

NUEVO MÉTODO DE MUESTREO PARA DISPERSIÓN COMPTON DE FOTONES IONIZANTES EN AGUA POR MONTE CARLO



Alfredo Vigny Mercado Quintero

Facultad de Ciencias

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO

Esta tesis se presenta para obtener el título de

FÍSICO

Departamento de Física

Junio 2016

Para Vita

“ Un hombre que posee el arte de la lectura correcta ... instintiva e inmediatamente percibe todo lo que en su opinión vale la pena recordar de forma permanente, ya sea porque es adecuado para su propósito o, en general vale la pena conocer ... El arte de la lectura, como de aprendizaje, es la siguiente : ... para conservar lo esencial, para olvidar lo no esencial”.

Adolf Hitler, “Mein Kampf”

Agradecimientos

Comienzo a redactar, después de ver que varios compañeros no han concluido, es lamentable, pero me lleno de dicha al ver de lo que estoy apunto de hacer. Se cubre de adrenalina mi cuerpo ya que ha llegado el momento en que daré el primer gran paso que tanto esperé.

Primero que nada, agradecer a mis padres que amo con toda mi alma, ya que gracias a sus desvelos, resistencia, lucha y sacrificios sobrehumanos forjaron una familia honorable, de valores y una ética inquebrantable. Me quedo sin palabras, ustedes dos, son impresionantes y admirables pues son muestra de la fuerza y voluntad que debe integrar un matrimonio, para ustedes no hay obstáculos pues las adversidades mueren a causa de su unión. No tengo más opción que demostrarles que al igual que ustedes seré un hombre de bien.

Un enorme agradecimiento al Dr. en C. Eugenio Torres García por haberme dado la oportunidad de realizar esta tesis, siendo dirigido por una persona tan instruida e inteligente como usted. Agradecerle por toda la paciencia que me tuvo, la explicación a detalle de cada una de mis dudas, por encaminarme paso a paso en lo que no tenía ni idea de cómo empezar, por poner en orden cada una la preguntas sin aparente solución que se me presentaban. Muchísimas gracias.

A mis hermanas que son mis mejores amigas, que siempre me escuchan y están conmigo. Por todas las cosas locas que se atreven a hacer conmigo. Por todas esas risas y momentos de tristeza que nos hacen estar más unidos, las amo muchísimo. Siempre estaré para ustedes. Cuando el Apocalipsis Zombie se aproxime, sabremos que ahí estaremos juntos para enfrentarlo.

A toda mi familia, a mis tios, a mis primos, por creer en mi y por todo su amor. En especial a mis abuelitos que han prevalecido con tanta fortaleza, vivacidad y sabiduría. Han dado todo por ver a sus nietos crecer, y al mirar hacia atrás pueden ver todo lo que han logrado, una vida tan perfecta e envidiable, son un ejemplo a seguir. Pido a Dios el seguir teniéndolos conmigo por muchísimos años más.

Expresar mi más sincero agradecimiento a todos mis amigos por todo su apoyo, especialmente Gerardo, Antonio, Luis, Paola y Judith por todos los buenos momentos que hemos compartido, por su sinceridad, por sus consejos y las platicas interminables sobre Ciencia, Filosofía y Rock.

Finalmente agradezco a la Universidad Autónoma del Estado de México, en especial a la de Facultad de Medicina y a la de Ciencias por haberme prestado sus instalaciones para la elaboración de este proyecto.

RESUMEN

La interacción de fotones con la materia es de total interés en áreas de la Física Médica como radioterapia, radiodiagnóstico, protección radiológica, etc., ya que se debe cuantificar la cantidad de energía depositada por fotones ionizantes en la región irradiada. La medición se puede realizar de manera directa con detectores. También de manera indirecta, por ejemplo, con simulación Monte Carlo. Sin embargo, la simulación Monte Carlo suele ser temporal y computacionalmente costosa, ya que se tienen que simular los procesos involucrados como son: Rayleigh, Compton, fotoeléctrico y producción de pares por lo menos. Sin embargo, se sabe que la interacción más tardada en simular es el proceso Compton debido a que ésta no aniquila al fotón solo lo desvía y continua la simulación. Por lo que el objetivo de este trabajo es comparar la velocidad y precisión de los distintos métodos existentes para realizar el muestreo de los ángulos de dispersión polar (AP) y azimutal (AA) para el Compton y proponer una nueva metodología más rápida para el muestreo de los ángulos mencionados.

Se realizó el cálculo para obtener el AP para el efecto Compton en el agua mediante 3 métodos de muestreo (Clásico, Kahn y EGS) con distintas energías (desde 1 keV hasta 150 keV). Se determinó el mejor método y se calcularon las funciones analíticas de distribución angular de ésta radiación dispersada. Las funciones analíticas (FDP's) se usaron para realizar el muestreo sobre ellas y calcular el ángulo polar usando el método directo, del rechazo y mixto lo cual representa la nueva metodología de muestreo del ángulo mencionado. Por otro lado, AA se muestreó con el método del rechazo y se determinaron sus FDP's.

Los resultados muestran que el método del EGS es el que concuerda mejor con lo reportado en la bibliografía, por lo que sus

FDP's se usaron para obtener el AP por el método del rechazo ya que las FDP's mencionadas no son invertibles por lo que no se les puede aplicar el método de muestreo directo. Se determinó que el muestreo para el AA con el método del rechazo debido a que su función de distribución acumulativa no era invertible, y en general la distribución angular es del tipo sinusoidal con mayor frecuencia a 90° y 270° .

Se puede concluir que el método de muestreo del rechazo es más rápido, 1.34 veces más (74.75% del tiempo requerido), que el EGS para el ángulo polar. Las FDP's obtenidas no son invertibles pero si fuesen invertibles sería más rápido con el método directo, aproximadamente 4.5 veces que el EGS.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	III
Lista de figuras	VIII
Lista de tablas	XII
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. HIPÓTESIS	2
1.2. OBJETIVOS	3
1.2.1. General	3
1.2.2. Específicos	3
2. MARCO TEÓRICO	4
2.1. RADIACIÓN	4
2.2. IONIZACIÓN	5
2.3. RADIACIÓN IONIZANTE	6
2.3.1. Rayos Gamma	7
2.3.2. Rayos X	8
2.4. INTERACCIÓN DE RADIACIÓN IONIZANTE CON LA MATERIA	8
2.4.1. Procesos de Interacción del Fotón con Respecto a su Energía	9
2.4.2. Dispersión Rayleigh.	10
2.4.3. Efecto Compton	12
2.4.4. Efecto Fotoeléctrico	15
2.4.5. Producción de Pares	17
2.5. MÉTODO MONTE CARLO	18
2.5.1. Aplicación del Método Monte Carlo al Transporte de Radiación Ionizante en la Materia	19

2.5.2. Método Clásico	21
2.5.3. Método Kahn	23
2.5.4. Método EGS (Electron Gamma Shower)	26
2.6. MUESTREO MONTE CARLO	30
2.6.1. Función de Densidad de Probabilidad (FDP)	30
2.6.2. Función de Distribución de Probabilidad Acumulada	31
2.6.3. Método Directo (función de distribución de probabilidad acumulada invertible)	33
2.6.4. Método de rechazo	36
2.6.5. Método Mixto	38
3. METODOLOGÍA	40
3.1. MUESTREO DEL ÁNGULO POLAR DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON	40
3.1.1. Simulación del ángulo polar por 3 métodos conocidos	40
3.1.2. Simulación del ángulo polar por método semi-analítico	46
3.1.3. Comparación en la Rapidez de la Generación del Ángulo Polar	54
3.2. MUESTREO DEL ÁNGULO AZIMUTAL DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON	54
3.2.1. Simulación del Ángulo Azimutal por Método Directo (Fotones No Polarizados)	56
3.2.2. Simulación del Ángulo Azimutal por Método del Rechazo (Fotones Polarizados)	57
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS	60
4.1. MUESTREO DEL ÁNGULO POLAR DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON	60
4.1.1. Simulación del ángulo polar por 3 métodos conocidos	60
4.1.2. Simulación del ángulo polar por método semi-analítico	78
4.1.3. Comparación en la Rapidez de la Generación del Ángulo Polar	88
4.2. MUESTREO DEL ÁNGULO AZIMUTAL DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON	96
4.2.1. Simulación del Ángulo Azimutal por Método Directo (Fotones No Polarizados)	96

4.2.2. Simulación del Ángulo Azimutal por Método del Rechazo	97
4.3. CONCLUSIONES	101
Bibliografía	103

Índice de figuras

2.1. Espectro Electromagnético.	5
2.2. Esquema del proceso de ionización.	6
2.3. Procesos de interacción de fotones ionizantes.	9
2.4. Procesos de interacción en el medio en función de la energía del fotón.(Attix, F. 1986. p. 125)	10
2.5. Dispersion de Rayleigh.	11
2.6. Cinemática del efecto Compton.	13
2.7. Efecto fotoeléctrico.	16
2.8. Producción de pares.	18
2.9. Trayectoria aleatoria de una partícula a través de un medio.	21
2.10Ejemplo de una Función de Densidad de Probabilidad. Definida sobre el dominio $[a, b]$, se puede observar que la suma de la probabilidad de cada intervalo es igual a 100%.	31
2.11Ejemplo de una Función de Distribución de Probabilidad Acumulada, $c(x)$. Definida sobre el dominio $[a, b]$, se puede observar que cada intervalo es la suma de la probabilidad de ese intervalo con el anterior.	33
2.12Función de Densidad de Probabilidad de los números aleatorios, $p(r)$. Definida sobre el dominio $[0, 1]$	34
2.13Función de Distribución de Probabilidad Acumulada ($c(x)$) obtenida al integrar $p(x)$. Definida sobre el dominio $[a, b]$	35
2.14Función de densidad de probabilidad escalada para el método de rechazo.	37
3.1. Diagrama de flujo del método clásico.	42
3.2. Diagrama de flujo del método de Kahn.	43
3.3. Diagrama de flujo del método de EGS.	45
3.4. Diagrama de flujo del método directo.	49

3.5. Diagrama de flujo del método del rechazo.	51
3.6. Diagrama de flujo del método mixto.	53
3.7. Diagrama de flujo para generar el ángulo azimutal con el método del directo para fotones no polarizados. . .	57
3.8. Diagrama de flujo para generar el ángulo azimutal con el método del rechazo para fotones polarizados linealmente.	59
4.1. Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Clásico para la energía de 1 keV.	62
4.2. Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 1 keV.	63
4.3. Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 50 keV.	63
4.4. Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 150 keV.	64
4.5. Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.	65
4.6. Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.	66
4.7. Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 50 keV.	66
4.8. Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 150 keV.	67
4.9. Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.	68
4.10 Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 1 keV.	69
4.11 Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 50 keV.	69
4.12 Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 150 keV.	70
4.13 Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 1 keV.	71
4.14 Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 80 keV.	71
4.15 Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 150 keV.	72

4.16	Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 711 keV.	72
4.17	Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 1332 keV.	73
4.18	Distribuciones angulares de rayos gamma y electrones dispersados dentro de un detector para fotones incidentes de 80, 711 y 1332 keV. (Venturinia et al., 2007)	74
4.19	Distribución del ángulo polar de dispersión en 12 intervalos de 15 grados que cubren el rango de 0 a 180 grados mediante el uso de diferentes algoritmos. (Fulea et al., 2009)	76
4.20	Distribución del ángulo polar de dispersión en 12 intervalos de 15 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 700 keV.	76
4.21	Algoritmo de Kahn para generar el ángulo polar de la dispersión Compton obtenido de una fuente alternativa. (Jaeger et al., 1968)	77
4.22	Algoritmo de Kahn para generar el ángulo polar de la dispersión Compton obtenido de otra fuente. (B.Kadhim and Mahdi, 2013)	77
4.23	Ejemplo del ajuste de una función a una distribución, es este caso a la distribución angular del Método EGS para 1 keV.	79
4.24	Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Semianalítico para la energía de 1 keV.	83
4.25	Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 1 keV.	84
4.26	Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 50 keV.	84
4.27	Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 150 keV.	85
4.28	Comparación de la Distribución angular polar por el Método EGS con el Método Semianalítico para la energía de 150 keV.	86
4.29	Tiempos de rutina del programa del Método Clásico para la energía de 1 keV.	89
4.30	Tiempos de rutina del programa del Método Kahn para la energía de 1 keV.	90

4.31	Tiempos de rutina del programa del Método EGS para la energía de 1 keV.	91
4.32	Tiempos de rutina del programa del Método Semianalítico para la energía de 150 keV.	92
4.33	Salida del código para generar 100,000,000 distancias de interacción, distribuidas entre 13 intervalos con el método Directo.	94
4.34	Tiempos de rutina para generar 100,000,000 distancias de interacción con el método Directo. El tiempo de rutina promedio es: 5,833 segundos.	95
4.35	Distribución angular azimutal (isotrópica) por método del directo para fotones no polarizados.	96
4.36	Salida del código para generar el ángulo azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 1 keV.	98
4.37	Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 1 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.	99
4.38	Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 50 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.	99
4.39	Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 150 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.	100

Índice de cuadros

4.1. Valor promedio del intervalo angular con mayor probabilidad. Los números en negritas refieren a cuán lejos de los valores reales (experimentales) se encuentran los valores muestreados mas probables.	75
4.2. Desviaciones experimentales angulares de las distribuciones dadas por los métodos de muestreo.	75
4.3. Valores de las funciones analíticas ajustadas a cada distribución angular de frecuencias desde una energía $h\nu = 0,001$ MeV hasta 0,150 MeV de 10 en 10 keV.	80
4.4. Comparación en la rapidez en la generación de 100,000,000 ángulos polares con una energía $h\nu = 0,001$ MeV.	91
4.5. Comparación en la rapidez en la generación de 100,000,000 ángulos polares con una energía $h\nu = 0,001$ MeV entre el mejor método de muestreo y el método semianalítico.	93
4.6. Funciones analíticas ajustadas a cada distribución angular de frecuencias desde una energía $h\nu = 0,001$ MeV hasta 0,150 MeV de 10 en 10 keV.	97

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

Las radiaciones ionizantes son aquellas radiaciones que tienen la energía suficiente para arrancar electrones ligados al átomo. En ésta investigación se trabajó con fotones ionizantes (radiación electromagnética). Según su origen y su energía se clasifican en rayos X y rayos gamma.

El estudio de la interacción de fotones con la materia es de mucho interés en la Física Médica, específicamente en radioterapia, radiodiagnóstico y protección radiológica. Por ejemplo, en radioterapia (tratamiento oncológico para eliminar las células tumorales, generalmente cancerígenas), se utilizan las radiaciones ionizantes para destruir las células malignas y así impedir que crezcan y se reproduzcan, evitando la extirpación del tumor.

Cuando el impacto de los fotones ionizantes tiene lugar en la cadena de ADN ocasiona pequeños cambios estructurales, ya que la ionización rompe los enlaces entre sus átomos, lo que impide la división celular y la célula muere por bloqueo de su capacidad de proliferación. En esta tesis se trabaja con la dispersión de los fotones ionizantes en agua, tomando en cuenta que el agua del cuerpo se encuentra en un 63% en el interior de las células. (McJunkin, 1988)

Ahora, cuando un haz de fotones interacciona con la materia normalmente el número de procesos que toman lugar son demasiados por lo cual es imposible predecir los resultados de tal interacción. Por lo cual se recurre a la simulación por computadora. La forma más precisa de realizar simulaciones es utilizando el llamado

método Monte Carlo que permite resolver problemas matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias. Este método proporciona toda la información posible a partir de la cual se pueden obtener valores promedios. El método Monte Carlo para la simulación de procesos físicos es perfectamente conocido desde hace mucho tiempo y para conseguir resultados estadísticamente significativos es necesario simular un gran número de casos. La importancia de este método destaca en aquellos problemas que no pueden tratarse analíticamente o cuyo tratamiento es demasiado complicado.

La desventaja de utilizar el Método de Monte Carlo en la simulación del transporte de radiación es el gran número de cálculos que se necesita, lo que se traduce en un largo tiempo de computación si se quieren resultados con incertidumbres relevantemente pequeñas.

Uno de los procesos que más nos interesa de los fotones ionizantes es el Efecto Compton, el cual es mediante una colisión elástica entre un electrón ligado y un fotón incidente aumentando la energía de éste electrón orbital lo suficiente para provocar su expulsión. El mayor tiempo de consumo en la simulación de transporte de radiación ionizante en Monte Carlo es debido a la dispersión Compton ya que realiza el cálculo de las coordenadas y los ángulos de dispersión. Por lo cual se plantea un nuevo método de muestreo para dispersión Compton de fotones ionizantes por Monte Carlo, lo que permitirá disminuir el tiempo de cálculo.

La importancia de dicho trabajo, contribuirá generalmente a realizar más rápido los cálculos dosimétricos, ya que es necesario conocer la energía que se deposita cuando se utilizan este tipo de radiaciones. Esta nueva metodología de muestreo para realizar de manera más rápida el cálculo impactará en el área clínica ya que los tiempos de cálculo serán menores lo que llevara a que los pacientes reciban antes sus tratamientos de radioterapia.

1.1. HIPÓTESIS

El ángulo polar de dispersión Compton en agua se puede simular por Monte Carlo más rápido y eficientemente a través de funciones de distribución angular.

1.2. OBJETIVOS

1.2.1. General

- Determinar una función de distribución angular óptima para el ángulo polar en la dispersión Compton en agua.
- Calcular más rápidamente los ángulos polar y azimutal en la dispersión Compton por un método seminanalítico.

1.2.2. Específicos

- Realizar el cálculo del ángulo polar de dispersión por al menos 3 métodos establecidos de muestreo (Clásico, Kahn y EGS).
- Calcular la función de distribución de la radiación dispersada por efecto Compton producida por el agua.
- Determinar cuál de los métodos es el mejor.

Capítulo 2

MARCO TEÓRICO

2.1. RADIACIÓN

La radiación es la emisión o transmisión de energía en forma de ondas o partículas a través del espacio o de un medio material. Esto incluye:

- Radiación electromagnética, como las ondas de radio, luz visible, rayos X y rayos gamma (todas estas formas de radiación electromagnética se componen por fotones).
- Radiación de partículas, tales como radiación alfa (núcleos de helio), radiación beta (electrones o positrones) y la radiación de neutrones.
- Radiación acústica, tal como ultrasonido, sonido, y las ondas sísmicas.
- Radiación gravitatoria, la radiación que toma la forma de las ondas gravitacionales en la curvatura del espacio-tiempo.

La radiación a menudo se clasifica como ionizante y no ionizante en función de la energía de las partículas irradiadas. (Ortega and Jorba, 1996)

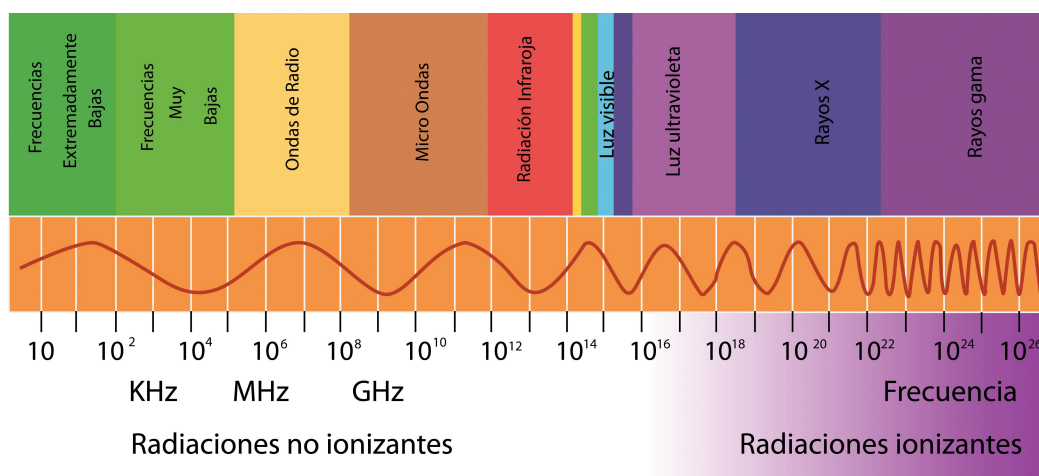


Figura 2.1: Espectro Electromagnético.
 (www.mimagnetoterapia.com/Espectro%20Tabloid.jpg)

En ésta tesis se va analizar la interacción de la radiación electromagnética, en forma de rayos X y rayos gamma (que se componen de fotones), sobre la materia. Debido a sus propiedades ionizantes, los rayos X y los rayos gamma son los que se emplean en radioterapia para eliminar células cancerígenas.

2.2. IONIZACIÓN

La ionización es el proceso por el cual un átomo o una molécula adquiere una carga negativa o positiva al ganar o perder electrones (formando iones). La ionización o excitación ocurre cuando hay un choque entre un fotón o una partícula cargada, con un electrón que se encuentra enlazado a un átomo. Se puede remover un electrón enlazado débilmente al núcleo, al aplicar una determinada cantidad de energía, formando un átomo ionizado. A esta energía se le conoce como potencial de ionización y varía entre 4 y 25eV. Igualmente, el electrón que es removido y el átomo ionizado, reciben el nombre de par iónico. A este proceso se le conoce como ionización. (Tachino et al., 2006)

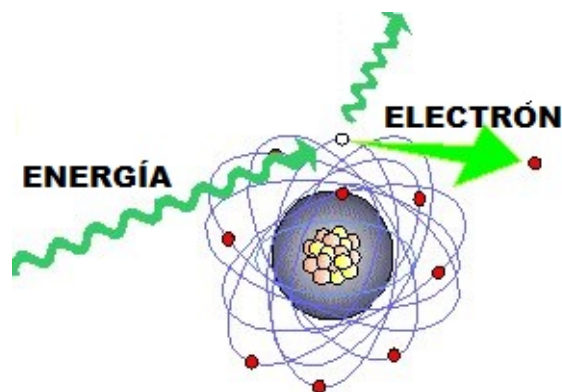


Figura 2.2: Esquema del proceso de ionización.
(www-naweb.iaea.org/nahu/DMRP/images/faq01_ionization.jpg)

2.3. RADIACIÓN IONIZANTE

La radiación ionizante es aquella que tiene una energía mayor a 10 eV, suficiente para ionizar los átomos y moléculas, y *romper enlaces químicos*. Esta es una distinción importante, debido a la gran diferencia de nocividad para los organismos vivos. Una fuente común de radiación ionizante son los materiales radiactivos que emiten radiación alfa (núcleos de helio), beta (electrones o positrones) ó gamma (fotones).

Los rayos gamma y los rayos X constituyen la parte ionizante del espectro electromagnético (se denomina espectro electromagnético al gráfico que muestra los diferentes tipos radiación electromagnética, ver figura 2.1). Y la luz visible, luz infrarroja, microondas y ondas de radio constituyen la no ionizante debido a su baja energía, su principal efecto en la interacción con el tejido es el calentamiento. Este tipo de radiación sólo daña las células si la intensidad es suficientemente alta como para causar un calentamiento excesivo. La radiación ultravioleta tiene algunas de las características de las radiaciones ionizantes y no ionizantes.(Attix, 2008)

En éste trabajo se analiza unicamente la radiación ionizante electromagnética: este tipo de radiación está formada por fotones con energía suficiente como para ionizar la materia. Según su origen y su energía se clasifican en rayos X y rayos gamma. Este tipo

de radiación es la que lleva suficiente energía para liberar electrones de los átomos o moléculas, es decir, los ioniza.

La radiación ionizante es invisible y no directamente perceptible por los sentidos humanos, por lo que los instrumentos de detección de radiación, tales como contadores Geiger se requieren.

La radiación ionizante se aplica de manera constructiva en una amplia variedad de campos como la medicina, la investigación, fabricación, construcción, y muchas otras áreas. También puede presentar un peligro para la salud si no se siguen las medidas adecuadas para evitar la exposición no deseada. La exposición a la radiación ionizante causa daño a la vida del tejido, y puede resultar en mutación, enfermedad por radiación, cáncer, y muerte. En éste trabajo se analiza la radiación ionizante electromagnética. Según su origen y su energía se clasifican en rayos X y rayos gamma.

2.3.1. Rayos Gamma

La radiación gamma o rayos gamma, se denotan por la letra griega gamma en minúscula γ , es un tipo de radiación electromagnética, y por tanto constituida por fotones, producida generalmente por elementos radiactivos o por procesos subatómicos como la aniquilación de un par positrón-electrón.

Debido a las altas energías que poseen, los rayos gamma constituyen un tipo de radiación ionizante capaz de penetrar en la materia más profundamente que la radiación alfa y la beta. Pueden causar grave daño al núcleo de las células, por lo cual se usan para esterilizar equipos médicos y alimentos.

La energía de esta naturaleza se mide en megaelectronvolts (MeV). Un MeV corresponde a fotones gamma de longitudes de onda inferiores a 10^{-11} m o a frecuencias superiores a 10^{19} Hz. (Attix, 2008)

Los rayos gamma se producen por desexcitación de un nucleón de un nivel o estado excitado a otro de menor energía y por desintegración de isótopos radiactivos. Se diferencian de los rayos X en su origen.

2.3.2. Rayos X

Los rayos X son una radiación electromagnética de la misma naturaleza que los rayos gamma. La diferencia con los rayos gamma es que los rayos X surgen de fenómenos extranucleares, a nivel de la órbita electrónica, fundamentalmente producidos por desaceleración de electrones.

Cuando un fotón con una energía igual o mayor a 87.95 keV (energía de enlace del electrón) golpea a un electrón, este es expulsado del átomo, dejando un espacio vacante. Inmediatamente, uno de los electrones que se encuentra en las capas exteriores cae en el espacio dejado por el electrón expulsado (fotoelectrón).

Cuando esto sucede un fotón es emitido, si es un fotón con energía alta, se dice que es un rayo-X. Los rayos X son una radiación ionizante porque al interactuar con la materia produce la ionización de los átomos de la misma, al igual que los rayos gamma, origina partículas con carga (iones). (Als-Nielsen and McMorrow, 2011)

2.4. INTERACCIÓN DE RADIACIÓN IONIZANTE CON LA MATERIA

Los fotones al atravesar la materia interaccionan tanto con los electrones como con los núcleos atómicos de manera que solamente los fotones absorbidos ceden su energía al medio (Brosed, 2012). Otros fotones, al interaccionar con el medio, son desviados de su trayectoria pero no ceden energía en esta interacción, sino que sólo se dispersan como se muestra en la figura [2.3].

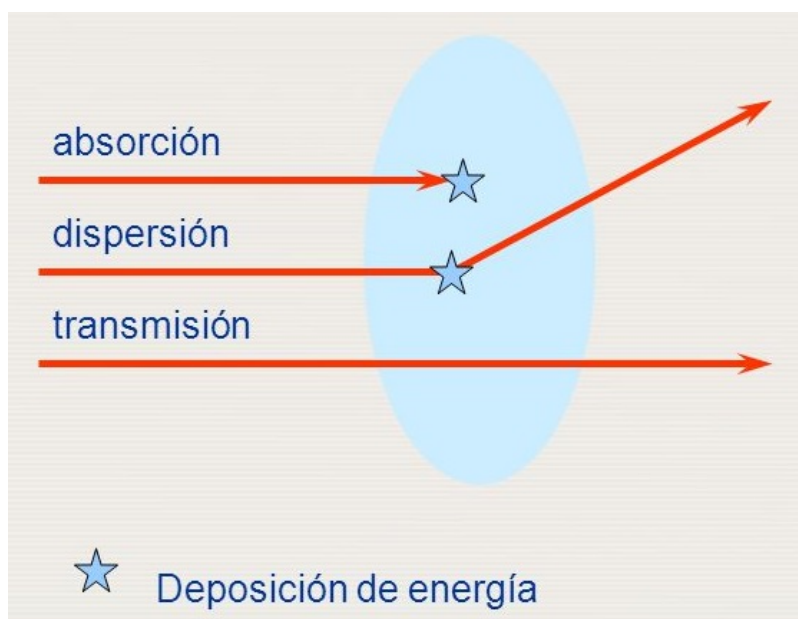


Figura 2.3: Procesos de interacción de fotones ionizantes.
(http://images.slideplayer.es/2/300957/slides/slide_44.jpg)

En esta tesis se toma en consideración la interacción de fotones mono energéticos con moléculas de H_2O neutras, la razón por la que se estudia la interacción de la radiación en agua es debido a que se quiere analizar la interacción de los fotones en el tejido considerando que el 60% del peso de un hombre adulto promedio es agua.

2.4.1. Procesos de Interacción del Fotón con Respecto a su Energía

A continuación se presentan los 4 tipos procesos en interacción de fotones con la materia que se encuentran dentro de los rangos de energía que son de interés:

- Dispersión Rayleigh
- Efecto Compton
- Efecto fotoeléctrico

- Producción de pares

Para el efecto Compton, el efecto fotoeléctrico y la producción de pares es necesario considerar la energía del fotón y el número atómico (Z) del medio absorbente, ya que de esto dependerá el tipo de interacción que ocurra. El número atómico ó Z es el número de protones que hay en el núcleo del átomo de un elemento. Para los medios con Z bajo (por ejemplo, el carbono, el aire, el agua, el tejido humano) la región de dominio del efecto Compton es muy amplia, se extiende desde 0.02 MeV y 30 MeV. Este dominio se estrecha gradualmente con el aumento de Z como se ve en la figura 2.4 (Attix, 2008)

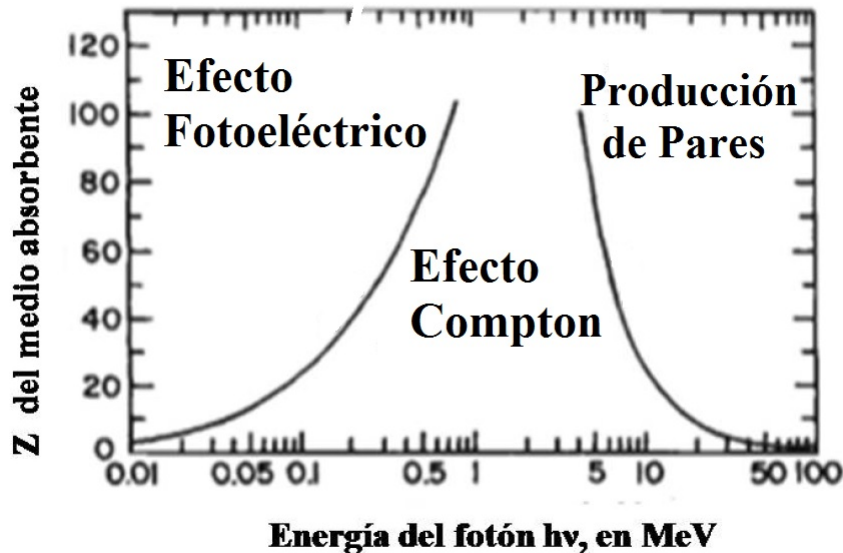


Figura 2.4: Procesos de interacción en el medio en función de la energía del fotón.(Attix, F. 1986. p. 125)

2.4.2. Dispersión Rayleigh.

En la dispersión de Rayleigh, los fotones sufren procesos elásticos sin deposición o transferencia de energía (dispersión coherente). Este proceso se produce cuando un fotón incidente interacciona con la nube electrónica del átomo, dando como resultado un fotón con la misma energía incidente dispersado un pequeño ángulo respecto la

trayectoria inicial que puede calcularse por las sección transversal diferencial de Thomson que se define por:

$$\frac{d\sigma_T(\theta)}{d\Omega} = r_0^2 \frac{[1 + \cos^2\theta]}{2} \quad (2.1)$$

donde θ es el angulo de dispersión y r_0 es el radio clásico del electrón.

Radio clásico del electrón:

$$r_e = 2,8179403267 \times 10^{-15} m \quad (2.2)$$

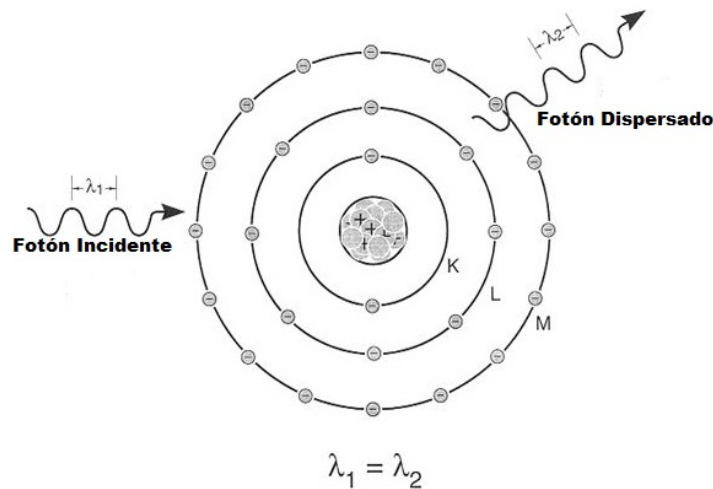


Figura 2.5: Dispersión de Rayleigh.

(http://images.slideplayer.es/4/1549245/slides/slide_25.jpg)

Debido a que los fotones incidentes sufren cambios en la dirección pero sin cambios en la energía, no contribuyen en la deposición de esta en el medio. (Fulea et al., 2009)

La sección eficaz o transversal es un área efectiva que cuantifica la probabilidad intrínseca de un evento de dispersión cuando un haz incidente golpea un objeto de destino, hecho de partículas discretas. Por lo general se denota con la letra griega en minúscula σ y se mide en unidades de área.

En experimentos de dispersión, es a menudo de interés saber qué probabilidad se produce en un evento determinado. Sin embargo, la tasa depende fuertemente de las variables experimentales tales como la densidad del material del blanco, la intensidad del haz, o el área de superposición entre la viga y el material diana. Para el control de estas diferencias mundanas, se puede factorizar estas variables, lo que resulta en una cantidad área similar conocida como la sección transversal.

2.4.2.1. Sección eficaz para la dispersión Rayleigh

Para conocer la medida con la cual los fotones interactúan con los átomos esta se describe en términos de cantidades conocidas como secciones eficaces (σ). Para la sección eficaz Rayleigh tiene la siguiente forma (Morin, 1982):

$$\sigma_R = \frac{r_0}{2} [1 + \cos^2(\theta)] [F(q, Z)]^2 \quad (2.3)$$

donde r_0 es el radio clásico del electrón, θ es el ángulo polar de dispersión, q es el parámetro de transferencia de la cantidad de movimiento:

$$q = \frac{1}{\lambda_0} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.4)$$

Y $F(q, Z)$ es el factor de forma atómico.

2.4.3. Efecto Compton

2.4.3.1. Importancia de la interacción del efecto Compton

Es ésta investigación se trabaja exclusivamente con el efecto Compton, ya que es el que más interacciones tiene a diferencia de la dispersión Rayleigh (coherente), efecto fotoeléctrico o producción de pares y el que toma más tiempo de cómputo, tomando en cuenta que el objetivo es reducir tiempos en la simulación de dispersión de radiación. Es posible interpretar que el efecto Compton es el proceso más probable ya que el efecto fotoeléctrico es dominante a bajas energías del foton, la producción de pares en altas energías y el dominio del efecto Compton es muy amplio, se extiende desde $\cong 20$ keV hasta $\cong 30,000$ keV (regresar a figura 2.4) y es para medios con número atómico bajo por ejemplo; carbono, aire, agua, tejido humano. Y el código de transporte de radiación para calcular la

radiación dispersa con el método de Monte Carlo requiere que el cálculo de la dispersión Compton producida por el agua sea más rápido.

2.4.3.2. Cinemática de la interacción del efecto Compton

La figura 2.6 muestra esquemáticamente un fotón de energía $h\nu$ colisionando con un electrón. Un fotón de energía cuántica incidente $h\nu$ desde la izquierda golpea un electrón estacionario no confinado, dispersándolo con un ángulo ϕ respecto a la dirección del fotón incidente, con energía cinética T . El fotón dispersado $h\nu'$ sale con un ángulo θ en el lado opuesto de la dirección original, en el mismo plano de dispersión. La energía y el momento se conservan. La suposición de un electrón no confinado significa que las relaciones cinemáticas por encima son independientes del número atómico del medio.

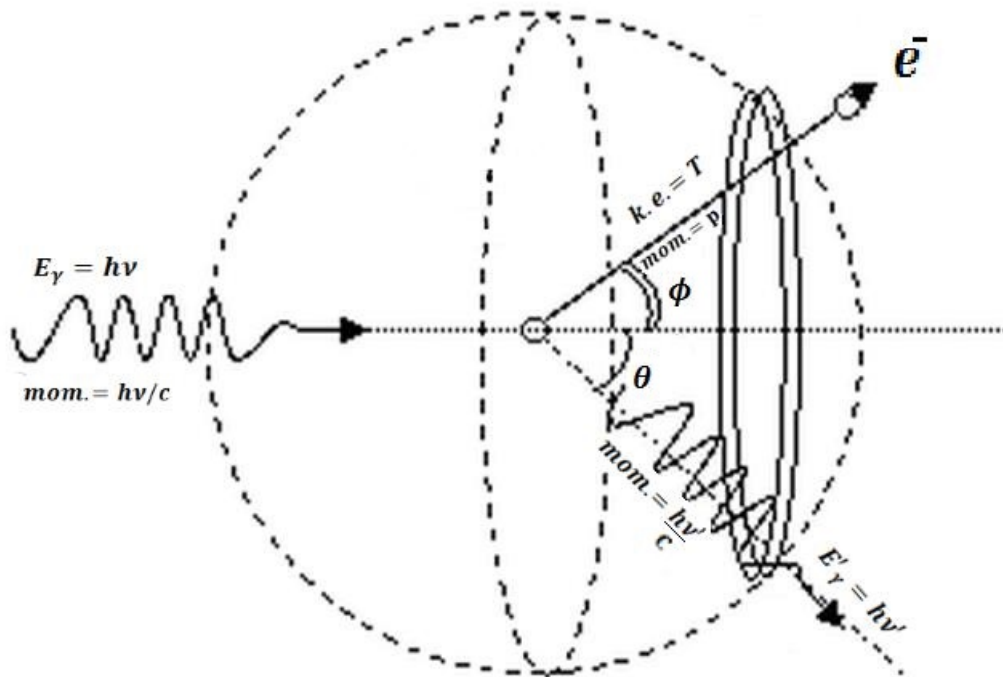


Figura 2.6: Cinemática del efecto Compton.
(<http://klaihem.tripod.com>)

A medida que la energía del fotón aumenta, su longitud de onda decrece y hay una mayor tendencia a interactuar con los electrones individuales y no con el átomo en su conjunto como en el caso del efecto Rayleigh.

La radiación en la dirección del ángulo azimutal se distribuye homogéneamente, pero en el caso del ángulo polar no ocurre así. Lo que significa que en plano en el que es dispersado el fotón la dispersión fotónica es uniforme pero en plano perpendicular a este no lo es.

El siguiente conjunto de tres ecuaciones, cada una en tres variables, ofrece en forma conveniente una solución completa a la cinemática de las interacciones Compton. (Attix, 2008)

La energía incidente del foton y su energía de dispersión se dan por la siguiente ecuación:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}(1 - \cos\theta)} \quad (2.5)$$

Energía cinética que adquirió el electrón:

$$T = h\nu - h\nu' \quad (2.6)$$

Cotangente del ángulo del electrón en función de las energías iniciales y del ángulo en que se dispersó el fotón:

$$\cot\phi = \left(1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}\right) \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.7)$$

donde θ es el ángulo de dispersión del fotón con respecto a su eje original, y ϕ es el ángulo en el que desvía el electrón despues de la colisión.

Constante de Plank: $h = 6,62606957 \times 10^{-34}$ Js

Velocidad de la luz: $c = 299792458$ m/s

Masa del electrón: $m_e = 9,10938356 \times 10^{-31}$ kg

Carga de electrón: $e = 1,602176565 \times 10^{-19}$ C

Electronvolt: $1 \text{ eV} = 1,602176565 \times 10^{-19}$ J

Energía del electrón en reposo: $m_e c^2 = 0,511$ MeV

Sin embargo para determinar completamente lo que ocurre en dicho proceso hay que calcular varias cantidades: la probabilidad de que ocurra la interacción en función de la energía del fotón incidente y las nuevas direcciones y energías del fotón y del electrón después de la colisión. La nueva dirección del fotón se calculará con la sección eficaz diferencial del efecto Compton, que viene dada por la fórmula de Klein-Nishina: (Evans, 1958)

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 + \cos\theta)]} \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos\theta)}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \right] \quad (2.8)$$

donde σ_{KN} es la sección eficaz por electrón, Ω es el ángulo sólido, r_e es el radio clásico del electrón y $\alpha = h\nu/m_e c^2$ es la energía del fotón incidente en términos de la masa en reposo del electrón.

Debido esto la diferencia de energía entre el fotón incidente y el fotón dispersado es transferida al electrón libre por lo tanto contribuye a la deposición de energía en el medio. (Attix, 2008)

2.4.3.3. Sección eficaz para el efecto Compton

Integrando la sección diferencial σ_{KN} (Klein-Nishina) para todo el ángulo sólido se obtiene la sección eficaz total del proceso, que nos da la probabilidad de que ocurra un efecto Compton en función de la energía del fotón incidente (Attix, 2008):

$$\sigma_C = 2\pi r_0^2 \left[\frac{1 + \alpha}{\alpha^2} \left(\frac{2(1 + \alpha)}{1 + 2\alpha} - \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{\alpha} \right) + \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{2\alpha} - \frac{1 + 3\alpha}{(1 + 2\alpha)^2} \right] \quad (2.9)$$

donde $\alpha = h\nu/m_e c^2$ en el cual $h\nu$ es expresado en MeV y $m_e c^2$ es igual a 0.511 MeV.

2.4.4. Efecto Fotoeléctrico

Es el proceso más importante de interacción de radiación con la materia a bajas energías así como para materiales absorbentes con número atómico grande. Una característica de este efecto es que la velocidad de los fotoelectrones crece al aumentar la frecuencia de

la radiación incidente y no de su intensidad, solo se puede obtener efecto fotoeléctrico a una frecuencia mínima para cada material.

En el proceso fotoeléctrico *toda* la energía del fotón incidente $E = h\nu$, es cedida a un electrón ligado de un átomo que resulta expulsado del mismo con una energía cinética, ver figura [2.7].

$$T = h\nu - W \quad (2.10)$$

donde T es la energía cinética impartida al electrón y W es el potencial de ionización del electrón. Este mecanismo de interacción de fotones con la materia es el dominante cuando la energía de los fotones es baja, (inferior a los 50 keV), originando un electrón libre, este puede así salir del absorbente o, más probablemente, ser reabsorbido casi de inmediato debido al corto alcance de los electrones en el medio.

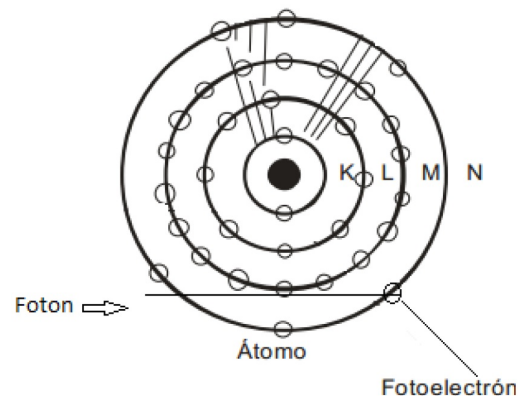


Figura 2.7: Efecto fotoeléctrico.

(http://en.wikibooks.org/wiki/Basic_Physics_of_Digital_Radiography)

Un ejemplo claro donde uno puede encontrar este efecto es en una celda solar que es un dispositivo que transforma la energía lumínica del Sol (fotones) en energía eléctrica (flujo de electrones libres) y está compuesta de un material particular que presenta el efecto fotoeléctrico (absorber fotones de luz y emitir electrones).

2.4.4.1. Sección transversal para efecto fotoeléctrico

Si bien no existe una expresión analítica única para describir la probabilidad del efecto fotoeléctrico en un átomo para todos los rangos de energía y número atómico, es posible escribir la siguiente aproximación cuando la energía de los fotones es superior a la energía de enlace de los electrones del átomo Attix (2008):

$$\sigma_F \cong \frac{Z^n}{[hv]^3} \quad (2.11)$$

siendo k una constante de proporcionalidad, y n varía entre 4 y 5 en el rango de energías de interés.

2.4.5. Producción de Pares

Un fotón incidente cerca del núcleo tiende a desaparecer debido a la interacción coulombiana y como consecuencia; la creación de un electrón y un positrón [antipartícula del electrón]. Para esto, el fotón debe tener una energía que exceda los 1.022 MeV (la suma de las energías en reposo de un electrón y un positrón).

Después de que el positrón y el electrón son proyectados, van perdiendo su energía cinética por excitación, ionización o bremsstrahlung. El positrón al perder toda su energía se une a un electrón, produciendo dos fotones de 0.511 MeV, cada uno. A esto se le conoce como radiación de aniquilamiento, ver figura 2.8.

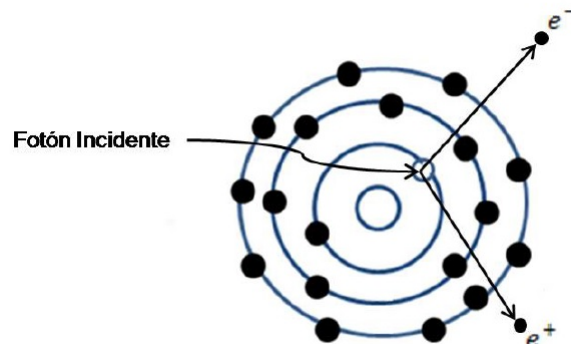


Figura 2.8: Producción de pares.
(<http://slideplayer.es/slide/1549245/>)

2.5. MÉTODO MONTE CARLO

El nombre "Monte Carlo" fue popularizado por los investigadores de física Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John von Neumann y Nicholas Metropolis, entre otros. El nombre hace referencia al Casino de Monte Carlo en Mónaco, donde el tío de Ulam tomaba dinero prestado para apostar. El uso de la aleatoriedad y de la naturaleza repetitiva en el método de Monte Carlo es análogo a las actividades que se llevan a cabo en un casino. La simulación de Monte Carlo data del año 1940, cuando Neuman y Ulam la aplicaron en el campo de la experimentación de armas nucleares.

El método de Monte Carlo es un método no determinista o estadístico numérico, usado para aproximar expresiones matemáticas complejas y costosas computacionalmente de evaluar con exactitud. El método de Monte Carlo proporciona soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos posibilitando la realización de experimentos con muestreos de números pseudoaleatorios en una computadora. El método es aplicable a cualquier tipo de problema, ya sea estocástico (basado en la teoría de la probabilidad) o determinista.

Es utilizado a menudo para problemas físicos y matemáticos, es muy útil cuando es difícil o imposible usar otros métodos matemáticos. El método de Monte Carlo se utiliza principalmente en tres

clases de problemas distintos: optimización, integración numérica, y la generación de sorteos de una distribución de probabilidad.

En los problemas relacionados con la física, el método de Monte Carlo es muy favorable para los sistemas de simulación con muchos grados de libertad acoplados, como los fluidos, materiales desordenados, sólidos fuertemente acoplados, y estructuras celulares. Otros ejemplos incluyen fenómenos de modelado con una importante incertidumbre en insumos tales como el cálculo de riesgo en los negocios y, en matemáticas, evaluación de integrales definidas multidimensionales con condiciones de frontera complicadas. (Jenkins et al., 1988)

2.5.1. Aplicación del Método Monte Carlo al Transporte de Radiación Ionizante en la Materia

En el método Monte Carlo se combinan conceptos estadísticos como lo es el muestreo aleatorio, con la generación de números aleatorios y la automatización de los cálculos. Es un procedimiento matemático que consiste en la generación numérica de series mediante un muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad.

Todos los procesos que involucran el transporte de partículas tienen naturaleza estocástica, es decir, no se puede prever qué tipo de interacción se va a producir en cada momento y lugar sino que solamente se puede asignar una probabilidad a cada uno de los posibles sucesos. Sin embargo, las distribuciones de probabilidad que describen el comportamiento del sistema que se quiere estudiar son conocidas. El método de Monte Carlo construye un modelo estocástico, que basándose en las funciones de densidad de probabilidad modela secuencialmente eventos individuales de una variable aleatoria. Teóricamente se siguen todos los eventos o interacciones que sufre cada partícula desde su origen hasta que alcanza una condición terminal, ya sea por absorción, escape, energía de corte, etc. Lo mismo se aplica para todas las partículas creadas en el proceso.

El método de Monte Carlo es considerado el más preciso para simular el transporte de partículas en un medio. Para cualquier evento, el método de Monte Carlo genera un número aleatorio fundamentándose en las funciones de distribución de probabilidad,

que definirá el tipo de interacción y otros parámetros. Posteriormente, se calcula el valor esperado de todos los eventos simulados. El valor esperado de una o varias variables aleatorias es equivalente al valor de una cantidad física del sistema estudiado.

La historia de una partícula comienza calculando mediante procesos aleatorios la probabilidad de que se cree una partícula, de manera análoga se obtiene la energía, la posición y la dirección inicial de la trayectoria de dicha partícula, tomando en cuenta que éstas son independientes entre sí, ver figura 2.9. Posteriormente, se simula la distancia libre que recorrerá antes de interaccionar y el tipo de colisión que sufrirá. La energía y dirección de las partículas dispersadas son variables aleatorias que también se calculan en la simulación. Este proceso continua para cada uno de las partículas que se van generando hasta que se alcanza una condición terminal. Siendo posible obtener con este método, paso por paso, el “trayecto aleatorio” de las partículas a través del medio, obteniendo así la distribución exacta de estas. (Bielajew, 2001)

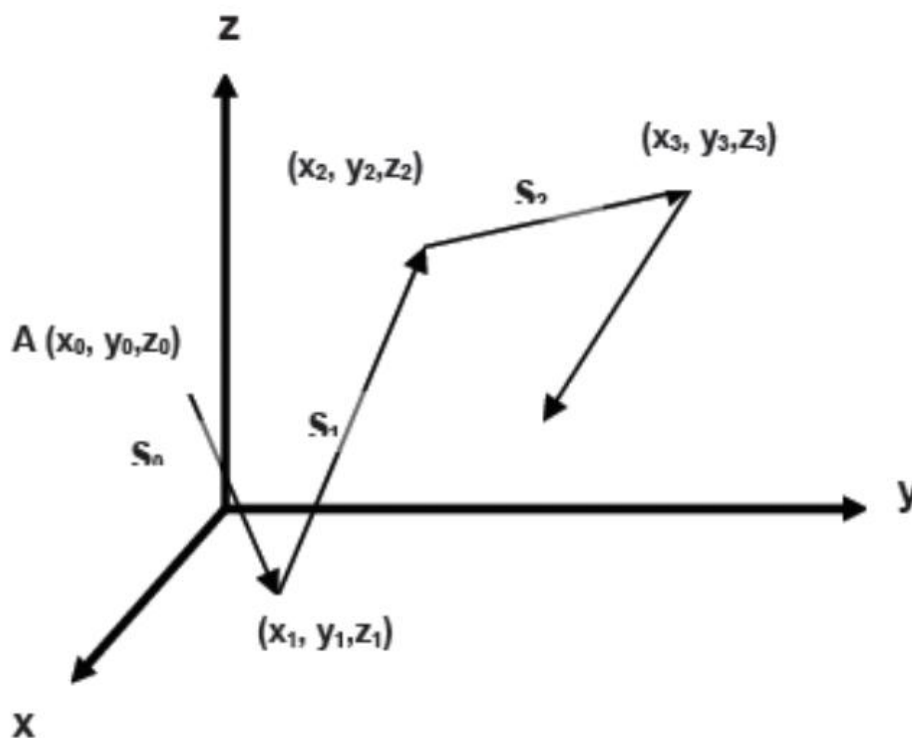


Figura 2.9: Trayectoria aleatoria de una partícula a través de un medio.

(www.ptolomeo.unam.mx:8080/jspui/bitstream/132.248.52.100/720/5/A5.pdf)

2.5.2. Método Clásico

Es un método que utiliza la técnica Monte Carlo para el muestreo del ángulo polar de dispersión Compton. Considera la dispersión Compton como un proceso clásico, donde los fotones sufren una pérdida de energía por la interacción con los electrones atómicos o con electrones libres, y depositan energía en el tejido (Fulea et al., 2009). Para calcular la nueva dirección del fotón se basa de la fórmula exacta de sección transversal diferencial del efecto Compton, que viene dada por la ecuación de Klein-Nishina.

La ecuación de Klein-Nishina para la sección transversal diferencial de la dispersión no coherente o dispersión Compton de la radiación electromagnética no polarizada en un electrón libre en

reposito se visualiza de ésta forma:

$$\frac{\sigma_{KN}(h\nu', \theta)}{d\Omega} = \frac{r_e h\nu'}{2 h\nu} \left[1 + \left(\frac{h\nu'}{h\nu} \right)^2 - \frac{h\nu'}{h\nu} \sin^2 \theta \right] \quad (2.12)$$

Una forma para muestrear el ángulo polar desde (2.12) es considerar la parte con mayor dependencia (peso) de θ que sería:

$$w = \left[1 + \left(\frac{h\nu'}{h\nu} \right)^2 - \frac{h\nu'}{h\nu} \sin^2 \theta \right] \quad (2.13)$$

donde w sería la variable de ponderación que tiene un valor máximo de 2 y es la que determina el peso o la validez del ángulo generado. De acuerdo a la ecuación (2.5) se tiene

$$\frac{h\nu}{h\nu'} = 1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) \quad (2.14)$$

donde $\frac{h\nu}{h\nu'}$ es máxima cuando $\theta = \pi$ y mínima cuando $\theta = 0$, por lo tanto el valor máximo y el mínimo de ésta relación serían igual a:

$$\left(\frac{h\nu}{h\nu'} \right)_{\text{máx}} = 1 + 2 \frac{h\nu}{m_e c^2} \quad (2.15)$$

$$\left(\frac{h\nu}{h\nu'} \right)_{\text{mín}} = 1 \quad (2.16)$$

Ahora se define a un número aleatorio r que se encuentra en el rango $[0, 1]$. La ecuación (2.15) se elevará a r , donde éste numero aleatorio determinará el valor de la ecuación (2.14) de la siguiente manera:

$$1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) = \left(1 + 2 \frac{h\nu}{m_e c^2} \right)^r \quad (2.17)$$

sí r es igual a 1 entonces el valor será máximo y sí r es igual a 0 entonces el valor será igual a 1.

Se despeja $(1 - \cos \theta)$ y se obtiene la siguiente ecuación:

$$(1 - \cos \theta) = \frac{m_e c^2}{h\nu} \left[\left(1 + 2 \frac{h\nu}{m_e c^2} \right)^r - 1 \right] \quad (2.18)$$

donde $(1 - \cos \theta)$ tiene un valor máximo de 2.

Ahora se determina $u = 1 - \cos \theta$, y se obtendrá la ecuación que más nos importa para el muestreo del ángulo polar:

$$u = \frac{m_e c^2}{h\nu} \left[\left(1 + 2 \frac{h\nu}{m_e c^2} \right)^r - 1 \right] \quad (2.19)$$

La dispersión del ángulo polar, θ , es entonces computarizado aplicando:

$$\theta = \arccos(1 - u) \quad (2.20)$$

el ángulo se aceptará si se cumple la siguiente desigualdad:

$$w > 2r \quad (2.21)$$

ya que al elegir los valores de w mayores a $2r$ se están escogiendo los valores más probables.

2.5.3. Método Kahn

Al igual que el método clásico, el método de Kahn es un método de muestreo para calcular la dispersión del ángulo polar por efecto Compton, utilizando la técnica Monte Carlo. El algoritmo desarrollado por Kahn tiene sus fundamentos en la ecuación de sección transversal de Klein-Nishina suponiendo a los electrones libres y en reposo en el dispersor. (Ljungberg, 1998)

La ecuación de Klein-Nishina puede escribirse como:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\alpha, \theta)}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1 + \cos^2\theta}{[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos\theta)^2}{(1 + \cos^2\theta)[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]} \right] \quad (2.22)$$

siendo $r_e = 2,818 \times 10^{-15} m$. el radio clásico del electrón, θ el ángulo polar de dispersión del fotón y $\alpha = h\nu/m_e c^2$ la energía del fotón incidente expresada en unidades de la energía másica del electrón en reposo.

Si se sustituye: $d\Omega = \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi$, y se integra a través del ángulo azimutal, φ , se tiene la expresión:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\alpha, \theta)}{d\theta} = \pi \cdot r_e^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{(1 + \cos^2 \theta)[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right] \cdot \sin \theta \quad (2.23)$$

cuyo reajuste conduce a la ecuación:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\alpha, \theta)}{d\theta} = \pi \cdot r_e^2 \frac{\sin \theta}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \cdot \left[\frac{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2 + 1 - [1 + \alpha(1 - \cos \theta)] + [1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2 \cdot \cos^2 \theta}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right] \quad (2.24)$$

De las leyes de conservación de la energía y el impulso se concluye que la energía del fotón dispersado, en unidades de la masa en reposo del electrón, puede expresarse según:

$$\alpha' = \frac{\alpha}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \quad (2.25)$$

Si se define $x = \frac{\alpha'}{\alpha} = 1 + \alpha(1 - \cos \theta)$ y se sustituye en la ecuación 2.24, se tiene:

$$\frac{d\sigma_{KN}(x, \theta)}{d\theta} = \pi \cdot r_e^2 \cdot \frac{1}{x^2} \cdot \left[x + \frac{1}{x} - \cos^2 \theta - 1 \right] \cdot \sin \theta \quad (2.26)$$

aplicando la transformación $\frac{d\sigma}{dx} = \frac{d\sigma}{d\theta} \cdot \frac{d\theta}{dx}$ donde $\frac{dx}{d\theta} = \alpha \cdot \sin \theta$, se obtiene:

$$\frac{d\sigma_{KN}(x, \theta)}{dx} = \frac{\pi \cdot r_e^2}{\alpha} \cdot \frac{1}{x^2} \cdot \left[x + \frac{1}{x} - \cos^2 \theta - 1 \right] \cdot dx \quad (2.27)$$

Si se considera que para el muestreo de la variable x mediante el método de rechazo, la constante de normalización no necesita ser especificada, es posible definir la función de densidad de probabilidad de x como:

$$f(x, \theta, \alpha) = \frac{1}{\alpha \cdot x^2} \cdot \left[x + \frac{1}{x} - \cos^2 \theta - 1 \right]. \quad (2.28)$$

siendo $\cos \theta = 1 - \frac{x-1}{\alpha}$, cuando se valua en $\theta = 0$ el valor de x es mínimo y cuando $\theta = \pi$ el valor de x es máximo, es decir, $1 \leq x \leq 1 + 2\alpha$.

El método de muestreo propuesto por Kahn parte del reajuste de la FDP (2.28) y su descomposición en la suma de dos funciones de densidad de probabilidad, cada una de ella compuesta por una función normalizada y otra acotada en el intervalo $1 \leq x \leq 1 + 2\alpha$, para obtener la siguiente expresión:

$$f(x, \theta, \alpha) = \frac{2\alpha + 1}{2\alpha + 9} \cdot \frac{1}{2\alpha} \cdot 4 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} \right) + \frac{8}{2\alpha + 9} \cdot \frac{2\alpha + 1}{2\alpha \cdot x^2} \cdot \frac{1}{2} \left(\cos^2 \theta + \frac{1}{x} \right) \quad (2.29)$$

Si se denotan: $g_1(x) = \frac{1}{2\alpha}$, $g_2(x) = \frac{2\alpha+1}{2\alpha \cdot x^2}$ tomando en cuenta que

$$\int_1^{1+2\alpha} g_1(x) dx = \int_1^{1+2\alpha} g_2(x) dx = 1 \quad (2.30)$$

y también se define a $h_1(x) = 4 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} \right)$ y $h_2(x) = \frac{1}{2} \left(\cos^2 \theta + \frac{1}{x} \right)$ donde $\max(h_1(x)) = \max(h_2(x)) = 1$, entonces el procedimiento consiste en el muestreo según $f_1(x) = g_1(x)h_1(x)$ y $f_2(x) = g_2(x)h_2(x)$ con frecuencias relativas $\frac{2\alpha+1}{2\alpha+9}$ y $\frac{8}{2\alpha+9}$ respectivamente.

El muestreo según $f_i(x) (i = 1, 2)$ se realiza aplicando el método de inversión a $g_i(x)$ para obtener la realización de la variable x , la que es aceptada o no mediante el método de rechazo según $h_i(x)$.

Acorde con el método de inversión, la realización de la variable x se obtiene entonces resolviendo una de las siguientes ecuaciones:

$$\gamma = \int_1^x g_1(x') dx' = \frac{1}{2\alpha} (x - 1) \quad (2.31)$$

$$\gamma = \int_1^x g_2(x') dx' = \frac{2\alpha + 1}{2\alpha} \left(1 - \frac{1}{x} \right) \quad (2.32)$$

siendo γ un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $(0, 1)$.

Para $g_1(x)$ el valor de x se obtiene como $x = 2\alpha \cdot \gamma + 1$, mientras que para $g_2(x)$ el valor de x se obtiene según: $x = \frac{2\alpha+1}{2\alpha \cdot \gamma}$. (Özmutlu, 1992)

2.5.4. Método EGS (Electron Gamma Shower)

El sistema de código de computadora EGS es un paquete de propósito general para la simulación Monte Carlo del transporte acoplado de electrones y fotones en una geometría arbitraria para partículas con energías de unos pocos keV hasta varios TeV.

Existen dos direcciones que utilizan el código fuente del proyecto ya existente: EGSnrc, mantenida por el Grupo de Estándares de radiación ionizante, Instituto de Estándares Nacionales de medición, Consejo Nacional de Investigación de Canadá y el EGS, mantenida por la KEK, el centro de investigación de la física de partículas japonesa. En éste trabajo nosotros se utiliza el EGS, en su versión más actual, EGS5.

Para el muestreo del ángulo polar de dispersión este método se basa de la fórmula de sección transversal diferencial del efecto Compton, que viene dada por la ecuación de Klein-Nishina tal como en los métodos anteriores, que se visualiza en la siguiente ecuación:

$$\frac{d\sigma(h\nu)}{dh\nu'} = \frac{X_0 n \pi r_e^2 m_e c^2}{(h\nu)^2} \left[\left(\frac{C_1}{\varepsilon} + C_2 \right) / \varepsilon + C_3 + \varepsilon \right] \quad (2.33)$$

donde

X_0 = longitud de la radiación (cm),

n = densidad de electrones (electrón/cm³),

r_e = radio clásico del electrón (cm),

$m_e c^2$ = energía del electrón en reposo (MeV),

$h\nu$ = energía del fotón incidente (MeV),

$h\nu'$ = energía del fotón disperso (MeV),

$\varepsilon = h\nu'/h\nu$,

$h\nu_0 = \frac{h\nu}{m_e c^2}$,

$$C_1 = (h\nu_0)^{-2},$$

$$C_2 = 1 - 2(1 + h\nu_0)/(h\nu_0)^2,$$

$$C_3 = (1 + 2h\nu_0)/(h\nu_0)^2.$$

La sección transversal de Compton integrada sobre el rango de energía de $h\nu_1$ a $h\nu_2$ puede ser expresada como:

$$\int_{h\nu_1}^{h\nu_2} \frac{d\sigma(h\nu)}{dh\nu'} dh\nu' = \frac{X_0 n \pi r_e^2}{h\nu_0}.$$

$$\left[C_1 \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - \frac{1}{\varepsilon_2} \right) + C_2 \ln \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} + \varepsilon_2 (C_3 + \varepsilon_2/2) - \varepsilon_1 (C_3 + \varepsilon_1/2) \right] \quad (2.34)$$

donde

$$\varepsilon_1 = h\nu_1/h\nu$$

$$\varepsilon_2 = h\nu_2/h\nu$$

Se sabe que la energía de dispersión del fotón es igual a: siguiente ecuación:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos\theta)} \quad (2.35)$$

El valor máximo y el mínimo de $h\nu'$ ocurre cuando $\theta = 0, \pi$, ó

$$h\nu'_{\text{máx}} = h\nu_2 = h\nu \quad (2.36)$$

$$h\nu'_{\text{mín}} = h\nu_1 = \frac{h\nu}{1 + 2\frac{h\nu}{m_e c^2}} \quad (2.37)$$

Tenga en cuenta que éste tratamiento, considera los electrones atómicos como no unidos al átomo y en reposo. Cuando existen efectos debido a ésta aproximación.

Para fotones de alta energía estas suposiciones son razonables, pero a energías más bajas iniciales, la unión atómica de electrones tiene el efecto de disminuir la sección eficaz de dispersión Compton

dada por la ecuación 2.33, en particular en la dirección hacia adelante. Sin embargo, aún considerando éstas suposiciones, éste método sigue siendo de los más eficientes para fotones de baja energía.

Ahora hay que tratar las técnicas de muestreo de la energía del rayo gamma dispersado. Si se define la variable que se quiere muestrear como:

$$\varepsilon = h\nu'/h\nu, \quad (2.38)$$

es posible ver de las ecuaciones (2.36) y (2.37) que ε debe estar en el intervalo $(\varepsilon_0, 1)$, donde

$$\varepsilon_0 = \frac{h\nu}{1 + 2\frac{h\nu}{m_e c^2}} \quad (2.39)$$

Se inicia con una forma de la sección transversal diferencial similar a la dada por Butcher y Messel (Butcher and Messel, 1958):

$$\frac{d\sigma(h\nu)}{d\varepsilon} = \frac{X_0 n \pi r_e^2 m_e c^2}{h\nu} \left[\frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon \right] \left[1 - \frac{\varepsilon \sin^2 \theta}{1 + \varepsilon^2} \right] \propto f(\varepsilon)g(\varepsilon) \quad (2.40)$$

Se muestrea $f(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon$ sobre $(\varepsilon_0, 1)$ y utilizar $g(\varepsilon) = \left[1 - \frac{\varepsilon \sin^2 \theta}{1 + \varepsilon^2} \right]$ como una función de rechazo. Se factoriza $\left[\frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon \right]$ sobre $(\varepsilon_0, 1)$ como sigue

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon = \sum_{i=1}^2 \alpha_i f_i(\varepsilon) \quad (2.41)$$

donde

$$\alpha_1 = \ln(1/\varepsilon_0), f_1(\varepsilon) = \frac{1}{\ln(1/\varepsilon_0)} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right), \varepsilon \in (\varepsilon_0, 1) \quad (2.42)$$

$$\alpha_2 = (1 - \varepsilon_0^2)/2, f_2(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{(1 - \varepsilon_0^2)}, \varepsilon \in (\varepsilon_0, 1). \quad (2.43)$$

Se muestrea f_1 al permitir que

$$\varepsilon = \varepsilon_0 e^{\alpha_1 r} \quad (2.44)$$

donde r es un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $(0, 1)$. Podría muestrearse f_2 tomando el mayor de dos números aleatorios sí es está dispuesto a rechazar los valores muestreados menores que ε_0 , pero esto podría ser muy ineficiente para fotones de baja energía. En lugar de eso, se realiza un cambio de variables. De la siguiente manera:

$$\varepsilon' = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{1 - \varepsilon_0}. \quad (2.45)$$

A continuación, con el fin de dar una adecuada distribución a ε , ε' debe tener la distribución

$$f_2'(\varepsilon') = f_2(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{d\varepsilon'} = \alpha_1' f_1''(\varepsilon') + \alpha_2' f_2''(\varepsilon') \quad (2.46)$$

donde

$$\alpha_1' = \frac{h\nu_0}{h\nu_0 + 1}, f_1''(\varepsilon') = 2\varepsilon', \varepsilon' \in (0, 1) \quad (2.47)$$

$$\alpha_2' = \frac{1}{h\nu_0 + 1}, f_2''(\varepsilon') = 1, \varepsilon' \in (0, 1) \quad (2.48)$$

Ambas sub-distribuciones son muestreadas fácilmente.

Para calcular la función de rechazo, es necesario obtener $\sin^2 \theta$. Se define

$$t = \frac{m_e c^2 (1 - \varepsilon)}{h\nu \cdot \varepsilon} \quad (2.49)$$

Usando la ecuación

$$\cos \theta = \frac{(h\nu + m_e c^2) h\nu' - h\nu \cdot m_e c^2}{h\nu \cdot h\nu'} \quad (2.50)$$

se entiende que

$$\cos \theta = 1 - \frac{m_e c^2 (1 - \varepsilon)}{h\nu \cdot \varepsilon} = 1 - t \quad (2.51)$$

entonces

$$\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = (1 - \cos \theta)(1 + \cos \theta) = t(2 - t). \quad (2.52)$$

Cuando se acepta el valor de ε , entonces el $\sin \theta$ y el $\cos \theta$ se obtienen a través de

$$\sin \theta = \sqrt{\sin^2 \theta} \quad (2.53)$$

$$\cos \theta = 1 - t. \quad (2.54)$$

2.6. MUESTREO MONTE CARLO

De aquí en adelante se demuestra cómo los números al azar se pueden emplear para tomar muestras de distribuciones de probabilidad. Toda simulación estadística se basa en la creación de un modelo estocástico (analizable en términos de probabilidad) del sistema bajo estudio, de forma que los valores buscados de las magnitudes físicas que caracterizan al sistema se deducen a partir de los valores esperados de determinadas variables aleatorias (Persliden, 1983). Estas variables se obtienen a su vez como combinaciones de otras variables aleatorias que describen los diferentes procesos acontecidos en el sistema.

2.6.1. Función de Densidad de Probabilidad (FDP)

Es una función que describe la probabilidad que tendrá la variable aleatoria para tomar un valor a lo largo de todo su dominio. La integral definida de la FDP de cada intervalo coincide con la probabilidad de los mismos. Es decir, es posible identificar la probabilidad de un intervalo observando el área bajo la curva de la FDP, ver figura 2.10.

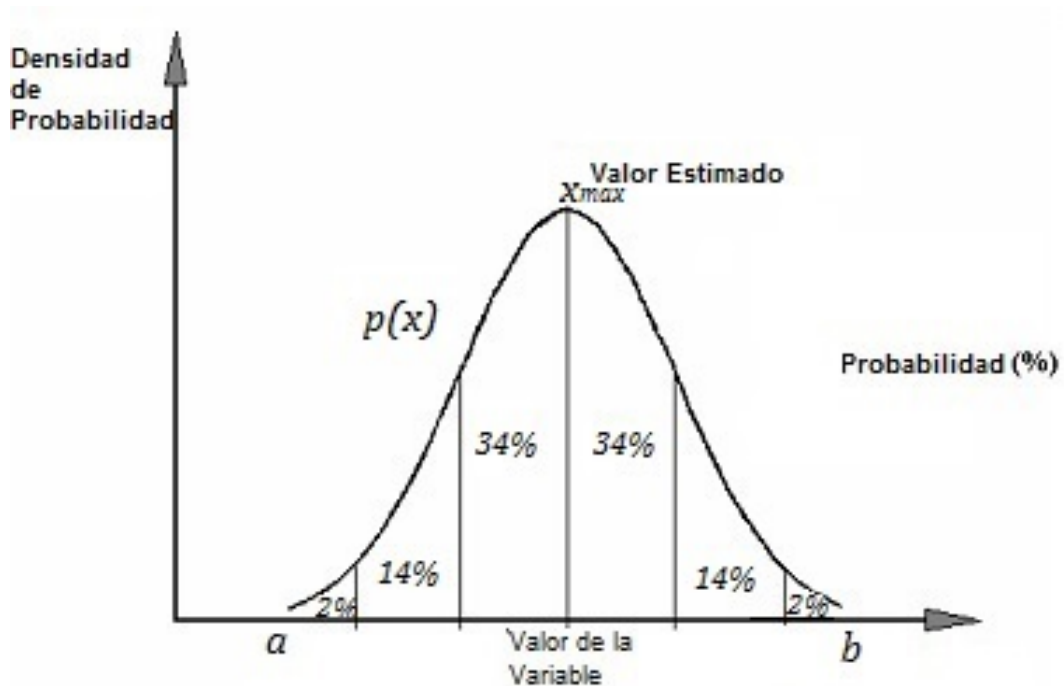


Figura 2.10: Ejemplo de una Función de Densidad de Probabilidad. Definida sobre el dominio $[a, b]$, se puede observar que la suma de la probabilidad de cada intervalo es igual a 100%.

Para describir cómo está distribuida alguna variable aleatoria, se utiliza una función de densidad de probabilidad $p(x)$ la cual debe cumplir con la condición de normalización expresada en la ecuación.

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1 \quad (2.55)$$

Ésta integral significa que al sumar todas las probabilidades de la variable aleatoria al tomar un valor en x debe ser igual a 1, que puede visualizarse como un 100%.

2.6.2. Función de Distribución de Probabilidad Acumulada

A partir de la función de densidad de probabilidad es posible construir ésta función de distribución de probabilidad acumulada que expresa la probabilidad que tiene la variable aleatoria x de caer en un intervalo $[a \leq x \leq x_1]$, sabiendo que el dominio completo es $[a \leq x \leq b]$ y esta definida con la ecuación:

$$c(x_1) = \int_a^{x_1} p(x)dx \quad [a \leq x \leq x_1] \quad (2.56)$$

Al observar la figura 2.11, es posible entender que la probabilidad de que la variable aleatoria caiga entre a y b es de un 100% ya que es todo el dominio completo (todos los valores que puede tomar la variable).

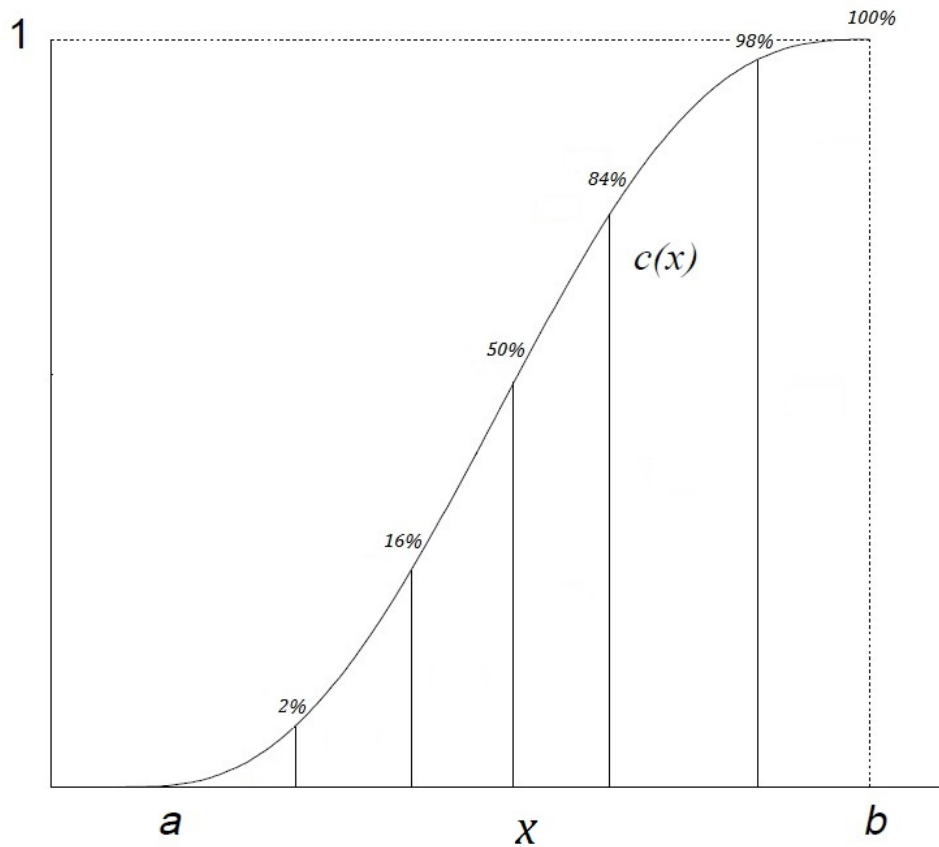


Figura 2.11: Ejemplo de una Función de Distribución de Probabilidad Acumulada, $c(x)$. Definida sobre el dominio $[a, b]$, se puede observar que cada intervalo es la suma de la probabilidad de ese intervalo con el anterior.

Ahora que ya se conoce las diferencias entre una función de densidad de probabilidad y una función de distribución de probabilidad acumulada es posible continuar con los 3 métodos de muestreo.

2.6.3. Método Directo (función de distribución de probabilidad acumulada invertible)

Para generar las variables aleatorias que son necesarias para la simulación, se generan números aleatorios uniformemente distribuidos entre $[0, 1]$, por lo que la función de densidad de los números

aleatorios r se define como $p(r) = 1$, lo que nos dice es que la probabilidad de que r sea un número entre 0 y 1 es del 100% (ver figura 2.12), cualquier número entre 0 y 1 tienen la misma probabilidad de generarse.

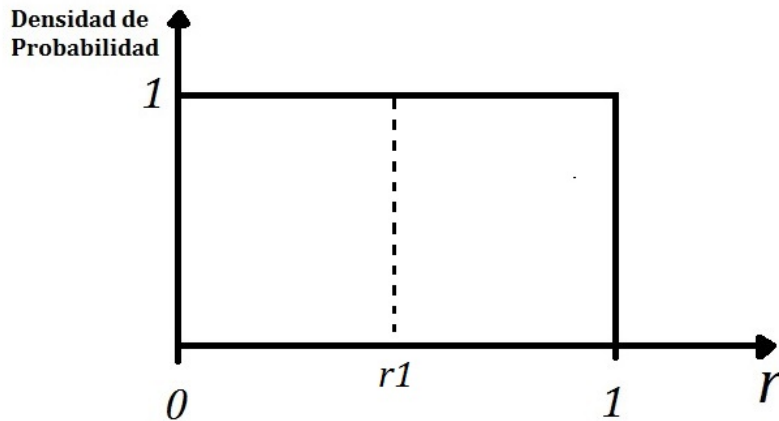


Figura 2.12: Función de Densidad de Probabilidad de los números aleatorios, $p(r)$. Definida sobre el dominio $[0, 1]$.

Por lo tanto, la función de distribución de probabilidad acumulada para los números aleatorios está dada por la ecuación 2.57.

$$c(r_1) = \int_0^{r_1} p(r)dr = r_1 \quad (2.57)$$

donde: $0 \leq r_1 \leq 1$

Al igualar el valor de la función de distribución de probabilidad acumulada de la variable aleatoria x_1 con la función distribución de probabilidad acumulada de los números aleatorios r_1 , es decir $c(x_1) = c(r_1)$, se logra un mapeo uno a uno entre los valores x_1 y r_1 , por lo anterior se obtiene la ecuación 2.59. Los valores de la variable aleatoria x obtenidos utilizando la ecuación 2.59, seguirán la función de densidad $p(x)$.

$$r_1 = c(x_1) \quad (2.58)$$

$$r_1 = \int_a^{x_1} p(x)d(x) \quad (2.59)$$

Lo que nos da a entender que el número aleatorio r_1 es igual al valor de la probabilidad que tiene de caer la variable aleatoria en el intervalo $[a, x_1]$ como se muestra en la siguiente figura:

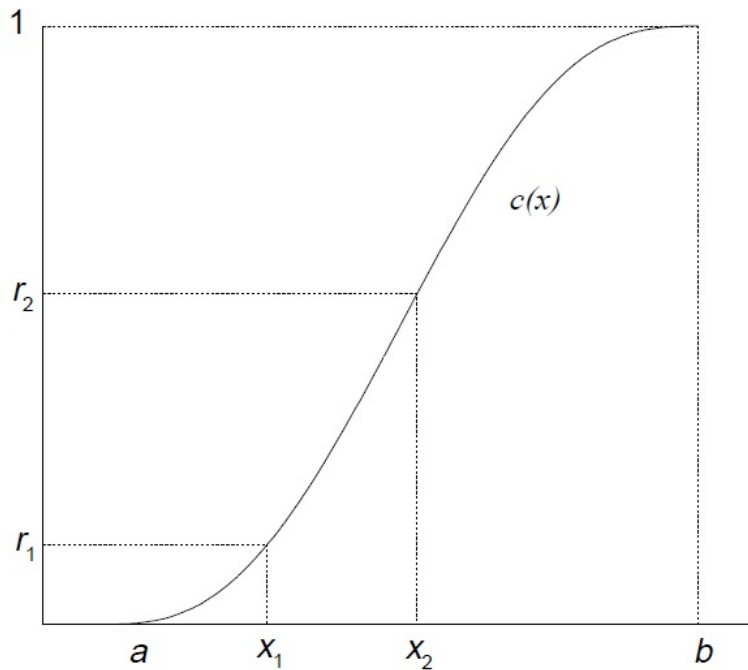


Figura 2.13: Función de Distribución de Probabilidad Acumulada ($c(x)$) obtenida al integrar $p(x)$. Definida sobre el dominio $[a, b]$.

Después de haber asignado los números aleatorios en la función de distribución de probabilidad acumulativa, es decir, $c(x) = r$, se puede invertir ésta ecuación para obtener el valor de x a partir de un número aleatorio:

$$x = c^{-1}(r) \quad (2.60)$$

Todas las funciones de distribución de probabilidad acumulada que se derivan de las funciones de densidad de probabilidad adecuadamente definidas son invertibles, numéricamente, si no analíticamente (Bielajew, 2001).

Entonces, al elegir r 's aleatoriamente a través de una distribución uniforme en el intervalo $[0, 1]$ y sustituyendo en la ecuación anterior, se generan x 's de acuerdo con la FDP apropiada. A partir de esta secuencia de números aleatorios con distribución uniforme se realiza el muestreo de cada variable en Monte Carlo.

2.6.4. Método de rechazo

Mientras que el método que se vió anteriormente siempre es posible, al menos en principio, a menudo es poco práctico para el cálculo de $c^{-1}()$, ya que puede ser muy complicado matemáticamente o contiene estructura matemática que es difícil de controlar. Otro enfoque consiste en utilizar el método de rechazo.

Este método consiste en primeramente en generar un valor de la variable aleatoria y enseguida probar que dicho valor simulado proviene de la función de densidad de probabilidad que se está analizando. Para comprender la lógica de este método, suponga que $p(x)$, es una FDP acotada y con rango finito, es decir, $a \leq x \leq b$. De acuerdo a esta función de densidad de probabilidad, la aplicación del método de rechazo o método de Neumann [Neumann, 1951] implica el desarrollo de los siguientes pasos:

1. Generar un número aleatorio, r_1 , uniforme en el rango $[0, 1]$ y usarlo para obtener una x la cual es uniforme en el rango de la función de densidad de probabilidad, $[a, b]$. Para hacer esto, se calcula el valor de x de la siguiente forma:

$$x = a + (b - a)r_1 \quad (2.61)$$

Uno puede observar en ésta ecuación que si el número aleatorio es igual a 0 entonces x será igual al valor mínimo del rango que es a y si es igual a 1 entonces será igual al valor máximo que es b , es decir, el número aleatorio r_1 dará como resultado una x que se encuentre dentro del intervalo $[a, b]$.

2. Escalar la función de densidad de probabilidad $p(x)$ con su valor máximo, $p_{max}(x)$, obteniendo una nueva FDP ($f(x)$), ver figura 2.14, de la siguiente manera:

$$f(x) = \frac{p(x)}{p_{max}(x)} \quad (2.62)$$

Ésta nueva FDP tiene un valor máximo de 1 que ocurre cuando x tiene el valor más probable o estimado).

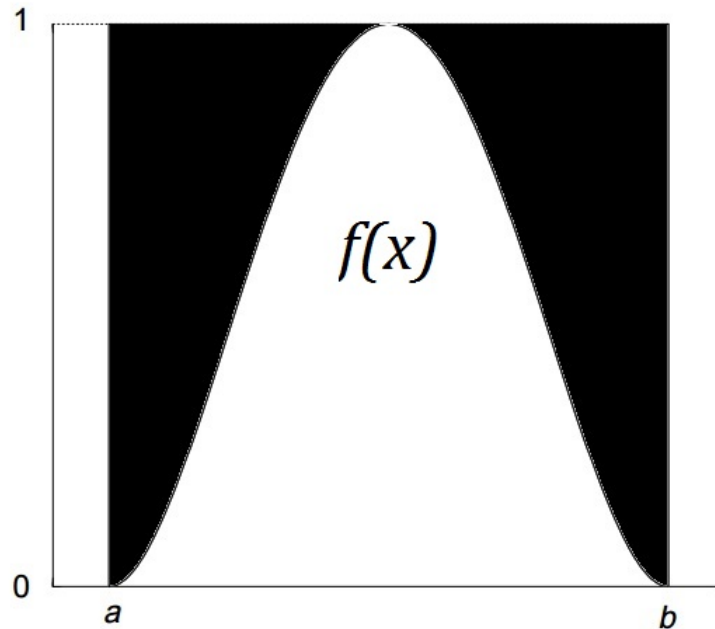


Figura 2.14: Función de densidad de probabilidad escalada para el método de rechazo.

3. Evaluar el valor calculado de x en la función de densidad de probabilidad $f(x)$.
4. Generar un segundo número aleatorio, r_2 , uniforme en el rango $[0, 1]$ al igual que el primero. Si se cumple:

$$r_2 \leq \frac{p(x)}{p_{max}(x)} \quad (2.63)$$

Entonces aceptar el valor de x , de lo contrario repetir toda la secuencia. Lo que nos quiere decir ésta desigualdad es que solamente se aceptarían los valores con una mayor probabilidad de acuerdo a la FDP utilizada, es decir, que el valor de la $f(x)$ sea mayor que r_2 , por lo tanto se aceptará una mayor cantidad de variables que sean más probables, y una menor cantidad de las que sean menos probables.

Este método genera x 's utilizando directamente la función de densidad de probabilidad. Algunos consideran que este método desperdician número aleatorios a diferencia del método anterior que utiliza la función de distribución de probabilidad acumulada invertida. Sin embargo, se puede ahorrar tiempo de cálculo si el $c^{-1}()$ es muy complicado. Uno tiene que perder muchos números aleatorios para su uso como mucho tiempo de cálculo como en la evaluación de una función trascendental. (Bielajew, 2001)

2.6.5. Método Mixto

Éste método es una combinación de los dos métodos vistos anteriormente. Ahora, uno se imagina que la FDP es muy difícil de integrar e invertir (muchas funciones densidad de probabilidad tienen este carácter negativo), entonces se descarta el método directo, y el método del rechazo es ineficiente debido a su costoso tiempo de simulación. Entonces se recurre a éste método que en ciertos casos podría evitar el uso del método del rechazo (que es el menos conveniente debido a que es el más tardado en muestreo), claro, su posibilidad de que pueda ser usado éste método depende de la complejidad matemática de la $p(x)$ (o FDP).

El primer paso es factorizar la FDP:

$$p(x) = f(x)g(x) \tag{2.64}$$

donde $f(x)$ es una función que puede ser invertible y $g(x)$ es la función que contiene la mayoría de la complejidad matemática. El desarrollo del método mixto es de la siguiente forma:

1. Normalizar $f(x)$ produciendo una $\tilde{f}(x)$ tal que $\int_a^b \tilde{f}(x)dx \leq 1$.
2. Se genera un número aleatorio r_1 , uniforme en el rango $[0, 1]$ para obtener una $x = \tilde{f}^{-1}(r_1)$.
3. Sustituir el valor de x en $g(x)$ produciendo una $g(r_1)$ tal que $\int_0^{\int_a^b \tilde{f}(x)dx} g(r_1)dr_1 \approx 1$.
4. Se genera un segundo número aleatorio, r_2 , uniforme en el rango $[0, 1]$.

5. Aplicar el método del rechazo utilizando $g(r_1)$. Si $r_2 \leq \frac{g(r_1)}{g_{\max}(r)}$, aceptar a x , de otro modo regresar al paso 2.

La eficiencia de éste método conciste en saber factorizar la función para que la función $g(x)$ sea lo más sencilla posible, claro, compleja matemáticamente, pero que no involucre un cálculo costoso al momento de evaluarla usando la variable x .

Capítulo 3

METODOLOGÍA

3.1. MUESTREO DEL ÁNGULO POLAR DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON

El algoritmo para el transporte de radiación por Monte Carlo nos dice que un fotón entra en el material, es absorbido por efecto fotoeléctrico, o experimenta sucesivas dispersiones debidas al efecto Compton, en las que va perdiendo energía y variando su trayectoria, hasta que sale del material o es absorbido por efecto fotoeléctrico; o bien interacciona produciendo un par iones. Pero como se mencionó anteriormente, el proceso reelevante en este trabajo es el efecto Compton ya que es el que está tomando más tiempo en su simulación debido a que tiene el mayor número de incidencias en comparación con los otros procesos de interacción.

3.1.1. Simulación del ángulo polar por 3 métodos conocidos

Existen varios métodos para la simulación de dispersión angular de radiación por efecto Compton basados en Monte Carlo. En éste trabajo se utilizan los 3 métodos siguientes:

- Método Clásico
- Método de Kahn
- Método EGS (Electron Gamma Shower)

Con cada método se muestrean los ángulos polares de dispersión de los fotones para distintas energías, se generan las distribuciones angulares de frecuencias respecto a cada energía y de ahí se observa cuál método fue el más eficiente.

Para realizar las distribuciones angulares, lo primero que se tiene que hacer es muestrear los ángulos en la computadora a partir de los código que siguen los algoritmos de cada método con 100,000,000 historias (ángulos). Mediante el uso de matrices dinámicas, en el código, se crea una matriz con 30 entradas, cada entrada es un intervalo de 6° hasta llegar a los 180° , es decir, el primer intervalo es $[0^\circ - 6^\circ)$, el segundo es $[6^\circ - 12^\circ)$..., y así sucesivamente hasta llegar al último que es $[174 - 180]$. Cada ángulo que genera el código es seleccionado y sumado al intervalo que pertenece y de éste modo se genera una distribución angular de frecuencias.

Las distribuciones angulares se deben de escalar en un porcentaje del 100 %, esto significa dividir entre 1,000,000 (1 % del total de historias) el número de incidencias de cada intervalo. De esta forma, cada intervalo de la distribución angular representará un porcentaje de probabilidad.

3.1.1.1. Método Clásico

El ángulo polar de dispersión, se genera aplicando la ecuación (2.20) y este se somete a prueba, si w satisface la condición (2.21). Estas valoraciones hacen que el ángulo polar siga la distribución Klein-Nishina donde la dispersión en ángulos pequeños es más a menudo que se produzca.

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado por el método clásico:

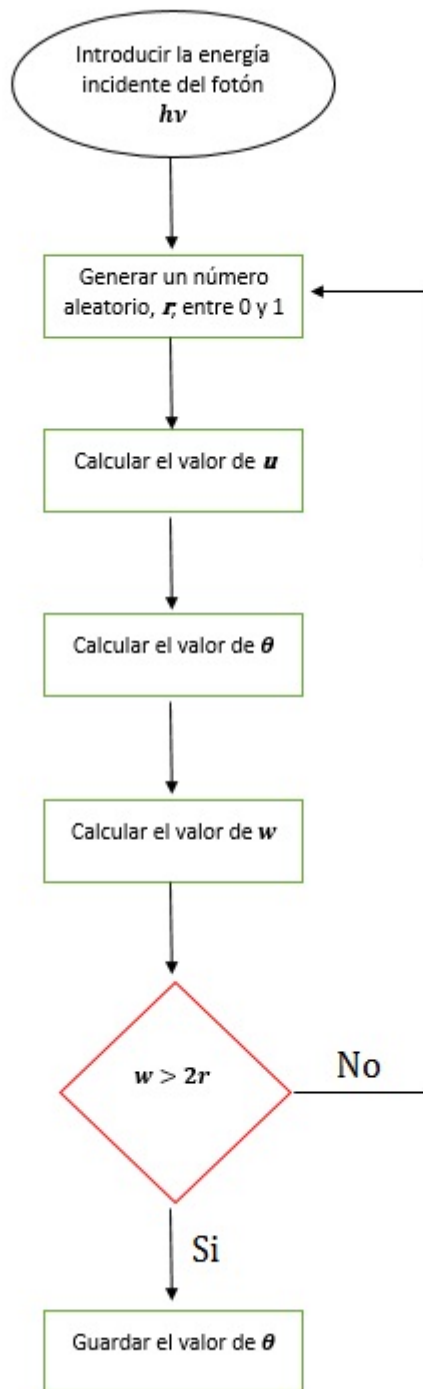


Figura 3.1: Diagrama de flujo del método clásico.

3.1.1.2. Método de Kahn

El método de muestreo propuesto por Kahn permite dar solución a la sección eficaz diferencial de Klein-Nishina para la obtención del ángulo polar de dispersión (θ) además de la energía $h\nu'$ que llevará el fotón dispersado.

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado por este método:

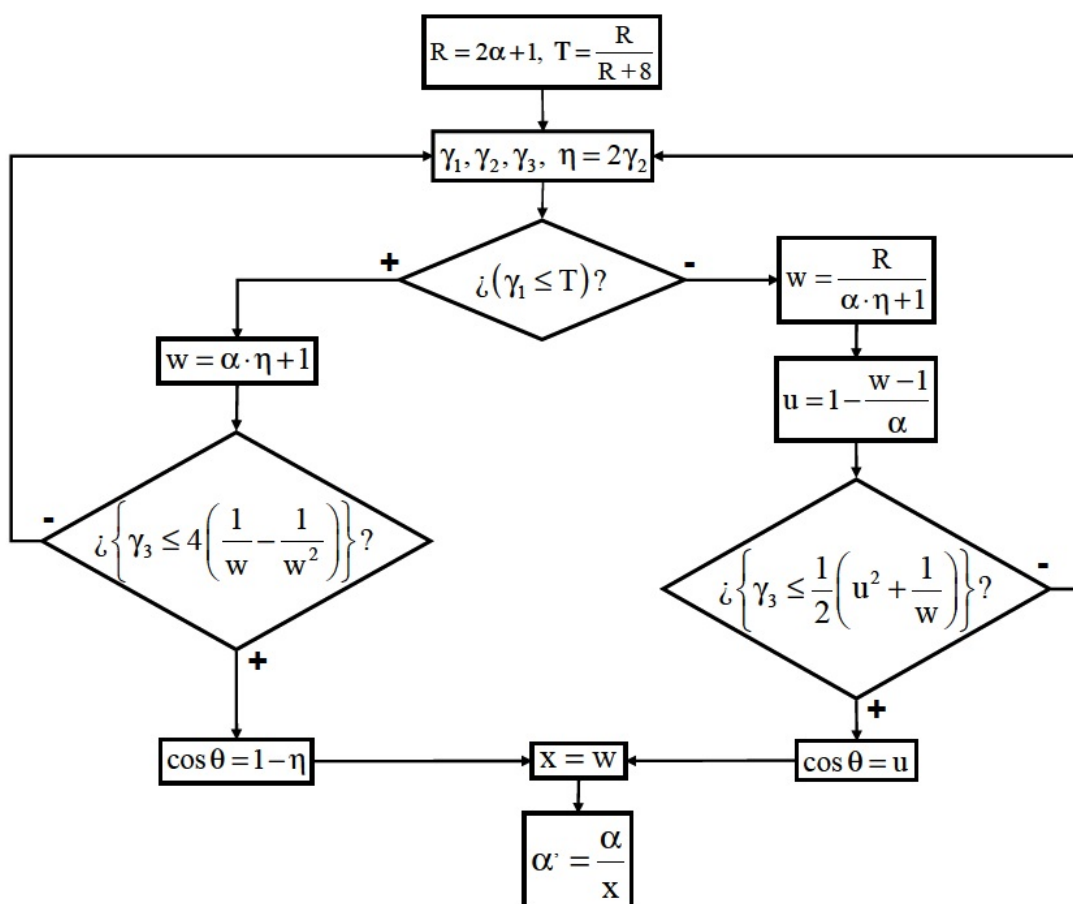


Figura 3.2: Diagrama de flujo del método de Kahn.

3.1.1.3. Método EGS (Electron Gamma Shower)

El proceso de muestreo del ángulo polar dispersado por efecto Compton del método EGS se presenta a continuación:

1. Calcular los parámetros que están en función de $h\nu$, pero no de ε , como: $h\nu_0$, ε_0 , α_1 y α_2 .
2. Muestrear ε de la siguiente forma: Sí $\alpha_1 \geq (\alpha_1 + \alpha_2) \cdot r_1$, utilizar $\varepsilon = \varepsilon_0 e^{\alpha_1 \cdot r_2}$. Sí no se cumple entonces utilizar $\varepsilon = \varepsilon_0 + (1 - \varepsilon_0)\varepsilon'$, donde ε' es determinada por

$$\varepsilon' = \max(r_3, r_4) \text{ si } h\nu_0 \geq (h\nu_0 + 1) \cdot r_2$$

ó desde

$$\varepsilon' = r_3 \text{ si no se cumple la condición anterior.}$$

3. Calcular t y la función de rechazo $g(\varepsilon)$. Sí r_4 (or r_5) $> g(\varepsilon)$, rechazar y volver al paso 2. (Hirayama and Namito, 2005)

El siguiente diagrama de flujo en la figura 3.5 muestra el algoritmo empleado por éste método:

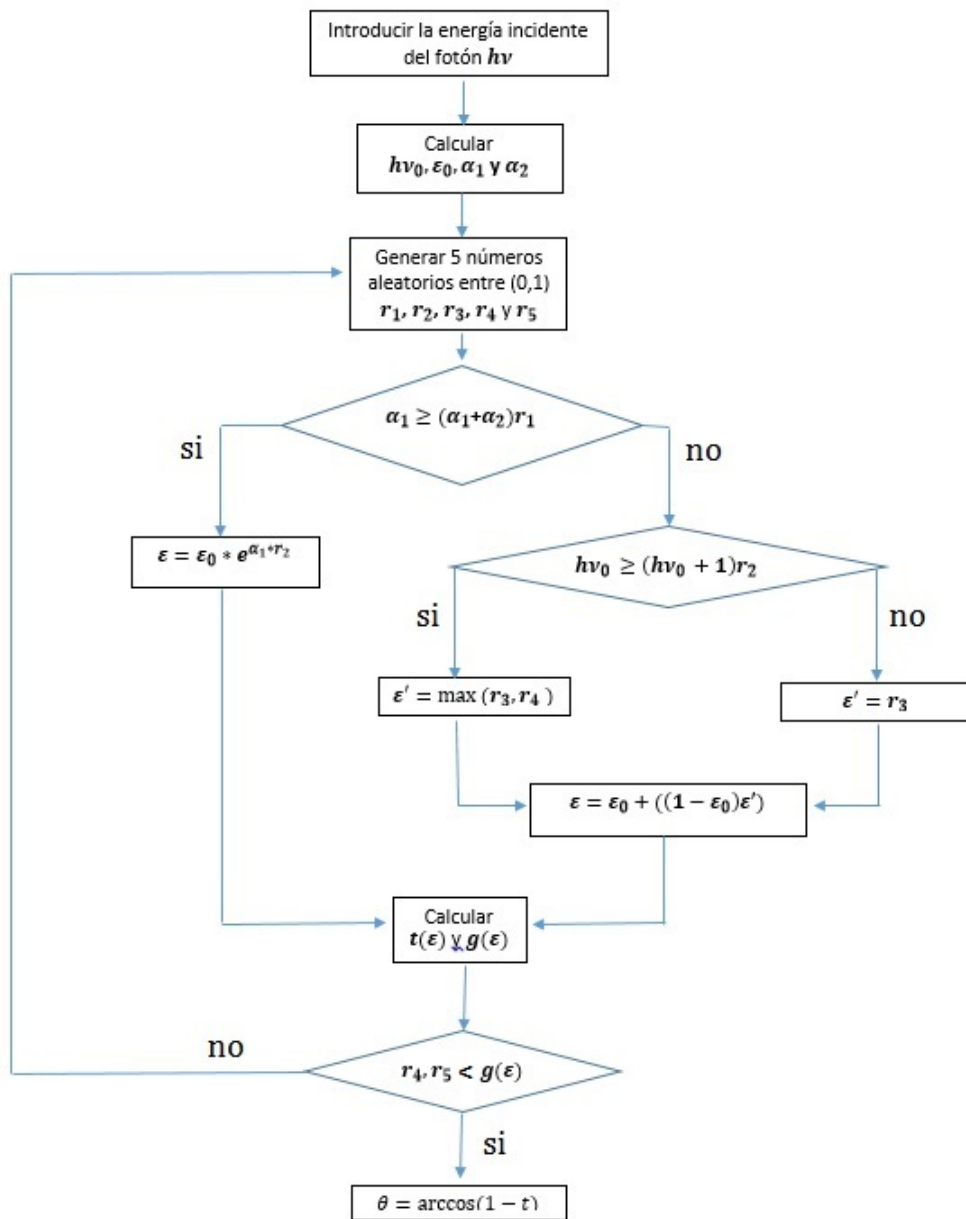


Figura 3.3: Diagrama de flujo del método de EGS.

3.1.1.4. Determinación del Mejor Método de Muestreo

Se establece cual es mejor método de muestreo tomando en cuenta las siguientes consideraciones:

1. Las distribuciones de frecuencias angulares proporcionadas por la simulación con el método de muestreo deben cubrir los 180° .
2. Las distribuciones de frecuencias angulares simuladas por el método de muestreo deben tener una distribución suave y poco invariante en su forma.
3. Independientemente del valor de la energía (específicamente pequeñas energías) se debe poder distinguir el intervalo angular con mayor probabilidad en la distribución angular.
4. El comportamiento de las distribuciones angulares deben estar en función de lo observado experimentalmente, de acuerdo a los datos que se tienen en la literatura donde se reportan algunas distribuciones para energía específica.

3.1.2. Simulación del ángulo polar por método semianalítico

Después de haber realizado la simulación del ángulo polar por los 3 métodos de muestreo que mencionados anteriormente se selecciona el más eficiente.

Se ajustan funciones analíticas a cada distribución de frecuencias del ángulo polar del fotón dispersado por efecto Compton, que nos proporciona el mejor método seleccionado, para distintas energías del fotón incidente, en éste caso, desde $h\nu = 1$ keV hasta 150 keV, cada 10 keV.

Por medio del $R_{Ajustado}^2$ se da validez al ajuste de cada función analítica a las distribuciones angulares. $R_{Ajustado}^2$ es un ajuste para el Coeficiente de Determinación (R^2) que te penaliza por los puntos que no encajan en el modelo. Si se agregan más y más variables inútiles a un modelo, $R_{Ajustado}^2$ se reducirá. Si agregan más variables útiles, $R_{Ajustado}^2$ se incrementará.

Hay una diferencia principal entre R^2 y el $R_{Ajustado}^2$: R^2 asume que cada variable individual explica la variación en la variable dependiente. El $R_{Ajustado}^2$ indica el porcentaje de variación de las variables

independientes que realmente afectan a la variable dependiente.

La ecuación para obtener R^2 es:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.1)$$

lo que significa que es la relación entre la suma de los cuadrados de los residuos (ó suma residual de cuadrados) y la suma total de cuadrados (proporcional a la varianza de los datos).

La ecuación para obtener $R_{Ajustado}^2$ es:

$$R_{Ajustado}^2 = 1 - \left[\frac{(1 - R^2)(n - 1)}{n - k} \right] \in (0, 1) \quad (3.2)$$

donde: n es el número de datos (tamaño de la muestra), k es el número total de regresores independientes, es decir, el número de datos que no encajan en el modelo.

Al tomar en cuenta el Coeficiente de Determinación Ajustado es posible corroborar que cada función elegida es la que más se ajusta a cada Distribución Angular, respectivamente.

Al estar seguros de la validez de cada función analítica ajustada, ahora cada una de ellas se convertirá en una Función de Densidad de Probabilidad (FDP) que se utilizará para el muestreo del ángulo polar con respecto a una energía dentro del intervalo que se ha determinado.

Para realizar el muestreo Monte Carlo, se debe considerar que este tiene tres vertientes: Método Directo, Método del Rechazo y Método Mixto, especificando que cada uno de ellos tiene sus propias condiciones sobre la FDP (dependiendo de las ventajas de su factorización o si es invertible), para que el método sea aplicable.

Con el método que haya aceptado la FDP, bajo sus condiciones se van a muestrear 100 millones de ángulos.

3.1.2.1. Aplicación del Método Directo

Ahora, se va a trabajar con cada Función Analítica Ajustada $[p(\theta)]$, la cual se convertirá en la Función de Densidad de Probabilidad (ó FDP).

Note que el número de total de intervalos en que se divide la Distribución Angular de Frecuencias (en el muestreo del ángulo polar con el mejor método) es 30, de 6° cada uno. Por lo tanto, cada θ resultante debe multiplicarse por 6 para obtener su valor en el rango $(0^\circ, 180^\circ)$.

Como se vio anteriormente, en el método directo, lo primero que se tiene que hacer es normalizar la función analítica ajustada que ahora es la FDP ó $p(\theta)$ a utilizar. Para este caso la normalización de la FDP se necesita de una constante N ya que la integral definida de $p(\theta)$ de 0 a 30 es igual a 100 (las distribuciones de frecuencias fueron graduadas de un 100%), es decir:

$$p(\theta)_{Normalizada} = N \cdot p(\theta), \quad (3.3)$$

donde $N = \frac{1}{100}$ es la constante de normalización.

Ahora, se obtiene la función de distribución de probabilidad acumulativa, $c(\theta)$, para ésto se integra la $p(\theta)_{Normalizada}$ de 0 a θ :

$$c(\theta) = \int_0^\theta p(\theta')_{Normalizada} d\theta' = r \in (0, 1),$$

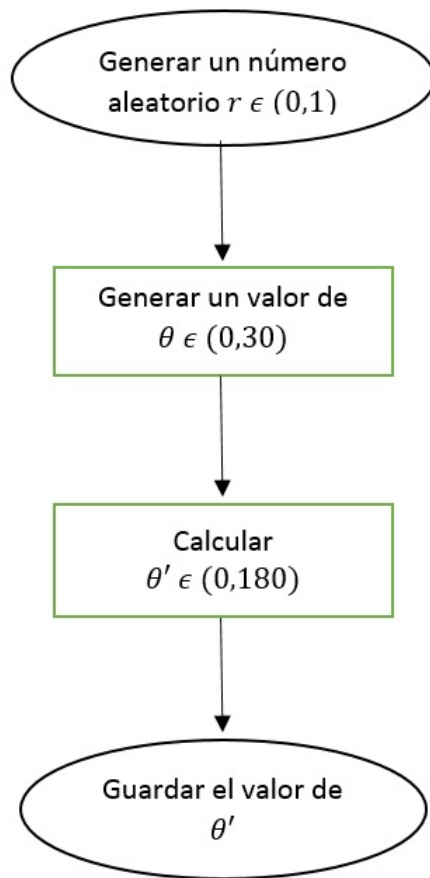
Para que el método directo sea exitoso, la función de distribución de probabilidad acumulativa, $c(\theta)$, debe ser invertible, por lo que significa que es posible despejar θ , es decir:

$$\theta = c^{-1}(r), \quad 0 \leq \theta \leq 30, \quad (3.4)$$

de este modo se realiza el muestreo de cada ángulo polar con respecto a un número aleatorio generado uniformemente entre 0 y 1. Y para obtener el valor de θ en grados:

$$\theta' = \theta \cdot 6, \quad 0^\circ \leq \theta' \leq 180^\circ. \quad (3.5)$$

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado por el método directo:



3.1.2.2. Aplicación del método de rechazo

1. Generar un número aleatorio $r_1 \in (0, 1)$.
2. Generar un ángulo, θ , con el número aleatorio:

$$\theta = 30 \cdot r_1. \quad (3.6)$$

3. Sustituir θ en $p(\theta)$.

4. Calcular

$$f(\theta) = \frac{p(\theta)}{p_{max}(\theta)}. \quad (3.7)$$

5. Generar un segundo número aleatorio $r_2 \in (0, 1)$.

6. Si $r_2 > f(\theta)$ regresar al paso 1. De lo contrario, aceptar θ cuyo valor en grados es:

$$\theta' = \theta \cdot 6, \quad 0^\circ \leq \theta' \leq 180^\circ. \quad (3.8)$$

Se obtiene el número esperado de las iteraciones que son necesarias para que una $\theta_{promedio}$ sea aceptada en ésta técnica del rechazo, y está definido como:

$$M = \frac{1}{p\left(r_2 \leq \frac{p(\theta_{promedio})}{p_{m\acute{a}x}(\theta)}\right)} \cdot \int_0^{30} p(\theta) d\theta, \quad 1 \leq M < \infty. \quad (3.9)$$

Esta es la relación entre la probabilidad del número total de los pares de números aleatorios empleados y la probabilidad del número esperado de los pares de números aleatorios que se aceptan, como una medida de la complejidad computacional del algoritmo, donde

$$p(\theta_{promedio}) = \frac{p_{m\acute{a}x}(\theta) + p(\theta_{m\acute{i}n})}{2}.$$

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado por el método del rechazo:

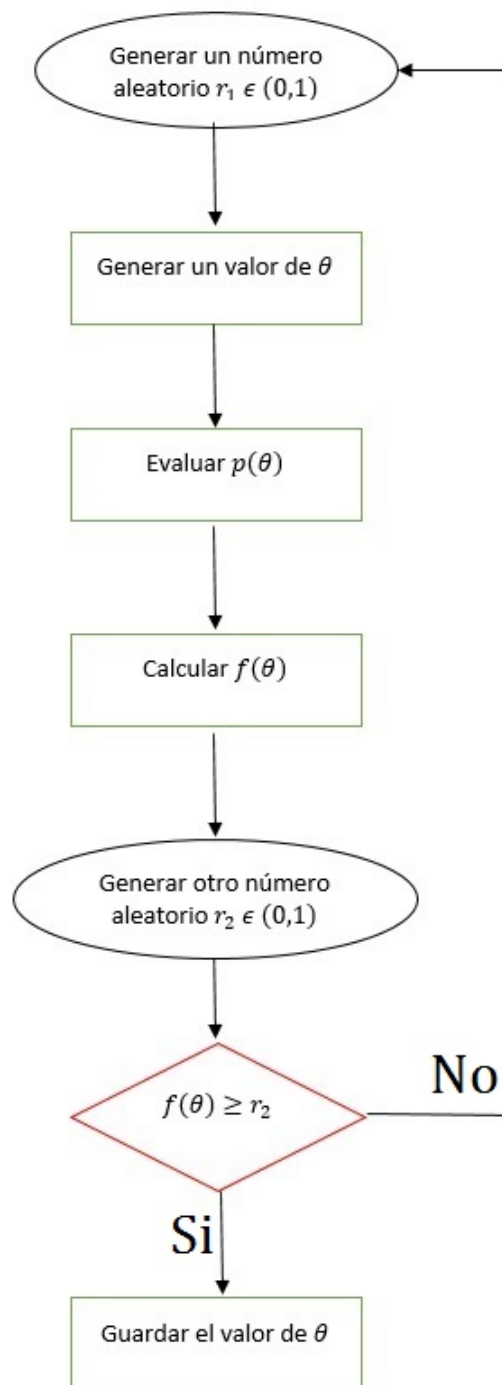


Figura 3.5: Diagrama de flujo del método del rechazo.

3.1.2.3. Aplicación del método mixto

Se normaliza la $p(\theta)$ y se factoriza de la forma más favorable:

$$p(\theta)_{Normalizada} = f(\theta) \cdot g(\theta), \quad (3.10)$$

se considera la parte "susceptible", la que tiene las condiciones necesarias para integrarla analíticamente y que sea una función invertible, en éste caso $f(\theta)$. Se integra la $f(\theta)$ de 0 a θ :

$$c(\theta) = \int_0^\theta f(\theta) d\theta', \quad (3.11)$$

la función de distribución de probabilidad acumulada, $c(\theta)$, se iguala a r_1 ,

$$r_1 = c(\theta), \quad 0 \leq r \leq \int_0^{30} f(\theta) d\theta \approx 1 \quad (3.12)$$

e invertida,

$$\theta = c^{-1}(r_1), \quad (3.13)$$

y ahora se tiene que muestrear, sustituyendo la θ generada con el número aleatorio en $g(\theta)$.

Se genera un segundo número aleatorio, r_2 , si se cumple que

$$r_2 \leq \frac{g(\theta)}{g_{\text{máx}}(\theta)}, \quad (3.14)$$

se aceptará el ángulo generado, de lo contrario, regresar a la ecuación (3.13).

El número de iteraciones para una $\theta_{promedio}$ para ésta técnica del rechazo está definida como:

$$M = \frac{1}{p \left[r_2 \leq \frac{g(\theta_{promedio})}{g_{\text{máx}}(\theta)} \right]} \cdot \int_0^{\int_0^{30} f(\theta)d\theta} g(\theta) d\theta, \quad 1 \leq M < \infty. \quad (3.15)$$

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado por el método mixto:

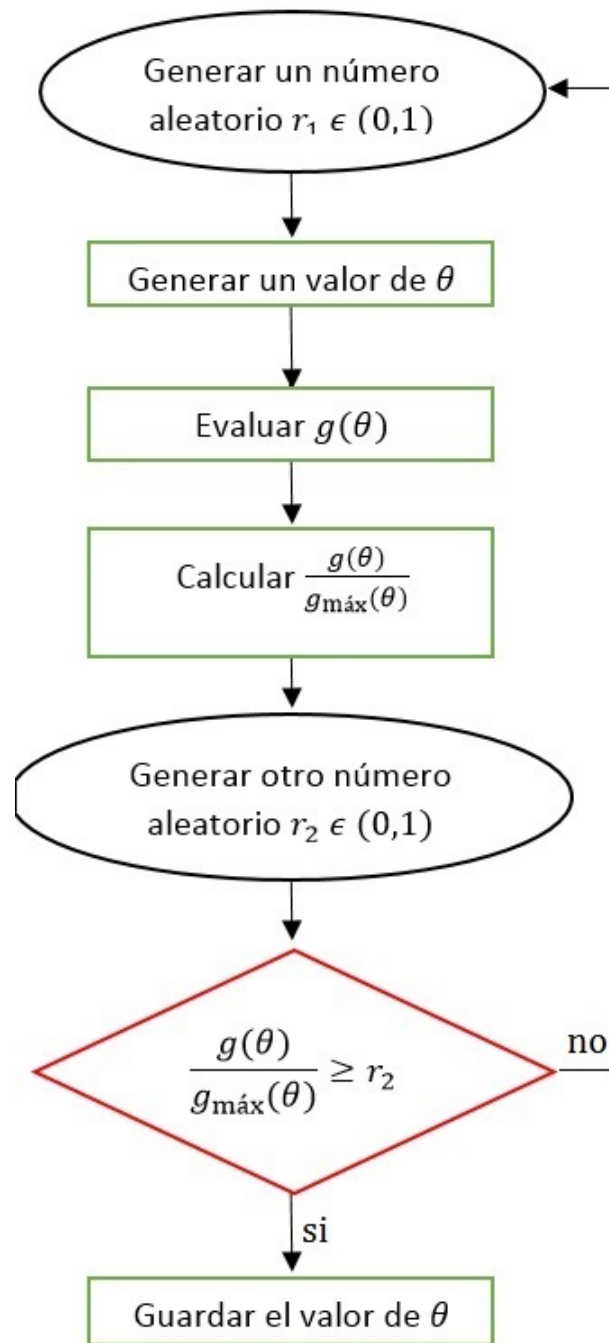


Figura 3.6: Diagrama de flujo del método mixto.

3.1.3. Comparación en la Rapidez de la Generación del Ángulo Polar

3.1.3.1. Tiempos y Exactitud de los Métodos de Muestreo

Ahora, se mide el tiempo de simulación de cada método de muestreo, (Kahn, EGS y Clásico), es decir, cuánto se tarda cada uno en generar 100,000,000 millones de historias (ángulos).

Se repite esta medición de tiempo treinta veces (30 rutinas) y se obtiene el promedio de tiempo de las rutinas para cada método.

Obteniendo estos resultados se vuelven a comparar los tres métodos, y nuevamente se selecciona cual es el más exacto ahora considerando también tanto sus tiempos de rutina como sus distribuciones angulares.

3.1.3.2. Tiempo de Método Semianalítico

Se mide el tiempo de simulación del muestreo por funciones analíticas ajustadas al generar 100,000,000 millones de ángulos. De igual forma se obtiene el promedio de tiempo de treinta rutinas.

3.1.3.3. Comparación

Una vez analizado los tiempos y exactitud de los tres métodos de muestreo y el tiempo del método semianalítico se compara y se observa si fue conveniente el empleo de funciones analíticas ajustables o es mejor seguir utilizando los métodos tradicionales para muestrear el ángulo polar de dispersión del fotón por efecto Compton.

3.2. MUESTREO DEL ÁNGULO AZIMUTAL DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON

Se muestrea la distribución del ángulo azimutal (ϕ) y se construyen las FDP's del ángulo azimutal para determinar su dependencia

con la energía.

FOTONES NO POLARIZADOS (DISTRIBUCIÓN ISOTRÓPICA)

Para fotones no polarizados la distribución angular en la dirección azimutal del fotón dispersado se considera isotrópica. El ángulo azimutal se genera de manera uniforme en el intervalo $(0, 2\pi)$. Es decir:

$$\phi = 2\pi \cdot r. \quad (3.16)$$

donde r es un número aleatorio uniformemente distribuido entre $(0,1)$.

FOTONES POLARIZADOS (DISTRIBUCIÓN ANISOTRÓPICA)

Para fotones polarizados linealmente se considera la dispersión Compton de rayos gamma (fotones) polarizados linealmente. La sección eficaz diferencial Klein-Nishina para fotones polarizados es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{4} \cdot \left[\frac{h\nu}{h\nu'} + \frac{h\nu'}{h\nu} - 2 + 4 \cos^2 \Theta \right] \quad (3.17)$$

donde Θ es el ángulo entre los dos vectores de polarización. En términos del ángulo polar y del ángulo azimutal (θ, ϕ) ésta sección eficaz puede ser escrita como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \cdot \left[\frac{h\nu}{h\nu'} + \frac{h\nu'}{h\nu} - 2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta \right] \quad (3.18)$$

La integración de esta sección transversal sobre el ángulo azimutal produce la sección transversal estándar. La distribución angular y de energía son obtenidas de la misma manera que para el proceso estándar. Utilizando estos valores para el ángulo polar y la energía, el ángulo azimutal es muestreado de la siguiente distribución:

$$p(\phi) = 1 - \frac{a}{b} \cos^2(\phi) \quad (3.19)$$

donde $a = \sin^2 \theta$ y $b = \varepsilon + 1/\varepsilon$. ε es la relación entre la energía de los fotones dispersos y la energía incidente de fotones, $\frac{h\nu'}{h\nu}$. (Heitler,

1954)

Tomar en cuenta la normalización de la función (3.19):

$$\int_0^{2\pi} p(\phi)_{Normalizada} d\phi = N \cdot \int_0^{2\pi} 1 - \frac{a}{b} \cos^2(\phi) d\phi = 1, \quad (3.20)$$

donde $N = \frac{1}{\left(2 - \frac{a}{b}\right) \cdot \pi}$ es la constante de normalización:

$$p(\phi)_{Normalizada} = \frac{\left[1 - \frac{a}{b} \cos^2(\phi)\right]}{\left(2 - \frac{a}{b}\right) \cdot \pi}. \quad (3.21)$$

Al integrar (3.21) de 0 a θ se tiene la función de distribución acumulativa:

$$c(\phi) = r = \frac{2a\phi + a \sin(2\phi) - 4b\phi}{4\pi(a - 2b)}. \quad (3.22)$$

La aplicación del método directo para el cálculo del ángulo azimutal en fotones polarizados no es posible debido a que la función de distribución acumulativa no es invertible. Por lo tanto se opta por el método del rechazo.

3.2.1. Simulación del Ángulo Azimutal por Método Directo (Fotones No Polarizados)

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado para generar el ángulo azimutal por el método del directo para fotones no polarizados:

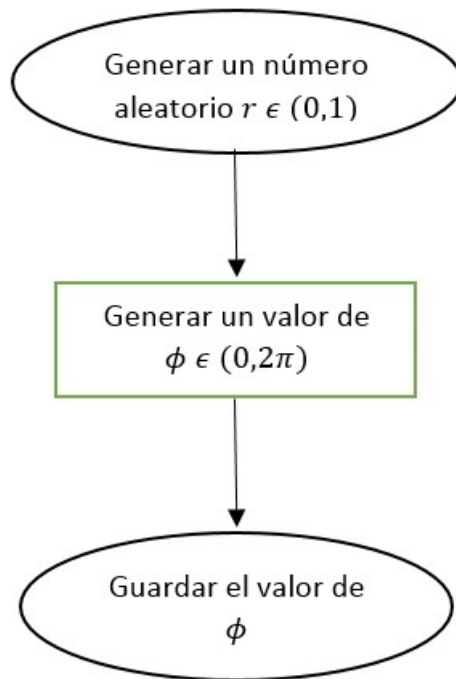


Figura 3.7: Diagrama de flujo para generar el ángulo azimutal con el método del directo para fotones no polarizados.

3.2.2. Simulación del Ángulo Azimutal por Método del Rechazo (Fotones Polarizados)

Se muestrea el ángulo azimutal del fotón de dispersión polarizado linealmente haciendo uso del Método del Rechazo con la función (3.21), de la siguiente forma:

1. Utilizar el valor del ángulo polar (θ) con mayor probabilidad para determinada energía, $h\nu$. Obteniendo ésta información del muestreo del ángulo polar con el mejor método que se haya elegido.
2. Calcular $h\nu'$ con la ecuación (2.5), a y b .
3. Generar un número aleatorio $r_1 \in (0, 1)$.
4. Generar un ángulo $\phi \in (0, 2\pi)$, con el número aleatorio de la siguiente forma:

$$\phi = (2\pi) \cdot r_1. \quad (3.23)$$

5. Sustituir ϕ en

$$p(\phi)_{Normalizada} = \frac{\left[1 - \frac{a}{b} \cos^2(\phi)\right]}{\left(2 - \frac{a}{b}\right) \cdot \pi}. \quad (3.24)$$

la función (3.24) tiene dos máximos en $\phi = \pi/2$ y en $\phi = 3\pi/2$.

6. Calcular

$$f(\phi) = \frac{p(\phi)_{Normalizada}}{p_{\text{máx}}(\phi)_{Normalizada}}, \quad (3.25)$$

donde

$$p_{\text{máx}}(\phi)_{Normalizada} = \frac{1}{\left(2 - \frac{a}{b}\right) \cdot \pi}. \quad (3.26)$$

7. Generar un segundo número aleatorio $r_2 \in (0, 1)$.

8. Si $r_2 > f(\phi)$ regresar al paso 3. De lo contrario, aceptar ϕ .

El siguiente diagrama de flujo muestra el algoritmo empleado para generar el ángulo azimutal por el método del rechazo:

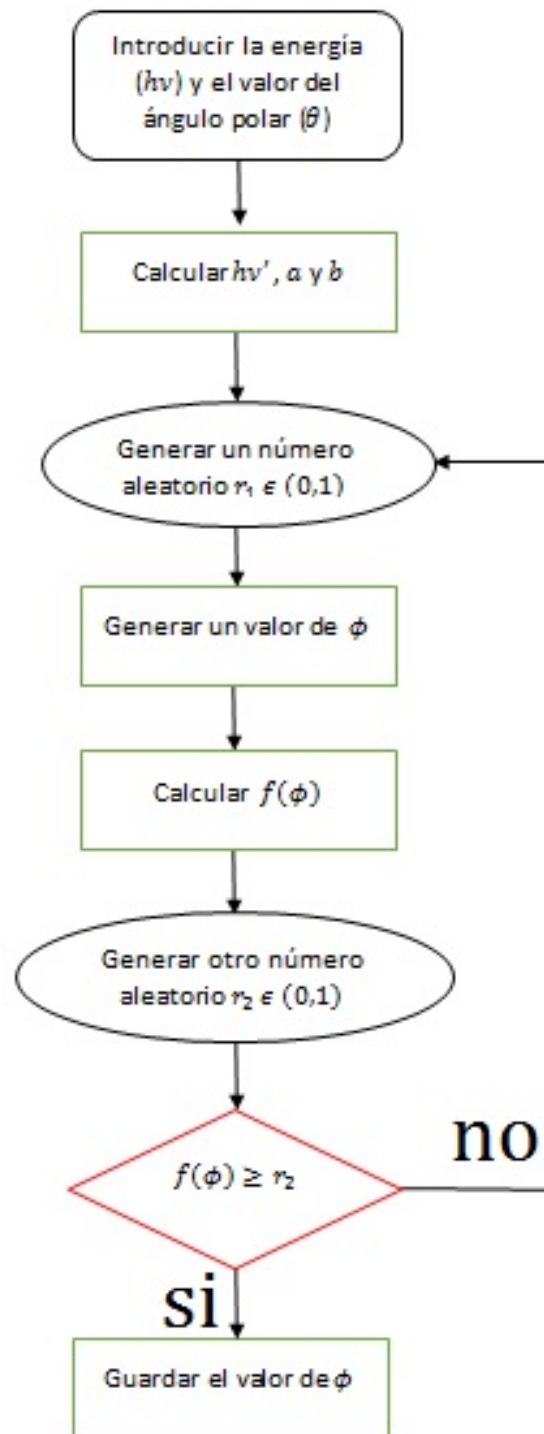


Figura 3.8: Diagrama de flujo para generar el ángulo azimutal con el método del rechazo para fotones polarizados linealmente.

Capítulo 4

RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1. MUESTREO DEL ÁNGULO POLAR DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON

Para la simulación del ángulo polar se usaron los tres algoritmos de los métodos de muestreo (Clásico, Kahn, EGS) mencionados en el capítulo anterior. Los algoritmos se realizaron a través del lenguaje C++ en el IDE Microsoft Visual C++ 2006.

4.1.1. Simulación del ángulo polar por 3 métodos conocidos

El algoritmo más comunmente utilizado para generar números aleatorios es el de *congruencia lineal* que se enuncia de la forma siguiente:

$$r_k = (\text{multiplicador} * r_{k-1} + \text{incremento}) \% \text{modulo}, \quad (4.1)$$

se observa que cada número es una secuencia, y esta es llamada secuencia pseudoaleatoria, ya que cada número generado depende del anterior generado y tiene como semilla el tiempo del reloj interno de la computadora.

Para la generación de números aleatorios distribuidos uniformemente entre 0 y 1 que nos piden los métodos se utilizó una función

que se basa del algoritmo de *congruencia lineal*. (Ceballos, 2004)

La función no causa desbordamiento en un ordenador que admita un rango de enteros de -2^{31} a $2^{31} - 1$ y es la siguiente:

```
double rnd(long& random)
{
    random=(25173*random+13849)%65536;
    return static_cast<double>(random)/65535;
}
```

4.1.1.1. Método Clásico

Se simularon 100,000,000 de ángulos con el Método Clásico para cada energía (desde 1 keV hasta 150 de 10 en 10 keV). Y se seleccionaron dentro de 30 intervalos, como se muestra en la figura:

```

PROGRAMA PARA GENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO CLASICO

Ingrese el Numero de Angulos que Desea Generar:
100000000

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frec. con Rango[0,180]:
30

Frecuencias en (0,6) = 550384
Frecuencias en (6,12) = 1.64501e+006
Frecuencias en (12,18) = 2.71824e+006
Frecuencias en (18,24) = 3.767e+006
Frecuencias en (24,30) = 4.7699e+006
Frecuencias en (30,36) = 5.72082e+006
Frecuencias en (36,42) = 6.6075e+006
Frecuencias en (42,48) = 7.427e+006
Frecuencias en (48,54) = 8.16086e+006
Frecuencias en (54,60) = 8.80294e+006
Frecuencias en (60,66) = 9.35331e+006
Frecuencias en (66,72) = 9.7967e+006
Frecuencias en (72,78) = 1.01361e+007
Frecuencias en (78,84) = 1.03623e+007
Frecuencias en (84,90) = 1.01819e+007
Frecuencias en (90,96) = 0
Frecuencias en (96,102) = 0
Frecuencias en (102,108) = 0
Frecuencias en (108,114) = 0
Frecuencias en (114,120) = 0
Frecuencias en (120,126) = 0
Frecuencias en (126,132) = 0
Frecuencias en (132,138) = 0
Frecuencias en (138,144) = 0
Frecuencias en (144,150) = 0
Frecuencias en (150,156) = 0
Frecuencias en (156,162) = 0
Frecuencias en (162,168) = 0
Frecuencias en (168,174) = 0
Frecuencias en (174,180) = 0

Tiempo de la rutina : 275.825 segundos

```

Figura 4.1: Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Clásico para la energía de 1 keV.

A continuación se muestran algunas distribuciones angulares para ciertas energías:

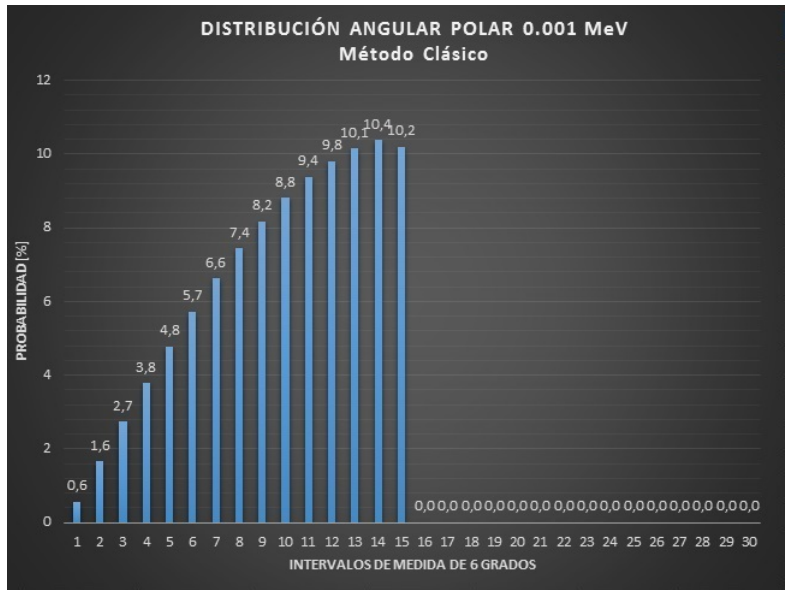


Figura 4.2: Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 1 keV.

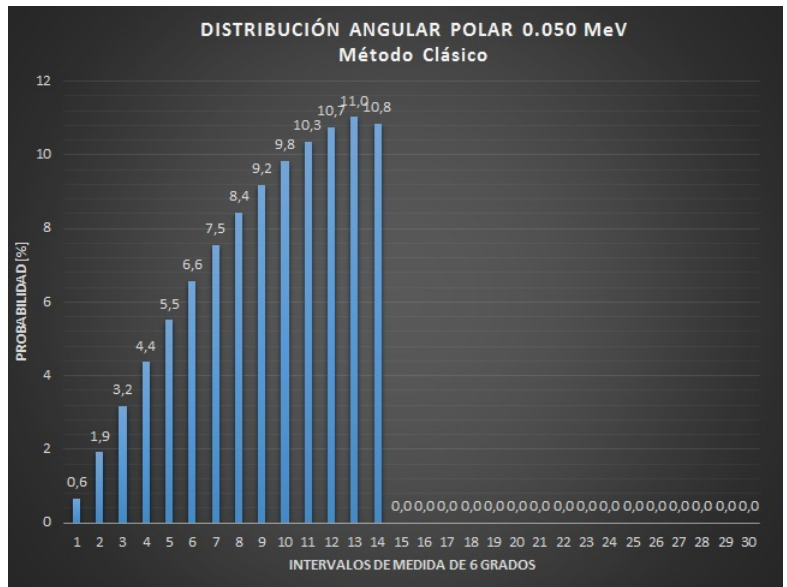


Figura 4.3: Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 50 keV.

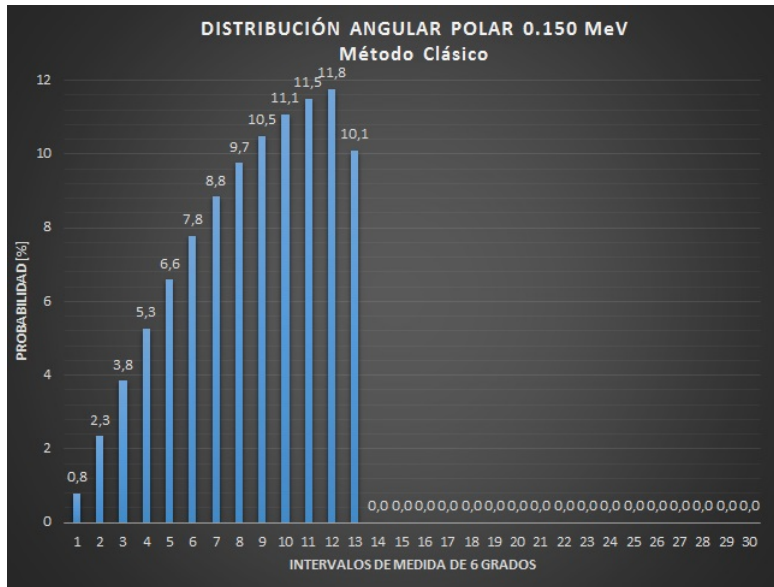


Figura 4.4: Distribución angular polar por el Método Clásico para la energía de 150 keV.

4.1.1.2. Método de Kahn

Se simularon 100,000,000 de ángulos con el Método Kahn para cada energía (desde 1 keV hasta 150 de 10 en 10 keV). Y se seleccionaron dentro de 30 intervalos, como se muestra en la figura:

```

PROGRAMA PARA GENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO KAHN

Ingrese el Numero de Angulos que Desea Generar:
10000000

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frec. con Rango[0,180]:
30

Frecuencias en (0,6) = 415140
Frecuencias en (6,12) = 1.22734e+006
Frecuencias en (12,18) = 1.96993e+006
Frecuencias en (18,24) = 2.61198e+006
Frecuencias en (24,30) = 3.19985e+006
Frecuencias en (30,36) = 3.63563e+006
Frecuencias en (36,42) = 3.99143e+006
Frecuencias en (42,48) = 4.21578e+006
Frecuencias en (48,54) = 4.25703e+006
Frecuencias en (54,60) = 4.25959e+006
Frecuencias en (60,66) = 4.23383e+006
Frecuencias en (66,72) = 4.17968e+006
Frecuencias en (72,78) = 4.03525e+006
Frecuencias en (78,84) = 3.96307e+006
Frecuencias en (84,90) = 4.01208e+006
Frecuencias en (90,96) = 3.90636e+006
Frecuencias en (96,102) = 3.92955e+006
Frecuencias en (102,108) = 4.04045e+006
Frecuencias en (108,114) = 4.08686e+006
Frecuencias en (114,120) = 4.15391e+006
Frecuencias en (120,126) = 4.23639e+006
Frecuencias en (126,132) = 4.30341e+006
Frecuencias en (132,138) = 4.14358e+006
Frecuencias en (138,144) = 3.94245e+006
Frecuencias en (144,150) = 3.58918e+006
Frecuencias en (150,156) = 3.18693e+006
Frecuencias en (156,162) = 2.66352e+006
Frecuencias en (162,168) = 1.98799e+006
Frecuencias en (168,174) = 1.21703e+006
Frecuencias en (174,180) = 404800

Tiempo de la rutina : 173.518 segundos

```

Figura 4.5: Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.

A continuación se muestran algunas distribuciones angulares para ciertas energías:

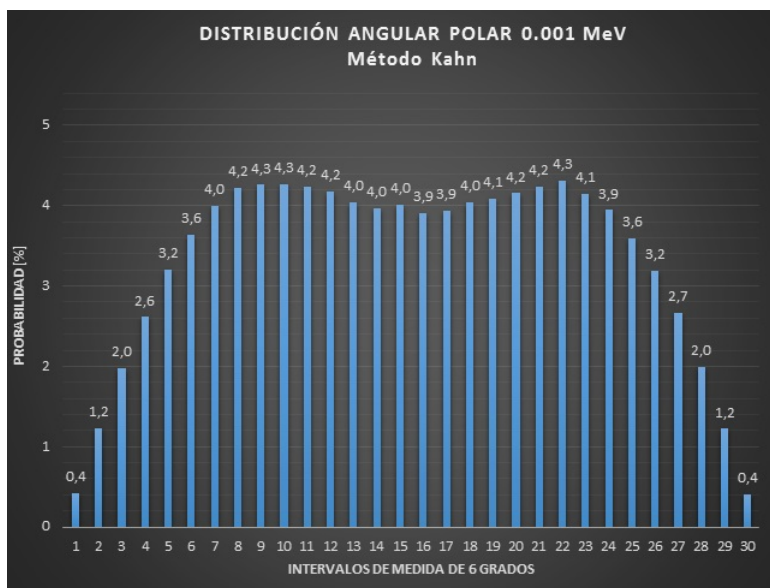


Figura 4.6: Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.

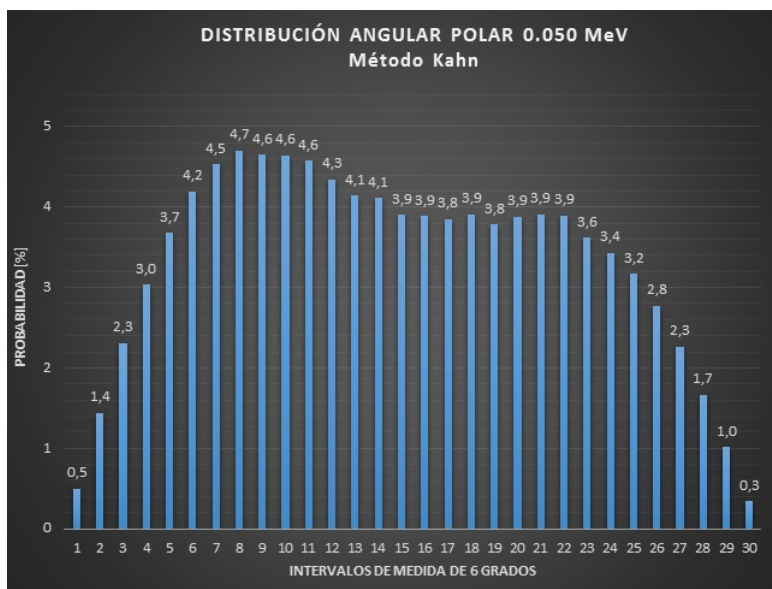


Figura 4.7: Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 50 keV.

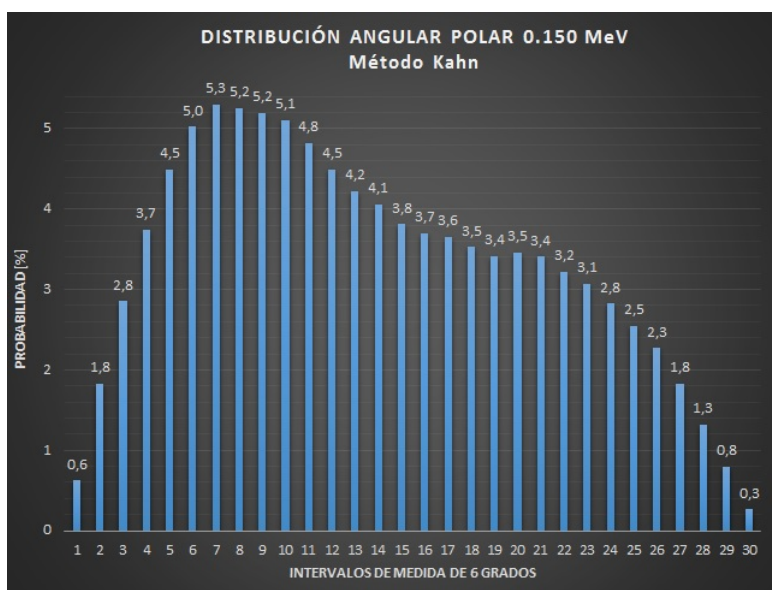


Figura 4.8: Distribución angular polar por el Método Kahn para la energía de 150 keV.

4.1.1.3. Método EGS (Electron Gamma Shower)

Se simularon 100,000,000 de ángulos con el Método EGS (Electron Gamma Shower) para cada energía (desde 1 keV hasta 150 de 10 en 10 keV). Y se seleccionaron dentro de 30 intervalos, como se muestra en la figura:

```

PROGRAMA PARA GENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO EGS

Ingrese el Numero de Angulos que Desea Generar:
100000000

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frec. con Rango[0,180]:
30

Frecuencias en (0,6) = 271606
Frecuencias en (6,12) = 823970
Frecuencias en (12,18) = 1.35496e+006
Frecuencias en (18,24) = 1.88295e+006
Frecuencias en (24,30) = 2.38951e+006
Frecuencias en (30,36) = 2.85642e+006
Frecuencias en (36,42) = 3.302e+006
Frecuencias en (42,48) = 3.71399e+006
Frecuencias en (48,54) = 4.0726e+006
Frecuencias en (54,60) = 4.39759e+006
Frecuencias en (60,66) = 4.67223e+006
Frecuencias en (66,72) = 4.89656e+006
Frecuencias en (72,78) = 5.0598e+006
Frecuencias en (78,84) = 5.17273e+006
Frecuencias en (84,90) = 5.22616e+006
Frecuencias en (90,96) = 5.22307e+006
Frecuencias en (96,102) = 5.16969e+006
Frecuencias en (102,108) = 5.05068e+006
Frecuencias en (108,114) = 4.88282e+006
Frecuencias en (114,120) = 4.65393e+006
Frecuencias en (120,126) = 4.37776e+006
Frecuencias en (126,132) = 4.06189e+006
Frecuencias en (132,138) = 3.68498e+006
Frecuencias en (138,144) = 3.28217e+006
Frecuencias en (144,150) = 2.84727e+006
Frecuencias en (150,156) = 2.36512e+006
Frecuencias en (156,162) = 1.86767e+006
Frecuencias en (162,168) = 1.34736e+006
Frecuencias en (168,174) = 813303
Frecuencias en (174,180) = 279227

Tiempo de la rutina : 181.258 segundos

```

Figura 4.9: Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Kahn para la energía de 1 keV.

A continuación se muestran algunas distribuciones angulares para ciertas energías:

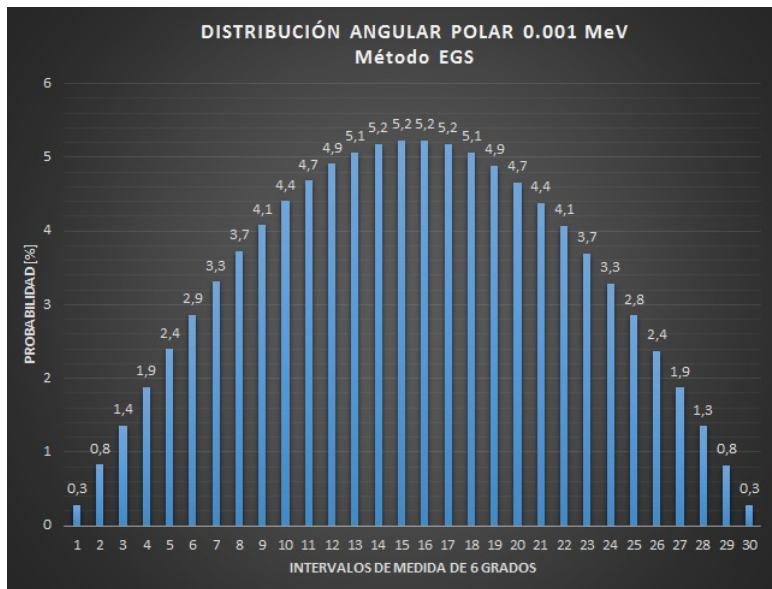


Figura 4.10: Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 1 keV.

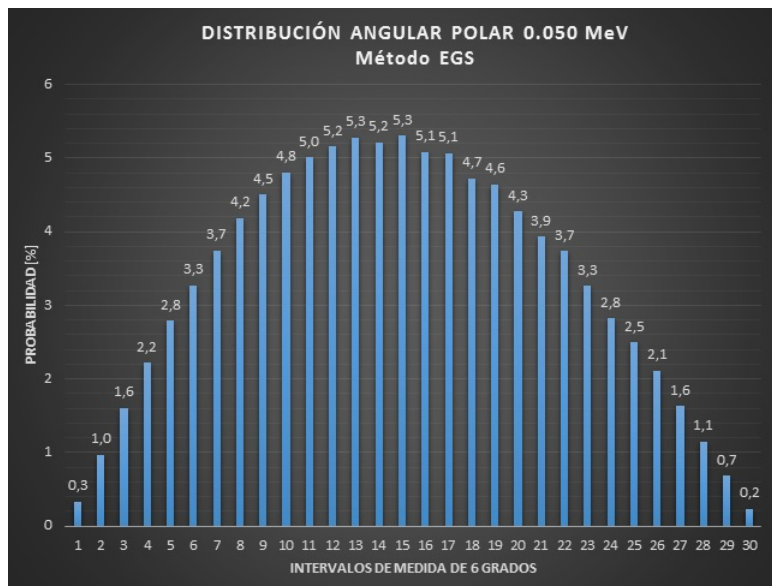


Figura 4.11: Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 50 keV.

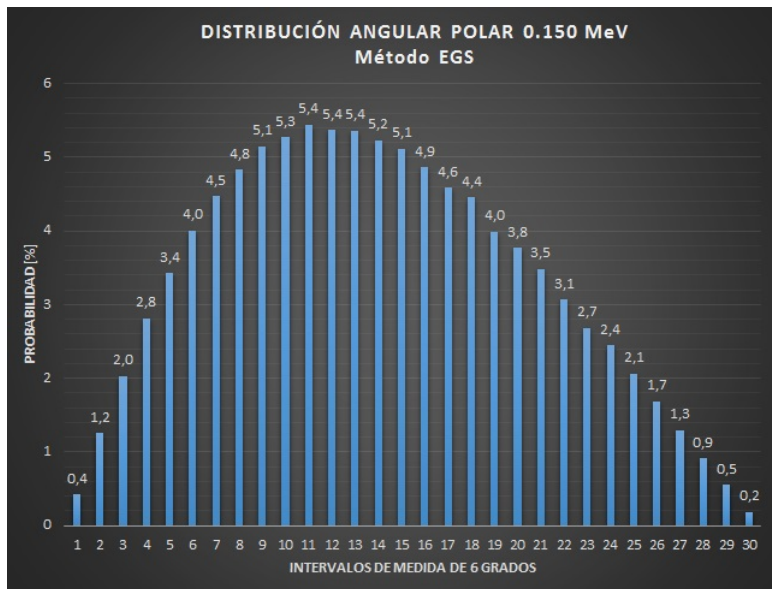


Figura 4.12: Distribución angular polar por el Método EGS para la energía de 150 keV.

4.1.1.4. Determinación del Mejor Método de Muestreo

La comparación entre las distribuciones del ángulo polar por dispersión Compton de los 3 métodos se observa en las siguientes gráficas:

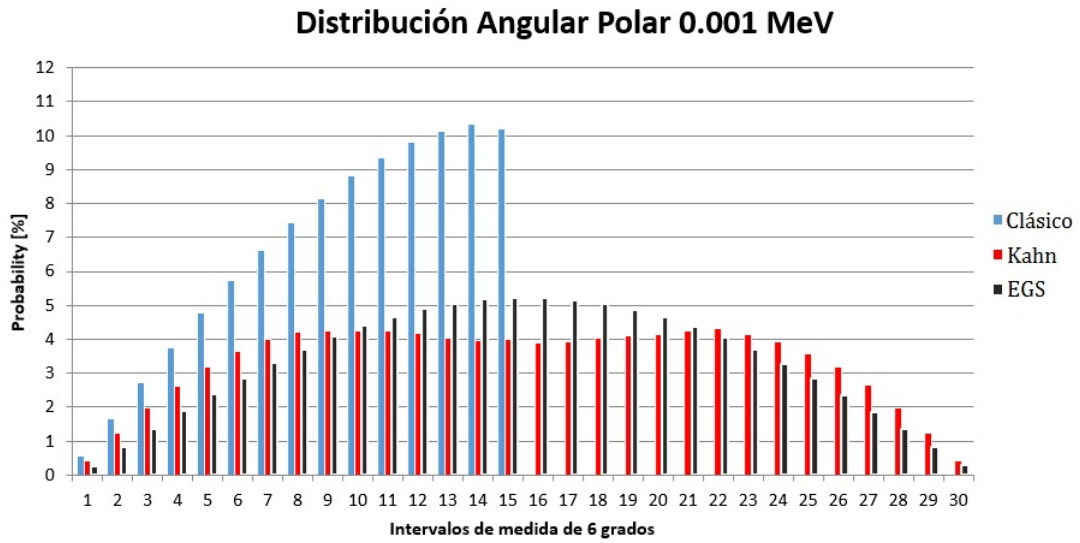


Figura 4.13: Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 1 keV.

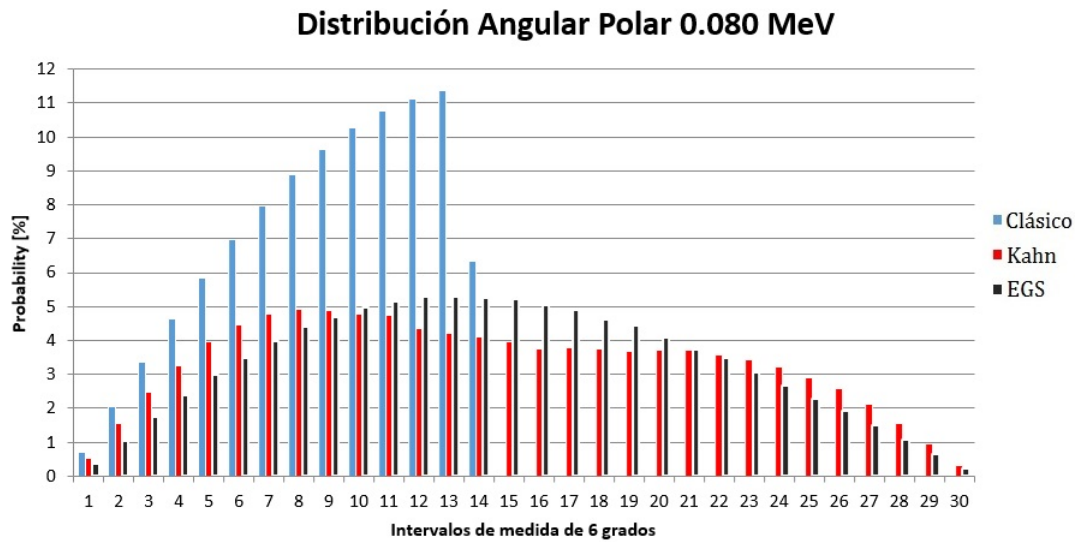


Figura 4.14: Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 80 keV.

Distribución Angular Polar 0.150 MeV

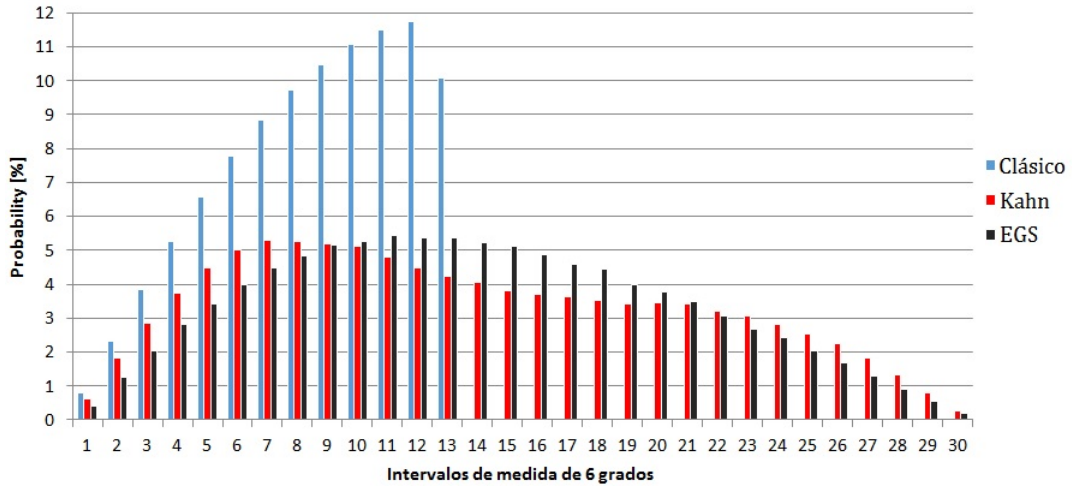


Figura 4.15: Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 150 keV.

Distribución Angular Polar 0.711 MeV

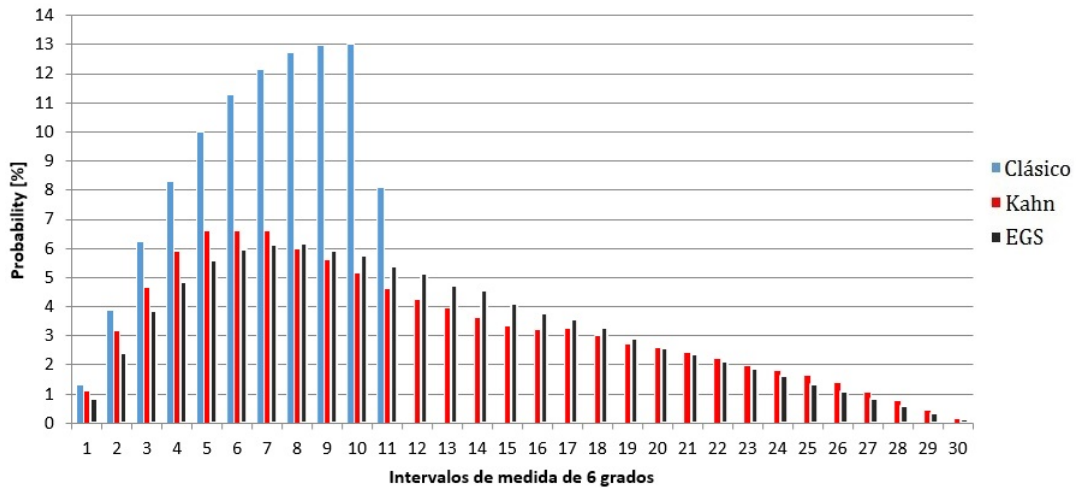


Figura 4.16: Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 711 keV.

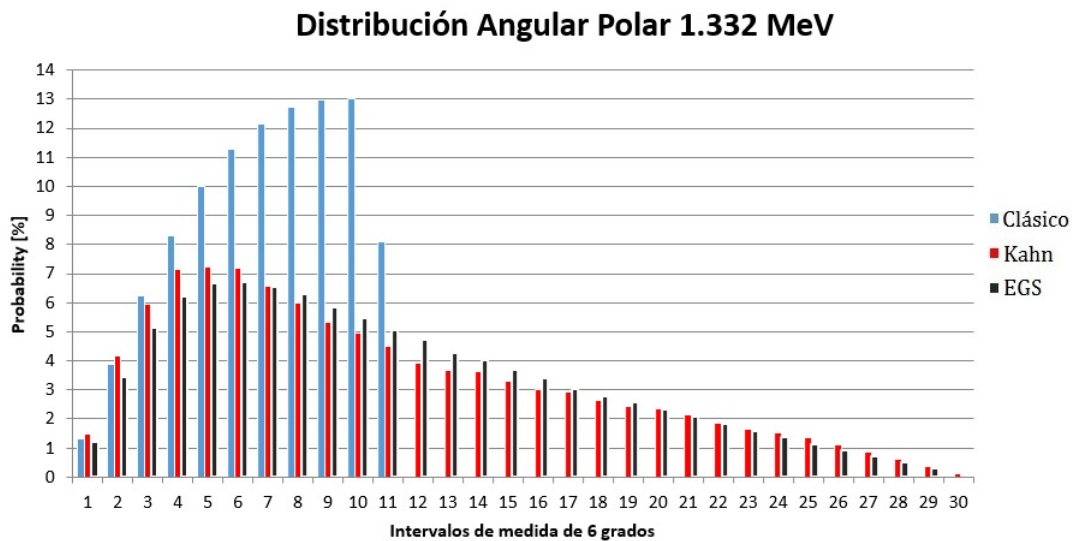


Figura 4.17: Distribución del ángulo polar de dispersión en 30 intervalos de 6 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 1332 keV.

De acuerdo a las consideraciones que se explican en el capítulo anterior, el mejor método para el muestreo del ángulo polar de dispersión por efecto Compton es el Método EGS ya que el comportamiento de las distribuciones angulares conforme el aumento de la energía es suave y consistente, abarca el rango de los 180° , se puede visualizar mas fácilmente el intervalo con mayor probabilidad que con los otros métodos de muestreo (Clásico y Kahn) en energías pequeñas y en función de lo observado experimentalmente (ver figura 4.18) el método EGS es el más preciso.

La siguiente figura muestra la distribución angular de los fotones y electrones dispersados en el interior de un detector, como resultado de múltiples interacciones, por fotones incidentes con energías iniciales de 80, 711 y 1332 keV:

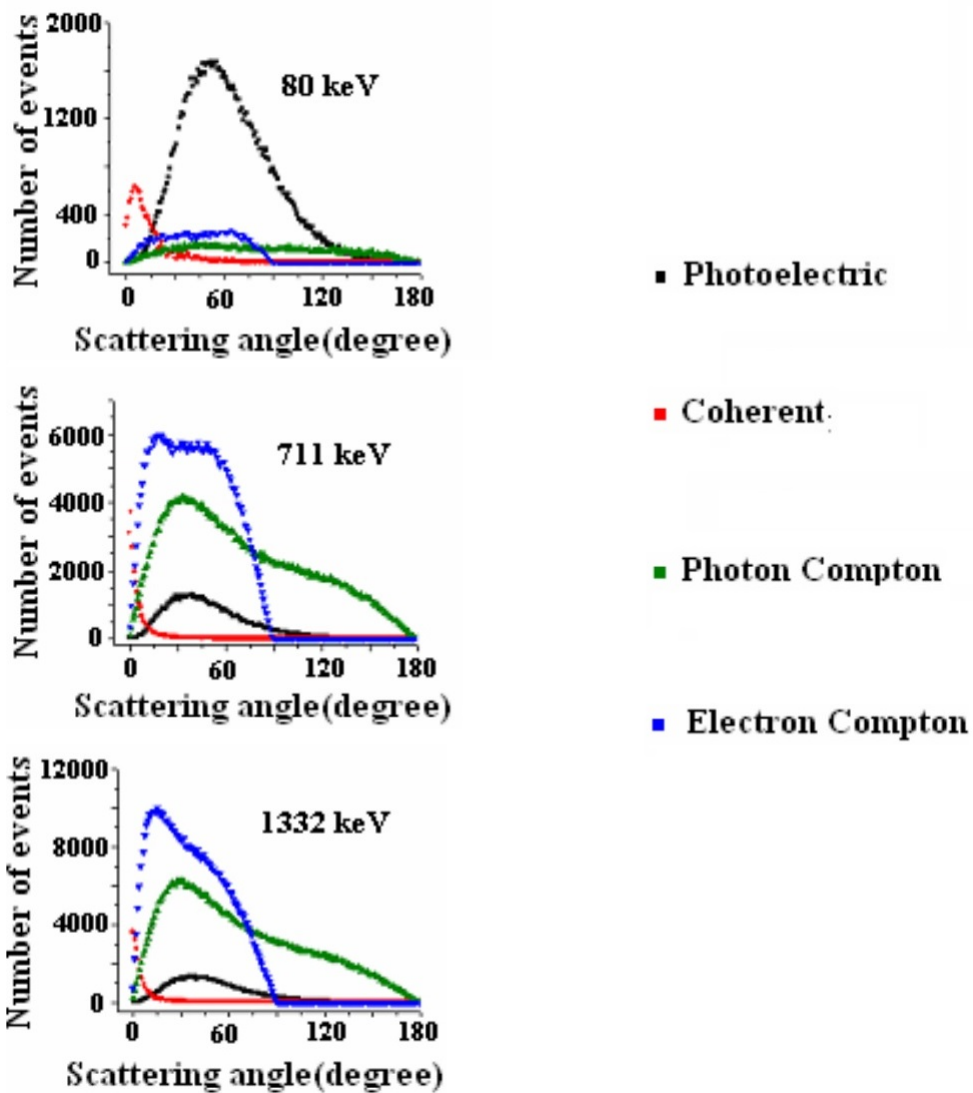


Figura 4.18: Distribuciones angulares de rayos gamma y electrones dispersados dentro de un detector para fotones incidentes de 80, 711 y 1332 keV. (Venturinia et al., 2007)

Es posible corroborar el comportamiento y la precisión de las distribuciones angulares del EGS al observar la distribuciones angulares de color verde (Photon Compton) en la figura anterior.

Se obtuvo el valor promedio del intervalo con mayor número de frecuencia para determinadas energías (80 keV, 711 keV y 1332 keV)

se comparó con el valor aproximado del ángulo más probable de los datos experimentales.

Promedio del Intervalo Angular con Mayor Probabilidad				
Energía (keV)	Experimental (°)	Clásico (°)	Kahn (°)	EGS (°)
80	≈57	75 (=57+ 18)	45 (=57- 12)	69 (=57+ 9)
711	≈39	57 (=39+ 18)	33 (=39- 6)	45 (=39+ 6)
1332	≈33	45 (=33+ 12)	27 (=33- 6)	33 (=33+ 0)

Cuadro 4.1: Valor promedio del intervalo angular con mayor probabilidad. Los números en **negritas** refieren a cuán lejos de los valores reales (experimentales) se encuentran los valores muestreados más probables.

Se promediaron los valores en **negritas** del cuadro 4.1 y se obtuvo la desviación experimental para cada método.

Desviación Experimental Promedio de cada Método		
Clásico (°)	Kahn (°)	EGS (°)
± 16	± 8	± 5

Cuadro 4.2: Desviaciones experimentales angulares de las distribuciones dadas por los métodos de muestreo.

Y para asegurarse que los algoritmos de cada método se emplearon de forma correcta, se observa la figura 4.19 y se compara con la figura 4.20.

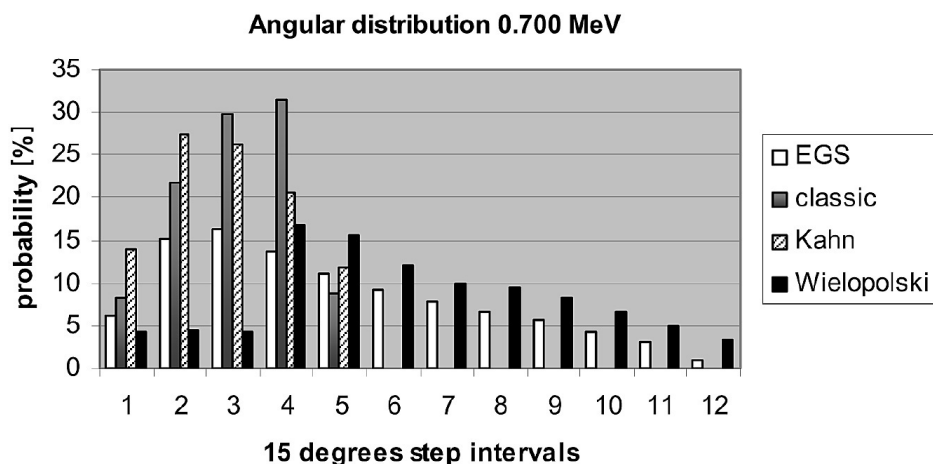


Figura 4.19: Distribución del ángulo polar de dispersión en 12 intervalos de 15 grados que cubren el rango de 0 a 180 grados mediante el uso de diferentes algoritmos. (Fulea et al., 2009)

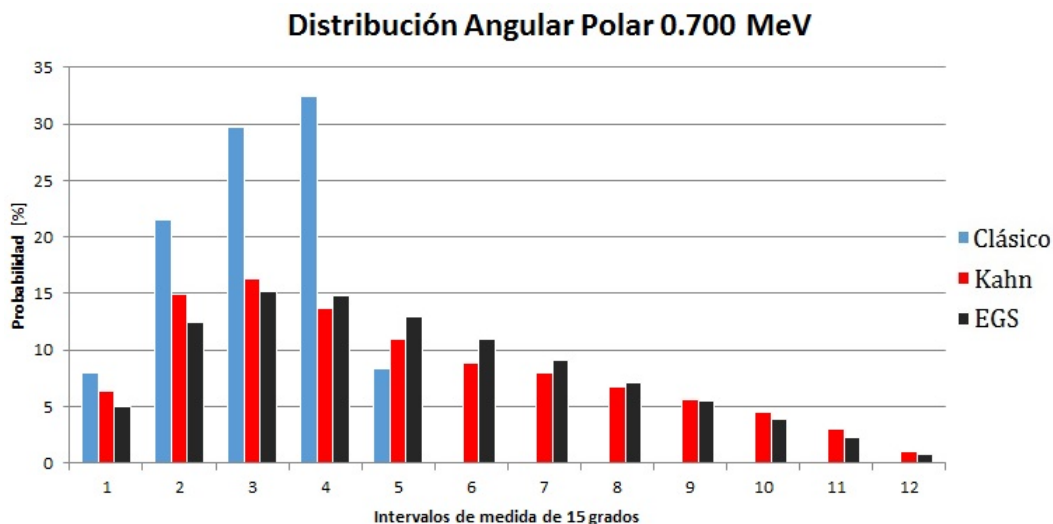
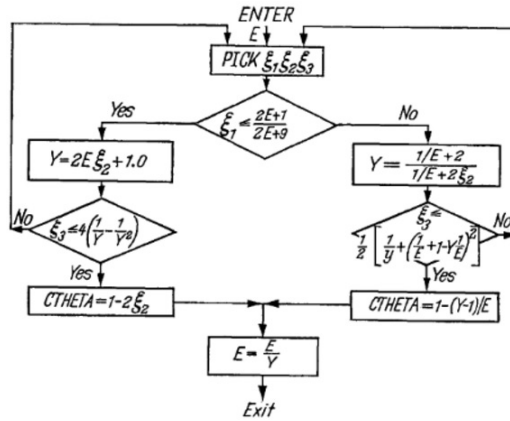


Figura 4.20: Distribución del ángulo polar de dispersión en 12 intervalos de 15 grados cada uno, mediante el uso de 3 diferentes algoritmos para 700 keV.

El único método que no coincidió con las distribuciones angulares de la figura 4.19 fue el Método Kahn. Se volvió a revisar exhaus-

tivamente en la literatura y se encontraron los siguientes algoritmos (figura 4.21 y 4.22):



KAHN subprogram for Compton scattering.

Figura 4.21: Algoritmo de Kahn para generar el ángulo polar de la dispersión Compton obtenido de una fuente alternativa. (Jaeger et al., 1968)

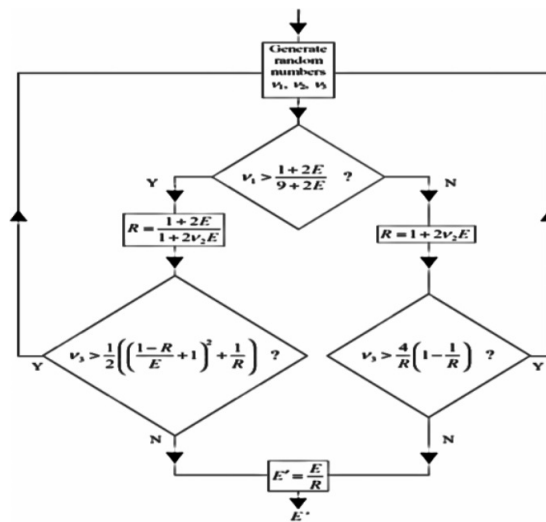


Figura 4.22: Algoritmo de Kahn para generar el ángulo polar de la dispersión Compton obtenido de otra fuente. (B.Kadhim and Mahdi, 2013)

Se compararon estos 2 algoritmos con el que se propuso anteriormente (figura 3.2) y se observó que prácticamente son idénticos por lo que es posible decir que la distribución para el método de Kahn mostrada en la figura 4.19 es incorrecta.

Dado que el EGS es el mejor método, este se usó para construir las **Funciones Analíticas** de las distribuciones angulares para obtener por un **Método Semianalítico** el muestreo del ángulo polar.

4.1.2. Simulación del ángulo polar por método semianalítico

Después de haber realizado la simulación del ángulo polar por los 3 métodos de muestreo que se vieron anteriormente se selecciona cuál fue el más eficiente, en éste caso el EGS.

Se generaron 16 distribuciones angulares de frecuencias (una para cada energía incidente establecida que van desde 1 keV hasta 150 keV, cada 10 keV) con ayuda del programa que se ha creado con base en el algoritmo de este método. Se utiliza éste rango de energías (de 1 keV a 150 keV) ya que el ^{99m}Tc emite fotones de 140 keV y es el más usado en la medicina nuclear.

^{99m}Tc (TECNECIO-99 METAESTABLE)

El ^{99m}Tc es un elemento radiactivo artificial y el más utilizado para el diagnóstico de muchas enfermedades. Por ejemplo, para detectar algunos tipos de cáncer (especialmente tumores difíciles de localizar) se incorpora ^{99m}Tc a un anticuerpo monoclonal, una proteína del sistema inmunitario capaz de unirse a células cancerosas. Pocas horas después de la inyección, se detectan los rayos gamma emitidos por el ^{99m}Tc con el correspondiente equipo médico; altas concentraciones indican dónde se localiza el tumor. (IAEA, 2009)

Se utiliza éste radionúclido debido a sus propiedades físicas de desintegración, las cuales son: emisión de fotones de 140 keV y tiempo de vida media de 6.029 horas lo que se traduce en una rápida eliminación del organismo.

Se ajustaron funciones analíticas a cada distribución de frecuencias del ángulo polar del fotón dispersado por efecto Compton, como se muestra en la siguiente figura:

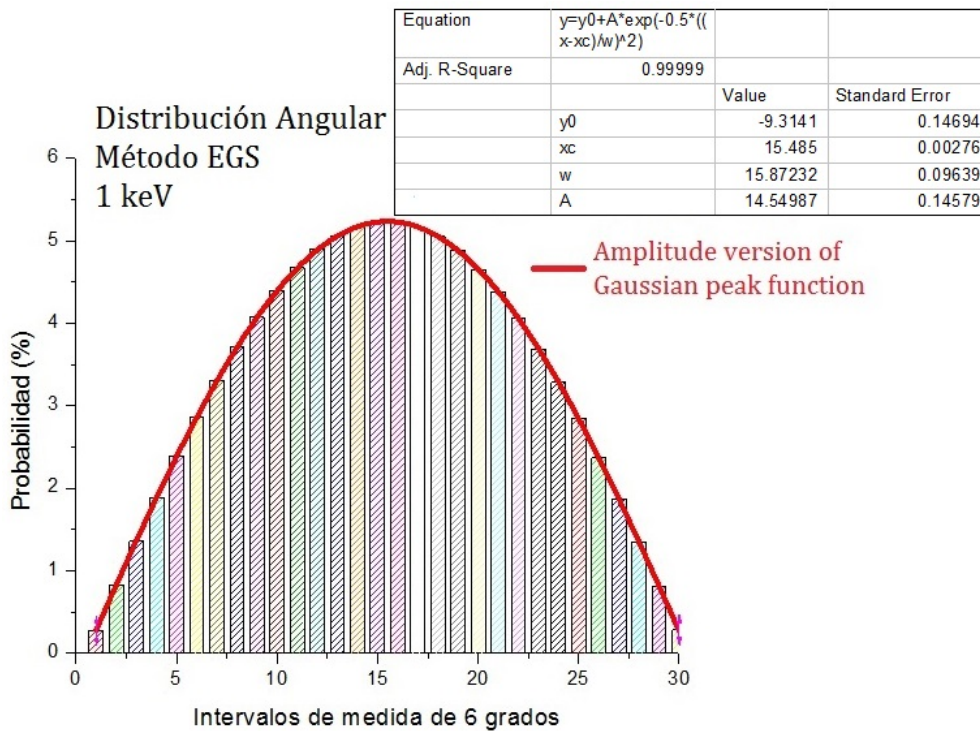


Figura 4.23: Ejemplo del ajuste de una función a una distribución, es este caso a la distribución angular del Método EGS para 1 keV.

Las funciones analíticas ajustadas para cada distribución angular de frecuencias son:

$$p(\theta)_{1-30 \text{ keV}} = y_0 + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta-x_c}{w}\right)^2} \quad (4.2)$$

Versión de Amplitud de la Función de Pico Gaussiana

Esta fue la función que mejor se ajustó a las primeras 4 distribuciones, para energías de 1 keV, 10 keV, 20 keV y 30 keV.

$$p(\theta)_{40-150 \text{ keV}} = y_0 + A \cdot e^{\left[-e^{\left(\frac{\theta-x_c}{w}\right)} - \left(\frac{\theta-x_c}{w}\right) + 1 \right]}. \quad (4.3)$$

Función Extrema en Estadística

Esta fue la función que mejor se ajustó a las 12 distribuciones restantes, para energías de 40 keV, 50 keV, 60 keV, 70 keV, 80 keV, 90 keV, 100 keV, 110 keV, 120 keV, 130 keV, 140 keV y 150 keV.

Solo cambian los parametros de dichas funciones que cambian en función de la energía y estos se muestran a continuación en la tabla 4.3.

VALORES DE LAS FUNCIONES AJUSTADAS				
Energía [MeV]	y_0	x_c	w	A
0,001	-9,314070661	15,484999739	15,872306963	14,549839851
0,010	-9,261100753	15,344095269	15,834643866	14,498511714
0,020	-8,625651089	15,195710697	15,417876436	13,868340726
0,030	-7,652867035	15,051626023	14,759186553	12,903920025
0,040	-25,995984158	14,104612566	24,214047070	31,191258393
0,050	-18,169636794	13,844532022	20,577471892	23,388176414
0,060	-13,729649824	13,610854518	18,185628728	18,973075665
0,070	-10,899836109	13,396156392	16,479694360	16,168075538
0,080	-9,030368902	13,199605001	15,240752444	14,323479552
0,090	-7,701152294	13,017654912	14,290586701	13,018799503
0,100	-6,756037727	12,852928822	13,567139137	12,097581713
0,110	-5,990519550	12,698206704	12,953315184	11,355116118
0,120	-5,386396920	12,552151761	12,446264013	10,772827713
0,130	-4,641786608	12,345678421	11,795218863	10,059328745
0,140	-4,415788144	12,278731275	11,592233975	9,843587459
0,150	-4,013897278	12,149794205	11,223692251	9,461061539

Cuadro 4.3: Valores de las funciones analíticas ajustadas a cada distribución angular de frecuencias desde una energía $h\nu = 0,001$ MeV hasta 0,150 MeV de 10 en 10 keV.

Al tomar en cuenta el Coeficiente de Determinación Ajustado es posible corroborar que cada función elegida es la que más se ajusta a cada Distribución Angular, respectivamente. También se tiene un promedio de los $R_{Ajustado}^2$'s igual a 0,9985 por lo que es posible decir que todos los ajustes son aceptables.

4.1.2.1. Aplicación del Método Directo

Ahora, se va a trabajar con la Función Analítica Ajustada [$p(\theta)$], la cual se convertirá en la Función de Densidad de Probabilidad (ó FDP).

Por los tanto, solo se tienen dos funciones para analizar. Como se vio anteriormente, en el método directo, lo primero que se tiene que hacer es normalizar la FDP. La función de densidad de probabilidad normalizada en el primer caso, ecuación (4.2), es:

$$p(\theta)_{Normalizada} = N \cdot \left[y_0 + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta - x_c}{w} \right)^2} \right], \quad 0 \leq \theta \leq 30, \quad (4.4)$$

donde $N = \frac{1}{100}$ es la constante de normalización.

El número de intervalos en que se dividió la Distribución Angular de Frecuencias fue 30, es decir, los 180° de rango están divididos en 30 intervalos de 6° cada uno. Por lo tanto, cada θ resultante debe multiplicarse por 6 para obtener su valor en el rango ($0^\circ, 180^\circ$).

Ahora, se obtiene la función de distribución de probabilidad acumulativa, $c(\theta)_{1-30 \text{ keV}}$, para ésto se integra la FDP normalizada de 0 a θ .

$$\begin{aligned} c(\theta)_{1-30 \text{ keV}} &= \int_0^\theta p(\theta')_{Normalizada} d\theta' = r \in (0, 1) \\ c(\theta)_{1-30 \text{ keV}} &= N \cdot \int_0^\theta y_0 + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta' - x_c}{w} \right)^2} d\theta' \\ c(\theta)_{1-30 \text{ keV}} &= N \cdot y_0 \cdot \theta + N \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot A \cdot w \cdot \left[erf \left(\frac{x_c}{\sqrt{2} \cdot w} \right) + erf \left(\frac{\theta - x_c}{\sqrt{2} \cdot w} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde $erf(z)$ es la *función de error* encontrada en la integración de la distribución normal (que es una forma normalizada de la función de Gauss). Es una función entera, se define por

$$erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt. \quad (4.6)$$

Es posible decir que la función de distribución de probabilidad acumulativa, $c(\theta)_{1-30 \text{ keV}}$, que se ve en la ecuación (4.5) no es invertible, por lo tanto no se puede despejar θ , es decir:

$$\theta = c^{-1}(r). \quad (4.7)$$

Se realiza el mismo procedimiento para la segunda ecuación, (4.3) y se obtiene:

$$c(\theta)_{40-150 \text{ keV}} = N \cdot y_0 \cdot \theta + N \cdot A \cdot w \left(e^{-e^{-\frac{\theta-x_c}{w}+1}} - e^{-e^{\frac{x_c}{w}+1}} \right) \quad (4.8)$$

la cual tampoco es una función invertible.

Tomando en cuenta la ecuación (4.5) y (4.8), el método directo es descartado.

4.1.2.2. Aplicación del método de rechazo

El método del rechazo se puede aplicar a cualquier función de densidad de probabilidad sin importar su complejidad matemática por lo tanto, este método se aplica a las funciones analíticas ajustadas obtenidas normalizando cada una de ellas.

Para una energía de 1 keV:

$$M_{1 \text{ keV}} = \frac{\int_0^{30} p(\theta) d\theta}{p\left(r_2 \leq \frac{p(2,61316)}{p(5,22632)}\right)} = \frac{\int_0^{30} y_0 + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta-x_c}{w}\right)^2} d\theta}{p\left(r_2 \leq \frac{1}{2}\right)} = \frac{99,8\%}{50\%}, \quad (4.9)$$

la $M_{1 \text{ keV}}$ es igual a 1,99 (≈ 2). Lo que significa que aproximadamente se necesita repetir 2 veces el proceso (generar dos pares de números aleatorios) para generar un ángulo promedio que sea aceptado por el código.

Se simularon 100,000,000 de ángulos con el Método Semianalítico para cada energía (desde 1 keV hasta 150 de 10 en 10 keV). Y se seleccionaron dentro de 30 intervalos, como se muestra en la figura:

```

PROGRAMA PARA GENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO SEMIANALITICO

Ingrese el Numero de Angulos que Desea Generar:
100000000

Ingrese la Energia Incidente del Foton < 1[KeV] - 150[KeV] >:
1

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frec. con Rango[0,180]:
30

Frecuencias en (0,6) = 62285
Frecuencias en (6,12) = 555770
Frecuencias en (12,18) = 1.09717e+006
Frecuencias en (18,24) = 1.63377e+006
Frecuencias en (24,30) = 2.13685e+006
Frecuencias en (30,36) = 2.63031e+006
Frecuencias en (36,42) = 3.08547e+006
Frecuencias en (42,48) = 3.50707e+006
Frecuencias en (48,54) = 3.89517e+006
Frecuencias en (54,60) = 4.24493e+006
Frecuencias en (60,66) = 4.53238e+006
Frecuencias en (66,72) = 4.78631e+006
Frecuencias en (72,78) = 4.98754e+006
Frecuencias en (78,84) = 5.1217e+006
Frecuencias en (84,90) = 5.21752e+006
Frecuencias en (90,96) = 5.23188e+006
Frecuencias en (96,102) = 5.20793e+006
Frecuencias en (102,108) = 5.12649e+006
Frecuencias en (108,114) = 4.98275e+006
Frecuencias en (114,120) = 4.78154e+006
Frecuencias en (120,126) = 4.52761e+006
Frecuencias en (126,132) = 4.22575e+006
Frecuencias en (132,138) = 3.88561e+006
Frecuencias en (138,144) = 3.51188e+006
Frecuencias en (144,150) = 3.07109e+006
Frecuencias en (150,156) = 2.61114e+006
Frecuencias en (156,162) = 2.11767e+006
Frecuencias en (162,168) = 1.60981e+006
Frecuencias en (168,174) = 1.08279e+006
Frecuencias en (174,180) = 531817

Tiempo de la rutina : 172.565 segundos

```

Figura 4.24: Salida del código para generar el ángulo polar por el Método Semianalítico para la energía de 1 keV.

A continuación se muestran algunas distribuciones angulares para ciertas energías:

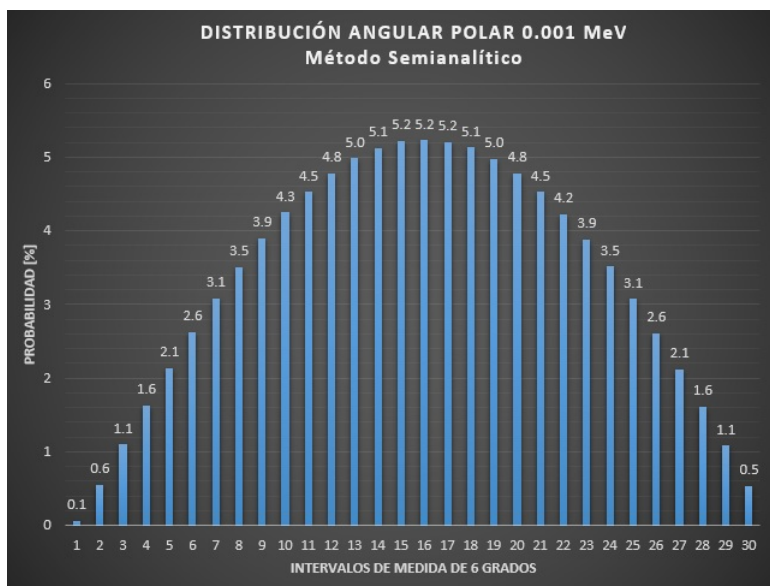


Figura 4.25: Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 1 keV.

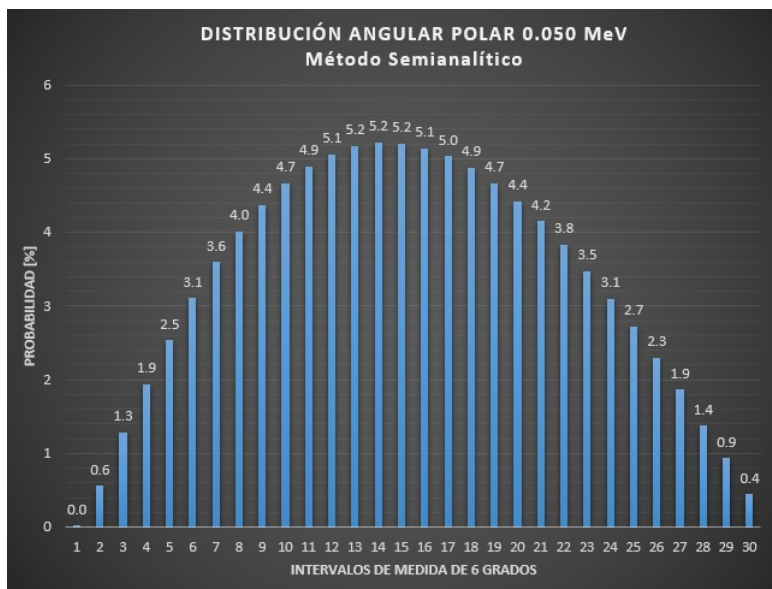


Figura 4.26: Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 50 keV.

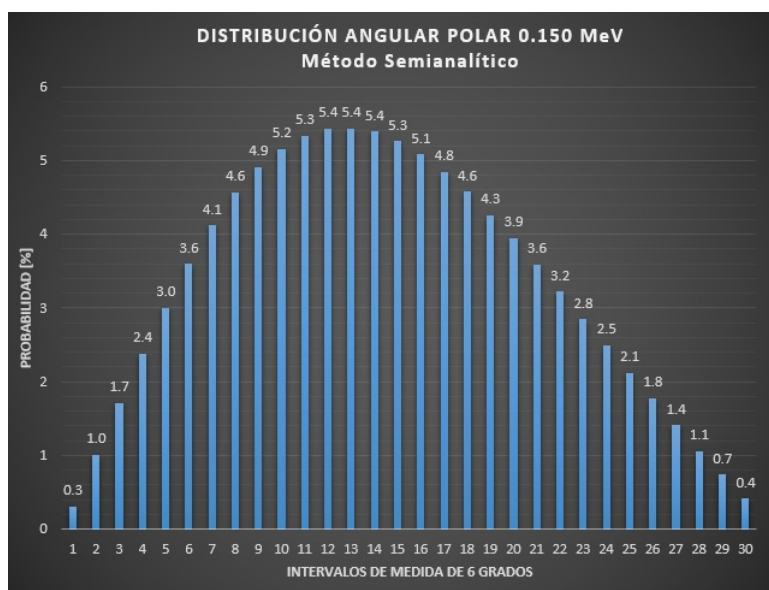


Figura 4.27: Distribución angular polar por el Método Semianalítico para la energía de 150 keV.

En la figura 4.28 se observa cómo se relaciona la distribución angular del Método Semianalítico con las obtenidas directamente con el Método de muestreo del EGS y que tan buena es su correlación.

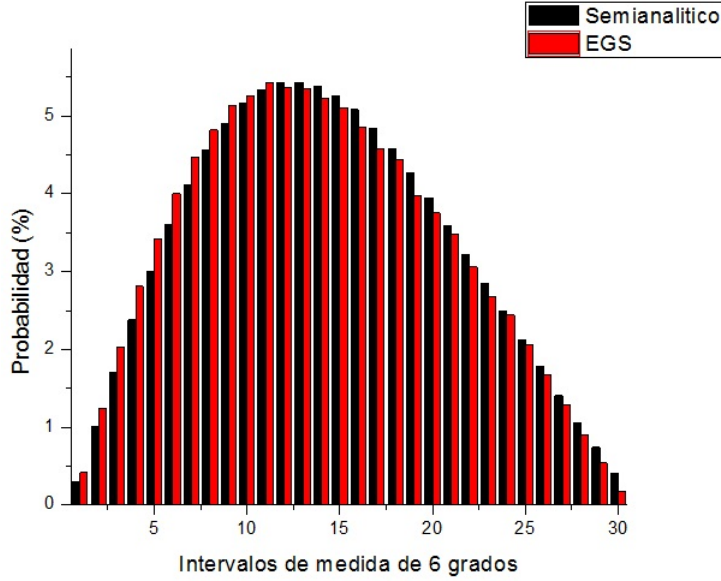


Figura 4.28: Comparación de la Distribución angular polar por el Método EGS con el Método Semianalítico para la energía de 150 keV.

Es posible decir que el método semianalítico se comporta de manera muy similar al EGS y por lo tanto es aceptable su distribución angular.

4.1.2.3. Aplicación del método mixto

Se factoriza la ecuación (4.2), cuya factorización más favorable es:

$$p(\theta)_{1-30 \text{ keV}} = \left(e^{\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} \right) \cdot \left(y_0 \cdot e^{-\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta^2 + x_c^2}{w^2} \right)} \right) \quad (4.10)$$

se considera la parte "susceptible", la que tiene las condiciones necesarias para integrarla analíticamente y que sea una función invertible, en éste caso $f(\theta)$ será:

$$f(\theta) = e^{\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}}, \quad 0 \leq \theta \leq 30, \quad (4.11)$$

se normaliza e integra directamente la función anterior de 0 a θ :

$$N \cdot \int_0^\theta e^{\frac{\theta' \cdot x_c}{w^2}} d\theta' = N \cdot \frac{w^2}{x_c} \cdot \left(e^{\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} - 1 \right), \quad (4.12)$$

donde $N = \frac{x_c \cdot w^2}{e^{30 \cdot x_c \cdot w^2}}$. Es bien sabido que la ecuación (4.12) es la función de distribución de probabilidad acumulada, $c(\theta)$, la cual se va a igualar a r ,

$$r = c(\theta) = N \cdot \frac{w^2}{x_c} \cdot \left(e^{\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} - 1 \right), \quad 0 \leq r \leq \int_0^{30} N \cdot f(\theta) \, d\theta \approx 1 \quad (4.13)$$

e invertida,

$$\theta(r) = \frac{w^2}{x_c} \cdot \ln \left(1 + \frac{r \cdot x_c}{N \cdot w^2} \right), \quad (4.14)$$

Se realiza un cambio de variables,

$$u = N \cdot \frac{w^2}{x_c} \cdot \left(e^{\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} - 1 \right) \rightarrow \theta = \frac{w^2}{x_c} \cdot \ln \left(1 + \frac{u \cdot x_c}{N \cdot w^2} \right) \quad 0 \leq u \leq \int_0^{30} N \cdot f(\theta) \, d\theta \approx 1, \quad (4.15)$$

y ahora se tiene que muestrear,

$$g(\theta) = y_0 \cdot e^{-\frac{\theta \cdot x_c}{w^2}} + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\theta^2 + x_c^2}{w^2} \right)} \quad (4.16)$$

se sustituye el nuevo valor de θ en (4.16):

$$g(u) = y_0 \cdot \frac{1}{1 + \frac{u \cdot x_c}{N \cdot w^2}} + A \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\left[\frac{w^2}{x_c} \cdot \ln \left(1 + \frac{u \cdot x_c}{N \cdot w^2} \right) \right]^2 + x_c^2}{w^2}}. \quad (4.17)$$

Se genera un segundo número aleatorio, r_2 , si se cumple que

$$r_2 \leq \frac{g(u)}{g_{\max}(u)}, \quad (4.18)$$

se aceptará el ángulo generado, de lo contrario, regresar a la ecuación (4.14).

El número de iteraciones para una $u_{promedio}$ para ésta técnica del rechazo está definida como:

$$M = \frac{1}{p \left[r_2 \leq \frac{g(u_{promedio})}{g_{\max}(u)} \right]} \cdot \int_0^{30} N \cdot f(\theta) \, d\theta \cdot g(u) \, du, \quad 1 \leq M < \infty. \quad (4.19)$$

Para la energía de 1 keV:

$$M = \frac{\int_0^{86,5778} g(u) du}{p\left(r_2 \leq \frac{1,1894}{2,3788}\right)} = \frac{99,8222\%}{50\%}, \quad (4.20)$$

la M es igual a 1,99 (≈ 2). Lo que significa que aproximadamente se necesita repetir 2 veces el proceso para generar un ángulo promedio que sea aceptado por el código.

Nuestra función $g(\theta)$ que contiene la mayor parte de la complejidad matemática en $p(\theta)$ **1-30 keV**, tomará mucho tiempo en su simulación (muestreada con el método de rechazo) ya que es una ecuación muy extensa y complicada de resolver. A pesar de que el número de iteraciones es igual que en el método anterior pero tendrá que realizar más pasos y más cálculos, lo que consumirá más tiempo al simular el transporte de radiación que con el método del egs. Por lo tanto, el método mixto es descartado.

4.1.3. Comparación en la Rapidez de la Generación del Ángulo Polar

4.1.3.1. Tiempos y Exactitud de los Métodos de Muestreo

Se midió el tiempo de simulación de cada método de muestreo, (Kahn, EGS y Clásico) es decir, cuánto se tarda cada uno en generar 100,000,000 millones de historias (ángulos).

Se repitió esta medición de tiempo para 30 rutinas y se obtuvo el promedio de tiempo de las rutinas para cada método que se muestran a continuación:

```
PROGRAMA PARA GENENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO CLASICO
RUTINAS: 30.      ANGULOS: 100,000,000.

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Tiempo de la rutina 1 : 186.108 segundos
Tiempo de la rutina 2 : 186.077 segundos
Tiempo de la rutina 3 : 186.109 segundos
Tiempo de la rutina 4 : 186.092 segundos
Tiempo de la rutina 5 : 186.078 segundos
Tiempo de la rutina 6 : 186.077 segundos
Tiempo de la rutina 7 : 186.061 segundos
Tiempo de la rutina 8 : 186.046 segundos
Tiempo de la rutina 9 : 186.03 segundos
Tiempo de la rutina 10 : 186.124 segundos
Tiempo de la rutina 11 : 186.078 segundos
Tiempo de la rutina 12 : 186.108 segundos
Tiempo de la rutina 13 : 186.093 segundos
Tiempo de la rutina 14 : 186.093 segundos
Tiempo de la rutina 15 : 186.061 segundos
Tiempo de la rutina 16 : 186.062 segundos
Tiempo de la rutina 17 : 186.061 segundos
Tiempo de la rutina 18 : 186.046 segundos
Tiempo de la rutina 19 : 186.046 segundos
Tiempo de la rutina 20 : 186.046 segundos
```

Figura 4.29: Tiempos de rutina del programa del Método Clásico para la energía de 1 keV.


```
PROGRAMA PARA GENENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO KAHN
RUTINAS: 30.          ANGULOS: 100,000,000.

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Tiempo de la rutina 1 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 2 : 26.286 segundos
Tiempo de la rutina 3 : 26.239 segundos
Tiempo de la rutina 4 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 5 : 26.239 segundos
Tiempo de la rutina 6 : 26.239 segundos
Tiempo de la rutina 7 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 8 : 26.239 segundos
Tiempo de la rutina 9 : 26.286 segundos
Tiempo de la rutina 10 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 11 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 12 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 13 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 14 : 26.239 segundos
Tiempo de la rutina 15 : 26.24 segundos
Tiempo de la rutina 16 : 26.254 segundos
Tiempo de la rutina 17 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 18 : 26.24 segundos
Tiempo de la rutina 19 : 26.254 segundos
Tiempo de la rutina 20 : 26.255 segundos
```

Figura 4.30: Tiempos de rutina del programa del Método Kahn para la energía de 1 keV.

```

PROGRAMA PARA GENENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO EGS
RUTINAS: 30.      ANGULOS: 100,000,000.

Ingrese la Energia Incidente del Foton [MeV]:
0.001

Tiempo de la rutina 1 : 26.316 segundos
Tiempo de la rutina 2 : 26.535 segundos
Tiempo de la rutina 3 : 26.193 segundos
Tiempo de la rutina 4 : 26.145 segundos
Tiempo de la rutina 5 : 26.13 segundos
Tiempo de la rutina 6 : 26.255 segundos
Tiempo de la rutina 7 : 26.099 segundos
Tiempo de la rutina 8 : 26.177 segundos
Tiempo de la rutina 9 : 26.192 segundos
Tiempo de la rutina 10 : 26.115 segundos
Tiempo de la rutina 11 : 26.13 segundos
Tiempo de la rutina 12 : 26.177 segundos
Tiempo de la rutina 13 : 26.13 segundos
Tiempo de la rutina 14 : 26.13 segundos
Tiempo de la rutina 15 : 26.145 segundos
Tiempo de la rutina 16 : 26.084 segundos
Tiempo de la rutina 17 : 26.052 segundos
Tiempo de la rutina 18 : 26.067 segundos
Tiempo de la rutina 19 : 26.068 segundos
Tiempo de la rutina 20 : 26.099 segundos

```

Figura 4.31: Tiempos de rutina del programa del Método EGS para la energía de 1 keV.

COMPARACIÓN DE RAPIDEZ	
Método de Muestreo	Tiempo de Rutina Promedio [s]
Método Clásico	186,094
Método Kahn	26,248
Método EGS	26,142

Cuadro 4.4: Comparación en la rapidez en la generación de 100,000,000 ángulos polares con una energía $h\nu = 0,001$ MeV.

Se compararon los tres métodos, y nuevamente se seleccionó cuál es el más exacto ahora considerando sus tiempos de rutina.

En éste caso es posible observar que el mejor método tanto en la forma de su distribución angular y su rapidez para generar el ángulo polar es nuevamente el **Método EGS**.

4.1.3.2. Tiempo de Método Semianalítico

Se midió el tiempo de simulación del muestreo por funciones analíticas ajustadas al generar 100,000,000 millones de ángulos. De igual forma se obtiene el promedio de tiempo de treinta rutinas.

```
PROGRAMA PARA GENENERAR EL ANGULO POLAR POR EL METODO SEMIANALITICO
RUTINAS: 30.      ANGULOS: 100,000,000.

Ingrese la Energia Incidente del Foton < 1[KeU] - 150[KeU] > :
1
Tiempo de la rutina 1 : 18.64 segundos
Tiempo de la rutina 2 : 18.766 segundos
Tiempo de la rutina 3 : 18.532 segundos
Tiempo de la rutina 4 : 18.527 segundos
Tiempo de la rutina 5 : 18.552 segundos
Tiempo de la rutina 6 : 18.718 segundos
Tiempo de la rutina 7 : 19.185 segundos
Tiempo de la rutina 8 : 19.616 segundos
Tiempo de la rutina 9 : 19.916 segundos
Tiempo de la rutina 10 : 19.894 segundos
Tiempo de la rutina 11 : 19.877 segundos
Tiempo de la rutina 12 : 19.907 segundos
Tiempo de la rutina 13 : 19.855 segundos
Tiempo de la rutina 14 : 19.958 segundos
Tiempo de la rutina 15 : 19.916 segundos
Tiempo de la rutina 16 : 19.921 segundos
Tiempo de la rutina 17 : 19.986 segundos
Tiempo de la rutina 18 : 19.927 segundos
Tiempo de la rutina 19 : 19.871 segundos
Tiempo de la rutina 20 : 19.904 segundos
```

Figura 4.32: Tiempos de rutina del programa del Método Semianalítico para la energía de 150 keV.

4.1.3.3. Comparación

Ahora ya que se ha analizado los tiempos y exactitud de los tres métodos de muestreo, y se escogió el Método EGS como el más preciso y el más rápido, se compara el tiempo de rutina del método semianalítico con el método EGS.

MÉTODO EGS vs. MÉTODO SEMIANALÍTICO	
Método de Muestreo	Tiempo de Rutina Promedio [s]
Método EGS	26,142
Método Semianalítico	19,541

Cuadro 4.5: Comparación en la rapidez en la generación de 100,000,000 ángulos polares con una energía $h\nu = 0,001$ MeV entre el mejor método de muestreo y el método semianalítico.

Se compararon los 2 métodos y se observa que el tiempo de cómputo de *Método Semianalítico* representa un 74,75 % del tiempo del Método EGS, es decir, el método semianalítico es 1,34 veces más rápido. Por lo que si es conveniente el empleo de *funciones analíticas ajustables* para disminuir el costo computacional en el muestreo del ángulo polar de dispersión del fotón por efecto Compton.

El método semianalítico basado en el método del rechazo es más rápido que el EGS. Las FDP's acumulativas obtenidas no fueron invertibles pero si fuesen invertibles, el Método Semianalítico sería más rápido al aplicarle el Método Directo lamentablemente ninguna de las funciones ajustadas, al integrarlas para obtener la función de distribución acumulativa, es invertible.

EJEMPLO DE UNA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE PROBABILIDAD ACUMULATIVA INVERTIBLE

La distancia, z , para una interacción en un medio uniforme, infinito y homogéneo se rige por la siguiente función de distribución de probabilidad:

$$p(z) = \mu e^{-\mu z}, \quad 0 \leq z \leq \infty \quad (4.21)$$

dónde μ es el coeficiente interacción. La $p(z)$ cumple la condición

$$\int_0^{\infty} \mu e^{-\mu z} dz = 1. \quad (4.22)$$

La probabilidad de que una partícula haya interactuado dentro de una distancia z es

$$c(z) = \int_0^z e^{-z'} dz' = 1 - e^{-\mu z} = r \quad (4.23)$$

que es la función de distribución acumulativa invertible. Al invertirla:

$$z = -\frac{1}{\mu} \ln(1 - r), \quad 0 \leq r < 1, \quad (4.24)$$

esta es exactamente la forma utilizada para el cálculo de la distancia de una partícula para una interacción en todos los códigos de Monte Carlo. Ahora se realiza el muestreo de las distancias para 100,000,000 interacciones considerando $\mu = 1$, como se muestra en la siguiente figura:

```

PROGRAMA PARA GENERAR LA DISTANCIA DE INTERACCION POR EL METODO DIRECTO

Ingrese el Numero de Interacciones que Desea Generar:
100000000

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frecuencias:
13

Interacciones entre <0,1> = 6.32126e+007
Interacciones entre <1,2> = 2.32528e+007
Interacciones entre <2,3> = 8.55564e+006
Interacciones entre <3,4> = 3.14635e+006
Interacciones entre <4,5> = 1.15815e+006
Interacciones entre <5,6> = 425736
Interacciones entre <6,7> = 157168
Interacciones entre <7,8> = 57984
Interacciones entre <8,9> = 19836
Interacciones entre <9,10> = 9153
Interacciones entre <10,11> = 1526
Interacciones entre <11,12> = 1526
Interacciones entre <12,13> = 0

Tiempo de la rutina : 67.219 segundos

```

Figura 4.33: Salida del código para generar 100,000,000 distancias de interacción, distribuidas entre 13 intervalos con el método Directo.

A continuación se muestra los tiempos de 30 rutinas al generar 100,000,000 historias:

```
PROGRAMA PARA GENERAR LA DISTANCIA DE INTERACCION POR EL METODO DIRECTO
RUTINAS: 30. HISTORIAS: 100,000,000.

Tiempo de la rutina 1 : 5.767 segundos
Tiempo de la rutina 2 : 5.754 segundos
Tiempo de la rutina 3 : 5.757 segundos
Tiempo de la rutina 4 : 5.769 segundos
Tiempo de la rutina 5 : 5.75 segundos
Tiempo de la rutina 6 : 5.812 segundos
Tiempo de la rutina 7 : 5.817 segundos
Tiempo de la rutina 8 : 5.838 segundos
Tiempo de la rutina 9 : 5.83 segundos
Tiempo de la rutina 10 : 5.828 segundos
Tiempo de la rutina 11 : 5.829 segundos
Tiempo de la rutina 12 : 5.842 segundos
Tiempo de la rutina 13 : 5.927 segundos
Tiempo de la rutina 14 : 6.028 segundos
Tiempo de la rutina 15 : 5.89 segundos
Tiempo de la rutina 16 : 5.83 segundos
Tiempo de la rutina 17 : 5.809 segundos
Tiempo de la rutina 18 : 5.922 segundos
Tiempo de la rutina 19 : 5.939 segundos
Tiempo de la rutina 20 : 5.839 segundos
```

Figura 4.34: Tiempos de rutina para generar 100,000,000 distancias de interacción con el método Directo. El tiempo de rutina promedio es: 5,833 segundos.

Por lo que es posible decir que si las funciones de distribución acumulativas que se obtuvieron a partir de las funciones analíticas que ajustamos a las distribuciones de frecuencias hubieran sido invertibles, el método semianalítico sería más rápido en tiempo de computación, aproximadamente 4,48 veces más rápido en una comparación con el método EGS pues solo representa un 22,3% del tiempo promedio del mismo. Lamentablemente en la naturaleza las funciones que describen su comportamiento normalmente son muy complejas matemáticamente y no son invertibles en la mayoría de

los casos.

4.2. MUESTREO DEL ÁNGULO AZIMUTAL DE DISPERSIÓN DEL FOTÓN DEBIDO AL EFECTO COMPTON

4.2.1. Simulación del Ángulo Azimutal por Método Directo (Fotones No Polarizados)

Para este caso no fue necesario muestrear el ángulo azimutal para cada energía ya que obviamente se obtendrá una distribución homogénea, como se observa a continuación:

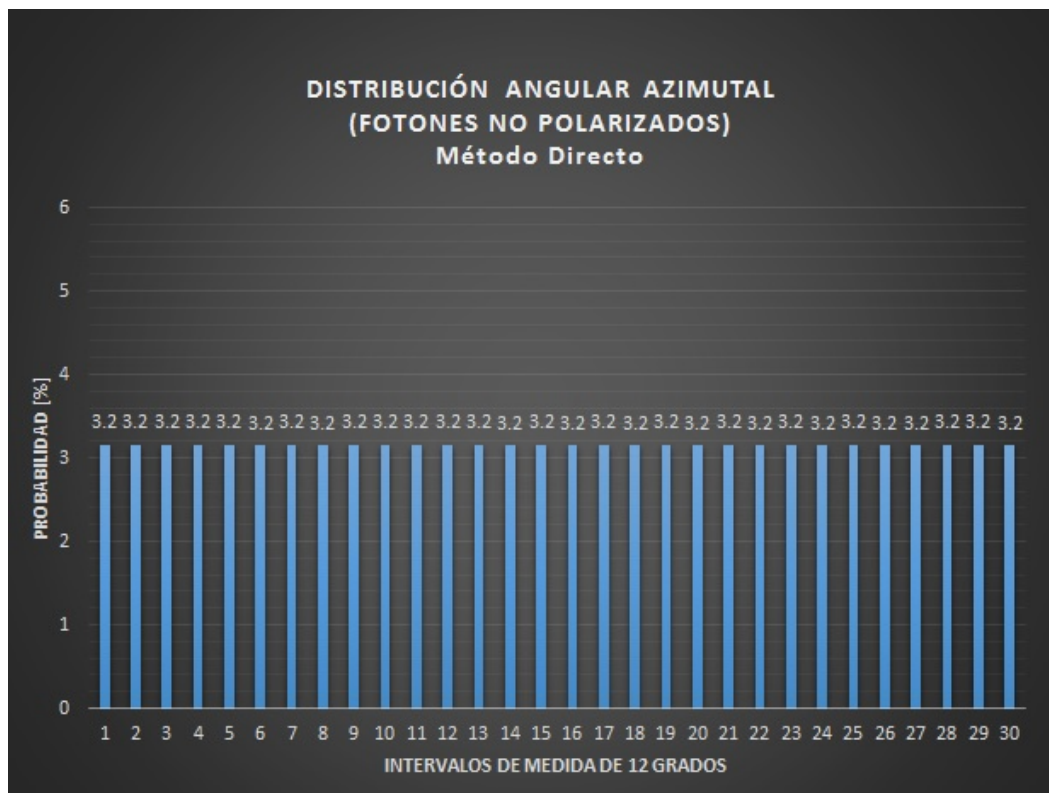


Figura 4.35: Distribución angular azimutal (isotrópica) por método del directo para fotones no polarizados.

4.2.2. Simulación del Ángulo Azimutal por Método del Rechazo

Se muestreó la distribución del ángulo azimutal de dispersión para fotones polarizados linealmente y se construyeron las FDP's del ángulo azimutal (ϕ) para varias energías desde 1 hasta 150 keV cada 10 keV y de este modo determinar su dependencia con la energía haciendo uso del método del rechazo.

Se obtuvieron los valores máximos de las funciones ajustadas a las distribuciones angulares que nos proporcionó el muestreo EGS y de este modo se calculó el valor del ángulo polar más probable de la distribución en relación a las energías de la siguiente forma:

ÁNGULO MÁS PROBABLE PARA CADA ENERGÍA	
Energía (MeV)	Ángulo Polar Más Probable (°)
0,001	87
0,010	87
0,020	87
0,030	87
0,040	87
0,050	87
0,060	87
0,070	75
0,080	75
0,090	69
0,100	69
0,110	69
0,120	69
0,130	63
0,140	63
0,150	63

Cuadro 4.6: Funciones analíticas ajustadas a cada distribución angular de frecuencias desde una energía $h\nu = 0,001$ MeV hasta 0,150 MeV de 10 en 10 keV.

Haciendo uso del Método del Rechazo se muestreó el ángulo azimutal. Se tiene la función de distribución del ángulo azimutal para fotones polarizados linealmente en la ecuación (3.19) y con ella se aplicó el Método del Rechazo utilizando los datos del cuadro 4.6. .


```

PROGRAMA PARA GENENERAR EL ANGULO AZIMUTAL POR EL METODO DEL RECHAZO

Ingrese el Numero de Angulos que Desea Generar:
100000000

Ingrese el Numero Intervalos para la Distribucion de Frec. con Rango [0,360]:
30

Ingrese la Energia Incidente del Foton < 1 [KeV] - 150 [KeV] >:
1

Frecuencias en (0,12) = 2.2661e+006
Frecuencias en (12,24) = 2.45795e+006
Frecuencias en (24,36) = 2.79766e+006
Frecuencias en (36,48) = 3.20931e+006
Frecuencias en (48,60) = 3.6889e+006
Frecuencias en (60,72) = 4.07258e+006
Frecuencias en (72,84) = 4.34036e+006
Frecuencias en (84,96) = 4.36434e+006
Frecuencias en (96,108) = 4.32837e+006
Frecuencias en (108,120) = 4.08854e+006
Frecuencias en (120,132) = 3.67692e+006
Frecuencias en (132,144) = 3.22127e+006
Frecuencias en (144,156) = 2.78966e+006
Frecuencias en (156,168) = 2.44595e+006
Frecuencias en (168,180) = 2.27009e+006
Frecuencias en (180,192) = 2.2621e+006
Frecuencias en (192,204) = 2.44994e+006
Frecuencias en (204,216) = 2.78565e+006
Frecuencias en (216,228) = 3.23728e+006
Frecuencias en (228,240) = 3.6729e+006
Frecuencias en (240,252) = 4.0766e+006
Frecuencias en (252,264) = 4.32838e+006
Frecuencias en (264,276) = 4.36433e+006
Frecuencias en (276,288) = 4.33237e+006
Frecuencias en (288,300) = 4.07259e+006
Frecuencias en (300,312) = 3.6809e+006
Frecuencias en (312,324) = 3.22929e+006
Frecuencias en (324,336) = 2.78567e+006
Frecuencias en (336,348) = 2.44592e+006
Frecuencias en (348,360) = 2.25809e+006

Tiempo de la rutina : 188.334 segundos

```

Figura 4.36: Salida del código para generar el ángulo azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 1 keV.

A continuación se muestran algunas distribuciones angulares para ciertas energías:

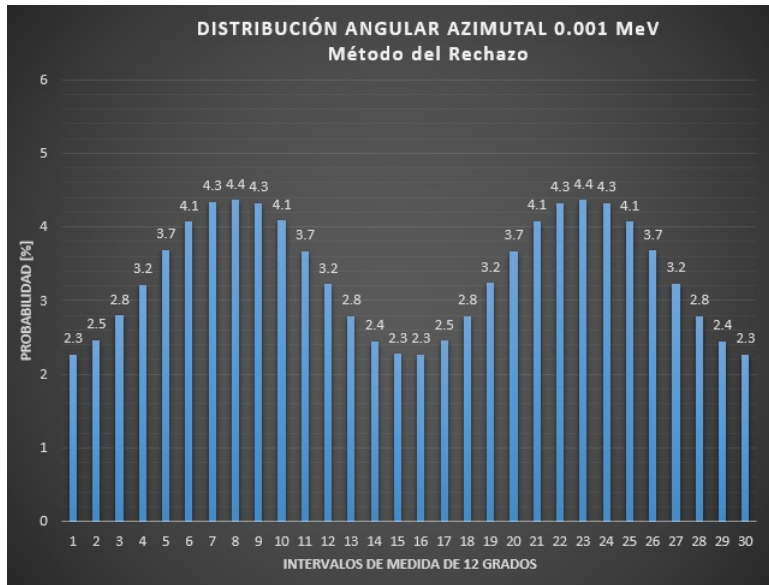


Figura 4.37: Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 1 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.

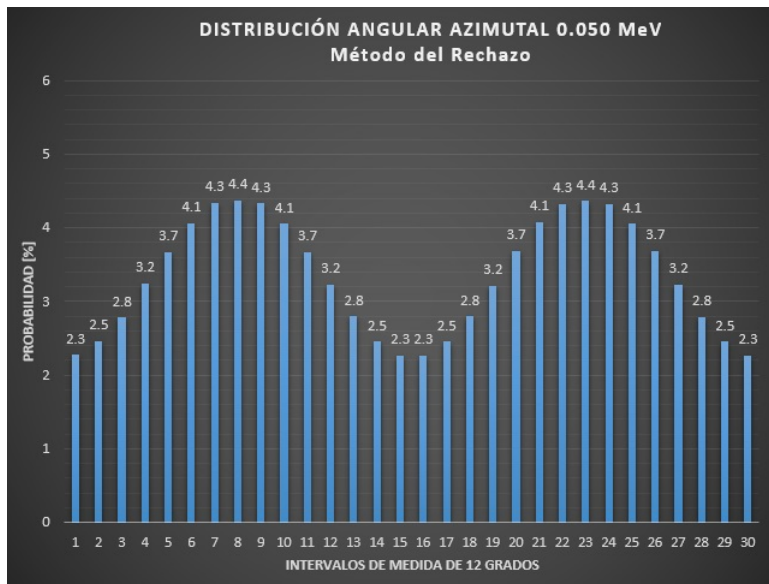


Figura 4.38: Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 50 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.

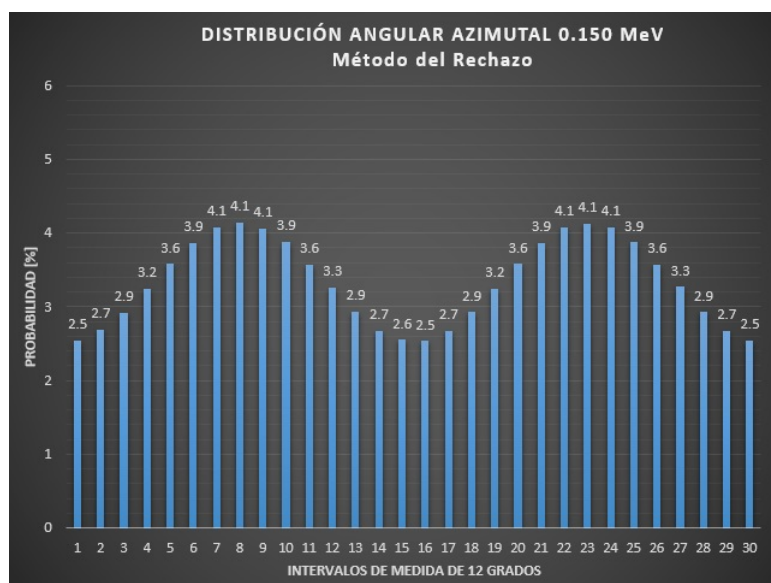


Figura 4.39: Distribución angular azimutal por el Método del Rechazo para la energía de 150 keV, 30 intervalos de 12 grados cada uno.

Se observa que conforme aumenta la energía, la distribución angular azimutal se hace más uniforme. Es posible intuir que a energías de incidencia más altas la distribución en el ángulo azimutal se hace isotrópica. En las figuras 4.37, 4.38 y 4.39 se muestra que en general la distribución angular es del tipo sinusoidal con mayor frecuencia a 90° y 270° .

En éste caso no se ajustaron Funciones Analíticas a las distribuciones angulares de cada energía debido a que el muestreo para el Ángulo Azimutal se realizó con el método del rechazo, tomando en cuenta que la función de distribución acumulativa obtenida a partir de la ecuación (3.24) no es invertible.

Al ajustar funciones analíticas se tendría que integrarlas para obtener Funciones de Distribución de Probabilidad Acumulativas las cuales NO serían invertibles y de nuevo realizar el muestreo a partir del método del rechazo (para cada energía determinada). Lo que significa que se terminaría en lo mismo, un método similar (menos eficiente) que tardaría un tiempo de cómputo aproximadamente igual. Todo un trabajo arduo de manera innecesaria.

4.3. CONCLUSIONES

El nuevo método de muestreo que se ha referido a el, en esta tesis, como "MÉTODO SEMIANALÍTICO"(utilizando el muestreo del rechazo) es 1.34 veces más rápido que el método EGS (74.75% del tiempo requerido por el EGS) para generar el muestreo el ángulo polar. Se observa que conforme aumenta la energía incidente del fotón la distribución angular se va sesgando a la izquierda lo que quiere decir que entre mayor sea la energía menor será la dispersión del fotón por efecto Compton.

Las Funciones de Distribución de Probabilidad Acumulativas obtenidas de las FDP's nos son invertibles pero si fuesen invertibles sería más rápido con el método directo, aproximadamente 4.5 veces que el EGS. Lamentablemente en la naturaleza las funciones que describen el comportamiento de un fenómeno de esta índole normalmente son muy complejas matemáticamente y no son invertibles en la mayoría de los casos.

Se determinó que el muestreo para el Angulo Azimutal con el método del rechazo debido a que su función de distribución acumulativa no era invertible, y en general la distribución angular es del tipo sinusoidal con mayor frecuencia a 90° y 270° . Se observa que conforme aumenta la energía, la distribución angular azimutal se hace más uniforme. Es posible intuir que a energías de incidencia más altas la distribución en el ángulo azimutal se hace isotrópica.

Para concluir, se construyó una nueva metodología para la dispersión Compton de fotones ionizantes por Monte Carlo (que consiste en la generación de números aleatorios) y al implementarla a un código de transporte de radiación consumirá menos tiempo al simular que con el metodo del EGS. Esto contribuirá generalmente a realizar más rápido los cálculos dosimetricos; realizar de manera más rápida el cálculo impactará en el área clínica ya que los tiempos de calculo serán menores lo que llevara a que los pacientes reciban antes sus tratamientos de radioterapia.

Bibliografía

- Als-Nielsen, J. and McMorrow, D. (2011). *Elements of modern X-ray physics*. John Wiley & Sons.
- Attix, F. H. (2008). *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry*. John Wiley & Sons.
- Bielajew, A. F. (2001). *Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*. The University of Michigan.
- B.Kadhim, A. and Mahdi, H. S. (2013). *Study the Variation of Gamma - Ray Backscattered Count Rate for Halley's Nucleus*. Department of Astronomy and Space, College of Science, University of Baghdad.
- Brosed, A. (2012). *Fundamentos de Física Médica*. Sefm.
- Butcher, J. C. and Messel, H. (1958). *Electron number distribution in electron-photon showers*. Phys. Rev.
- Ceballos, F. J. (2004). *Enciclopedia del lenguaje c++*. Alfaomega Grupo Editor.
- Evans, R. D. (1958). *Compton effect*. Springer.
- Fulea, D., Cosma, C., and Pop, G. (2009). *Monte Carlo method for radiological X-ray examinations*. Romanian Journal in Physics.
- Heitler, W. (1954). *The quantum theory of radiation*.
- Hirayama, H. and Namito, Y. (2005). *The EGS5 Code System*. High Energy Accelerator Research Organization (KEK).
- IAEA (2009). *Technetium-99m Radiopharmaceuticals: Status and Trends*. International Atomic Energy Agency.

- Jaeger, R. G., Blizard, E. P., Grotenhuis, M., and Eisenlohr, H. H. (1968). *Engineering Compendium on Radiation Shielding: Volume I: Shielding Fundamentals and Methods*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH.
- Jenkins, T. M., Nelson, W. R., and Rindi, A. (1988). *Monte Carlo transport of electrons and photons*. Plenum Press.
- McJunkin, F. E. (1988). *Agua y salud humana*. Editorial LIMUSA, S.A de C.V.
- Morin, L. (1982). *Molecular form factors and photon coherent scattering cross sections of water*. J. Phys. Chem. Ref. Data.
- Ortega, X. and Jorba, J. (1996). *Radiaciones ionizantes: utilización y riesgos*, volume 25. Univ. Politèc. de Catalunya.
- Özmutlu, E. N. (1992). *Sampling of angular distribution in Compton scattering*. Elsevier.
- Persliden, J. (1983). *A Monte Carlo program for photon transport using analogue sampling of scattering angle un coherent and incoherent scattering processes*. Computer Programs in Biomedicine.
- Tachino, C. A., Galassi, M. E., and Rivarola, R. D. (2006). *Estudio teórico de procesos de ionización múltiple en colisiones entre iones y moléculas*. Universidad Nacional de Rosario.
- Venturinia, L., Maidana, N. L., and Vanin, V. R. (2007). *Aramis: a computer code to estimate total and peak efficiencies of an HPGe photon detector*. Instituto de Investigaciones Energéticas y Nucleares, Universidad de San Pablo - Departamento de Física Experimental.