UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS - UNICAMP
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN - IFGW

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DA LUZ NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO EM MEIOS DENSOS E SUAS APLICAÇÕES AO TECIDO BIOLÓGICO

Rodrigo Menezes Forti – RA 084092

28/11/2012

Biografia do Autor

Rodrigo Menezes Forti é aluno do curso de Bacharelado em Física da Unicamp. Ingressou em 2008 através do vestibular realizado pela COMVEST. Em 2009 passou um ano morando em Israel, em um programa que tem como objetivo principal o de formar líderes comunitários pelo mundo.

Durante a graduação fez um ano e meio de iniciação científica no grupo de Neurofísica da UNICAMP, mais especificamente junto ao Laboratório de Óptica Biomédica (Orientador Prof. Dr. Rickson C. Mesquita). Os resultados de sua iniciação científica o levaram inclusive a participação de dois congressos locais.

O tema desta monografia tem particular importância para o autor, pois é num assunto muito similar a este que seu mestrado irá tratar.

Sumário

Biografia do Autor **1**

RESUMO **3**

1. Introdução **4**

1.1 Definindo as propriedades do Meio 4

1.1.1 Absorção da Luz 4

1.1.2 Espalhamento 5

1.2 Meios Densos e o Tecido Biológico 11

2. Modelos de transporte de luz em meios densos **14**

2.1 Grandezas e interações simplificadas relevantes ao transporte da luz 15

2.2 RTE e a Aproximação Difusiva 17

2.3 Soluções Gerais da Equação de Difusão pelo Método de Green 22

2.3.1 Propriedades das Soluções da ED 24

2.3.2 Condições de Contorno 25

3. Soluções da Equação de Difusão para Algumas Geometrias **26**

3.1 Meio Infinito 26

3.2 Meio Semi-Infinito 33

4. Conclusão **41**

Apêndice **41**

A.1 Meio Infinito 41

A.2 Meio Semi-Infinito 43

Referências **48**

RESUMO

Esta monografia visa fazer uma introdução ao tema da propagação da luz em meios densos. Este tema tem se mostrado muito importante devido à sua aplicação a tecidos biológicos. Particularmente, a espectroscopia óptica de difusão no infravermelho próximo (NIRS) é uma técnica baseada na propagação da luz em meios densos, que permite a medição de ativações cerebrais em experimentos funcionais do cérebro, dentre outras coisas.

Neste estudo, utilizaremos uma aproximação da Equação de Transporte Radioativo (RTE) para modelar o problema em questão, chegando a uma equação para a fluência e/ou para a radiância, grandezas relevantes para descrever a distribuição da luz no meio. Mais especificamente, utilizaremos a aproximação difusiva da RTE: a Equação de Difusão (ED).

Primeiramente definiremos algumas propriedades ópticas do tecido na seção 1. Em seguida falaremos um pouco sobre como podemos modelar a propagação da luz em meios genéricos e chegaremos a ED na seção 2. Na seção 3, resolveremos a ED para dois meios diferentes: um meio infinito e um meio semi-infinito, mostrando algumas propriedades relevantes da propagação da luz nestes meios

1. Introdução

1.1 Definindo as propriedades do Meio

Para definirmos o problema de propagação da luz, precisamos primeiramente entender como esta interage com as partículas do meio. Podemos classificar estas interações em dois tipos diferentes: espalhamento e absorção. É importante mencionar que estamos definindo aqui absorção como qualquer processo que aniquila o fóton incidente ou que muda o seu comprimento de onda (λ). Além disso, consideraremos como espalhamento somente o caso onde não há perda de energia (espalhamento elástico). Por fim, efeitos de espalhamento como o efeito Raman ou transições quânticas não serão levados em consideração.

1.1.1 Absorção da Luz

O fenômeno de absorção é um processo relacionado com as bandas de absorção das moléculas. O fóton incidente é absorvido ao excitar um elétron da molécula alvo, o qual poderá decair por um processo radiativo (com a re-emissão de um fóton, com menor energia) ou por um processo não radiativo com uma resposta mecânica e/ou com geração de calor. Neste estudo consideraremos ambos os casos como tendo o mesmo efeito e levaremos em conta apenas efeitos de absorção linear, isto é, casos onde a absorção depende linearmente da intensidade da luz incidente.

A capacidade de um meio em absorver fótons pode ser descrita macroscopicamente pelo coeficiente de absorção μ_a, que é definido como a razão entre a potência absorvida por unidade de volume e a potência incidente por unidade de área [1]. Este coeficiente é formalmente definido através da seção de choque das moléculas responsáveis pela absorção.

Mais a frente, veremos que podemos definir o livre caminho médio de absorção como $l_a = \frac{1}{\mu_a}$. A partir desta definição podemos interpretar μ_a, que tem unidade de

$[comprimento]^{-1}$, como o número médio de eventos de absorção por unidade de comprimento. Com esta interpretação, podemos notar que existe uma relação entre μ_a e a concentração de partículas absorventes no meio.

1.1.2 Espalhamento

O processo de espalhamento é um evento gerado pela existência de heterogeneidades no meio, as quais podem ser desde a existência de impurezas até a existência de flutuações estatísticas no meio. Este processo pode ser caracterizado pelo coeficiente de espalhamento μ_s e pela função de fase de espalhamento $p(\widehat{\mathbf{\Omega}}, \widehat{\mathbf{\Omega}}')$. O coeficiente de espalhamento é definido como a razão entre a potência espalhada por unidade de volume e a potência incidente por unidade de área. Já a função de fase de espalhamento, ou somente função de espalhamento, é a probabilidade que um fóton viajando na direção $\widehat{\mathbf{\Omega}}$ seja espalhado para a direção $\widehat{\mathbf{\Omega}}'$ (vide Figura 1). Considerando que a luz incidente é não polarizada e que temos espalhadores isotrópicos (partículas esféricas ou partículas não esféricas orientadas aleatoriamente), podemos dizer que a função de espalhamento depende somente do ângulo de espalhamento θ, isto é, do ângulo entre $\widehat{\mathbf{\Omega}}$ e $\widehat{\mathbf{\Omega}}'$. Podemos então escrever que $p\left(\widehat{\mathbf{\Omega}}, \widehat{\mathbf{\Omega}}'\right) = p(\theta)$, sendo que esta função é normalizada segundo:

$$\int_{4\pi} p(\hat{s}, \hat{s}')\, \mathrm{d}\widehat{\Omega} = 2\pi \int_{0}^{\pi} p(\theta) \sin(\theta)\, \mathrm{d}\theta = 1\,. \tag{1}$$

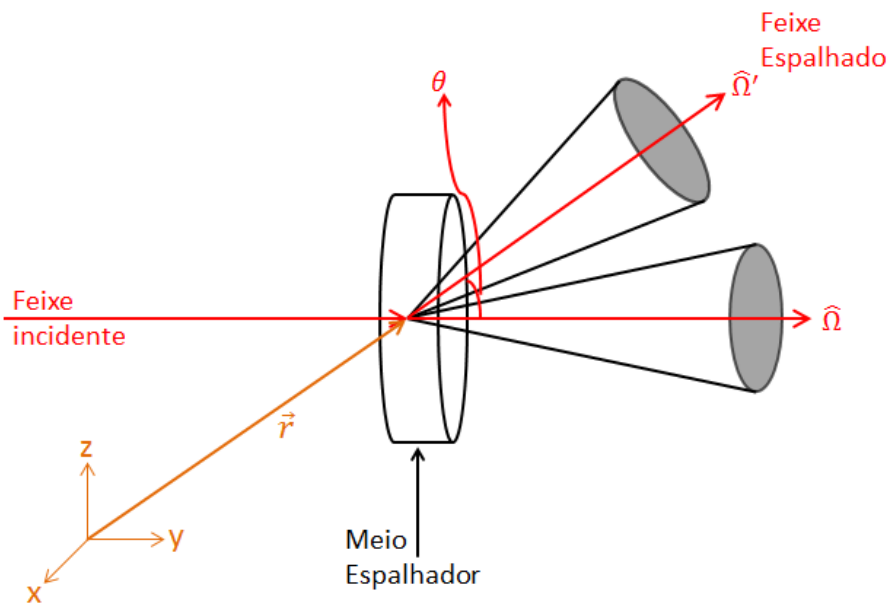

Figura 1 – Figura esquemática indicando a direção de incidência $\hat{\boldsymbol{\Omega}}$, direção de espalhamento $\hat{\boldsymbol{\Omega}}'$ e o ângulo de espalhamento θ no ponto $\vec{\boldsymbol{r}}$.

O espalhamento da luz depende diretamente da forma das partículas e do comprimento de onda utilizado. Mais ainda, o espalhamento depende do tamanho relativo das partículas em relação à λ.

Partículas muito menores que λ são responsáveis pelo espalhamento Rayleigh. Neste caso, as partículas podem ser consideradas como dipolos inseridos em um campo elétrico constante e, consequentemente, estarão oscilando. Sabemos ainda que um dipolo oscilante irradia para todas as direções e que, dependendo da polarização da onda incidente, teremos diferentes intensidades irradiadas para diferentes direções. Uma propriedade importante é que a função de espalhamento para este caso é simétrica (mas não isotrópica), e varia suavemente. Podemos escrever a intensidade do espalhamento Rayleigh como [2]:

$$I = I_0 \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4 \frac{|\alpha|^2}{2r^2}(1 + \cos^2\theta),$$

onde α é a polarizabilidade da molécula, que descreve o quanto as cargas elétricas na molécula podem se mover devido a presença de um campo elétrico, e r é a distância do ponto de medição até a partícula. É importante citar que esta intensidade dependerá da polarização da onda incidente. A Figura 2 mostra a distribuição deste espalhamento e sua dependência com a polarização da onda incidente.

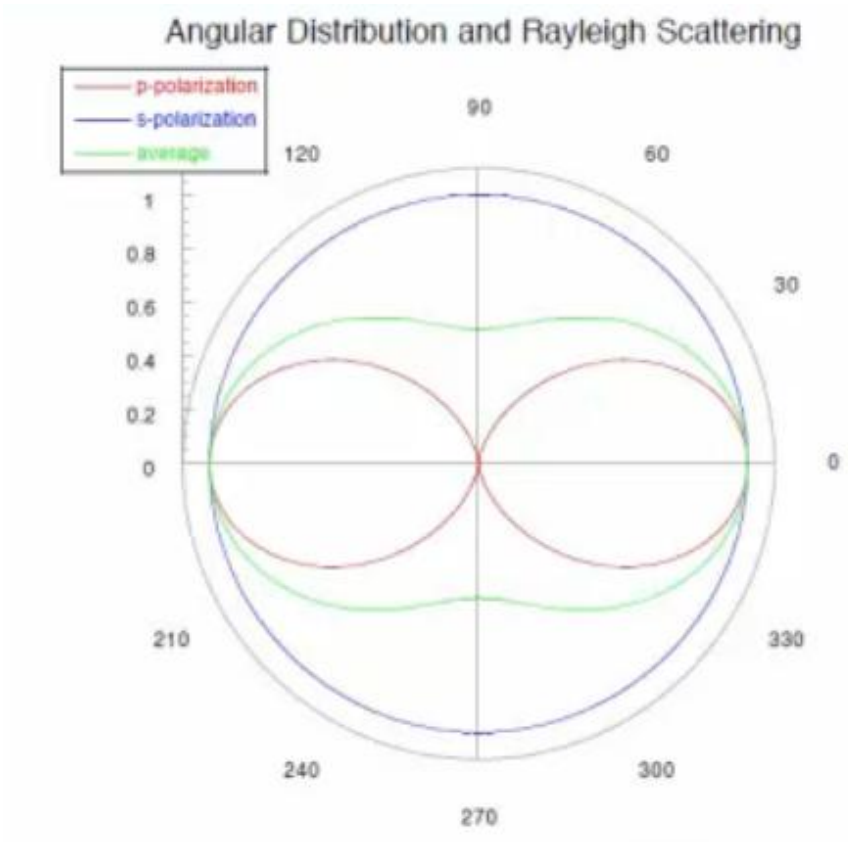

Figura 2 – Distribuição angular da intensidade do espalhamento de Rayleigh, para três tipos diferentes de polarização. (Figura extraída de [5].)

Agora, se temos que as partículas são muito maiores que λ, podemos interpretar a luz incidente como uma frente de onda que pode interagir com a partícula através de diferentes fenômenos: reflexão/refração e difração. Os processos de reflexão e refração podem ser entendidos da mesma maneira que na óptica geométrica. Os raios de luz ao passar pela partícula formam uma frente de onda, a partir da qual uma parte está "faltando". Esta parte

“faltando” tem forma e tamanho da sombra geométrica da partícula, isto é, a projeção da partícula em um plano bidimensional. A frente de onda incompleta é responsável por gerar o padrão da difração de Fraunhofer, através do princípio de Huygens [2].

Da descrição acima, podemos ver que neste caso o espalhamento depende diretamente da forma da partícula; devemos, porém, esperar, independentemente da forma da partícula, uma maior intensidade de espalhamento na direção de propagação do feixe inicial ($\theta = 0$), devido ao padrão de difração de Fraunhofer. Além disso, fora de $\theta = 0$ espera-se encontrar um intensidade oscilante, causada pelas interferências construtivas e destrutivas do processo de difração. Na Figura 3, vemos um exemplo da distribuição angular de espalhamento de uma gota de água ($raio = 10\mu m$) quando irradiada por radiação de $\lambda = 650\ nm$ [6].

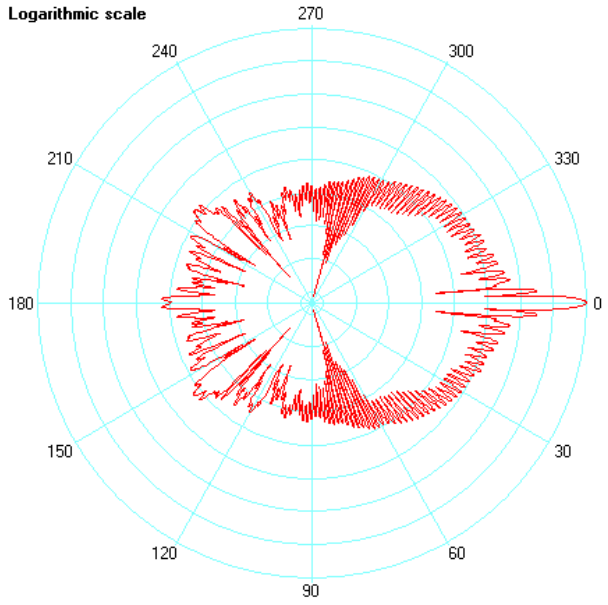

Figura 3 - Diagrama polar da função de espalhamento a partir de uma gota de água de r = 10m sendo irradiada com luz vermelha ($\lambda = 650\ nm$, polarização perpendicular).

A partir da descrição destes dois tipos de espalhamento, podemos perceber que para quantificar o espalhamento dentro de um meio, temos de levar diversos fatores em

consideração, o que geralmente pode ser muito complexo e pouco eficiente. Existem porém, maneiras de aproximar estes resultados.

Uma primeira aproximação é dizer que quando a propagação é dominada por espalhamentos múltiplos, isto é, quando a luz sofre diversos eventos de espalhamento antes de ser absorvida por uma molécula do meio, ou eventualmente sair do tecido, apenas um parâmetro é suficiente para descrever a função de espalhamento: o fator de assimetria g, que é definido como:

$$g = \langle \cos(\theta) \rangle = 2\pi \int_0^{\pi} \cos(\theta)\, p(\theta) sin(\theta) d\theta. \qquad (2)$$

Podemos agora definir o coeficiente e a função de espalhamento através das propriedades das partículas individuais, conforme descrito anteriormente, como [1]:

$$\mu_s = N \int_0^{\infty} \sigma_s(r) f(r) dr \qquad (3.a)$$

e

$$p(\theta) = \frac{N \int_0^{\infty} p(\theta, r) \sigma_s(r) f(r) dr}{N \int_0^{\infty} \sigma_s(r) f(r) dr}, \qquad (3.b)$$

onde $\sigma_s(r)$ e $p(\theta, r)$ são a seção de choque de espalhamento e a função de espalhamento para partículas individuais (com raio r), respectivamente, e $Nf(r)$ é a concentração de partículas com raio entre $r\ e\ r + dr$. A seção de choque de espalhamento é definida como a razão entre a potência espalhada pela partícula e a potência incidente por unidade de área.

O coeficiente de espalhamento é proporcional à concentração das partículas, o que faz com que μ_s aumente proporcionalmente com a fração de volume ocupada pelas partículas. Já a função de espalhamento é definida como a média das funções de espalhamento das partículas individuais, e, portanto é independente da concentração.

Ao contrário do coeficiente de absorção, que depende somente da composição química do meio, o coeficiente de espalhamento depende das características microfísicas das partículas. Em particular, as propriedades de espalhamento dependem do índice de refração relativo das partículas, do tamanho e da forma das partículas, e do comprimento de onda da radiação.

A partir de uma interpretação estatística do coeficiente de espalhamento total, $\mu_t = \mu_a + \mu_s$, e da função de espalhamento, $p(\hat{\mathbf{\Omega}}, \hat{\mathbf{\Omega}}')$, podemos definir o livre caminho médio de um fóton[1] para um meio homogêneo como $l_t = \frac{1}{\mu_t}$. Com esta definição, podemos interpretar o coeficiente de espalhamento como sendo o número de eventos que um fóton sofre, em média, por unidade de comprimento. Analogamente, podemos definir um livre caminho médio para o caso de um meio puramente absorvedor ($l_a = \frac{1}{\mu_a}$) e para um meio puramente espalhador ($l_s = \frac{1}{\mu_s}$).

É importante notar que as definições aqui usadas são válidas para qualquer tipo de meio, desde que l_s não seja da ordem do comprimento de onda da radiação. Neste caso, teríamos de levar em conta efeitos de interferência, pois a onda eletromagnética não conseguiria completar nem sequer uma oscilação antes de ser espalhada novamente. Devemos notar, porém, que este efeito não é importante para os casos que serão aqui estudados, pois nos meios de interesse, $l_s \gg \lambda$.

---

[1] *Na realidade, não faz sentido definir um livre caminho médio para um fóton, uma vez que esta é uma partícula quântica e, portanto, não possui trajetória definida. Mesmo assim, esta abordagem corpuscular para o fóton é útil para derivar as propriedades do meio quando há espalhamento múltiplo, produzindo resultados similares aos resultados encontrados através do formalismo ondulatório, porém de uma forma mais simples.*

Outra definição importante que pode nos ajudar ao analisar o processo de espalhamento é o coeficiente de espalhamento reduzido, μ_s', que é particularmente útil para o caso de espalhamentos múltiplos. Este coeficiente é definido como:

$$\mu_s' = \mu_s(1 - g)\,. \tag{4}$$

A partir disto, podemos redefinir um livre caminho médio associado com o espalhamento múltiplo como $l_s' = \frac{1}{\mu_s'}$.

1.2 Meios Densos e o Tecido Biológico

Vamos agora restringir um pouco mais nossa atenção a meios densos, mais especificamente a tecidos biológicos. Um meio denso é um meio no qual $\mu_s' \gg \mu_a$, isto é, um meio no qual os eventos de espalhamento são muito mais frequentes que os eventos de absorção. Desta forma, em meios densos, a propagação da luz é dominada por espalhamentos múltiplos.

Sabemos que tanto o espalhamento quanto a absorção são dependentes do comprimento de onda. Na Figura 4 vemos um gráfico da curva de absorção das principais partículas absorvedoras presentes no tecido biológico. Nesta figura, pode-se notar que há uma "janela óptica" para comprimentos de onda no infravermelho próximo (NIR), isto é, $650\,nm < \lambda < 1000\,nm$, aproximadamente. Nesta região, temos baixa absorção de luz no tecido, mas ainda com um nível considerável de espalhamento. Mais ainda, as principais partículas absorvedoras nesta região são a oxi- e deoxi-hemoglobina, devido à alta intensidade destas moléculas no tecido. Neste intervalo, temos que $\mu_s \approx 100\mu_a$, ou seja, podemos dizer que o tecido biológico é um meio denso para esta região do espectro eletromagnético.

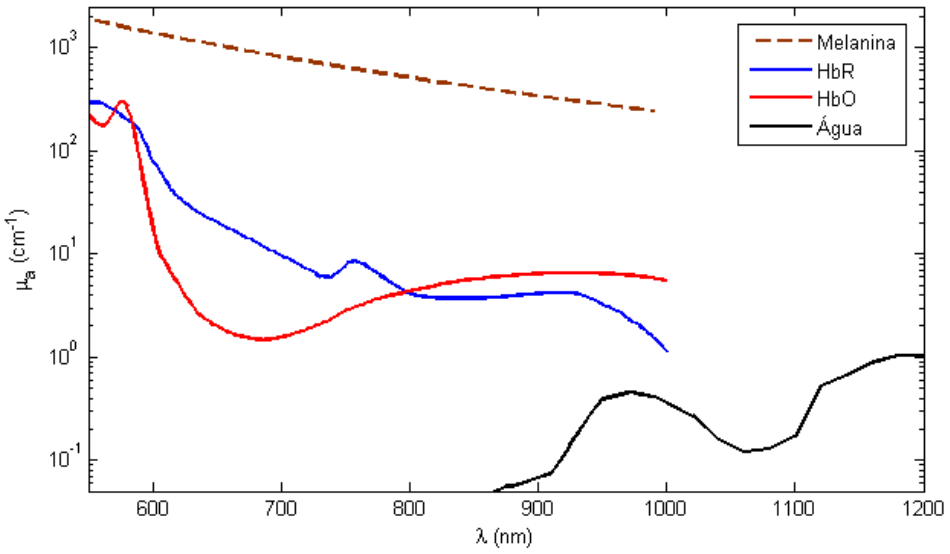

Figura 4 – Espectro de absorção dos principais constituintes do tecido biológico. Os dados para o gráfico foram obtidos em [7].

Já os eventos de espalhamento ocorrem em diversas escalas nos tecidos biológicos (Figura 5). Se usarmos uma radiação incidente na região do infravermelho próximo, com $\lambda \sim 800nm$, vemos que temos partículas espalhadoras com raios muito menores e muito maiores que λ. Teremos então uma mistura dos dois tipos de espalhamento citados acima, o que torna o processo de análise mais complicado. Aqui, porém, não esperamos ver o padrão de interferência gerado pelo caso $r \gg \lambda$, pois ao trabalhar com o tecido biológico, a soma dos efeitos provocados pelo espalhamento das diversas partículas, distribuídas aleatoriamente no meio, anula o padrão de interferência. Desta forma, procuramos descrever a propriedade de espalhamento do tecido a partir dos valores de μ_s e g, ou simplesmente de μ_s'.

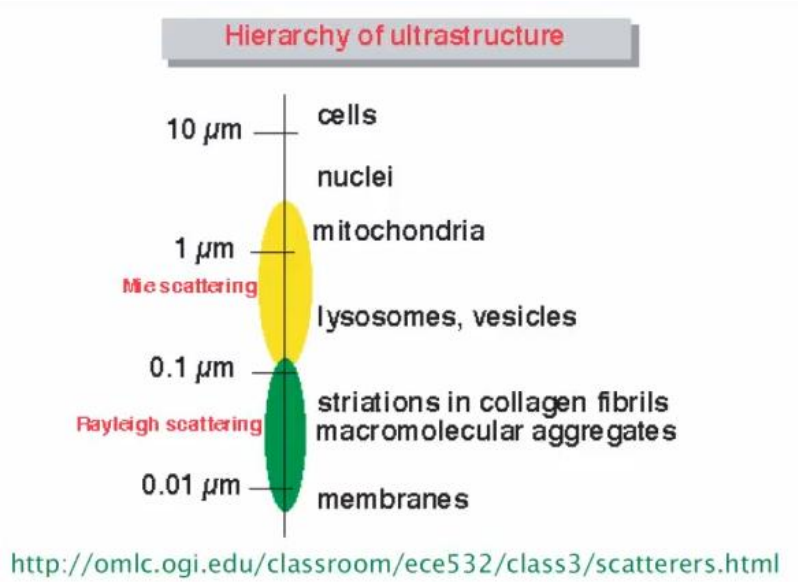

Figura 5 – Principais constituintes espalhadores do tecido biológico e suas respectivas ordens de grandeza.

2. Modelos de transporte de luz em meios densos

Precisamos agora de um modelo para descrever o processo de propagação da luz em meios densos, o que pode ser feito de diversas maneiras. Do ponto de vista clássico, a abordagem mais rigorosa e fundamental para lidar com o transporte da luz seria o uso direto das equações de Maxwell. Com isto levaríamos em conta todos os efeitos ondulatórios da luz (interferência, difração e polarização). Este tratamento é, teoricamente, preciso em todas as escalas espaciais.

As propriedades do meio que governam o transporte da luz, segundo as equações de Maxwell, são as constantes dielétricas de permeabilidade e permissividade. Estes valores são geralmente desconhecidos e de difícil acesso para o caso dos tecidos biológicos. Além disto, para a eficiência desta técnica, precisaríamos de uma resolução espacial muito menor que o comprimento da luz, que é da ordem de μm. Isto é algo inviável para os experimentos macroscópicos realizados em tecidos biológicos, pelo fato de que precisaríamos calcular um número muito grande de interações. Outra grande dificuldade criada pelo uso das equações de Maxwell é que teríamos de saber ao menos as concentrações absolutas de todas as principais partículas dentro do tecido, o que é uma informação de muito difícil acesso. Existem, porém, alguns estudos que aplicam a teoria de Maxwell para sistemas pequenos, obtendo alguns resultados significativos [8].

Outro método para resolução do problema de transporte da luz seria o uso da Equação de Transporte Radioativo (RTE) [1]. Enquanto as equações de Maxwell consideram as propriedades ondulatórias da luz, a RTE trata a luz como partículas (fótons) descrevendo certa trajetória. Este modelo usa a conservação de energia no sistema para derivar uma equação para a densidade de fótons por unidade de volume por unidade de tempo. Apesar

desta diferença, é importante citar que a RTE pode ser derivada das equações de Maxwell para o caso onde temos que cada partícula está no campo longínquo ("far-field") das outras partículas, isto é, está numa região onde os campos elétricos e magnéticos se propagam como ondas livres. Além disso, supõe-se que não existe correlação entre as posições das partículas. É também importante citar que o modelo usado pela RTE é um modelo escalar, isto é, não é possível levar em consideração efeitos de difração e interferência.

Através da expansão em polinômios de Legendre das soluções da RTE podemos chegar a diferentes soluções, válidas em escalas variando entre dezenas de μm até cm. Em particular, como queremos estudar propriedades macroscópicas do tecido, a aproximação difusiva, dada descrita equação de difusão (ED), é muito útil devido ao seu formalismo simplificado, válido em meios densos na escala de mm. Nas seções seguintes derivamos a ED diretamente da RTE, através de uma aproximação usando os esféricos harmônicos.

2.1 Grandezas e interações simplificadas relevantes ao transporte da luz

Antes de descrever o processo de transporte da luz em meios turvos, precisamos entender e definir algumas grandezas relevantes. Na Figura 6 podemos ver diferentes processos sofridos pela luz ao se propagar num meio denso. Neste caso temos que a intensidade luminosa incidente (I_0) para um comprimento de onda λ específico é distribuída de acordo com a Equação:

$$I_0(\lambda) = R_s + R_d + A + T, \tag{5}$$

onde R_s é a intensidade de luz refletida pela superfície; R_d é a intensidade luz refletida após se propagar no meio; A é a intensidade de luz absorvida e; T é a intensidade de luz transmitida. Observe que esta equação é para um comprimento de onda particular, e, portanto não leva em

consideração processos de fluorescência/fosforescência (que estão contabilizados dentro de A).

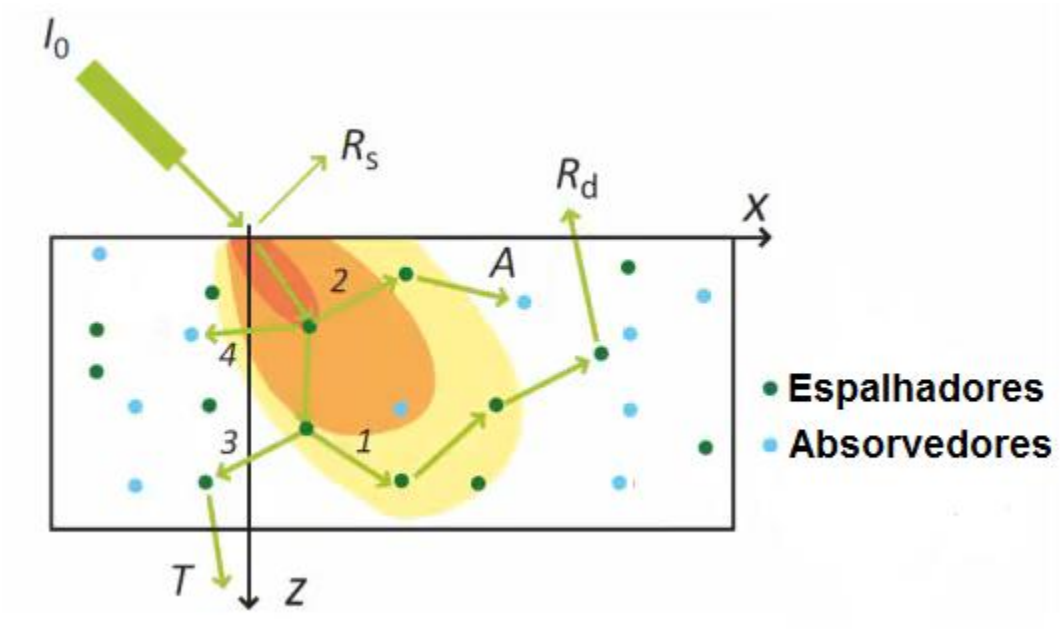

Figura 6 - Modelo esquemático da distribuição de intensidade de luz num meio denso.

Podemos ver que esta distribuição da luz no tecido gera um campo de intensidade de luz escalar, mas com certa variação direcional. Podemos definir então uma grandeza, a radiância, L, como a potência média em um determinado local $\vec{\boldsymbol{r}}$ e em um determinado tempo t que atravessa uma unidade de área orientada na direção do vetor unitário $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$, onde $\vec{\boldsymbol{r}}$ e $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$ são definidos de forma análoga à Figura 1. Conhecendo a radiância $L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)$, temos acesso a todas as outra grandezas referentes à propagação da luz no tecido.

Em particular, é útil definirmos três grandezas: a fluência (φ), a refletância (R) e a densidade de corrente ($\vec{\boldsymbol{J}}$). A fluência nada mais é do que a integral da radiância L sobre todas as direções de propagação $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$, ou seja:

$$\varphi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \int_{4\pi} L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t) d\widehat{\boldsymbol{\Omega}}. \tag{6}$$

Considere agora dois meios separados por uma interface em z=0 (considerando o sistema de coordenadas da Figura 6). Podemos então definir a refletância como a quantidade de luz que atinge a interface a partir de z > 0, de forma que $\hat{\boldsymbol{z}}.\widehat{\boldsymbol{\Omega}} < 0$. Definimos então:

$$R(\vec{\boldsymbol{r}}|_{z=0}, t) = \int_{\hat{\boldsymbol{z}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}}<0} L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)\, d\widehat{\boldsymbol{\Omega}}. \tag{7}$$

Já a densidade de corrente dos fótons nada mais é do que fluxo líquido de energia por unidade de área por unidade de tempo na direção $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$:

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \int_{4\pi} L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)\widehat{\boldsymbol{\Omega}} d\widehat{\boldsymbol{\Omega}} \tag{8}$$

2.2 RTE e a Aproximação Difusiva

A partir da conservação de energia para um elemento de volume no meio denso, podemos chegar à expressão para a equação de transporte radioativo para a radiância [3]:

$$\left[\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\boldsymbol{\nabla}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}} + \mu_t\right] L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t) = \mu_s \oint f(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}') L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}', t)\, d\widehat{\boldsymbol{\Omega}}' + Q(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t), \tag{9}$$

onde:

- $\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t} L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)$ está relacionado com a variação temporal da energia ($\propto$ número de fótons) propagando na direção $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$. Aqui, v é a velocidade da luz no meio;
- $\vec{\boldsymbol{\nabla}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}}\left[L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)\right]$ está relacionado com o fluxo líquido de energia que diverge da direção $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$;
- $\mu_t L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)$ está relacionado com a fração de energia que é extraída através dos fenômenos de absorção e espalhamento;
- $\mu_s \oint f(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}') L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}', t)\, d\widehat{\boldsymbol{\Omega}}'$ está relacionado com a energia vindo de todas as outras direções $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}'$ que são espalhadas para $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$;
- $Q(\boldsymbol{r}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t)$ está relacionado com termos de criação de fótons em **r** (termo de fonte).

A RTE é uma equação integro-diferencial e, como tal, complicada de se resolver analiticamente. Em geral, usam-se métodos numéricos ou estocásticos para resolvê-la. Considerando a simetria esférica, um possível caminho algébrico é o de expandir a radiância em esféricos harmônicos,

$$L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} L_n^m(\vec{\boldsymbol{r}}, t) Y_n^m(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}) \ , \tag{10}$$

onde L_n^m sãos os coeficientes da expansão e Y_n^m são os esféricos harmônicos definidos como:

$$Y_n^m(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}) = Y_n^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} P_{n,m}(cos\theta) e^{im\phi}, \tag{11}$$

onde $P_{n,m}(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^n n!} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} (x^2-1)^n$ é o polinômio de Legendre.

Duas propriedades importantes dos harmônicos esféricos são:

$$Y_n^{-n}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_n^{n*}(\theta, \phi) \text{ e} \tag{12.a}$$

$$\int_{4\pi} Y_n^m(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}) Y_{n'}^{m'^*}(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}) d\Omega = \delta_{nn',mm'} \ , \tag{12.b}$$

onde $\delta_{nn',mm'} = \begin{cases} 1 \ , & n = n' e \ m = m' \\ 0 \ , & caso\ contrário \end{cases}$ representa a função delta de Kronecker.

Sabemos ainda que a aproximação difusiva assume que a radiância em um meio com $\mu_s' \gg \mu_a$ é quase isotrópica quando estamos em um regime de espalhamentos múltiplos. A vantagem desta aproximação é que em muitos tecidos biológicos têm-se condições muito próximas a estas.

Queremos então derivar a aproximação difusiva da RTE. Esta aproximação corresponde à aproximação P_1 da RTE, ou seja, podemos obter a ED mantendo os termos com até $n = 1$ na Equação 10. Sabemos que o termo (0,0) é um termo isotrópico enquanto os

outros são termos anisotrópicos, algo que pode ser visto diretamente da expressão dos esféricos harmônicos para estes casos:

$$Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{4\pi} \tag{13.a}$$

$$Y_1^{-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} sin\theta e^{-i\phi} \tag{13.b}$$

$$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} cos\theta \tag{13.c}$$

$$Y_1^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} sin\theta e^{i\phi} \tag{13.d}$$

Vamos substituir agora a aproximação (10) na definição da fluência (6):

$$\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \int_{4\pi} L\left(\vec{\boldsymbol{r}},\widehat{\boldsymbol{\Omega}},t\right) d\widehat{\boldsymbol{\Omega}} \approx \int_{4\pi} \sum_{n=0}^{1} \sum_{m=-n}^{n} L_n^m(\vec{\boldsymbol{r}},t) Y_n^m\left(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}\right) d\widehat{\boldsymbol{\Omega}} = \int_{4\pi} L_0^0(\vec{\boldsymbol{r}},t) Y_0^0\left(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}\right) d\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$$

ou seja,

$$\frac{\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{4\pi} \approx L_0^0(\vec{\boldsymbol{r}},t) Y_0^0\left(\widehat{\boldsymbol{\Omega}}\right) \tag{14}$$

Da Equação 15 podemos ver que o termo isotrópico é a fluência dividida pelo ângulo sólido total (4π), o qual pode ser interpretado como a radiância média, a partir da própria definição da fluência.

Notemos agora que podemos escrever $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$ em termos dos harmônicos esféricos:

$$\widehat{\boldsymbol{\Omega}} = (sin\theta cos\phi, sin\theta sin\phi, cos\theta) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1} - Y_1^1, i[Y_1^{-1} + Y_1^1], \sqrt{2}Y_1^0\right) \tag{15}$$

Multiplicando agora a Equação 10 por $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$, usando as propriedades da Equação 12, e substituindo na expressão para a densidade de corrente da equação 8, obtemos que:

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\sum_{n=0}^{1}\sum_{m=-n}^{n}\int_{4\pi}(-1)^m L_n^m(\vec{\boldsymbol{r}},t)Y_n^{-m*}(\theta,\phi)\{(Y_1^{-1}-Y_1^1)\hat{x}+i(Y_1^{-1}+Y_1^1)\hat{y}+\sqrt{2\pi}Y_1^0\hat{z}\},$$

onde, após algumas manipulações, chegamos a:

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\{-(Y_1^{-1}-Y_1^1)\hat{x}-i(Y_1^{-1}+Y_1^1)\hat{y}+\sqrt{2\pi}Y_1^0\hat{z}\}. \tag{16}$$

Fazendo o produto escalar da Equação 16 com a Equação 15, obtemos $\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}} = \frac{4\pi}{3}\sum_{m=-1}^{1}L_1^m(\vec{\boldsymbol{r}},t)Y_1^m(\widehat{\boldsymbol{\Omega}})$, ou seja:

$$\sum_{m=-1}^{1}L_1^m(\vec{\boldsymbol{r}},t)Y_1^m(\widehat{\Omega}) = \frac{3}{4\pi}\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}} \quad . \tag{17}$$

Substituindo agora as Equações 14 e 17 na expansão feita na Equação 10 até n=1, chegamos à expressão para a aproximação da radiância no caso difusivo:

$$L(\vec{\boldsymbol{r}},\widehat{\boldsymbol{\Omega}},t) = \frac{1}{4\pi}\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)+\frac{3}{4\pi}\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}}\,. \tag{18}$$

Aqui, podemos ver que, como esperado, a radiância é aproximada por um termo isotrópico ($\frac{1}{4\pi}\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)$), mais um termo anisotrópico ($\frac{3}{4\pi}\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$). Observe ainda, que a aproximação difusiva requer que a radiância seja quase isotrópica, isto é, requer que o segundo termo seja pequeno em comparação ao primeiro.

Antes de chegarmos à equação de difusão, vamos primeiro supor que estamos trabalhando com uma fonte isotrópica, isto é, o termo de fonte não depende da direção de propagação $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$, ou seja:

$$Q(\vec{\boldsymbol{r}},\widehat{\boldsymbol{\Omega}},t) = \frac{Q(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{4\pi}. \tag{19}$$

Substituindo agora as Equações 18 e 19 na RTE (Equação 9) e integrando sobre todo o ângulo sólido 4π, obtemos:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t}+\mu_a\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)+\vec{\boldsymbol{\nabla}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)=Q(\vec{\boldsymbol{r}},t)\,. \tag{20}$$

Substituindo novamente as Equações 18 e 19 na RTE, porém multiplicando por $\widehat{\boldsymbol{\Omega}}$ antes de realizar a integração sobre todo o ângulo sólido 4π, obtemos:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t}+\mu_t'\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)+\frac{1}{3}\nabla\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=0\,, \tag{21}$$

onde $\mu_t'=\mu_a+\mu_s'$ é o coeficiente de transporte reduzido e μ_s' está definido na Equação 4.

Queremos obter uma equação escalar que dependa somente da fluência. Para isso, devemos assumir que a mudança fracionária de $\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)$ dentro do intervalo $l_t'=\frac{1}{\mu_t'}$ é pequena, ou seja:

$$\left(\frac{l_t'}{v}\right)\left(\frac{1}{\left|\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\right|}\left|\frac{\partial\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t}\right|\right)\ll 1.$$

Aqui, o primeiro termo em parênteses é o tempo que um fóton leva para cruzar o comprimento l_t', enquanto o segundo termo contem a mudança fracionária da corrente de densidade por unidade de tempo. Esta equação pode ser reescrita como:

$$\left|\frac{1}{v}\frac{\partial\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t}\right|\ll\mu_t'\left|\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)\right|\,. \tag{22}$$

Usando a hipótese da Equação 22, podemos reescrever a Equação 21 como:

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}},t)=-\frac{1}{3\mu_t'}\nabla\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=-D\nabla\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t), \tag{23}$$

onde $D=\frac{1}{3\mu_t'}$ é o coeficiente de difusão. Substituindo agora a Equação 23 na Equação 20, finalmente obtemos a equação de Difusão (ED):

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t}+\mu_a\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)-\vec{\boldsymbol{\nabla}}\cdot[D(\vec{\boldsymbol{r}},t)\nabla\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)]=Q(\vec{\boldsymbol{r}},t). \tag{24.a}$$

Observe que trabalhando com um meio homogêneo, $D(\vec{\boldsymbol{r}},t) = D = cte$, podemos reescrever a Equação 24.a como:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t} + \mu_a\varphi(\vec{\mathbf{r}},\mathrm{t}) - \mathrm{D}\nabla^2\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = Q(\vec{\boldsymbol{r}},t). \qquad (24.b)$$

Lembrando que $D = \frac{1}{3\mu_t'} = \frac{1}{3(\mu_a+\mu_s')}$, e que para o caso de meios densos $\mu_s' \gg \mu_a$, o coeficiente de difusão se torna $D \approx \frac{1}{3\mu_s'}$. Podemos notar que o conhecimento do valor de $\mu_s' = \mu_s(1-g)$ e μ_a nos dá toda a informação necessária, além das condições de contorno, para resolver as equações (24). Também é importante mencionar que o processo aqui descrito vale para o caso onde a energia emitida pela fonte depende do tempo, embora também seja possível resolver este problema para o caso de fontes de onda contínua.

2.3 Soluções Gerais da Equação de Difusão pelo Método de Green

De agora em diante, trataremos da solução do problema de propagação de fótons, com aproximação difusiva, através do método de Green. Para entender o que é o método de Green, considere um operador diferencial linear L_x, da seguinte forma:

$$L_x[y] = f(x)\,, \qquad (25)$$

onde $y = y(x)$ é a solução da Equação 25 e x é a variável independente do problema. Queremos então encontrar uma expressão para a solução $y(x)$ da Equação 25. Através do uso de um operador inverso L_x^{-1}, podemos escrever:

$$y(x) = L_x^{-1}L_x[y] = L_x^{-1}f(x) = G[f](x). \qquad (26)$$

Temos agora que se o operador G é um operador integral, podemos escrever:

$$y(x) = G[f](x) = \int G(x,\xi)\mathrm{f}(\xi)\mathrm{d}\xi\ , \qquad (27)$$

onde ξ é uma variável de integração. Com isso, temos que:

$$L_x[y] = \int L_x[G(x,\xi)]f(\xi)d\xi = f(x) = \int \delta(x-\xi)f(\xi)d\xi\,, \tag{28}$$

onde $\delta(x-\xi)$ é a função delta de Dirac. Temos então que a função de Green do problema da Equação 25 pode ser definida como:

$$L_x[G(x,\xi)] = \delta(x-\xi). \tag{29}$$

A partir disto, podemos ver que basta saber a função de Green $G(x,\xi)$ e o termo de fonte $f(x)$ para encontrarmos a solução $y(x)$ desejada. Extrapolando esta ideia agora para o problema da equação de difusão, isto é, definindo o operador L como:

$$L = \frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t} + \mu_a - \vec{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (D\nabla), \tag{30}$$

podemos então escrever a equação de difusão como:

$$L[\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t)] = Q(\vec{\boldsymbol{r}},t). \tag{31}$$

Usando um análogo da Equação 29, e considerando que temos uma única fonte pontual na origem ($\xi = 0$), temos que:

$$L[\Phi(\vec{r},t)] = \delta^3(\vec{r})\delta(t)\,, \tag{32}$$

onde $\Phi(\vec{\boldsymbol{r}},t)$ é a função de Green associada à ED. A solução da ED é dada por:

$$\varphi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \int \Phi(\vec{\boldsymbol{r}},t)Q(\vec{\boldsymbol{r}},t)d^3r dt. \tag{33.a}$$

Uma propriedade importante da função de Green é que esta é proporcional à distribuição de probabilidade, ou seja, podemos usá-la como função peso para descobrir os valores médios de alguma variável de interesse α:

$$\langle\alpha\rangle = \frac{\int \alpha\Phi(\vec{r},t)d^3r dt}{\int \Phi(\vec{r},t)d^3r dt} \tag{33.b}$$

2.3.1 Propriedades das Soluções da ED

Outra importante propriedade da solução é que, dada a função de Green de uma ED de um meio homogêneo, com coeficientes μ_s' e μ_a, podemos então ter a solução da ED para outro meio homogêneo com propriedades ópticas diferentes, com coeficientes $\overline{\mu_s'}$ e $\overline{\mu_a}$, de forma que [1]:

$$\overline{\Phi}\left(\overline{\vec{r}}, \overline{t}\right) = \left(\frac{\overline{\mu_s'}}{\mu_s'}\right)^3 \Phi(\vec{r}, t)\ , \tag{34}$$

onde $\overline{\vec{r}} = \vec{r}\frac{\mu_s'}{\overline{\mu_s'}}$ e $\overline{t} = t\frac{\mu_s'}{\overline{\mu_s'}}$. Esta equação é válida dado que $\overline{\mu_s'}/\mu_s' = \overline{\mu_a}/\mu_a$. Esta propriedade, também conhecida como o princípio de similaridade, é muito útil uma vez que permite a utilização de resultados obtidos numa dada escala para qualquer outra escala, desde que $\overline{\mu_s'}/\mu_s' = \overline{\mu_a}/\mu_a$, e que a função de espalhamento $p(\theta)$ seja a mesma para ambos os meios. Com base neste princípio, quando se estuda problemas envolvendo a ED é possível escolher a escala mais conveniente para o experimento em questão, ao invés de fazê-lo com sua escala real.

Outra propriedade importante da ED se refere ao seu comportamento em relação à absorção. Em nossa aproximação, o coeficiente de difusão D não depende do coeficiente de absorção. Suponha que sabemos a solução para um problema de um meio não absorvedor $\Phi(\vec{r}, t, \mu_a = 0)$. Podemos então achar a solução para um meio absorvedor como [1]:

$$\Phi(\vec{r}, t, \mu_a) = \Phi(\vec{r}, t, \mu_a = 0)\exp(-\mu_a v t). \tag{35.a}$$

Através dessa dependência com a absorção, dada pela Equação 35.a, podemos encontrar o tempo médio de viagem de um fóton. Lembrando-se da Equação 33.b, temos:

$$\langle t \rangle = \frac{\int_0^{+\infty} \mathrm{t}\Phi(\vec{r}, t)dt}{\int_0^{+\infty} \Phi(\vec{r}, t)dt} = -\frac{1}{v\Phi(\vec{r})}\frac{\partial\Phi(\vec{r})}{\partial\mu_a} = -\frac{1}{v}\frac{\partial \ln[\Phi(\vec{r})]}{\partial\mu_a}\ , \tag{35.b}$$

onde $\Phi(\vec{r})$ é a função de Green da fluência para o caso de uma fonte de onda contínua. Para encontrar o caminho óptico médio, basta notarmos que $\langle l \rangle = v\langle t \rangle$.

Essa expressão pode ser generalizada para o n-ésimo momento como [1]:

$$\langle t^n \rangle = (-1)^n \frac{1}{v^n \Phi(\vec{r})} \frac{\partial^n \Phi(\vec{r})}{\partial {\mu_a}^n} \qquad (35.c)$$

2.3.2 Condições de Contorno

A equação de difusão é uma equação parcial e, como tal, para resolvê-la precisamos definir as condições de contorno para cada caso que queiramos estudar. Um exemplo de uma condição de contorno, válida para meios infinitos, é:

$$\lim_{r \to \infty} \varphi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = 0. \qquad (36)$$

Existem diferentes tipos possíveis de condições de contorno, tanto para interfaces entre um meio difusivo e um meio não espalhador como para interfaces entre dois meios difusivos. Estas condições de contorno podem ser encontradas entre as páginas 43 e 48 de [1].

Aqui resolveremos a ED para alguns casos diferentes. Cabe relembrar que as soluções feitas aqui se referem à função de Green do problema da ED propriamente dita.

3. Soluções da Equação de Difusão para Algumas Geometrias

3.1 Meio Infinito

Vamos considerar um meio infinito homogêneo caracterizado pelos coeficientes μ_a e μ_s', com um termo de fonte na origem. Queremos resolver então o problema da Equação 32, isto é:

$$\left(\frac{\partial}{v\partial t} - D\nabla^2 + \mu_a\right)\Phi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \delta^3(\vec{\boldsymbol{r}})\delta(t). \tag{37}$$

Pela propriedade da ED descrita pela Equação 35, sabemos que podemos escrever:

$$\Phi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}}, t)\exp(-\mu_a vt), \tag{38}$$

onde $\Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$ é a solução para um meio não absorvedor. Nos basta então resolver a Equação 37 com $\mu_a = 0$. Escrevendo:

$$\Phi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \Phi_{0x}(\vec{\boldsymbol{r}}, t)\Phi_{0y}(\vec{\boldsymbol{r}}, t)\Phi_{0z}(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$$

e, lembrando que:

$$\nabla^2 = \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \;\; e\; que\; \delta^3(\vec{\boldsymbol{r}}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z),$$

podemos reescrever a Equação 37 como:

$$\left[\frac{\partial}{v\partial t} - D\left(\frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}\right)\right]\Phi_{0x}\Phi_{0y}\Phi_{0z} = \delta(x)\delta(y)\delta(z)\delta(t), \tag{39}$$

com as condições de contorno

$$\lim_{|\vec{\boldsymbol{r}}|\to\infty} \Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = 0 \;\; e;\; \Phi_0 \equiv 0\; para\; t < 0.$$

Vamos tomar agora a transformada de Fourier da Equação 39, definida como:

$$\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) = \boldsymbol{FT}[\Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}},t)] = \begin{cases} \widetilde{\Phi}_{0x}(\omega_1,t)\widetilde{\Phi}_{0y}(\omega_2,t)\widetilde{\Phi}_{0z}(\omega_3,t), & para\ t \geq 0 \\ 0, & para\ t < 0 \end{cases}$$

onde,

$$\begin{cases} \widetilde{\Phi}_{0x}(\omega_1,t) = FT[\Phi_{0x}(x,t)] = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_1 x)\,\Phi_{0x}(x,t)dx\,, \\ \widetilde{\Phi}_{0y}(\omega_2,t) = FT\big[\Phi_{0y}(y,t)\big] = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_2 y)\,\Phi_{0y}(y,t)dy\,, \\ \widetilde{\Phi}_{0z}(\omega_3,t) = FT[\Phi_{0z}(z,t)] = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_1 z)\,\Phi_{0z}(z,t)dz. \end{cases} \tag{40}$$

Usando a Equação 40 e a propriedade da transformada de Fourier de que $\frac{d^n f(x)}{dx^n} \overset{FT}{\Rightarrow} (i\omega)^n \tilde{f}(\omega)$ e, lembrando que:

$$FT[\delta^3(\vec{\boldsymbol{r}})] = \int \exp(-i\vec{\boldsymbol{\omega}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}})\,\delta^3(\vec{\boldsymbol{r}})d^3r = 1, \tag{41}$$

podemos então escrever a transformada de Fourier da Equação 37 como:

$$\frac{\partial}{v\partial t}\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) + (\omega_1^2+\omega_2^2+\omega_3^2)D\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) = \delta(t). \tag{42}$$

Observe que podemos reescrever a Equação 42 como

$$\frac{\partial}{v\partial t}\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) + (\omega_1^2+\omega_2^2+\omega_3^2)D\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) = 0, \qquad para\ t > 0. \tag{43}$$

Para encontrar $\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t)$, basta então integrarmos a Equação 43 de $t = 0$ até $t = +\infty$, o que nos leva a:

$$\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t) = \begin{cases} A\exp[-(\omega_1^2+\omega_2^2+\omega_3^2)Dvt], & para\ t \geq 0, \\ 0, & para\ t < 0. \end{cases} \tag{44}$$

Para calcularmos o valor da constate A, precisamos analisar o comportamento de $\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}},t)$ em $t \to 0$. Integrando agora a Equação 42 dentro do intervalo $[0^-, 0^+]$, chegamos a condição de que:

$$\left[\widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}}, 0^+) - \widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}}, 0^-)\right] = v. \tag{45}$$

Sabemos ainda da Equação 44 que $\widetilde{\Phi}_0(\vec{\omega}, 0^-) = 0$, o que nos leva a dizer que $A = v$. Temos então que a transformada de Fourier de $\Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}}, t)$ é

$$\widetilde{\Phi}_0(\vec{\omega}, t) = \begin{cases} v\exp[-(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2)Dvt], & para\ t \geq 0, \\ 0, & para\ t < 0. \end{cases} \tag{44}$$

Aplicando agora a transformada inversa na Equação 44, obtemos

$$\Phi_0(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\vec{\boldsymbol{\omega}} \cdot \vec{\boldsymbol{r}})\, \widetilde{\Phi}_0(\vec{\boldsymbol{\omega}}, t) d^3\omega\,, \qquad para\ t \geq 0. \tag{45}$$

Usando as Equações 44 e 45, chegamos a

$$\Phi_0(\vec{r}, t) = \frac{v}{(2\pi)^3} I_1 I_2 I_3\,,$$

onde

$$\begin{cases} I_1 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_1 x)\exp(-\omega_1^2 Dvt)\, d\omega_1\,, \\ I_2 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_2 x)\exp(-\omega_2^2 Dvt)\, d\omega_2\,, \\ I_3 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega_3 x)\exp(-\omega_3^2 Dvt)\, d\omega_2\,. \end{cases} \tag{46}$$

Estas integrais são simplesmente a transformada de Fourier de uma função Gaussiana, que sabemos o resultado:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a\xi^2 + i\omega\xi)\, d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, \exp\left(-\frac{\omega^2}{4a}\right).$$

Portanto, os passos acima levam à solução da ED para um meio infinito não absorvedor:

$$\Phi_0(\vec{r},t) = \begin{cases} \dfrac{v}{(2\pi)^3}\left(\dfrac{\pi}{Dvt}\right)^{3/2} \exp\left(-\dfrac{x^2+y^2+z^2}{4Dvt}\right), & para\ t \geq 0, \\ 0, & para\ t < 0. \end{cases} \tag{47}$$

Lembrando da Equação 38, podemos escrever a função de Green para um meio com coeficientes μ_a e μ_s', para $t > 0$, como:

$$\Phi(\vec{r},t) = \frac{v}{(4\pi Dvt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dvt} - \mu_a vt\right), \tag{48}$$

onde $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

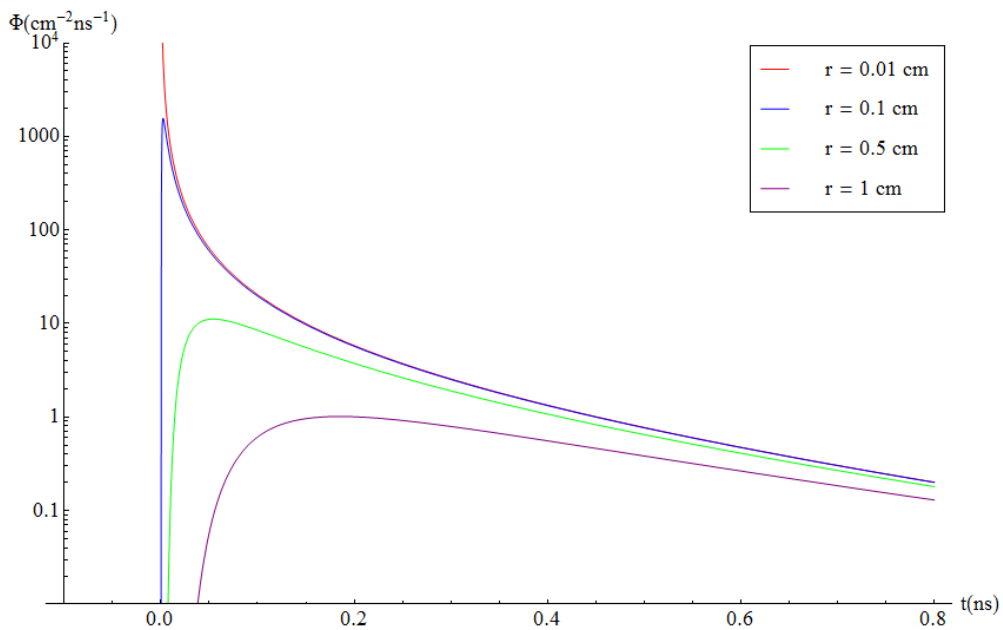

Figura 7 – Perfil temporal para a fluência num meio infinito, para diversos valores de r, quando temos $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$.

Na Figura 7, podemos ver como a fluência varia em função do tempo em diferentes locais no meio infinito (Equação 48). Neste caso, assumimos $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$. O script usado para gerar este gráfico está no Apêndice A.1. Por estes gráfico podemos ver que, como esperado, a amplitude da fluência decai quanto mais longe da fonte se está. Observe que

o perfil temporal de detecção da luz é diferente, dependendo da localização do detector. Para valores de r suficientemente grandes (~cm), o perfil aproxima-se de uma Lorentziana.

É importante notar, porém, que esta solução prediz energias para todos os instantes de tempo, incluindo $t < r/v$; ou seja, as hipóteses usadas para simplificar o problema da ED levam a necessidade de uma velocidade infinita da luz, isto é, leva a necessidade de que a luz se espalhe instantaneamente por todo o meio. Este aspecto da ED o torna fisicamente incorreto, pois viola o princípio da casualidade. Podemos ver, no entanto, que a ED descreve o comportamento assintótico da propagação de fótons em um meio. De qualquer forma, estas considerações não são de fato um problema para experimentos reais, dado que, na prática, trabalhamos com escalas suficientemente grandes para não podermos ver este efeito balístico da propagação.

Para chegarmos a uma expressão para a função de Green da radiância propriamente dita, primeiro devemos usar a Equação 23, chegando a:

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \frac{r}{16(\pi D v)^{3/2}\,(t)^{5/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dvt} - \mu_a v t\right)\hat{\boldsymbol{r}}. \tag{49}$$

Substituindo agora as Equações 48 e 49 na Equação 18 obtemos:

$$L(\vec{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}, t) = \frac{1}{(4\pi)^{5/2}(Dvt)^{3/2}}\left[v + \frac{3r}{2t}(\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{\Omega}})\right] \exp\left(-\frac{r^2}{4Dvt} - \mu_a v t\right). \tag{50}$$

A partir das Equações 48, 49 e 50 podemos encontrar as expressões destas grandezas para o caso de uma fonte de onda contínua (CW). Para isto, basta integrarmos estas expressões em todo o intervalo temporal, i.e., teremos de realizar integrais do tipo:

$$\int_0^{+\infty} t^{\nu-1} \exp\left(-\frac{B}{t} - \gamma t\right) dt = 2\left(\frac{B}{\gamma}\right)^{\nu/2} K_\nu\left(2\sqrt{\gamma B}\right) \tag{51.a}$$

onde, onde $K_\nu(x)$ são as funções de Bessel esféricas modificadas de terceiro tipo. Estas equações têm a seguinte propriedade:

$$K_{\nu+1/2}(x) = K_{-\nu-1/2}(x) \tag{51.b}$$

Para $\nu = 1/2$ e $\nu = 3/2$, as equações podem ser escritas como:

$$\begin{cases} \sqrt{\dfrac{\pi}{2x}} K_{1/2}(x) = \dfrac{\pi}{2x} \exp(-x), \\ \sqrt{\dfrac{\pi}{2x}} K_{3/2}(x) = (1 + x^{-1}) \exp(-x)\,. \end{cases} \tag{51.c}$$

Integrais do tipo da Equação 51.a, embora sejam geralmente válidas para $Re(B) > 0$ e $Re(\gamma) > 0$, podem também ser representadas pela mesma equação para $Re(B) = 0$ e $Re(\gamma) = 0$.

Integrando agora as Equações 48, 49 e 50, e usando a Equação 51, obtemos as expressões de $\Phi(\vec{\boldsymbol{r}}), \vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}}) e\ L(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}})$ para o caso de uma fonte CW:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r D} \exp\left(-\mu_{eff} r\right), \tag{52}$$

$$\vec{\boldsymbol{J}}(\vec{\boldsymbol{r}}) = \frac{1}{4\pi r}\left(\frac{1}{4} + \mu_{eff}\right) \exp\left(-\mu_{eff} r\right) \hat{\boldsymbol{r}}, \tag{53}$$

$$L\left(\vec{\boldsymbol{r}}, \widehat{\boldsymbol{\Omega}}\right) = \frac{1}{16\pi^2 r D}\left[1 + 3\left(\frac{D}{r} + \mu_{eff}\right)\left(\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \widehat{\boldsymbol{\Omega}}\right)\right] \exp\left(-\mu_{eff} r\right), \tag{54}$$

onde $\mu_{eff} = \sqrt{\mu_a / D} = \sqrt{3\mu_a \mu_s'}$.

Na Figura 8 podemos ver a variação da fluência em função da distância entre uma fonte (na origem) e um detector (localizado na posição r), para diversos valores μ_s', mantendo $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ fixo. Este gráfico foi feito usando os scripts descritos no Apêndice A.1.

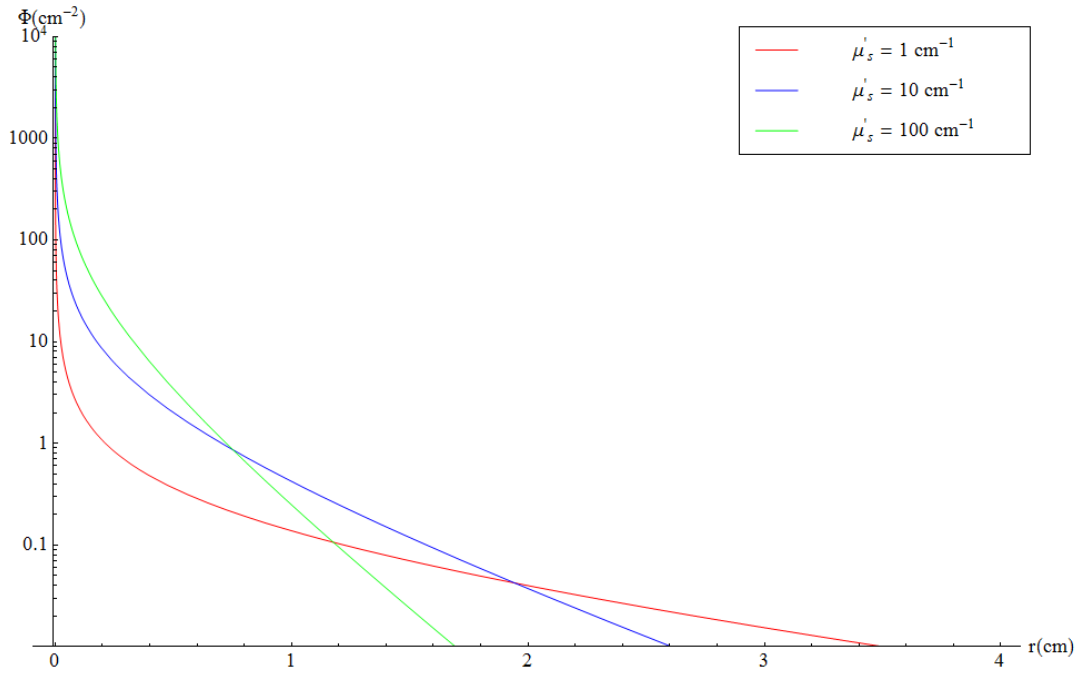

Figura 8 – Variação da fluência para diferentes valores da razão μ_s', mantendo $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$fixo, no caso CW.

A partir das expressões acima, também podemos derivar características da propagação da luz em função das propriedades do meio. Por exemplo, a expressão da posição média de um fóton é dada por [4]:

$$\langle r \rangle = \frac{\int_0^\infty r\Phi(\vec{r})4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty \Phi(\vec{r})4\pi r^2 dr} = \frac{3}{\mu_{eff}}. \qquad (55.a)$$

A distância quadrática média que um fóton percorre antes de ser absorvido pode ser descrita por:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty r^2\Phi(\vec{r})4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty \Phi(\vec{r})4\pi r^2 dr} = \frac{6}{{\mu_{eff}}^2} \qquad (55.b)$$

Podemos também chegar a uma expressão para o tempo médio de viagem de um fóton medido em r usando a equação 35.b:

$$\langle t\rangle(r) = \frac{\int_0^\infty t\Phi(\vec{r},t)dt}{\int_0^\infty \Phi(\vec{r},t)dt} = \frac{r}{2v}\frac{1}{\sqrt{\mu_a D}} = \frac{r}{2v}\sqrt{\frac{3\mu_s'}{\mu_a}}\,, \tag{56}$$

que também pode ser estimado a partir das curvas da Figura 7. Além disto, como podemos escrever que $\langle l\rangle(r) = v\langle t\rangle(r)$, temos que o caminho óptico médio de um fóton detectado na posição r é:

$$\langle l\rangle(r) = \frac{r}{2}\sqrt{\frac{3\mu_s'}{\mu_a}}\,, \tag{57}$$

que pode ser utilizado para estimar o "differential pathlength factor", um parâmetro de correção para a lei de Beer-Lambert em meios densos (não discutido aqui). Fazendo agora a média da Equação 57 em todo o espaço, obtemos o caminho óptico médio total:

$$\langle l\rangle = \frac{\int_0^\infty \langle l\rangle(\mathrm{r})\Phi(\vec{r},t)4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty \Phi(\vec{r},t)4\pi r^2 dr} = \frac{1}{\mu_a}. \tag{58}$$

Vemos então que o caminho óptico médio total para um meio infinito é igual ao caminho óptico médio para um fóton em um meio não espalhador. Devemos notar que há, porém, uma diferença entre os dois casos: no caso de um meio não espalhador o caminho realizado pelo fóton acontece em uma linha reta, enquanto que para o caso do meio espalhador o fóton segue uma trajetória aleatória.

3.2 Meio Semi-Infinito

Para resolver a ED para um meio semi-infinito, podemos usar diretamente a solução do meio infinito (Equação 52) fazendo duas hipóteses adicionais. Primeiro, temos de assumir que os fótons serão inicialmente espalhados a uma distância $z_0 = {\mu_s'}^{-1}$, ou seja, na realidade teremos um termo de fonte da forma $\delta(z - z_0)\delta^2(\vec{\boldsymbol{\rho}})$. Além disso, precisamos também especificar uma condição de contorno para a superfície do tecido. Podemos estabelecer que

$\Phi(\vec{r}, t) = 0$ na interface entre os dois meios ($z = 0$) [1,9]. Para satisfazer esta condição, basta adicionarmos uma "fonte negativa" de fótons, isto é, uma fonte da mesma forma que a fonte em z_0 porém com sinal oposto, como mostrado na Figura 9 (análogo ao problema do método de imagens) [10]. Podemos escrever a solução para o meio semi-infinito como a soma da contribuição das duas fontes:

$$\Phi(z, \rho, t) = \frac{v}{(4\pi Dvt)^{3/2}} \exp(-\mu_a vt) \left\{ \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2 + \rho^2}{4Dvt} \right) - \exp\left(-\frac{(z + z_0)^2 + \rho^2}{4Dvt} \right) \right\}, \quad (60)$$

onde a posição neste caso é dada em coordenadas cilíndricas.

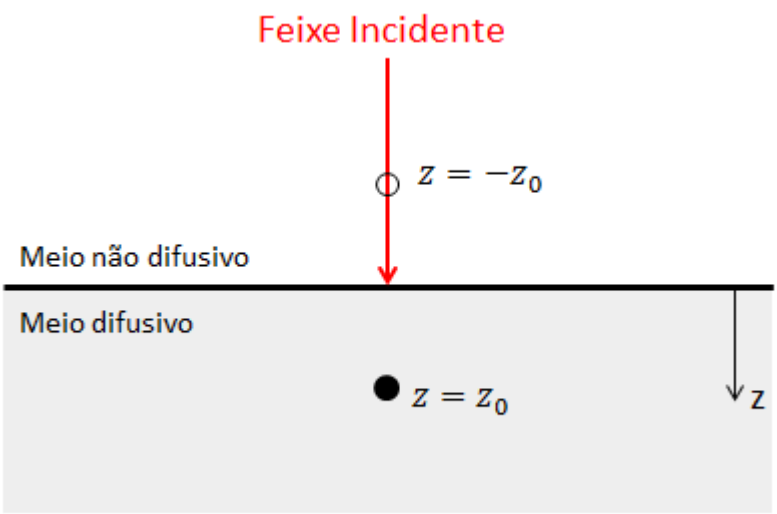

Figura 9 – Desenho esquemático da geometria utilizada para o caso de um meio semi-infinito.

Plotamos a fluência para o meio semi-infinito em dois casos diferentes: primeiro fixando os valores $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$ e variamos ρ (Figura 10), e em seguida plotamos para os valores fixos de $\rho = 1.5\ cm$ e $\mu_a = 0.1 cm$, variando μ_s' (Figura 11). Em ambos os casos estamos calculando a fluência em $z = z_0 = 1/\mu_s'$. Para gerar os gráficos, usamos os scripts descritos no Apêndice A.2.

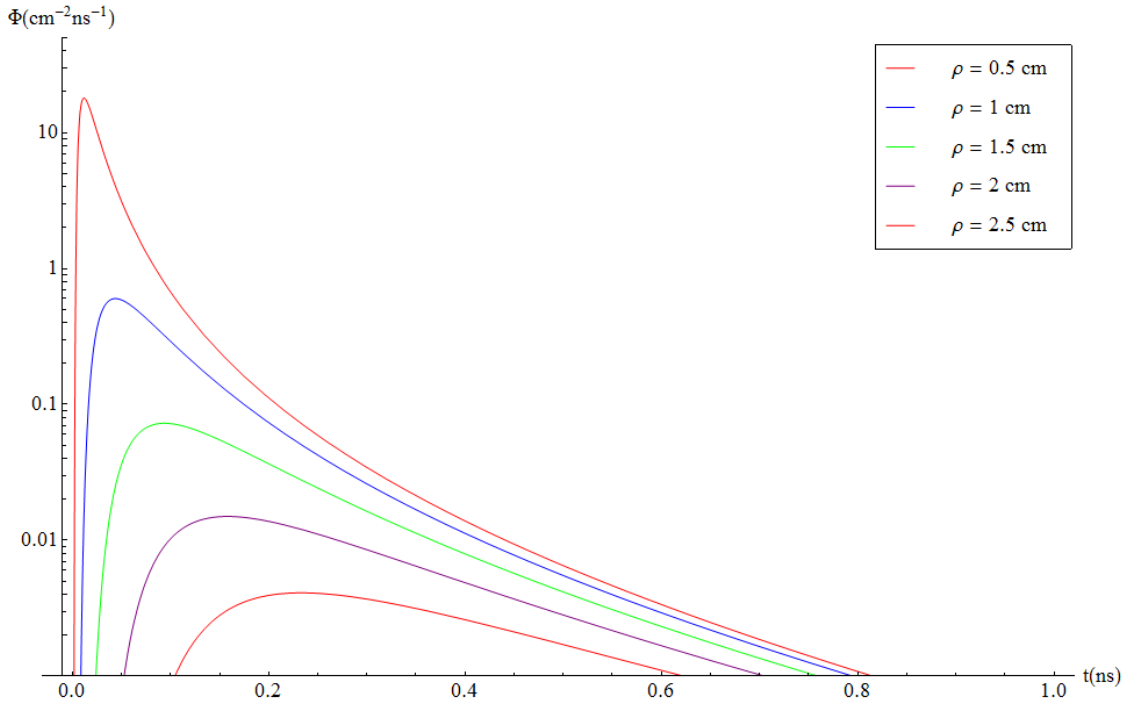

Figura 10 – Variação temporal da fluência, em função de ρ, para o caso de um meio semi-infinito, com valores de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$ fixos.

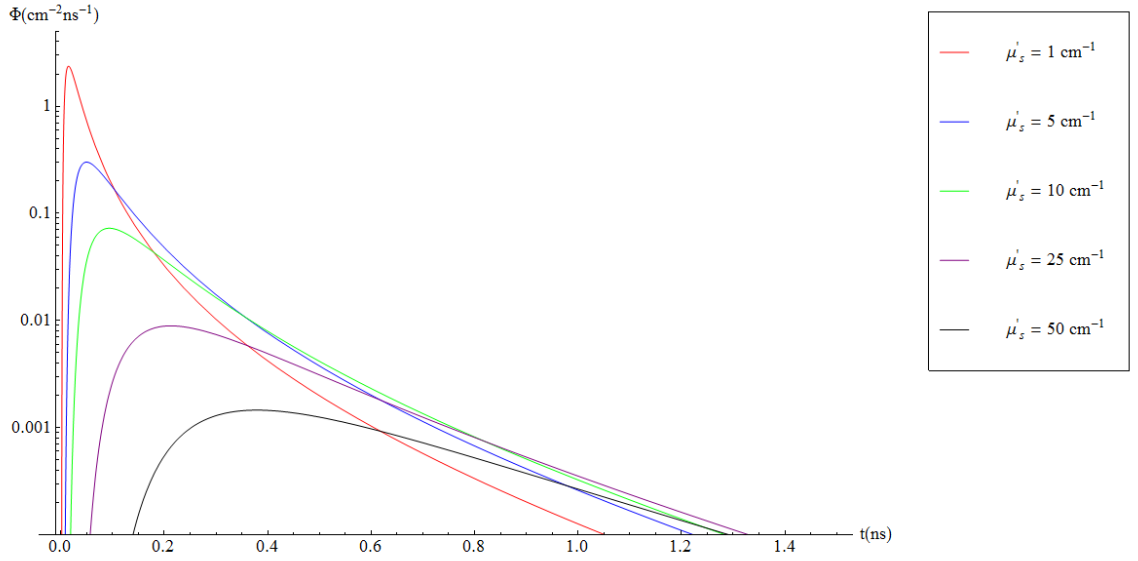

Figura 11 – Variação temporal da fluência, em função de μ_s', para o caso de um meio semi-infinito, com valores fixos de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\rho = 1.5\ cm$.

Se quisermos saber qual o fluxo de fótons indo para a fronteira em $z = 0$, devemos lembrar da Equação 23:

$$\vec{J}(z = 0, \rho, t) = -D\nabla\Phi(z, \rho, t)|_{z=0} \,. \tag{61}$$

Lembrando-se da definição da Equação 7, podemos encontrar uma expressão para refletância:

$$R(\vec{r}|_{z=0}, t) = \vec{J}(z = 0, \rho, t) = \frac{z_0}{(4\pi Dv)^{3/2} t^{5/2}} \exp(-\mu_a vt) \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2 + \rho^2}{4Dvt}\right). \tag{62}$$

Devemos notar ainda que se $\rho^2 \gg z_0^2$, podemos escrever [9]:

$$\frac{d}{dt} \ln R(\vec{r}|_{z=0}, t) = -\frac{5}{2t} - \mu_a v + \frac{\rho^2}{4Dvt^2} \,. \tag{63}$$

Tomando o limite $t \to \infty$:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{d}{dt} \ln R(\vec{r}|_{z=0}, t) = -\mu_a v. \tag{64}$$

A Equação 64 nos mostra que através do caráter assintótico da Equação 63 (ou pelas Figuras 10 e 11) podemos calcular o coeficiente de absorção do meio. Se igualarmos a Equação 63 à zero, podemos também encontrar uma expressão para calcular o valor de μ_s' do meio. Chamando $t = t_{max}$ o tempo no qual temos um máximo da refletância (pelas Figuras 10 e 11 podemos ver que teremos um único máximo), obtemos uma expressão para μ_s':

$$\mu_s' = \frac{1}{3\rho^2}(4\mu_a v^2 t_{max}^2 + 10vt_{max}) - \mu_a. \tag{65}$$

Podemos ver então que, usando as Equações 64 e 65, as propriedades óticas de um meio semi-infinito podem ser calculadas, medindo-se a intensidade refletida, em função do tempo, em algum ponto na superfície do meio, desde que $\rho^2 \gg z_0^2$.

Integrando a Equação 60 em $t = [0, \infty]$ (através do software *Wolfram Mathematica 8.0*), chegamos a seguinte expressão para a fluência no caso CW (o script para realizar esta integração está no Apêndice A.2):

$$\Phi(z,\rho) = \frac{3\sqrt{3}\mu_s^{3/2}}{8\pi^{3/2}\sqrt{v}} \left\{ \frac{2\pi\sqrt{\frac{v}{\mu_s[\rho^2 + (z - z_0)^2]}}\exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sqrt{\mu_a v}}{\sqrt{\frac{v}{\mu_s[\rho^2 + (z - z_0)^2]}}}\right)}{\sqrt{3}} - \pi\sqrt{\frac{v}{\mu_s[\rho^2 + (z + z_0)^2]}}\exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sqrt{\mu_a v}}{\sqrt{\frac{v}{\mu_s[\rho^2 + (z + z_0)^2]}}}\right) \right\}, \quad (66)$$

onde devemos garantir que os termos dentro das raízes sejam ≥ 0, o que será sempre verdade.

Usando novamente o método mostrado no Apêndice A.2, podemos plotar a fluência para o caso CW. Na Figura 12 plotamos a fluência em função de z para valores fixos de $\rho = 1.5\ cm\ e\ \mu_a = 0.1\ cm^{-1}$, variando o valor de μ_s'. Na Figura 13 plotamos a fluência em função de z para valores fixos de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$, variando o valor de ρ. Além disso, plotamos na Figura 14 a fluência em função de ρ, para diferentes valores de μ_s', mantendo $z = z_0\ e\ \mu_a = 0.1\ cm^{-1}$. A partir destes gráficos podemos ter uma ideia de como será a distribuição dos fótons dentro do meio.

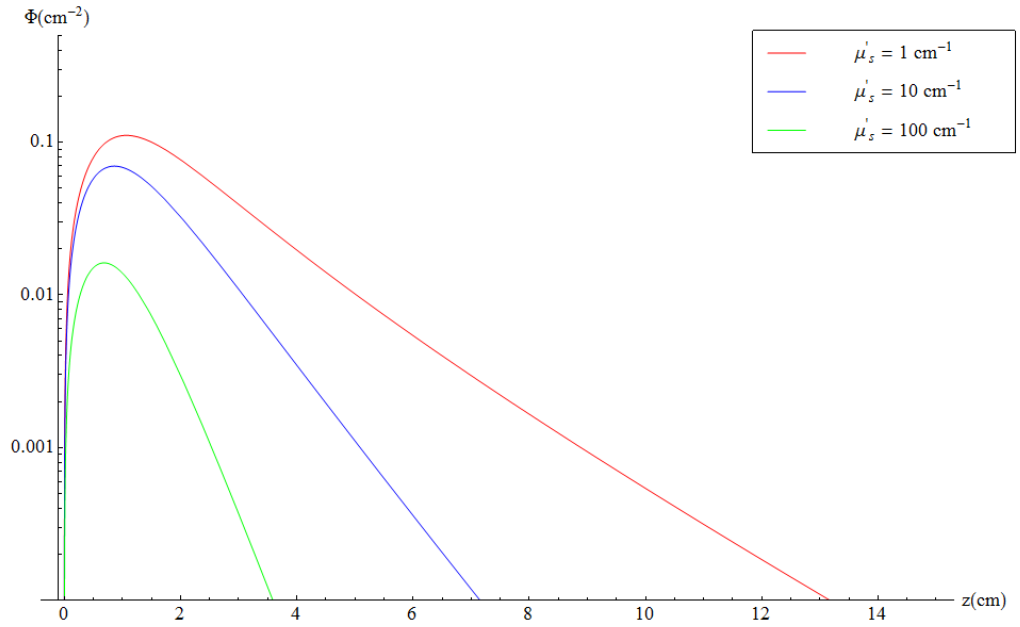

Figura 12 – Fluência, no caso CW, em função de z, com valores fixos de $\rho = 1.5\ cm$ e $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$, e variando o valor de μ_s'.

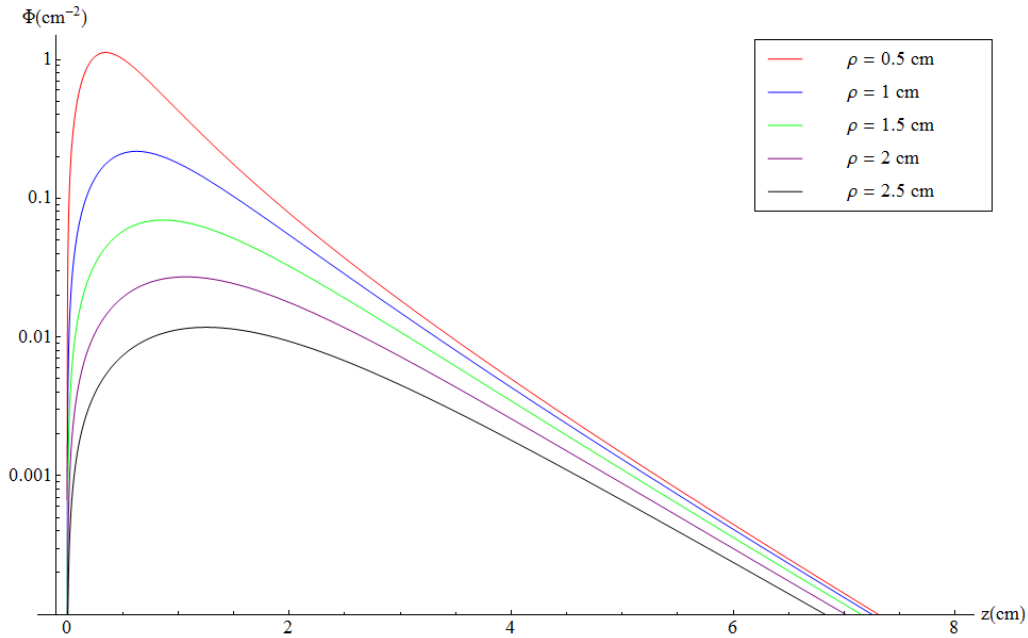

Figura 13 – Fluência, no caso CW, em função de z, com valores fixos de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$, variando o valor de ρ.

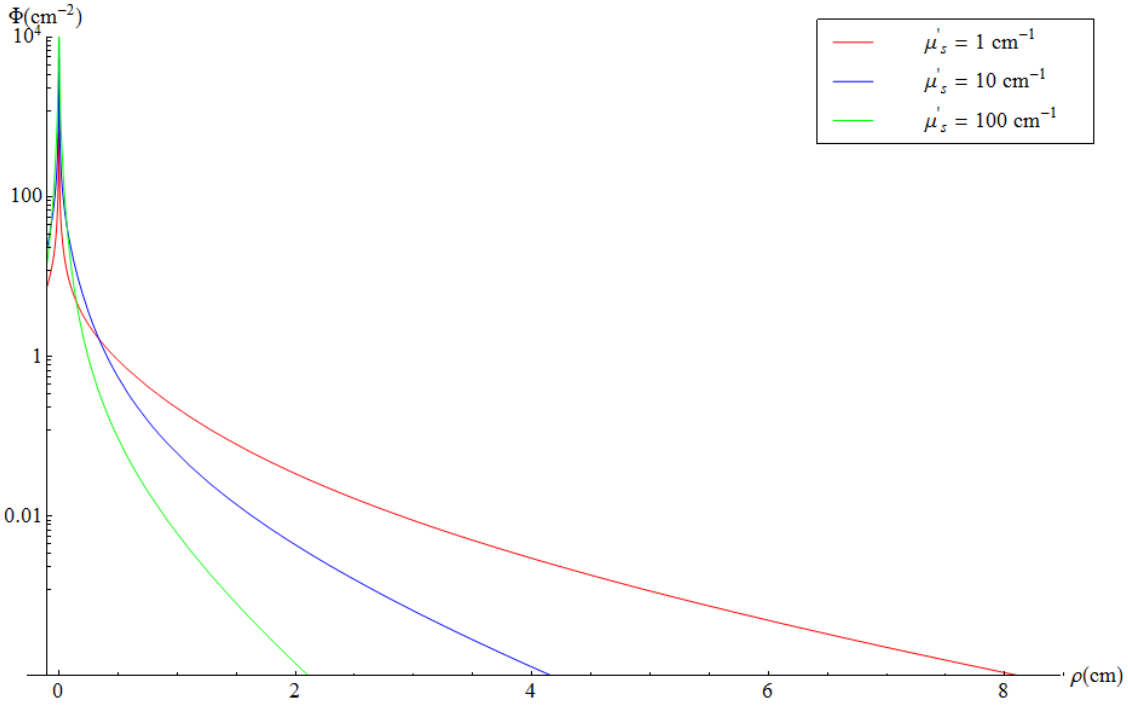

Figura 14 – Fluência, no caso CW, em função de ρ, para diferentes valores de μ_s', mantendo $z = z_0$ *e* $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$.

Da Figura 12 podemos ver que se temos valores de μ_s' muito maiores que μ_a teremos cada vez menores profundidades alcançadas pelos fótons. Isto é algo esperado, dado que se temos um valor de μ_s' muito alto, espera-se que o fóton se espalhe muitas vezes em um pequeno comprimento, consequentemente não possibilitando que ele vá muito longe do seu ponto de criação, em média. As Figuras 13 e 14 mostram que, como esperado, se estamos a maiores distancias da fonte, esperamos encontrar menores intensidade refletidas. Cabe aqui ressaltar que este fato pode ser de grande importância, pois, como se pode ver pela Figura 13, se temos valores maiores de ρ, teremos também uma maior profundidade média dos fótons, $\langle z \rangle$.

Usando um procedimento parecido com a da Equação 55.a, podemos chegar a uma expressão para a profundidade média que um fóton alcança antes de ser absorvido:

$$\langle z \rangle = \frac{\int_0^\infty \mathrm{z}\Phi(z,\rho)dz}{\int_0^\infty \Phi(z,\rho)dz}. \qquad (67.a)$$

Podemos calcular o valor de $\langle z \rangle$, para diferentes valores de ρ, usando o descrito no Apêndice A.2. Para $\rho = 0.75\ cm$, chegamos a:

$$\langle z \rangle \approx 0.97\ cm, \qquad (67.b)$$

e com $\rho = 1.5\ cm$, chegamos ao valor de:

$$\langle z \rangle \approx 1.45\ cm. \qquad (67.c)$$

Ao trabalhar com problemas de propagação da luz num meio semi-infinito, muitas vezes é interessante sabermos qual a porcentagem dos fótons que chega a uma dada profundidade α, $\tau(\alpha)$. Devemos então calcular, para cada valor fixo de $\rho, \mu_a\ e\ \mu_s'$:

$$\tau(\alpha) = \frac{\int_\alpha^\infty \Phi(z,\rho)dz}{\int_0^\infty \Phi(z,\rho)dz}. \qquad (68.a)$$

Usando novamente o Apêndice A.2, podemos calcular $\tau(\alpha)$ para diversos valores de α. Por exemplo, com $\rho = 1.5\ cm, \mu_a = 0.1\ cm^{-1}$e $\mu_s' = 10\ cm^{-1}$:

$$\tau(\alpha = 1.5\ cm) \approx 38.7\%, \qquad (68.b)$$

$$\tau(\alpha = 3\ cm) \approx 7.3\%, \qquad (68.c)$$

$$\tau(\alpha = 5\ cm) \approx 0.7\%. \qquad (68.d)$$

4. Conclusão

Neste estudo vimos como podemos modelar a propagação da luz em meios densos. Vimos também que através do uso da luz no infravermelho próximo, podemos medir as propriedades ópticas de um meio. Com o mesmo método, sabendo-se as propriedades ópticas do meio, podemos também medir as variações nas concentrações dos cromóforos presentes no tecido, propriedade na qual a técnica de NIRS se baseia. Em muitos casos, podemos aproximar o tecido biológico por um meio semi-infinito, e, portanto, podemos ter uma ideia clara de como a luz se distribuirá no tecido, devido aos resultados obtidos na seção 3.

As soluções encontradas nesta monografia têm, por outro lado, uma hipótese essencial: ela considera que os cromóforos estão parados durante os processos de absorção e espalhamento. O problema da propagação de luz em meios com grande movimentação dos cromóforos será o tema de estudo do mestrado do autor desta monografia.

Apêndice

Neste Apêndice apresentamos o método utilizado para gerar os gráficos das Figuras 7 a 12. Em todos os processos utilizou-se o software *Wolfram Mathematica 8.0.* Além disso, em todos os gráficos índice de refração do meio foi assumido como $n = 1.4$, ou seja, temos que $v = 0.214\,mm/ps = 21.4\,cm/ns$. Observe que o valor de $n = 1.4$ foi escolhido por ser um valor próximo ao valor real do tecido biológico [9].

A.1 Meio Infinito

Para plotar a Figura 7, o gráfico da fluência temporal (Equação 48), usamos o seguinte algoritmo:

```
v := 0.214*10^2
ms := 10
```

```
ma := 0.1
r := 0.01
Phi1 = (3 ms)^(3/2) v (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-3 ms r^2/(4 v t) - ma v t]
r := 0.1
Phi2 = (3 ms)^(3/2) v (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-3 ms r^2/(4 v t) - ma v t]
r := 0.5
Phi3 = (3 ms)^(3/2) v (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-3 ms r^2/(4 v t) - ma v t]
r := 1
Phi4 = (3 ms)^(3/2) v (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-3 ms r^2/(4 v t) - ma v t]
LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3, Phi4}, {t, -0.1, 0.8},  PlotRange -> {10^-6, 10^4}, PlotStyle -> {Red,
Blue, Green, Purple},  PlotLegend -> {"r = 0.01 cm", "r = 0.1 cm", "r = 0.5 cm",    "r = 1 cm"},
egendShadow -> None, LegendPosition -> {1.05, -0.2},  AxesLabel -> {"t(ns)",
  "\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\),     \\(-2\)]\)\!\(\*SuperscriptBox[\(ns\),     \(-
1\)]\))"},  BaseStyle -> {FontSize -> 18}]
```

Os valores de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}\ e\ \mu_s' = 10\ cm^{-1}$ foram escolhidos pelo fato de serem boas aproximações para os valores reais de um tecido biológico, como por exemplo, o cérebro.

Para plotar a Figura 8, o gráfico da fluência para o caso CW (Equação 52), usamos:

```
v := 0.214*10^2
ms := 1
ma := 0.1
Phi1 = 3 ms/(4 Pi r)*Exp[-Sqrt[3 ma ms] r]
ms := 10
ma := 0.1
Phi2 = 3 ms/(4 Pi r)*Exp[-Sqrt[3 ma ms] r]
ms := 50
ma := 0.1
Phi3 = 3 ms/(4 Pi r)*Exp[-Sqrt[3 ma ms] r] LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3}, {r, -0.01, 2}, PlotRange ->
All,  PlotStyle -> {Red, Blue, Green},
 PlotLegend -> {"ms = 10 \!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\) e ma \= 1
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)",  "ms = 15 \!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\) e ma
= 1.5 \\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)",    "ms = 20 \!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-
1\)]\) e ma = 2 \
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)"}, LegendShadow -> None,  LegendPosition -> {1.05, -
0.2},
```

```
AxesLabel -> {"r(cm)",    "\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-2\)]\)\)"},  BaseStyle
-> FontSize -> 18}]
```

A.2 Meio Semi-Infinito

Para o meio infinito, precisamos usar o seguinte script para o cálculo da fluência no caso CW:

```
PhiTR = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)] -
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}
Phi = Integrate[PhiTR, {t, 0, Infinity}]
```

Para ter uma ideia de como se comporta a fluência para o caso temporal, primeiramente plotamos a equação temporal da fluência (Equação 60). Neste caso usamos o seguinte script:

```
Clear[rho, z, ms, ma, v, z0, t]
v := 0.214*10^2
ms := 10
ma := 0.1
z0 := 1/ms
z := z0
rho := 0.5
Phi1 = ((3*ms)^(3/2)* v*{E^(-((3*ms*(rho^2 + (z - z0)^2))/(4*Pi*t*v))) - E^(-((3*ms*(rho^2 +
(z + z0)^2))/(4*Pi*t*v)))}}/((4*Pi*t*v)^(3/ 2)*E^(ma*t*v))
rho := 1
Phi2 = ((3*ms)^(3/2)*v*{E^(-((3*ms*(rho^2 + (z - z0)^2))/(4*Pi*t*v))) -E^(-((3*ms*(rho^2 + (z
+ z0)^2))/(4*Pi*t*v)))}}/((4*Pi*t*v)^(3/ 2)*E^(ma*t*v))
rho := 1.5
Phi3 = ((3*ms)^(3/2)*v*{E^(-((3*ms*(rho^2 + (z - z0)^2))/(4*Pi*t*v))) - E^(-((3*ms*(rho^2 +
(z + z0)^2))/(4*Pi*t*v)))}}/((4*Pi*t*v)^(3/ 2)*E^(ma*t*v))
rho := 2
Phi4 = ((3*ms)^(3/2)*v*{E^(-((3*ms*(rho^2 + (z - z0)^2))/(4*Pi*t*v))) -E^(-((3*ms*(rho^2 + (z
+ z0)^2))/(4*Pi*t*v)))}}/((4*Pi*t*v)^(3/2)*E^(ma*t*v))
rho := 2.5
```

```
Phi5 = ((3*ms)^(3/2)*v*{E^(-((3*ms*(rho^2 + (z - z0)^2))/(4*Pi*t*v))) -E^(-((3*ms*(rho^2 + (z
+ z0)^2))/(4*Pi*t*v)))}})/((4*Pi*t*v)^(3/ 2)*E^(ma*t*v))
```

Plotamos também para $z = z_0 = \frac{1}{\mu_s'}$, mantendo $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}\ e\ \rho = 10\ cm^{-1}$ e variamos o valor de μ_s' (Figura 11). Usamos o seguinte script para este caso:

```
Clear[rho, z, ms, ma, v, z0, t]
v := 0.214*10^2
ma := 0.1
rho := 1.5

ms := 1
z0 := 1/ms
z := z0
Phi1 = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)] -
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}
ms := 5
z0 := 1/ms
z := z0
Phi2 = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)] -
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}
ms := 10
z0 := 1/ms
z := z0
Phi3 = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)] -
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}
ms := 25
z0 := 1/ms
z := z0
Phi4 = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)] -
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}
ms := 50
z0 := 1/ms
z := z0
```

```
Phi5 = v (3 ms)^(3/2) (4 Pi v t)^(-3/2) Exp[-ma v t] {Exp[-3 ms ((z - z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]-
Exp[-3 ms ((z + z0)^2 + rho^2)/(4 Pi v t)]}

LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3, Phi4, Phi5}, {t, -0.01, 1.5}, PlotRange -> {10^-4, 5},  PlotStyle -> {Red,
Blue, Green, Purple, Black},  PlotLegend -> {Style[
"\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\) =
\1\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 5
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 10
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 25
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 50
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18]},  LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1.05,
-0.2},  AxesLabel -> {"t(ns)",   "\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \\(-
2\)]\)\!\(\*SuperscriptBox[\(ns\), \(-1\)]\))"},  BaseStyle -> {FontSize -> 18}]
```

Tendo em mão estes dois plots, nosso próximo foi plotar a fluência para o caso CW, calculada pelo método descrito no começo deste Apêndice. Primeiramente plotamos a fluência em função de z, com valores fixos de $\rho = 1.5\ cm\ e\ \mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ e variando o valor de μ_s' (Figura 12). O script usado foi:

```
Clear[z, z0, ms, ma, rho, v]
v := 0.214*10^2
ma := 0.1
rho := 1.5

ms := 2
z0 := 1/ms
Phi1 = Phi
ms := 10
z0 := 1/ms
Phi2 = Phi
ms := 50
```

```
z0 := 1/ms
Phi3 = Phi

LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3}, {z, -0.1, 15}, PlotRange -> {10^-4, 0.5},  PlotStyle -> {Red, Blue,
Green},  PlotLegend -> {Style[ "\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\) =
\1 \!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 10
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\\) = 100
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18]},  LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1.05,
-0.2},  AxesLabel -> {"z(cm)",    "\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-2\)]\))"},
BaseStyle -> {FontSize -> 18}]
```

Depois disso plotamos a fluência para o caso CW, em função de z, com valores fixos de $\mu_a = 0.1\ cm^{-1} e\ \mu_s' = 10\ cm^{-1}$, variando o valor de ρ (Figura 13). O script usado foi:

```
Clear[z, z0, ms, ma, rho, v]
v := 0.214*10^2
ms := 10
z0 := 1/ms
ma := 0.1

rho := 0.5
Phi1 = Phi
rho := 1
Phi2 = Phi
rho := 1.5
Phi3 = Phi
rho := 2
Phi4 = Phi
rho := 2.5
Phi5 = Phi
LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3, Phi4, Phi5}, {z, -0.1, 8},  PlotRange -> {10^-4, 1.5},  PlotStyle -> {Red,
Blue, Green, Purple, Black},  PlotLegend -> {Style["\[Rho] = 0.5 cm", 18],    Style["\[Rho] = 1 cm",
18], Style["\[Rho] = 1.5 cm", 18],    Style["\[Rho] = 2 cm", 18], Style["\[Rho] = 2.5 cm", 18]},
LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1.05, -0.2},  AxesLabel -> {"z(cm)",
"\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-2\)]\))"},  BaseStyle -> {FontSize -> 18}]
```

O último plot realizado foi o plot da fluência para o caso CW, em função de ρ, para diferentes valores de μ_s', mantendo $z = z_0$ e $\mu_a = 0.1\ cm^{-1}$ (Figura 14). O script usado foi:

```
Clear[z, z0, ms, ma, rho, v]
v := 0.214*10^2
ma := 0.1

ms := 2
z0 := 1/ms
z := z0
Phi1 = Phi
ms := 10
z0 := 1/ms
z := z0
Phi2 = Phi
ms := 50
z0 := 1/ms
z := z0
Phi3 = Phi
LogPlot[{Phi1, Phi2, Phi3}, {rho, -0.1, 8.3},  PlotRange -> {10^-4, 10^4}, PlotStyle -> {Red, Blue,
Green},  PlotLegend -> {Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\) = \
1 \!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\) \= 10
\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18],
Style["\!\(\*SubscriptBox[SuperscriptBox[\(\[Mu]\), \('\)], \(s\)]\) \= 100
!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-1\)]\)", 18]},  LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1.05, -
0.2},
 AxesLabel -> {"\[Rho](cm)",    "\[CapitalPhi](\!\(\*SuperscriptBox[\(cm\), \(-2\)]\))"},
BaseStyle -> {FontSize -> 18}]
```

Neste estudo usamos mais dois outros scripts: um para o cálculo da profundidade média (Equação 67.a) e outro para o cálculo da porcentagem de fótons que chegam a uma dada profundidade (Equação 68.a). Os scripts usados foram, respectivamente:

```
Clear[z, z0, rho, ms, ma, t]
v := 0.214*10^2
ms := 10
z0 = 1/ms
ma := 0.1
rho := 0.74
Phi1 = Phi
integral1 = N[Integrate[Phi1, {z, 0, Infinity}]]
integral2 = N[Integrate[z Phi1, {z, 0, Infinity}]]
zmed1 = integral2/integral1
```

e,

```
v := 0.214*10^2
ms := 10
z0 = 1/ms
ma := 0.1
rho := 1.5
Phi1 = Phi
integral1 = N[Integrate[Phi1, {z, 0, Infinity}]]
integral2 = N[Integrate[ Phi1, {z, 1.5, Infinity}]]
porcentagem = integral2/integral1
```

Referências

[1] Fabrizio Martelli, *Light propagation through biological tissue and other diffusive media: theory, solutions, and software*

[2] *Light scattering by small particles*, H. C. van de Hulst

[3] Mesquita, Rickson Coelho, *Desenvolvimento de metodos opticos para o estudo do acoplamento neuro-vascular-metabolico intrinseco a dinamica cerebral*. 2009 Tese (Doutorado) - Instituto de Fisica Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas.

[4] http://www.wolframalpha.com

[5] Lecture 1, http://lammp.bli.uci.edu/video/vpworkshop10.php

[6] http://www.philiplaven.com/MiePlot.htm

[7] http://omlc.ogi.edu/spectra/index.html

[8] Arridge, S. R., Schotland, J. C. (2009). *Optical tomography: forward and inverse problems*. INVERSE PROBL 25(12), 123010

[9] Michael S. Patterson, B. Chance, and B. C. Wilson, *Time resolved reflectance and transmittance for the noninvasive measurement of tissue optical properties*