {
46         f = (1 - g * g) / (1 - g + 2 * g * ran1(&idum));
47         cTh = (1 + g * g - f * f) / (2.0 * g);
48     }
49
50     sTh = sqrt(1.0 - cTh * cTh);
51     sTh_sFi = sTh * sin(Fi);
52     sTh_cFi = sTh * cos(Fi);
53
54     if (*vz == 1.0)
55     {
56         *vx = sTh_cFi;
57         *vy = sTh_sFi;
58         *vz = cTh;
59     }
60     else if (*vz == -1.0)
61     {
62         *vx = sTh_cFi;
63         *vy = -sTh_sFi;
64         *vz = -cTh;
65     }
66     else
67     {
68         Kvz = sqrt(1.0 - (*vz) * (*vz));
69         ux = (*vx) * (*vz) * sTh_cFi - (*vy) * sTh_sFi / Kvz + (*vx) * cTh;
70         uy = (*vy) * (*vz) * sTh_cFi + (*vx) * sTh_sFi / Kvz + (*vy) * cTh;
71         uz = -Kvz * sTh_cFi + (*vz) * cTh;
72         *vx = ux;
73         *vy = uy;
74         *vz = uz;
75     }
76 }

```

Slika 4: Dio koda koji računa Henyey - Greensteinovu funkciju raspršenja

ne rasprše ni apsorbiraju, transmitiraju se kroz drugu ploču te se simulacija završava.

Svi mogući slučajevi interakcije paketa fotona s oba materijala obuhvaćeni su funkcijom *simulirajPaketFotona()*. Ova funkcija vraća vrijednosti broja apsorbiranih fotona (jedna varijabla za oba sloja), difuzijske refleksije i transmisije za oba sloja pojedinačno.

```

104     {
105         T += tezina;
106         double t = (Lz - z) / vz;
107         xP = x + t * vx;
108         yP = y + t * vy;
109         zP = Lz;
110
111         dr = -log(ran1(&idum)) / sigma_t2;
112         xP = xP + dr * vx;
113         yP = yP + dr * vy;
114         zP = zP + dr * vz;
115
116         if (zP >= Lz2)

```

Slika 5: Dio koda koji računa presjek ravnine $z=Lz$ i putanje fotona, novi položaj fotona i nasumičnu udaljenost koju foton prijeđe od prve do druge ploče između svake interakcije

4 Rezultati

4.1 Promjenjiv broj fotona

Simuliramo paket s promijenjivim brojem fotona, tako da se broj fotona kreće u rasponu od 1000 do 180000 te povećava za 1000 tijekom svake iteracije. Vrijednosti odabranih početnih parametara prikazane su u tablici 1.

Tablica 1: Koeficijenti apsorpcije, koeficijenti raspršenja, debljine i anizotropni faktori za prvi i drugi sloj. Podaci su proizvoljno odabrani.

Sloj	σ_a (cm ⁻¹)	σ_r (cm ⁻¹)	Lz (cm)	g
Prvi sloj	0,27	0,28	2	0,5
Drugi sloj	0,15	0,3	3	0,7

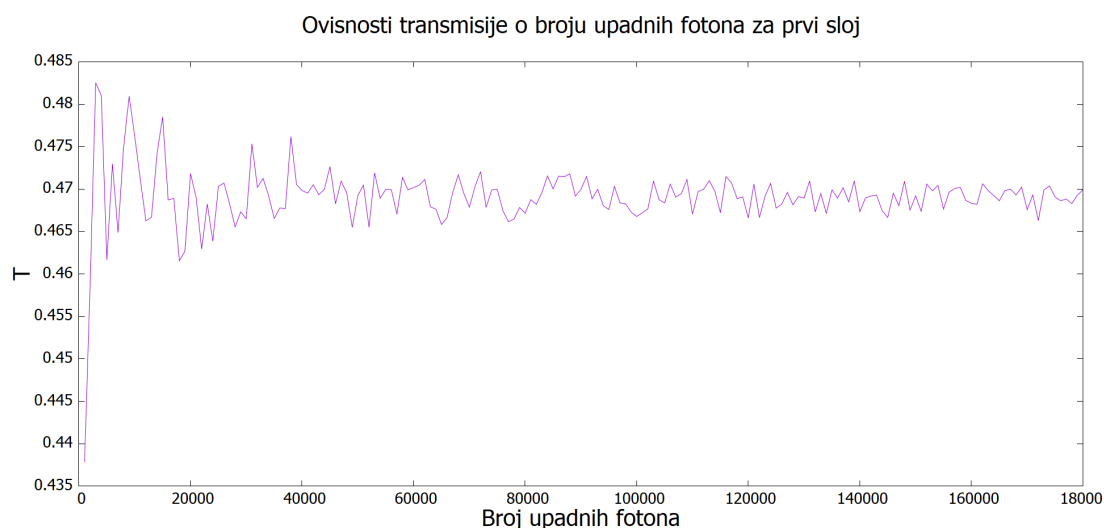
Kako su podaci iz tablice 1 proizvoljno odabrani, usporedit ćemo ih sa stvarnim podacima istih parametara za ljudsko tkivo. U tablici 2 prikazani su parametri za prva dva sloja kože - pokožice (lat. *epidermis*) i usmine (lat. *dermis*) (postoji još i treći sloj kože - potkožje). Ovi slojevi kože mogu se podijeliti na još manje slojeve, ali kako naša simulacija koristi dva sloja materijala, zadržat ćemo ovakvu podjelu. Pokožica je prvi i najtanji sloj kože, čija je primarna uloga zaštita tijela od vanjskih organizama i oštećenja (npr. UV zračenja). Usmina je drugi i najdeblji sloj kože koji nalazi se odmah ispod pokožice. Njegova uloga je zadržavanje elastičnosti i čvrstoće kože, a sastoji se od žlijezda znojnice, žlijezda lojnica, krvnih žila i živaca. [7] Kako su koeficijenti raspršenja vrlo veliki, a debljine slojeva vrlo male, simulacija s ovim podacima mogla bi biti previše složena za naš trenutni model te zahtijevati naprednije metode i više računalnih resursa. Stoga smo povećali redove veličina za debljine slojeva i koeficijente apsorpcije, smanjili red veličine za koeficijente raspršenja te uzeli različite anizotropne faktore. Svakako, usporedba stvarnih i proizvoljno odabranih parametara može nam pomoći u budućem poboljšanju modela i povećanju njegove točnosti, te daje uvid u primjenjivost modela na stvarne probleme.

Tablica 2: Koeficijenti apsorpcije, koeficijenti raspršenja, debljine i anizotropni faktori za pokožicu i usminu. Podaci preuzeti iz [8] i [9]. Za debljine slojeva uzete su prosječne vrijednosti.

Sloj	σ_a (cm ⁻¹)	σ_r (cm ⁻¹)	Lz (cm)	g
Pokožica	15	420	0,275	0,85
Usmina	2,3	175	0,0775	0,85

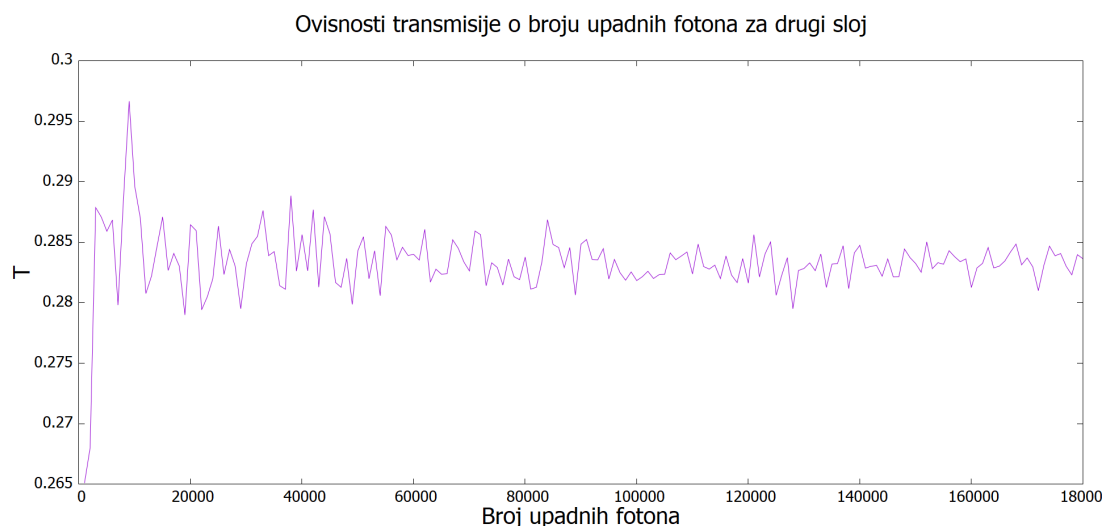
Ovisnost transmisije o broju upadnih fotona prikazana je na slikama 6 i 7. U oba slučaja uočavamo oscilirajući uzorak. Transmisija konvergira za velik broj fotona u paketu. Ovakvo ponašanje transmisije je očekivano, s obzirom na samu prirodu Monte Carlo simulacija. Zbog nasumičnog uzrokovanja slobodnog puta fotona, kako se broj fotona povećava, uzrokovanje postaje sve reprezentativnije što rezultira konvergencijom vrijednosti. Tehnika ruskog ruleta doprinosi ubrzanju simulacija, jer je za veći broj fotona sve manji broj fotona s malenim težinama koje zanemarujemo. Ovakvo ponašanje stoga možemo očekivati i za difuznu refleksiju. [2]

Oscilacije su najizraženije za manji broj fotona. Svakako, oscilacije su jako malene te se najvećim dijelom kreću između vrijednosti 0,465 do 0,475 za prvi sloj i između vrijednosti 0,280 i 0,288 za drugi sloj. Možemo zaključiti da je srednja vrijednost transmisije za prvi sloj 47%, a za drugi sloj 28,4%. Transmisija za drugi sloj je manja, jer do drugog sloja ne dolaze svi fotoni, već oni koji su se transmitirali kroz prvi sloj.

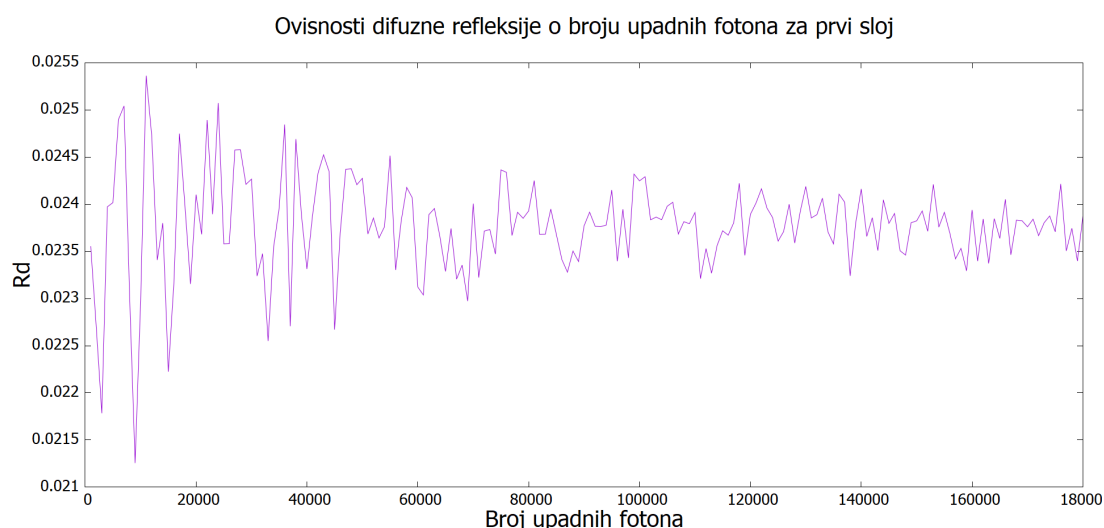
**Slika 6:** Ovisnost transmisije o broju upadnih fotona za prvi sloj debljine 2 cm

Na slikama 8 i 9 prikazana je ovisnost difuzne refleksije o broju upadnih fotona. Uočavamo isti uzorak kao i kod transmisije iz čega zaključujemo da je simulacija uspješna. Vrijednosti refleksije se razlikuju za jedan red veličine. Za prvi sloj oscilacije se kreću od 0,0225 do 0,0250 pa zaključujemo da je $R_d = 2,375\%$, a za drugi sloj od 0,0021 do 0,0026 pa je $R_d = 0,2305\%$.

Na slikama 10 i 11 vizualizirana je putanja paketa fotona kroz oba sloja. Zbog preglednosti prikazan je manji broj fotona. Crvenom bojom označen je prvi sloj debljine 2 cm, a plavom bojom drugi sloj debljine 3 cm. Vizualizirana putanja fotona odražava stohastičku prirodu



Slika 7: Ovisnost transmisije o broju upadnih fotona za drugi sloj debljine 3 cm



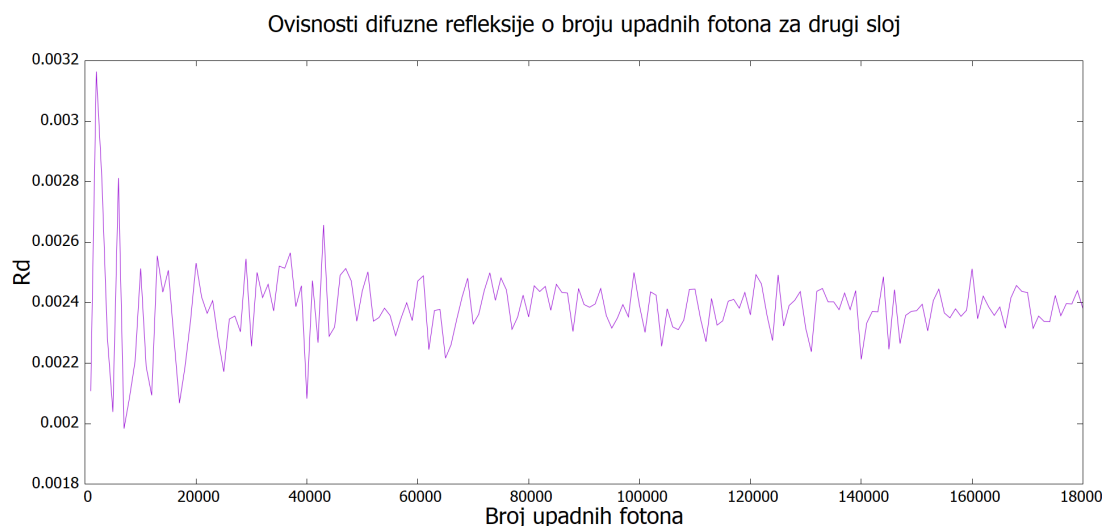
Slika 8: Ovisnost difuzne refleksije o broju upadnih fotona za prvi sloj debljine 2 cm

simulacije; svaki foton ima svoju jedinstvenu putanju i "sudbinu". Najgušće prikazane putanje fotona su između dva sloja, jer se na granici slojeva fotoni transmitiraju iz prvog sloja, te mogu reflektirati iz drugog sloja. U tom području fotoni prelaze nasumičan pomak dr , te je njegov položaj određen presjekom ravnine i pravca (slika 5).

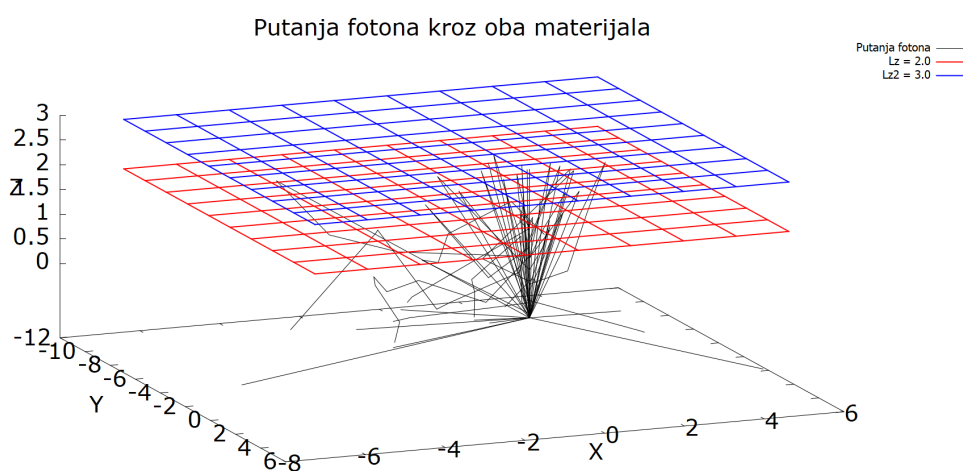
4.2 Promjenjiva debljina materijala

Uzimamo sada da je broj fotona u paketu konstantan te da iznosi 50 000. Uzimamo da debljine slojeva više nisu konstante, nego da se debljina mijenja od 0 do 10 cm.

Ovisnost transmisije o debljini materijala prikazana je na slici 12. Transmisija se računa kada je položaj fotona veći od debljine materijala, odnosno kada je foton napustio materijal. Uočavamo da se transmisija eksponencijalno smanjuje, kako je i očekivano prema izrazu (1.1).



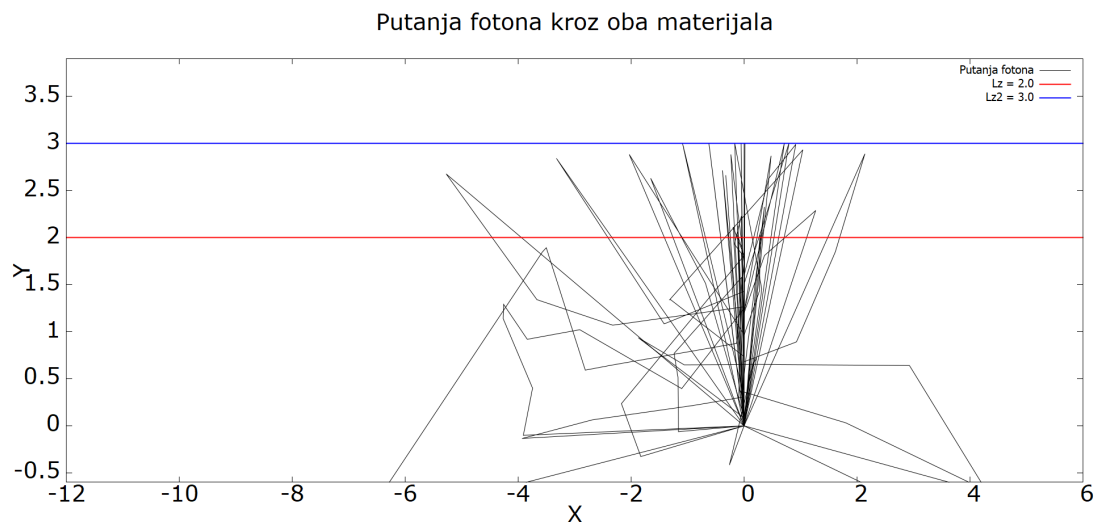
Slika 9: Ovisnost difuzne refleksije o broju upadnih fotona za drugi sloj debljine 3 cm



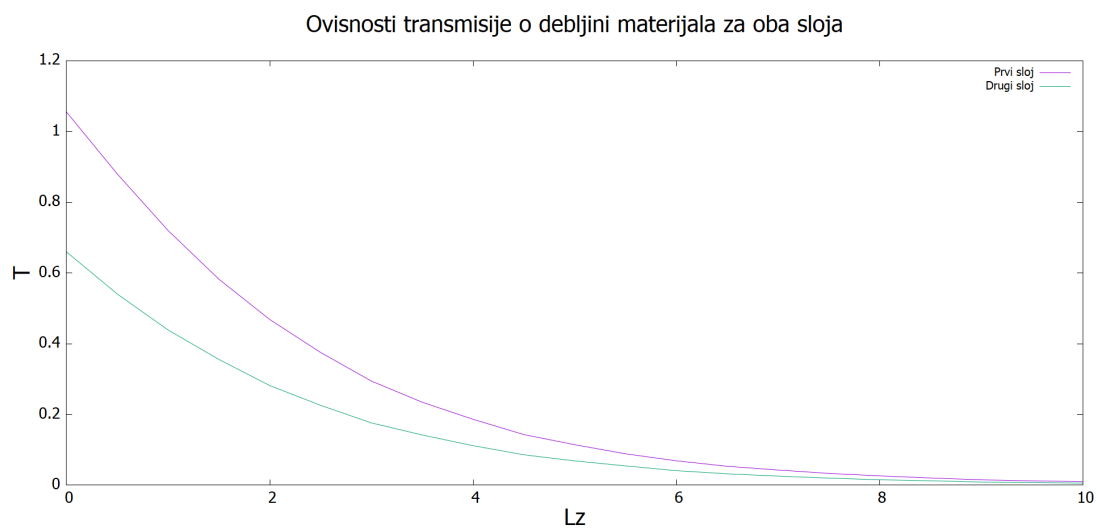
Slika 10: Vizualizacija putanje fotona kroz dva sloja.

Kako debljina sloja raste, krivulje transmisije se sve više približavaju istoj vrijednosti, te se potpuno preklapaju u nuli. Razlika krivulja transmisije koju uočavamo za malene debljine materijala određena je koeficijentom izumiranja. Kako je koeficijent izumiranja za drugi sloj manji od koeficijenta izumiranja prvog sloja, transmisija za drugi sloj na početku ima manju vrijednost od prvog sloja. Kako raste debljina materijala, više će se fotona raspršiti i apsorbirati nego transmitirati, što objašnjava konvergenciju u nulu.

Ovisnost difuzne refleksije o debljini materijala prikazana je na slici 13. Za oba materijala uočavamo inicijalni porast vrijednosti difuzne refleksije s rastom debljine materijala. Kako se povećava debljina materijala, difuzna refleksija za prvi sloj uz malene oscilacije postiže konstantu vrijednost od 2, 24%. Povećanjem debljine, fotoni imaju veću vjerojatnost apsorpcije u prvom materijalu, te sve manje fotona dolazi do drugog materijala, što objašnjava manju vrijednost difuzne refleksije za drugi sloj. Kako je vrijednost difuzne refleksije konvergirala u

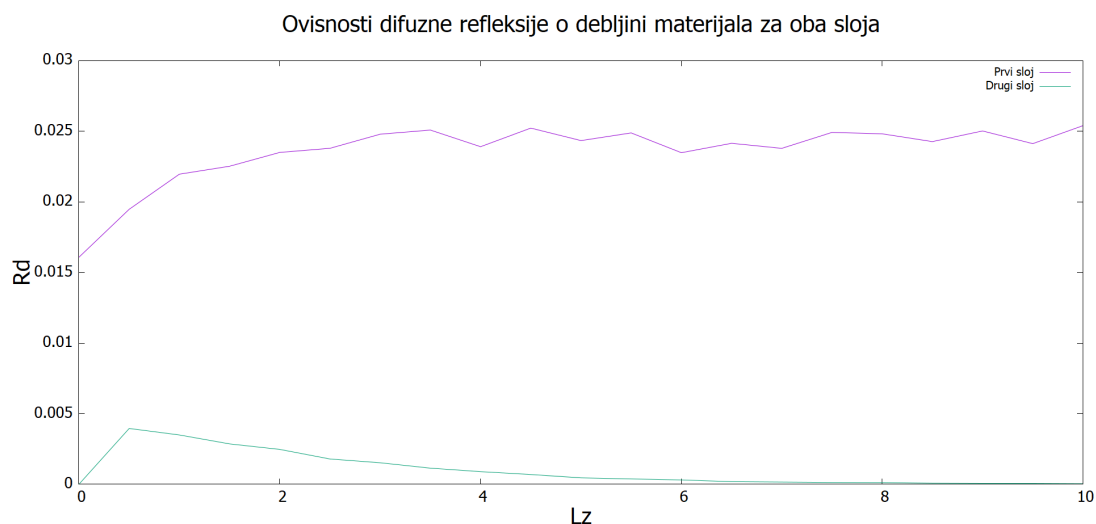


Slika 11: Vizualizacija putanje fotona kroz dva sloja u dvodimenzionalnom prikazu



Slika 12: Ovisnost transmisije o debljini materijala za oba sloja

kostantnu vrijednost za dovoljno velike vrijednosti debljine materijala, debljina materijala ne doprinosi difuznoj refleksiji drugog sloja te vrijednost pada na nulu.



Slika 13: Ovisnost difuzne refleksije o debljini materijala za oba sloja

5 Zaključak

Ideja rada bila je simulirati paket fotona proizvoljne i po potrebi promijenjive veličine te promatrati ponašanje transmisije, refleksije i putanje paketa fotona. Paket prolazi kroz dva sloja materijala različitih debljina. Kako bismo to realizirali, bilo je potrebno nasumično uzrokovati slobodan put fotona kroz oba materijala, tako da svaki foton iz paketa ima jedinstvenu "sudbinu". Potom smo definirali vrijednosti koeficijenata refleksije i apsorpcije i anizotropni faktor raspršenja, optička svojstva svakog materijala o kojima ovise sve promatrane veličine. Kako bi simulacija bila nepristrana, u tehnici ruskog ruleta nadomjestili smo one fotone čija je težina premalena. Pri prolasku kroz prvi materijal, fotoni se apsorbiraju, a vjerojatnost tog događaja određena koeficijentom izumiranja i koeficijentom apsorpcije. Fotoni se kroz prvi materijal mogu i raspršiti, gdje se novi smjer fotona računa pomoću Henyey-Greenstein formule. Raspršenje je određeno koeficijentom raspršenja, koeficijentom izumiranja te anizotropnim faktorom. Ako se fotoni kroz prvi materijal nisu apsorbirali, transmitiraju se do idućeg sloja. Na granici prvog i drugog sloja, dodatno računamo presjek ravnine ploče prvog materijala te pravca određenog točkama prethodnog i budućeg položaja fotona. Dolaskom do drugog materijala, fotoni se ponovno mogu apsorbirati sukladno vjerojatnosti apsorpcije određene parametrima tog materijala, mogu se raspršiti ili transmitirati. Kada svi fotoni napuste prvu ili drugu ploču prekidamo simulaciju.

Za paket s promijenjivim brojem fotona od 1000 do 180000, izmjerena vrijednost transmisije iznosi 47% za prvi sloj, a za drugi sloj 28,4%. Difuzna refleksija za prvi sloj iznosi 2,375%, a za drugi sloj 0,2305%. Transmisija i difuzna refleksija pokazuju oscilirajuće i konvergirajuće ponašanje, što je obilježje Monte Carlo simulacija. Vizualizacija putanje fotona odražava stohastičku prirodu simulacije, gdje se svaki foton u paketu nasumično transmitira, apsorbira ili reflektira.

Potom smo uzeli paket od 50 000 fotona, a mijenjali smo debljine materijala u vrijednostima od 0 do 10 cm. Vizualizacijom transmisijskih krivulja za oba materijala uočavamo eksponencijalni pad vrijednosti, što je u skladu s Beer-Lambertovim zakonom, te konvergenciju u nulu. Difuzna refleksija pokazuje inicijalni skok u vrijednosti, ali ultimativno ponovno konvergenciju u jednu vrijednost od 2,24%, odnosno 0%.

Rad se može unaprijediti simulacijom kroz više slojeva. Na primjer, mogli bismo simulirati prolazak svjetlosti kroz ljudsko tkivo. Također, mogli bismo uključiti spektralnu ovisnosti početnih parametara. U ovom radu koeficijenti su korišteni kao konstante, a uvođenje spektralne ovisnosti bi omogućilo analizu u ovisnosti o valnoj duljini. Obzirom na dualnu prirodu čestica fotona, zanimljivo bi bilo prikazati ih kao valove te uključiti i kvatne efekte u simulaciju. Ovaj rad predstavlja pojednostavljenu inačicu prve primjene Monte Carlo simulacija, te odražava primjenjivost i raznoliku upotrebu ove metode na različite probleme u fizici, medicini i ostalim srodnim znanostima.

6 Literatura

- [1] Reuven Y. Rubinstein, Dirk P. Kroese : *Simulation and the Monte Carlo Method, Third edition* ,
URL: <https://kgut.ac.ir/useruploads/1509987964985oqk.pdf> (1. 7. 2024.)
- [2] *Monte Carlo Methods in Practice*
URL:
<https://www.scratchapixel.com/lessons/mathematics-physics-for-computer-graphics/monte-carlo-methods-in-practice/monte-carlo-simulation.html> (27. 6. 2024.)
- [3] M. Xua, M. Alrubaieeb, S. K. Gayenb i R. R. Alfanob : *Determination of light absorption, scattering and anisotropy factor of a highly scattering medium using backscattered circularly polarized light*
URL: <https://www.hunter.cuny.edu/physics/faculty/xu/repository/files/abstracts/2007-spie-g.pdf>
(29. 6. 2024.)
- [4] *Research Gate*
URL: https://www.researchgate.net/figure/Differences-between-scattering-absorption-and-transmission_fig1_357750414
(27. 6. 2024.)
- [5] Rebellion Research *What Are The 5 Steps In A Monte Carlo Simulation?*
URL:
<https://www.rebellionresearch.com/what-are-the-5-steps-in-a-monte-carlo-simulation>
(1. 7. 2024.)
- [6] *Numerical Recipes*
William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery:
Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, <https://numerical.recipes/>
(1.7.2024.)
- [7] Hani Yousef; Mandy Alhajj; Adegbenro O. Fakoya; Sandeep Sharmay: *Anatomy, Skin (Integument), Epidermis*, <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK470464/> (2.7.2024.)
- [8] Jim Elliot Christopherjames, D. Devakumar, J.B. Jeeva , Megha Singh: *Monte Carlo simulation of handheld probes to detect non-invasive ductal carcinoma from diffuse optical reflectance signals*,
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666950123000627#t0005>
(2.7.2024.)

[9] National Cancer Institute, *Layers of the Skin*

<https://training.seer.cancer.gov/melanoma/anatomy/layers.html> (2.7.2024.)

A Kod za simulaciju

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <time.h>
4 #include <math.h>
5 #include "ran1.c"
6
7 #define broj_fotona_u_paketu 1000
8
9 double koeficijent_a = 0.27;
10 double koeficijent_r = 0.28;
11 double koeficijent_a2 = 0.15;
12 double koeficijent_r2 = 0.3;
13 double sigma_t, sigma_t2;
14 double Rd, T, Rd2, T2;
15 double Lz = 2;
16 double Lz2 = 3;
17 double g1 = 0.5, g2 = 0.7;
18 long idum;
19
20 double uzorkovanjeSlucajneVrijednosti()
21 {
22     double epsilon = ran1(&idum);
23     return -log(epsilon) / sigma_t;
24 }
25
26 double vjerojatnostApsorpcije()
27 {
28     return koeficijent_a / sigma_t;
29 }
30
31 double vjerojatnostApsorpcije2()
32 {
33     return koeficijent_a2 / sigma_t2;
34 }
35
36 void rasprsenje(double *vx, double *vy, double *vz, double g)
37 {
38     double ux, uy, uz;
39     double f, sTh, cTh, sTh_sFi, sTh_cFi, Kvz;
40     double Fi = 2 * M_PI * ran1(&idum);
41
42     if (g == 0)
43         cTh = 2 * ran1(&idum) - 1;
44     else
45     {
```

```
46     f = (1 - g * g) / (1 - g + 2 * g * ran1(&idum));
47     cTh = (1 + g * g - f * f) / (2.0 * g);
48 }
49
50 sTh = sqrt(1.0 - cTh * cTh);
51 sTh_sFi = sTh * sin(Fi);
52 sTh_cFi = sTh * cos(Fi);
53
54 if (*vz == 1.0)
55 {
56     *vx = sTh_cFi;
57     *vy = sTh_sFi;
58     *vz = cTh;
59 }
60 else if (*vz == -1.0)
61 {
62     *vx = sTh_cFi;
63     *vy = -sTh_sFi;
64     *vz = -cTh;
65 }
66 else
67 {
68     Kvz = sqrt(1.0 - (*vz) * (*vz));
69     ux = (*vx) * (*vz) * sTh_cFi - (*vy) * sTh_sFi / Kvz + (*vx) * cTh;
70     uy = (*vy) * (*vz) * sTh_cFi + (*vx) * sTh_sFi / Kvz + (*vy) * cTh;
71     uz = -Kvz * sTh_cFi + (*vz) * cTh;
72     *vx = ux;
73     *vy = uy;
74     *vz = uz;
75 }
76 }
77
78 double simulirajPaketFotona()
79 {
80     double x, y, z, xP, yP, zP, dr, vx, vy, vz;
81     double tezina;
82     int broj_apsorbiranih = 0;
83     int m = 6;
84     double apsorpcija = 0.0, apsorpcija2 = 0.0;
85
86     for (int foton = 0; foton < broj_fotona_u_paketu; foton++)
87     {
88         x = 0.0;
89         y = 0.0;
90         z = 0.0;
91         vx = 0.0;
92         vy = 0.0;
```

```
93     vz = 1.0;
94     tezina = 1.0;
95
96     while (tezina > 0)
97     {
98         dr = -log(ran1(&idum)) / sigma_t;
99         xP = x + dr * vx;
100        yP = y + dr * vy;
101        zP = z + dr * vz;
102
103        if (zP > Lz)
104        {
105            T += tezina;
106            double t = (Lz - z) / vz;
107            xP = x + t * vx;
108            yP = y + t * vy;
109            zP = Lz;
110
111            dr = -log(ran1(&idum)) / sigma_t2;
112            xP = xP + dr * vx;
113            yP = yP + dr * vy;
114            zP = zP + dr * vz;
115
116            if (zP >= Lz2)
117            {
118                T2 += tezina;
119                break;
120            }
121            else if (zP > Lz && zP < Lz2)
122            {
123                x = xP;
124                y = yP;
125                z = zP;
126                apsorpcija2 += vjerojatnostApsorpcije2();
127                tezina -= apsorpcija2;
128                if (tezina < 0.0)
129                    tezina = 0.0;
130                broj_apsorbiranih++;
131                if (tezina <= 0.001)
132                {
133                    if (ran1(&idum) > 1.0 / m)
134                        break;
135                    else
136                        tezina *= m;
137                }
138
139                rasprsenje(&vx, &vy, &vz, g2);
```

```
140     }
141     else if (zP < Lz && zP > 0)
142     {
143         Rd2 += tezina;
144         x = xP;
145         y = yP;
146         z = zP;
147         apsorpcija += vjerojatnostApsorpcije();
148         tezina -= apsorpcija;
149         if (tezina < 0.0)
150             tezina = 0.0;
151         broj_apsorbiranih++;
152
153         if (tezina <= 0.001)
154         {
155             if (ran1(&idum) > 1.0 / m)
156                 break;
157             else
158                 tezina *= m;
159         }
160         rasprsenje(&vx, &vy, &vz, g1);
161     }
162     else if (zP < 0)
163     {
164         Rd += tezina;
165         break;
166     }
167 }
168 else if (zP <= 0)
169 {
170     Rd += tezina;
171     break;
172 }
173 x = xP;
174 y = yP;
175 z = zP;
176 apsorpcija += vjerojatnostApsorpcije();
177 tezina -= apsorpcija;
178 if (tezina < 0.0)
179     tezina = 0.0;
180 broj_apsorbiranih++;
181 if (tezina <= 0.001)
182 {
183     if (ran1(&idum) > 1.0 / m)
184         break;
185     else
186         tezina *= m;
```



```
187         }
188         rasprsenje(&vx, &vy, &vz, g1);
189     }
190 }
191 return broj_apsorbiranih, Rd, Rd2, T, T2;
192 }
193
194 int main()
195 {
196     T = 0.0;
197     T2 = 0.0;
198     Rd = 0.0;
199     Rd2 = 0.0;
200     sigma_t = koeficijent_a + koeficijent_r;
201     sigma_t2 = koeficijent_a2 + koeficijent_r2;
202     int broj_apsorbiranih;
203     broj_apsorbiranih, Rd, Rd2, T, T2 = simulirajPaketFotona();
204
205     printf("Difuzna refleksija (Rd): %f%%\n",
206           (Rd / broj_fotona_u_paketu) * 100);
207     printf("Transmisija (T): %f%%\n",
208           (T / broj_fotona_u_paketu) * 100);
209     printf("Difuzna refleksija za drugi sloj (Rd2): %f%%\n",
210           (Rd2 / broj_fotona_u_paketu) * 100);
211     printf("Transmisija za drugi sloj (T2): %f%%\n",
212           (T2 / broj_fotona_u_paketu) * 100);
213
214     return 0;
215 }
```