



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MÉXICO

FACULTAD DE MEDICINA

**Desarrollo de un código para el transporte
de fotones ionizantes en agua con la
técnica evento-por-evento**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN FÍSICA MÉDICA

P R E S E N T A

Jorge Antonio Díaz Díaz

Comité de Tutores: Dr. en C. Eugenio Torres García
Dr. en Inv. Med. Rigoberto Oros Pantoja
Dr. en C. Luis Enrique Díaz Sánchez

Revisores: ...
...
...
...
...
...



TOLUCA, ESTADO DE MÉXICO 2017

Agradecimientos institucionales



Este trabajo se llevó a cabo en el Laboratorio de Simulación Monte Carlo bajo la dirección del Dr. en C. Eugenio Torres García, en la Facultad de Medicina de la Universidad Autónoma del Estado de México.

Índice general

Resumen	5
Abstract	6
Abreviaturas	7
Capítulo 1: Introducción.....	10
Capítulo 2: Estado del arte.....	12
Planteamiento del problema	14
Capítulo 3: Marco Teórico.....	16
Radiación	16
Procesos de interacción de la radiación con la materia	17
Dispersión coherente de Rayleigh	18
Efecto Fotoeléctrico	20
Efecto Compton	21
Producción de pares	23
Interacción fotonuclear	24
Sección eficaz y coeficiente de atenuación	24
Fracción de energía depositada	26
Método Monte Carlo	27
Generación de números aleatorios	29
Método directo	29
Método de rechazo	30
Muestreo del efecto Compton con el Método Monte Carlo	30
Método Kahn para dispersión Compton	30
Método EGS para dispersión Compton	31
Código MCNPX	32
Capítulo 4: Metodología	34
Núcleo del código de transporte de fotones ionizantes	34
Generador de números aleatorios	36
Inicio de transporte y lanzamiento del fotón	37
Coeficiente másico de atenuación, coeficiente de atenuación lineal y distancia recorrida de fotón	39
Tipo de interacción	41
Interacción efecto Rayleigh	42
Interacción efecto Fotoeléctrico	43
Interacción Efecto Compton	43
Método Kahn	43
Método EGS	45
Interacción Producción de Pares	46
Geometría	46
Código MCNPX (primera validación)	47
Fracción de energía depositada (segunda validación)	48
Capítulo 5: Resultados y discusión	50
Uniformidad del generador de números aleatorios	50
Coeficiente másico de atenuación	51
Comparación de la energía depositada por fotón del código desarrollado	

vs MCNPX	52
Comparación del muestro del ángulo polar del efecto Compton por la metodología Kahn y EGS	52
Código desarrollado vs MCNPX (primera validación)	53
Fracción de energía depositada (segunda validación).....	57
Capítulo 6: Conclusiones	60
Capítulo 7: Referencias	61
Anexo(s):	
Artículo de investigación	65

Resumen

El cáncer es una de las enfermedades principales a nivel mundial, esta enfermedad se puede tratar con más de un tratamiento con alta posibilidad de curarse a etapas tempranas, el uso de la radiación como forma de tratamiento y diagnóstico ha ido en aumento a nivel mundial, lo que se busca con el uso de la radiación es el depósito de energía para ocasionar daño y aniquilación de células cancerígenas tratando de dañar lo menos posible las áreas aledañas al tumor. El estudio correcto de la radiación es muy importante, por lo cual para poder estudiar sus efectos se ha recurrido a la experimentación y simulación de la radiación, siendo el método de simulación el más efectivo en el estudio de la radiación ionizante, a través de los años se han desarrollado varios códigos de carácter general que simulan la interacción de partículas, así como de la radiación ionizante, cada uno de ellos actualizándose constantemente. Existen dos metodologías para la simulación de radiación, siendo la primera el método de historias condensadas, este método consiste en simular el efecto global de un gran número de interacciones y tomarlo como un solo evento; el segundo método evento-por-evento consiste en la simulación de cada una de las interacciones que ocurran para cada historia, por ello para poder ahorrar tiempo de computo la mayoría de los códigos que existen recurren a la metodología de historias condensadas; por su naturaleza la metodología de evento-por-evento es más precisa en la simulación de radiación por ello el objetivo de este trabajo fue desarrollar un código de transporte de radiación ionizante utilizando la técnica de evento-por-evento, la fuente se colocó en el origen de un sistema cartesiano tridimensional dentro de un medio semi-infinito de H_2O , donde la dirección de emisión fue simulada de manera isotrópica para realizar la validación con una geometría esférica centrada en el origen del sistema. La energía de emisión fue de 1 keV a 6000 keV, guardando las coordenadas de interacción (x_i, y_i, z_i) y la energía depositada (e_i) , la verificación se realizó mediante la comparación del depósito de energía por fotón en una geometría esférica mediante la variación de su radio con un inicio en 2 cm y creciendo de 2 en 2 cm hasta un radio máximo de 30 cm contra el código MCNP 2.6; también se comparó la fracción de energía depositada, obteniendo diferencias porcentuales entre códigos del rango de 0.12 y 13.5%.

Abstract

Cancer is one of the major diseases worldwide, this disease can be treated with more than one treatment with a high chance of being cured at early stages. The use of radiation as a form of treatment and diagnosis has been increasing worldwide, what is sought with the use of radiation is the energy deposit to cause damage and annihilation of cancer cells trying to damage as little as possible areas adjacent to the tumor. The correct study of the radiation is very important, reason why to be able to study its effects has been resorted to the experimentation and simulation of the radiation. The correct study of the radiation is very important, reason why to be able to study its effects has been resorted to the experimentation and simulation of the radiation, being the simulation method most effective in the study of ionizing radiation, over the years several codes of general character have been developed that simulate the interaction of particles as well as ionizing radiation, each of them constantly being updated. There are two methodologies for the simulation of radiation, the first is the method of condensed stories, this method consists of simulating the global effect of a large number of interactions and take it as a single event, the second event-by-event method consists of the simulation of each of the interactions that occur for each story, so to save computing time most of the codes that exist use the methodology of condensed stories, by its nature the event-by-event methodology is more accurate in the simulation of radiation, therefore the objective of this work was to develop an ionizing radiation transport code using the event-by-event technique, the source was placed at the origin of a three-dimensional Cartesian system within a half-infinite medium of H₂O, where the emission direction was isotropically simulated, to perform validation with a spherical geometry centered on the origin of the system. The emission energy was from 1 keV to 6000 keV, keeping the interaction coordinates (x_i , y_i , z_i) and deposited energy (e_i), the verification was done by comparing the energy deposit per photon in a spherical geometry by means of the variation of its radius with a beginning in 2 cm and increasing of 2 in 2 cm to a maximum radius of 30 cm against the code MCNP 2.6; the fraction of energy deposited was also compared, obtaining percentage differences between codes of the range of 0.12 and 13.5%.

Abreviaturas

SMC	Simulación Monte Carlo
MCNPX	Monte Carlo N-Particle eXtended
PENELOPE	Penetration and ENERgy LOss of Positrons and Electrons
EGS	Electron Gamma Shower
Geant4	Geometry And Tracking
eV	electron-Volt
keV	kiloelectron-Volt
MeV	Megaelectron-Volt
E_γ	Energía gamma
N	Frecuencia
J	Joule
s	segundo
h	Constante de Plank
c	Velocidad de la luz
μ	Sección eficaz total
r	Radio
AF	Fracción de energía depositada
^{90}Y	90-Yttrium
Kv	kiloVolt
MV	MegaVolt
Z	Número atómico efectivo
m_0	Masa de reposo
cm	centímetro
m	metro
g	gramo
kg	kilogramo
s	camino libre medio
KN	Klein-Nishina
FDP	Función de Densidad de Probabilidad
p_0	Posición inicial

Índice de figuras

Índice de figuras

Figura 1: Importancia relativa de los tres principales tipos de interacciones de rayos γ . Las curvas muestran los valores de Z y $E\gamma$ para el que dos tipos de efectos son iguales. (Reproducido de Evans (1955) con permiso de R. D. Evans y McMw-Hill Book Company)	18
Figura 2: Dispersión coherente Rayleigh	19
Figura 3: Efecto fotoeléctrico	21
Figura 4: Efecto Compton	22
Figura 5: Producción de pares	24
Figura 6: Haz de fotones atravesando un medio absorbente	25
Figura 7: Secciones eficaces Rayleigh, Fotoeléctrico, Compton, Producción de Pares y sección eficaz total	26
Figura 8: Trayectoria de un fotón y camino libre medio	28
Figura 9: Diagrama de flujo del núcleo del programa de transporte de radiación	35
Figura 10: Cosenos directores del vector de emisión isotrópica de los fotones ionizantes	38
Figura 11: Probabilidad de ocurrencia de la interacción de la radiación con la materia	41
Figura 12: Muestreo del efecto Rayleigh	42
Figura 13: Muestreo del ángulo polar Compton por medio del método de Kahn	44
Figura 14: Muestreo del ángulo polar Compton por medio del método de EGS	45
Figura 15: Geometría esférica utilizada	47
Figura 16: Input MCNPX	48
Figura 17: Grafica de frecuencias del generador srand con raíz 10000	49
Figura 18: Grafica de frecuencias del generador srand con raíz 32768	50
Figura 19: Sección eficaz Compton con energías de 1 keV a 6000 keV	50
Figura 20: Sección eficaz del efecto fotoeléctrico de un intervalo de energía de 300 keV a 500 keV	51
Figura 21: Comparación de energía depositada por fotones de 140 keV	52
Figura 22: Deposito de energía por fotón de 50 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	53
Figura 23: Deposito de energía por fotón de 100 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	53
Figura 24: Deposito de energía por fotón de 392 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	54
Figura 25: Deposito de energía por fotón de 511 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	54
Figura 26: Deposito de energía por fotón de 511 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	55
Figura 27: Deposito de energía por fotón de 2000 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	55
Figura 28: Deposito de energía por fotón de 5000 keV entre el código desarrollado vs MCNPX	56

Figura 29: Fracción de energía depositada por fotón de 140 keV entre el código desarrollado vs el código de Eli E. Furhang	57
Figura 30: Fracción de energía depositada por fotón (AF) de 150 keV entre el código desarrollado vs la ecuación del AF propuesta en [6]	57

Índice de tablas

Tabla 1: Rangos de diferencia de potencial para la creación de rayos X	17
--	----

Capítulo 1: Introducción

El cáncer es una de las principales enfermedades causantes de muertes en el mundo, tan solo en el 2012 se le atribuyen 8.2 millones de muertes documentadas por esta enfermedad [1], este número ha ido en aumento año tras año, debido a que su patología es muy compleja y está ha ido evolucionando junto con la enfermedad, por ello existen diferentes formas de tratamiento que dependiendo del estadio de la enfermedad, localización y evolución fisiopatológica se puede tratar por medio de cirugía, radioterapia, quimioterapia, inmunoterapia, radioterapia dirigida y el trasplante de células madre [2,3,4,5], esta enfermedad tiene una alta probabilidad de erradicación si se trata en sus primeras etapas [5].

La radioterapia utiliza radiación ionizante para destruir y reducir el tamaño de los tumores, esta radiación destruye el material genético de las células dañadas haciendo imposible que sigan su procedimiento de división y expansión celular pero también infringen un daño a las células sanas (muchas de las células sanas pueden recuperarse del daño recibido), por lo cual el objetivo de la radioterapia es dañar el mayor número posible de células cancerígenas sin dañar el tejido sano del derredor [5,6,7].

La radiación ionizante es también utilizada para el diagnóstico de enfermedades (entre ellas el cáncer) o lesiones en el cuerpo humano, esta detección se realiza mediante la adquisición de imágenes; existen distintos tipos de radiación ionizante, la primera de ellas es la considerada como electromagnética y la segunda se deriva de las partículas [6,7,8].

El amplio uso de la radiación ionizante en la actualidad ha fomentado que se estudie de manera precisa la interacción de la radiación con la materia; el mejor método de estudio del transporte radiación ionizante es a través de la simulación Monte Carlo, así que a través del tiempo se han desarrollado códigos de uso general para la simulación del transporte de radiación ionizante, estos códigos se actualizan continuamente, así mismo se siguen desarrollando códigos nuevos que resuelvan problemáticas actuales [9-15].

En la simulación del transporte de radiación ionizante existen dos técnicas, la primera de ellas es la de historias condensadas, esta técnica consiste en simular un gran número de interacciones como una sola, siendo esta técnica la más usada en los códigos actuales [16]; la segunda técnica se le conoce como evento-por-evento, en esta se simulan todas las trayectorias e interacciones que ocurren una por una [17], debido a su naturaleza esta tiene una mayor precisión, es fundamental conocer como es la interacción de la radiación momento a momento en un medio, de ahí surge la idea de desarrollar un código de simulación Monte Carlo que realice el transporte de radiación ionizante utilizando la técnica de evento-por-evento para fotones en rangos de energía que van de 1 a 6000 keV en un medio de agua, dicho intervalo de energía abarca los radionúclidos empleados en medicina nuclear y la

energía en MV más empleada en los aceleradores lineales empleados en radioterapia.

Capítulo 2: Estado del arte

El cáncer es una de las principales causas de muerte en humanos en todo el mundo, existiendo diferentes tipos de tratamientos para esta enfermedad, el uso de la radiación ionizante para detección y tratamiento de esta patología ha ido en aumento en los últimos años donde más de 50% de los pacientes con cáncer reciben un tratamiento de radioterapia para el control tumoral o con carácter paliativo [18].

Actualmente no se conocen todos los efectos primarios y secundarios que provoca la radiación ionizante [18], es de interés para las áreas de estudio como la Física de Altas Energías, Física Nuclear, Física de Radiaciones y Física Médica, para esta última es importante establecer como es la interacción de la radiación ionizante en un medio (tejido humano), para ello se deben definir las energías con las que se trabaja en esta área, las cuales tienen un rango de unos cuantos keV hasta poco más de 20 MeV; la Física Médica es la rama de estudio donde se engloba el uso del radiodiagnóstico (imagenología y medicina nuclear), radioterapia y la protección radiológica [9], por lo que para esta área se requieren de cálculos precisos sobre cuál es la energía depositada, la dispersión que se genera y la penetración de la radiación ionizante utilizada en el tejido biológico irradiado [6,7,8].

Existen varios tipos de radiación ionizante la primera de ellas es la radiación electromagnética y la segunda es la que derivada de las partículas [6,7,8], ambas con un gran interés de estudio, para conocer los efectos que tiene la radiación en el tejido biológico se hace uso de la experimentación y la simulación por medio de la metodología Monte Carlo, esta última se ha demostrado que es la mejor forma de estudio para la radiación ionizante [9,10], existe una gran abundancia de artículos sobre códigos que realizan el transporte de partículas (electrones) [19-24], pero del transporte de fotones ionizantes en la actualidad los códigos existentes son de carácter general, algunos de ellos siendo códigos híbridos es decir que realizan el transporte de fotones y electrones, los códigos principales son PENELOPE, MCNPX, Geant4, EGS, etc. [11-15].

En el transporte de radiación ionizante existen dos técnicas de simulación, la primera de ellas es conocida como historias condensadas y consiste en el uso de trayectorias pre-simuladas y la utilización de cantidades promedio para disminuir el tiempo de cálculo, esto es muy útil en aplicaciones clínicas y la emplean todos los códigos de carácter general [11-16], la segunda técnica es la de evento-por-evento [17] y se fundamenta en modelar toda la trayectoria de la partícula o fotón ionizante, interacción por interacción considerando todos los procesos físicos involucrados en su desplazamiento a través del medio, esta técnica es ampliamente usada para el transporte de electrones (partículas), no así para fotones ionizantes debido a que consume más de tiempo de computo, pero por la naturaleza de esta técnica es más precisa.

Las interacciones físicas involucradas en el transporte de fotones ionizantes, dependen de su energía y el medio donde se están difundiendo [6,7,8]. En general, se consideran los siguientes efectos: Rayleigh, Compton, Fotoeléctrico y Producción de Pares [4,6,7,8, 25]. Según la literatura, la dispersión del efecto Compton tiene un interés especial, ya que varios estudios han reportado diferentes métodos de muestreo para el ángulo polar y azimutal del fotón disperso que se genera a través de este efecto [26, 27, 28], esto es requerido a causa de que este efecto tiene una mayor probabilidad de ocurrencia que los otros efectos antes mencionados; ya que se produce en un amplio espectro de energía, este efecto se basa en la transferencia de solo una parte de la energía del fotón incidente hacia una partícula, y en el seguimiento sucesivo del fotón ionizante sino se realiza un preciso muestreo de los ángulos polares y azimutales conlleva a un mal cálculo dosimétrico o una imagen reconstruida con mala calidad [29, 30].

De manera primaria en las ramas de imagenología, medicina nuclear, radioterapia y protección radiológica se hace el uso de fotones ionizantes, por este motivo actualmente se siguen realizando investigaciones mediante los códigos de carácter general que existen o con el desarrollo e implementación de códigos nuevos (específicos) para transporte de fotones ionizantes.

Recientemente se han realizado múltiples estudios, generalmente la Simulación Monte Carlo se usa para cálculos de dosimetría y está se realiza con la comprobación de modelos geométricos y maniquís que representan diferentes partes de la anatomía humana; el código MCNPX es uno de los códigos más robustos y con mejores resultados, gracias a sus herramientas de geometrías simples preestablecidas, Vega [9] logro simular maniquís de partes específicas del cuerpo humano (cabeza), mediante una representación con esferas y elipses, se comprobó como el número de fotones disminuye al pasar por la cabeza, independientemente de la geometría con que se haya representado la misma y aun con la simulación de diferentes tumores en el interior de los dos maniquís de cabeza propuestos los fotones se siguen comportando de similar forma; una vez realizada la dosimetría se llega a la conclusión de que la dosis absorbida para ambos modelos de cabeza es la misma [9].

Elschot y colaboradores [31] han utilizado la SMC en la reconstrucción de imágenes SPECT y PET, para ello se requiere el simular el transporte de fotones ionizantes, este grupo de trabajo utilizo el radioisótopo ^{90}Y , con él se evaluó la dosis absorbida que captan los tejidos tumorales y sanos que son de interés, en un caso más específico en los tumores malignos de hígado. En esta investigación se plantearon nuevos métodos de reconstrucción cuantitativa de imagen por radiación de frenado con tal de mejorar la dosimetría post-tratamiento, obteniendo mejoras en contraste de imagen con respecto al método clínico, así como un menor error de cuentas residuales.

El cáncer es el nombre que se le da a un conjunto de enfermedades relacionadas entre sí, existe una gran cantidad de tipos de cáncer actualmente, cuya característica principal que distingue a este conjunto de enfermedades es cuando las células de cuerpo humano empiezan a dividirse sin detenerse y con ello empiezan a diseminar los tejidos del derredor [5], como ya se mencionó la SMC se aplica a varios campos de investigación, diagnóstico, prevención y tratamiento; con la SMC se realiza el cálculo de la energía depositada (dosis absorbida) con la que se trata de erradicar las células malignas que determinan la enfermedad del cáncer sin dañar las células sanas adyacentes a la zona de tratamiento, un ejemplo de ello es el estudio que realizó Garza y colaboradores [32] donde gracias a la SMC lograron recrear modelos realistas con las características fundamentales de las distribuciones de dosis absorbida cuando los tumores de mama se irradian usando campos pequeños en radioterapia estereotáctica corporal (SBRT), con ayuda del código PENELOPE determinaron la distribución de dosis absorbida para cada haz de radiación que se administra al paciente en una planeación.

Uno de los campos más importantes que han sido explorados mediante la SMC es la microdosimetría, se ha demostrado que la dosis absorbida se debe de considerar diferente en volúmenes macroscópicos en comparación con volúmenes microscópicos, para esta área como en las anteriores las investigaciones han ido en aumento, cada vez se utiliza para estudios de los efectos que tiene la radiación en áreas anatómicas precisas de interés, por ejemplo Balley y colaboradores [33] realizaron un estudio de los efectos microdosimétricos y biológicos que causa la radiación de fotones ionizantes con diferentes energías en la médula ósea (zona con gran radiosensibilidad), debido a que se conoce la alta probabilidad con que el efecto fotoeléctrico predomina sobre otras interacciones a bajas energías y en materiales de alto número atómico, como es el caso de los huesos. Ello puede conducir a un aumento del depósito de dosis en el tejido blando adyacente al hueso, en referencia a las partículas de radiación secundaria que se generan. Estudios teóricos han indicado que este proceso debe afectar a la exposición de radiación de los tejidos vecinos como puede ser la médula ósea, de ahí su importancia de estudio.

Junto con el empleo de códigos de carácter general para el transporte de fotones ionizantes se han ido incrementando el desarrollo de nuevos códigos que ayuden a resolver las problemáticas que los códigos actuales no cubren [34-37], el gran desarrollo de la SMC ha contribuido al crecimiento del área de estudio Física Médica [38].

Planteamiento del problema

La técnica MC permite realizar el transporte de fotones y actualmente existe una gran variedad de códigos con los que se realiza el transporte, pero estos son de propósito general. Por otro lado, están limitados a realizar dosimetría en volúmenes macrométricos, lo que ha llevado a que actualmente se desarrollen códigos de propósito específico ya sea para Dosimetría o Imagenología. Dado que la técnica evento-por-evento consume mucho tiempo en el cálculo, no se emplea de manera directa en los códigos existentes. Por lo que el objetivo de este proyecto es desarrollar un código que realice el transporte evento-por-evento y permita conocer la trayectoria completa de los fotones y su energía, dado que los códigos existentes no permiten calcular la trayectoria de los fotones de manera que podamos determinar si son primarios o secundarios dadas sus direcciones de emisión. Lo anterior permitirá realizar dosimetría, microdosimetría e Imagenología en sistemas de radioterapia, braquiterapia y medicina nuclear.

Capítulo 3: Marco Teórico

Radiación

La radiación es definida como una transmisión espacial de energía en forma de partículas emitidas por átomos inestables o por ondas electromagnéticas, generalmente se clasifica en radiación ionizante y no ionizante [6].

Las radiaciones ionizantes se caracterizan por su capacidad para excitar e ionizar átomos de la materia con la que interactúan, al proceso en el cual un átomo o una molécula adquiere una carga positiva o negativa al perder o ganar electrones se le conoce como ionización. Sabemos que la energía necesaria para hacer escapar a un electrón de valencia es del orden de los 4-25 eV por lo tanto, la radiación debe de llevar energías cinéticas o cuantos de energía más altas de esta magnitud para poder ser llamada radiación ionizante [6].

Una característica importante de la radiación ionizante es la liberación localizada de grandes cantidades de energía, por ejemplo, la energía liberada por evento de ionización es alrededor de 33 eV, que es una energía más que suficiente para romper un enlace químico fuerte [7].

La radiación ionizante puede considerarse como electromagnética o de partículas, podemos considerar que a la radiación electromagnética la componen los rayos X y γ (tienen las mismas características, pero una diferente manera de producción) [7] en Medicina Nuclear como en Radioterapia se utiliza este tipo de radiación para diagnóstico o tratamiento, siendo de suma importancia conocer las características de cada uno.

Los rayos γ son considerados como la radiación electromagnética emitida por un núcleo o la radiación que se produce en las reacciones de aniquilación entre materia y antimateria. La energía cuántica de cualquier fotón se da en keV por la siguiente ecuación [6]:

$$E_{\gamma} = h\nu \quad (1)$$

Donde h es la constante de Planck (6.626×10^{-34} Js) y ν es la frecuencia.

Los rayos X son la radiación electromagnética emitida por las partículas cargadas (generalmente electrones) en el cambio de niveles de energía atómica de fluorescencia (llamados rayos X característicos) o en la desaceleración en un campo de fuerza de Coulomb (rayos X continuos o bremsstrahlung), los rangos de energía

de los rayos X, en función de la diferencia de potencial de su generación se muestra en la siguiente tabla:

0.1-20 kV	Baja energía
20-120 kV	Rango de diagnóstico (rayos X)
120-300 kV	Rayos X de ortovoltaje
300 kV - 1 MV	Rayos X de energía media
Arriba de 1 MV	Rayos X de megavoltaje

Tabla 1: Rangos de la diferencia de potencial para la creación de rayos X

Por lo tanto, concluimos que los rayos γ son producidos de forma intranuclear y los rayos X son producidos de forma extranuclear [7].

La radiación ionizante que se considera proveniente de las partículas son los:

- Electrones rápidos.
- Partículas cargadas pesadas: Protón, Deuterón, Tritón, partículas α , Piones.
- Neutrones.

La ciencia que se encarga del estudio de la radiación ionizante y su interacción con la materia, con especial interés en la energía absorbida es la física radiológica. Está comenzó con el descubrimiento de los rayos X por Wilhelm Roentgen, de la radioactividad por Henri Becquerel, y del radio por el matrimonio Curie en la década de 1890 [6].

Procesos de interacción de la radiación ionizante con la materia

La radiación al interactuar con la materia lleva a cabo dos propiedades: la penetración de la materia y el depósito de la energía (este último de gran utilidad en Física Medica), siendo los procesos más comunes la ionización y la excitación de los átomos transfiriendo energía al medio [8], esto debido a la radiación electromagnética y la proveniente de partículas cargadas.

En la radiación electromagnética (rayos X y γ) existen 5 efectos diferentes de interacción de la radiación con la materia [6], que varían dependiendo de la energía del fotón incidente y el número Z efectivo del material de interacción. Los tres principales efectos son el Fotoeléctrico, Compton y Producción de Pares, estos tres efectos los podemos ver en la figura 1 donde el eje X representa la energía del fotón incidente en (MeV) y el eje Y representa el número atómico Z efectivo del material absorbedor, las curvas que se observan en esta figura representan los valores donde la sección eficaz de interacción es igual para dos efectos distintos y las

regiones delimitadas por estas curvas significan que en esa área determinada el efecto que se representa es dominante, es decir que tiene una mayor probabilidad de ocurrencia. Por lo tanto, se entiende como sección eficaz a la magnitud proporcional a la probabilidad de que un efecto tenga lugar [39].

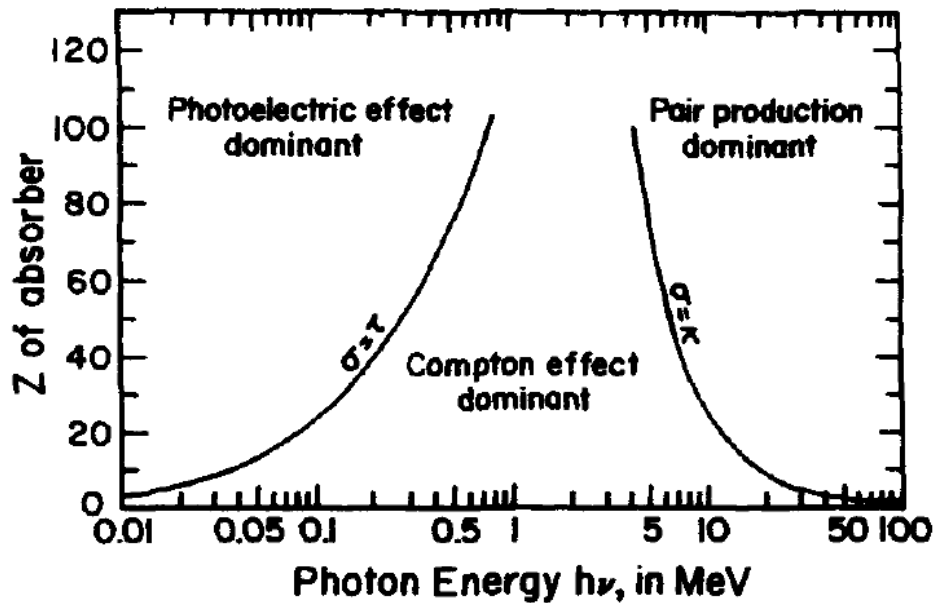


Figura 1: Importancia relativa de los tres principales tipos de interacciones de rayos γ . Las curvas muestran los valores de Z y E_γ para el que dos tipos de efectos son iguales. (Reproducido de Evans (1955) con permiso de R. D. Evans y McMw-Hill Book Company) [6].

El efecto Fotoeléctrico es dominante a energías bajas y números Z altos, también como se puede ver en la figura 1 el efecto Compton tiene un amplio espectro de energía y Z efectivo donde se muestra dominante por ello este efecto resulta ser fundamental en el estudio del transporte de fotones ionizantes y por último el efecto de Producción de Pares es dominante para la región delimitada de altas energías y alto número Z.

Como se mencionó previamente existen 5 tipos de diferentes de interacción de la radiación con la materia los tres principales son los ya descritos, el efecto Fotoeléctrico, Compton y Producción de Pares, los otros dos efectos se conocen como la dispersión coherente Rayleigh y las interacciones fotonucleares, cada uno de estos 5 efectos se describen a detalle a continuación:

Dispersión coherente de Rayleigh

La dispersión de Rayleigh se llama "coherente" porque el fotón es dispersado por la acción combinada de todo el átomo. El evento es elástico en el sentido de que el fotón no pierde esencialmente nada de su energía; el átomo se mueve lo suficiente como para conservar el momento. El fotón es generalmente redirigido a través de sólo un pequeño ángulo. Por lo tanto, el efecto en un haz de fotones sólo se puede detectar en la geometría de haz estrecho [6], la dispersión coherente se hace evidente a energías bajas de los fotones (valores debajo de 30 keV), se conoce que en las aplicaciones médicas solamente un máximo del 3% de todas las interacciones que ocurran serán de este tipo [9], la figura 2 muestra de manera esquemática la representación del efecto Rayleigh.

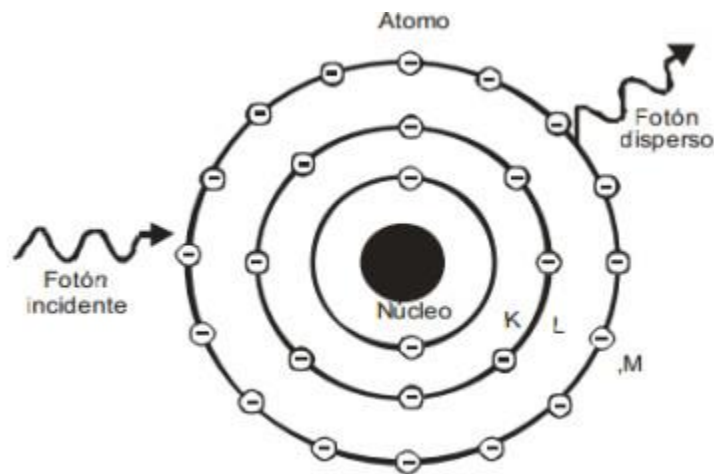


Figura 2: Dispersión coherente Rayleigh [8]

En la figura 2 se observa como el fotón incidente interacciona con la nube electrónica del átomo y sale un fotón dispersado que tiene la misma energía que el fotón incidente, pero con un pequeño ángulo respecto a la trayectoria inicial del fotón. Como los fotones solo sufren cambio en la dirección, pero no en la energía, este efecto no contribuye en el depósito de energía en el medio [26].

La sección eficaz Rayleigh se utiliza para conocer como es la interacción de los fotones con los átomos y se describe como [9,40,41]:

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

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, $q = \frac{1}{\lambda_0} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ y $F(q,Z)$ es el factor de forma atómico. $F(q,Z)$ se aproxima a Z cuando q se aproxima a cero, ya

sea porque la energía del fotón incidente $h\nu_0$ tiende a cero o porque θ tiende a cero [9].

Efecto Fotoeléctrico

El efecto Fotoeléctrico es la interacción más importante de fotones de baja energía con la materia, como se indica en la figura 1. Las secciones eficaces correspondientes al efecto fotoeléctrico aumentan fuertemente para medios de alto Z. En consecuencia, el efecto fotoeléctrico predomina a fotones de baja energía [6]. En este efecto el fotón incidente desaparece y toda su energía es cedida a un electrón fuertemente unido (normalmente de las capas más internas K, L o M) [9] cuya energía de unión es igual o menor que la energía del fotón. La partícula ionizante primaria resultante de esta interacción son los fotoelectrones, donde esta partícula puede salir del medio absorbente o con mayor probabilidad ser reabsorbida debido al corto alcance que tiene, la energía de esta partícula está determinada por la siguiente ecuación [6]:

$$T = h\nu - E_b \quad (3)$$

Donde T es la energía cinética del fotoelectrón, $h\nu$ es la energía incidente del fotón y E_b es la energía potencial del electrón ligado al átomo, la sección eficaz de interacción para este efecto por átomo integrada sobre todos los ángulos de emisión de fotoelectrones, se puede escribir como:

$$\sigma_F \cong \frac{Z^n}{(h\nu)^m} \quad (4)$$

Donde n tiene un valores hasta 4 para energías de $h\nu$ menores de 0.1 MeV y subiendo gradualmente hasta 4.6 a energías de 3 MeV, para la variable m sus valores son \cong a 3 para energías de $h\nu$ menores a 0.1 MeV y disminuyendo gradualmente hasta alrededor de 1 a energías de 5 MeV [6,9].

Los fotoelectrones disipan su energía en el medio absorbente principalmente por la excitación e ionización [6].

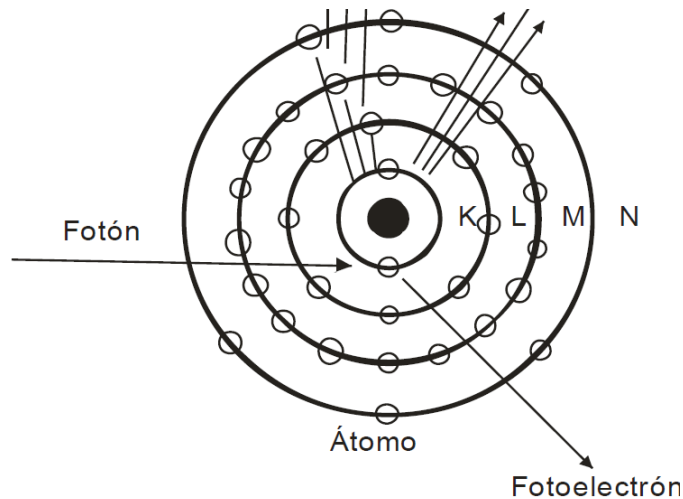


Figura 3: Efecto fotoeléctrico [9]

Para el desarrollo de este código se restringe solamente al transporte de fotones ionizantes y los fotoelectrones se considera que depositan toda su energía en el medio.

Efecto Compton

El efecto Compton representa una colisión entre un fotón y un electrón libre; se considera a un electrón libre como aquel que tiene una energía de enlace al átomo mucho menor que la energía del fotón incidente, como se muestra esquemáticamente en la figura 4, donde se observa como el electrón libre debe ser de las últimas o de la última capa del átomo; se conoce que en la colisión entre un fotón y un electrón libre, es imposible que toda la energía del fotón sea transferida al electrón si el impulso y la energía se han de conservar [6], debido a que a que el fotón incidente no transfiere toda su energía al electrón, éste debe ser dispersado con una energía $h\nu'$ que es menor a la energía que inicialmente poseía. La diferencia entre la energía del fotón incidente y el fotón dispersado es la que se transfiere al electrón libre [9] y esta la podemos observar en la ecuación 5 donde el fotón dispersado tendrá una frecuencia ν' menor a la frecuencia ν del fotón incidente para que se conserve la energía [6]:

$$h\nu = E_e + h\nu' \quad (5)$$

Para que se conserve el momento durante este proceso se obtiene:

$$\frac{hv}{c} = p_e + \frac{hv'}{c} \quad (6)$$

Donde E_e y p_e representan la energía total y el momento del electrón respectivamente. De esta manera, el efecto Compton se expresa así:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \theta) \quad (7)$$

En la cual λ es la longitud de onda del fotón incidente, λ' del fotón dispersado y θ es el ángulo de dispersión del fotón. La probabilidad del efecto Compton va a disminuir cuando se aumenta la energía del fotón incidente y el número atómico Z [9].

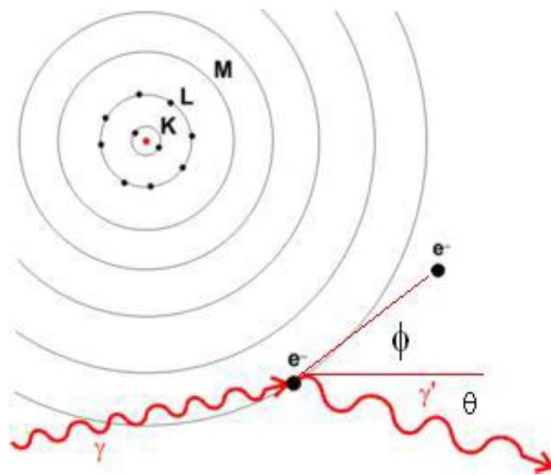


Figura 4: Efecto Compton [9].

Para describir dicho proceso se calculan varias cantidades: la probabilidad de que ocurra la interacción en función de la energía del fotón incidente y las nuevas direcciones, así como las energías del fotón y el electrón después de la colisión. Por lo tanto, la sección eficaz diferencial del efecto Compton está determinada por la fórmula de Klein-Nishina y con ella se puede calcular la nueva dirección del fotón [8, 32]:

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 + \cos\theta)]} \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\alpha^2(1 + \cos\theta)}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \right] \quad (8)$$

donde, σ_{KN} es la sección eficaz por electrón, Ω es el ángulo sólido, r_0 es el radio clásico del electrón y $\alpha = \frac{h\nu}{m_e c^2}$ es la energía del fotón incidente en términos de la masa en reposo del electrón. Integrando para todo el ángulo sólido se tiene la sección eficaz del efecto Compton [6,9,41]:

$$\sigma_C = 2\pi r_0^2 \left[\frac{1 + \alpha}{\alpha^2} \left(\frac{2(1 + \alpha)}{1 + 2\alpha} - \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{\alpha} \right) + \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{2\alpha} - \frac{1 + 3\alpha}{(1 + 2\alpha)^2} \right] \quad (9)$$

Producción de pares

Un fotón cuya energía supera 1.022 MeV puede a medida que pasa cerca de un núcleo, desaparecer espontáneamente, y su energía vuelve a aparecer como un positrón y un electrón, como se ilustra en la figura 5. Cada una de estas dos partículas tiene una masa de $m_0 c^2$ o 0.512 MeV, y la energía cinética total de las dos partículas es casi igual a $E_\gamma - 2 m_0 c^2$. Esta transformación de la energía en masa debe tener lugar cerca de una partícula, tal como un núcleo, para que el impulso se conserve. La energía cinética del núcleo en retroceso es muy pequeña [6].

La ecuación de conservación de energía, haciendo caso omiso de la energía cinética extremadamente pequeña dada al núcleo, es:

$$h\nu = 2m_0 c^2 + T^+ + T^- \quad (10)$$

$$h\nu = 1.022 \text{ MeV} + T^+ + T^- \quad (11)$$

El electrón y el positrón no necesariamente reciben energías cinéticas iguales, pero su media está dada por:

$$T = \frac{h\nu - 1.022 \text{ MeV}}{2} \quad (12)$$

Para valores $h\nu$ muy por encima del umbral de energía $2m_0 c^2$, los electrones y positrones están fuertemente dirigidos hacia adelante. Su ángulo promedio de salida en relación con la dirección original del fotón es aproximadamente la descrita por la ecuación 13 [6]:

$$\theta = \frac{m_0 c^2}{T} \quad (13)$$

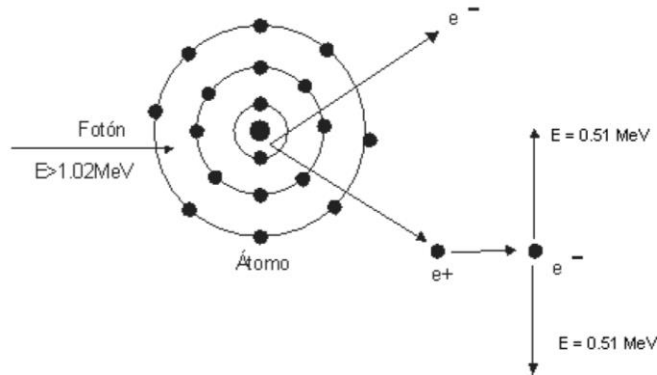


Figura 5: Producción de pares [8].

El par positrón-electrón pierde su energía cinética por ionización, excitación y bremsstrahlung como cualquier otro electrón con energía cinética [9], como se observa en la figura 5 el positrón perderá energía hasta que se aniquile formando un par de gammas de 0.511 MeV de energía. En el código desarrollado cuando el fotón incidente interactuare por este efecto se considera que deposita toda su energía en el medio.

Interacción fotonuclear

Es el último proceso de interacción de la radiación con la materia, en una interacción fotonuclear, el fotón energético (que excede unos pocos MeV) entra y excita un núcleo, el cual luego emite un protón o neutrón, estos contribuyen directamente al kerma, pero la cantidad relativa permanece inferior al 5% debido a la Producción de Pares. Por lo tanto, no es considerado comúnmente en mediciones de dosimetría [6]. El código desarrollado en este trabajo tiene una energía máxima de 6 MeV por ende este efecto no es considerado.

Sección eficaz y coeficiente de atenuación

Se definió a la sección eficaz como la magnitud proporcional a la probabilidad de que un efecto tenga lugar [39], este efecto puede ser debido por interacción Rayleigh, Fotoeléctrico, Compton y Producción de Pares, en un haz de fotones

monoenergéticos o polienergéticos experimentaran los diferentes tipos de interacciones mencionados, por ende las secciones eficaces nos expresan la probabilidad de ocurrencia de cada efecto dependiendo de la energía que tenga el fotón incidente [9], a la suma total de las probabilidades de todos los efectos se le conoce como sección eficaz total [42,43,44], debido a que el haz de fotones atraviesa un medio absorbente y este haz interacciona con este medio se sufre una atenuación exponencial por lo que se define a la medida del número de fotones primarios que han sufrido una interacción como el coeficiente de atenuación lineal μ o expresado de otra forma a la probabilidad total por unidad de longitud, la atenuación exponencial es relevante para la radiación ionizante sin carga, ya que esta puede perder su energía de manera gradual, se observa en la figura 6 como un haz de fotones incidente N_0 atraviesa un material absorbente de longitud L , a la cual después de interactuar solo la atraviesan N_L fotones [6,44].

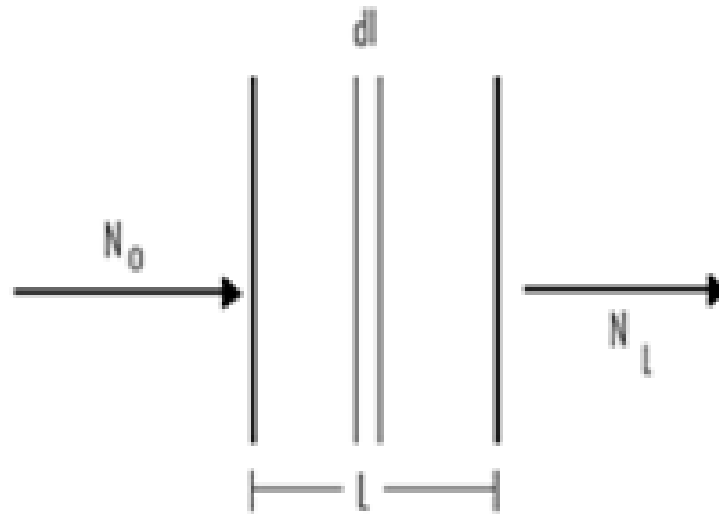


Figura 6: Haz de fotones atravesando un medio absorbente.

Se define a $\mu * L$ como la probabilidad de que una partícula interactúa en una unidad de espesor de material atravesado L , si figamos un diferencial de espesor dL entonces la probabilidad de interacción es $\mu * dL$, si N partículas interactúan en dL se obtiene [6,44]:

$$dN = -\mu dL * N = -\mu N dL \quad (14)$$

Donde μ tiene unidades de cm^{-1} o m^{-1} , el coeficiente de atenuación lineal total es la suma de los coeficientes de atenuación lineal para cada proceso de interacción de la radiación con materia μ_T ; si se divide al coeficiente lineal de atenuación μ entre la densidad ρ se obtiene el coeficiente de atenuación másico (μ/ρ) con unidades de cm^2/g ó m^2/kg , medida que se obtiene de las tablas proporcionadas en la base de datos del NIST XCOM [45] y que se muestran en la figura 7 donde se aprecia el coeficiente de atenuación másico para los diferentes procesos de interacción la

radiación con la materia, a la suma de todos los coeficientes másicos se le conoce como coeficiente másico total de atenuación.

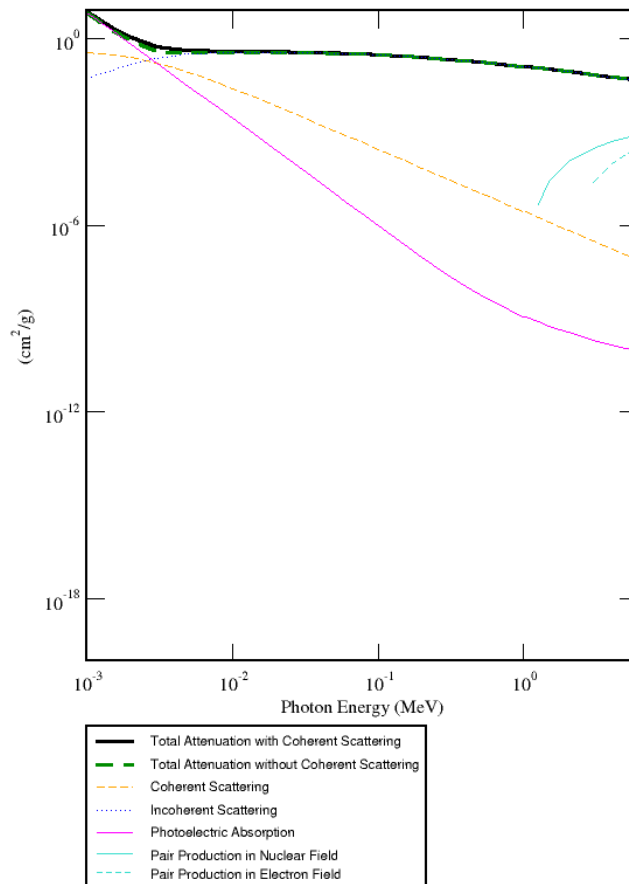


Figura 7: Coeficiente de atenuación másico de efecto Rayleigh, Fotoeléctrico, Compton, Producción de Pares y coeficiente másico de atenuación total

Fracción de energía depositada

En todos los procesos de interacción de la radiación con la materia con excepción de la dispersión Rayleigh depositan energía en el medio de interacción por lo cual para estimar la dosis de rayos X, y que se deposita en un punto interno de un objeto radiactivo de tamaño intermedio, se define una cantidad denominada fracción absorbida [AF] determinada por la siguiente ecuación [6]:

$$AF = \frac{\text{Energía de rayos y absorbida en el volumen blanco}}{\text{Energía de rayos y emitida por la fuente}} \quad (15)$$

Una aproximación de la fracción de energía depositada en un blanco con un volumen uniforme se puede obtener a través de la ecuación:

$$AF_{dv,V} \cong 1 - e^{-\mu_{en} * r} \quad (16)$$

donde \tilde{r} es el radio promedio que para una esfera es el radio de la misma, y μ_{en} es el coeficiente de absorción de energía de los diferentes tipos de medios.

Método Monte Carlo

El método Monte Carlo consiste en una solución numérica a un problema que modela la interacción de un objeto con otro objeto o la interacción del objeto con su entorno. Representa un intento de modelar la naturaleza a través de simulación directa de la dinámica esencial del sistema en cuestión. El método de Monte Carlo es esencialmente simple en su enfoque de una solución a un sistema macroscópico a través de la simulación de sus interacciones microscópicas. Una solución es determinada por muestreo aleatorio de las relaciones o interacciones microscópicas, hasta que el resultado converge, en medida en que muchas interacciones microscópicas pueden ser modeladas matemáticamente, la solución repetitiva puede ser ejecutada por un ordenador dando paso a una simulación [9,38]. En algunos casos, las interacciones microscópicas son bien conocidos como por ejemplo las interacciones electromagnéticas de electrones de alta energía y los fotones los cuales pueden verificarse por experimentos.

El método Monte Carlo es considerado como un método preciso para dar solución a problemas de transporte de radiación ionizante y no ionizante, a lo largo de la historia se ha estudiado la simulación del transporte de radiación ionizante en uno o varios medios materiales conformando geometrías distintas de estudio [46] en el área médica es importante saber la interacción de la radiación ionizante con el tejido blando, debido a que estas interacciones dan paso a solución en aplicaciones de diagnóstico, terapia y reconstrucción de imágenes. Con el método Monte Carlo los procesos físicos son simulados teóricamente sin necesidad de resolver completamente ecuaciones de un sistema. Sin embargo, es importante conocer las funciones de densidad de probabilidad que describen el comportamiento del sistema a estudiar. Con el algoritmo de Monte Carlo requerimos generar números aleatorios que sigan una cierta distribución de probabilidad en general uniforme [9].

El método Monte Carlo es útil para predecir las trayectorias de las partículas de alta energía a través de detectores y otros conjuntos complejos de materiales, el transporte de partículas es de tipo estocástico (no se puede prever que tipo de interacción se produce a cada momento pero si se le puede asignar una probabilidad a cada uno de ellos), para el caso de la interacción de la radiación con la materia descritas por el efecto Compton, Fotoeléctrico, Rayleigh y Producción de Pares; las distribuciones de probabilidad son conocidas y el método Monte Carlo aplicado a la simulación modela cada uno de los posibles sucesos [9,38,47].

En el transporte de radiación ionizante las historias o trayectorias de fotones se determinan usando el coeficiente de atenuación másico para definir la probabilidad de interacción de cada proceso y el coeficiente lineal de atenuación μ se utiliza para calcular la distancia que recorre un fotón de una interacción a otra durante todo el recorrido que realiza en cada historia dentro del medio atenuador o fuera del mismo, esta trayectoria se conoce como camino libre medio y se calcula a través de la siguiente ecuación [17,48]:

$$s = -\frac{\ln(\xi)}{\mu_T} \quad (17)$$

Donde s es el camino libre medio, ξ es el número aleatorio uniformemente distribuido en un intervalo de (0,1) y μ_T es el camino libre medio total.

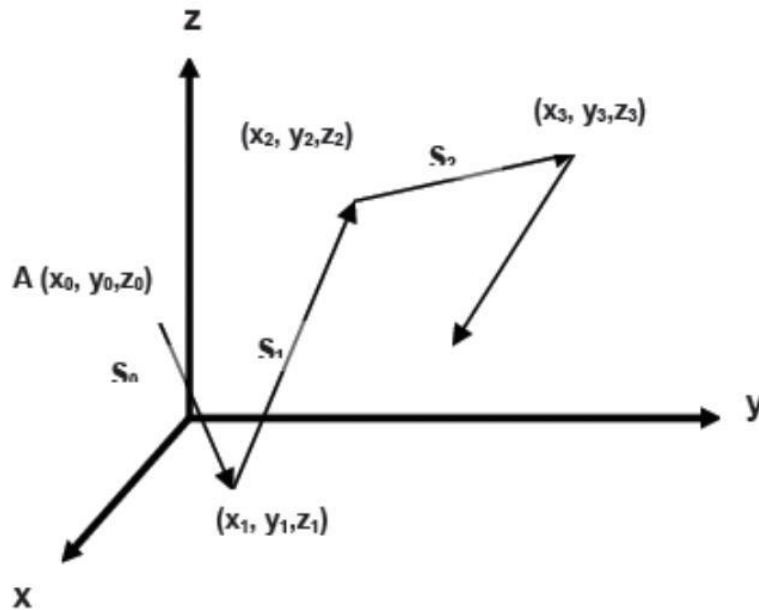


Figura 8: Trayectoria de un fotón y camino libre medio [47]

En la figura 8 observamos la trayectoria de un fotón (historia), en ella se calcula el camino libre medio (distancia que recorre antes de interactuar), si se obtienen las coordenadas para cada interacción se puede reconstruir toda su trayectoria.

Generación de números aleatorios

Los números aleatorios son muy importantes en la simulación de sistemas físicos utilizando modelos estadísticos ya que estos números aleatorios son los iniciadores del proceso [25]. Existen gran cantidad de algoritmos generadores de números aleatorios y estos deben de cumplir básicamente los siguientes objetivos:

- Debe de ser lo más rápida la generación de números aleatorios.
- Se debe de garantizar la aleatoriedad de los números es decir no pueden estar correlacionados entre si.
- La secuencia de repetición de los números debe de ser larga.

En la generación de números aleatorios se utilizan dos métodos los cuales son el método directo y el método del rechazo, estos dos métodos realizan un muestreo de las variables aleatorias a través de la función de distribución de probabilidad.

Método directo

Se generan números aleatorios uniformemente distribuidos entre [0,1], por lo cual la función de densidad de los números aleatorios r se define como $p(r) = 1$, lo que nos asegura que la probabilidad de que r sea un numero entre 0 y 1 es del 100%

Se toma una variable aleatoria ξ , con una densidad de probabilidad establecida por la función $p(x)$ con dominio en el intervalo $[a, b]$. Por lo cual la probabilidad de que la variable ξ tome un valor entre x y $x + dx$ es:

$$P(x < \xi < x + dx) = p(x)dx \quad (18)$$

Se construye una variable aleatoria r con la siguiente ecuación:

$$r = \int_a^{\xi} p(x)dx \quad (19)$$

Se puede demostrar que r es una variable aleatoria entre 0 y 1. Por lo que, si se quiere generar una variable aleatoria ξ , con densidad de probabilidad $p(x)$ a partir de un generador de números uniforme r . Así por cada número proporcionado por el generador uniforme se obtiene un ξ [9,41,47,48].

Método de rechazo

Si la variable Ψ está definida en un intervalo finito (a, b) y su función de probabilidad está acotada en todo el intervalo de definición: $f(x) < C$, donde C es la cota de $f(x)$ se puede aplicar el método del rechazo, se toman en cuenta los siguientes pasos:

1. Generar dos números aleatorios ξ_1 y ξ_2 , uniformemente distribuidos en el intervalo de $(0,1)$.
2. Calcular un valor posible de la variable Ψ uniformemente distribuida en (a,b) , como:

$$\Psi_1 = a + \xi_1(b - a) \quad (20)$$

3. Evaluar Ψ_1 en la función de densidad de probabilidad, si el valor de $f(\Psi_1) > \xi_2/C$, se acepta el valor de Ψ_1 , en caso contrario repetir el procedimiento.

Este procedimiento es menos eficiente que el método directo [9,41,47,48].

Muestreo del efecto Compton con el Método Monte Carlo

El efecto Compton es la interacción más importante en el tejido blando debido a que su rango de energía es muy amplio y va de unos cuantos keV a 10 MeV y prácticamente es independiente del número Z efectivo del material debido a que interactúa con electrones libres o electrones casi libres es decir de la últimas capas energéticas de los átomos, el desarrollo de métodos que hagan un correcto muestreo de este efecto ha ido en aumento, los métodos principales son el método clásico, el método Kahn y el método EGS, todos ellos con ayuda de la metodología Monte Carlo para dar solución al problema, estos métodos dan una solución a la ecuación de la sección eficaz de Klein-Nishina, en este trabajo se analizó el muestreo del ángulo de dispersión Compton por el método de Kahn y el EGS.

Método Kahn para dispersión Compton

Este método es un algoritmo desarrollado por Kahn y se basa en la ecuación de Klein-Nishina haciendo la suposición de que los electrones libres se encuentran en reposo dentro del dispersor [47], por lo tanto, de la siguiente ecuación de KN:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\alpha, \theta)}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1 + \cos^2\theta}{[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \frac{\alpha^2(1 + \cos\theta)^2}{(1 + \cos^2\theta)[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]} \right] \quad (21)$$

Con $r_e = 2.818 \times 10^{-15}$ m el radio clásico del electrón, θ el ángulo polar de dispersión para el 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 [47].

Tomando a $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi$ e integrando a través del ángulo azimutal φ llegamos a la siguiente expresión:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\alpha, \theta)}{d\theta} = \pi r_e^2 \frac{1 + \cos^2\theta}{[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos\theta)^2}{(1 + \cos^2\theta)[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]} \right] \sin\theta \quad (22)$$

Resolviendo las operaciones de la ecuación 22 y considerando las leyes de la conservación de energía y el impulso la energía del fotón dispersado en unidades de masa de reposo del electrón se puede expresar como [47]:

$$\alpha' = \frac{\alpha}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \quad (23)$$

Se obtiene:

$$\frac{d\sigma_{KN}(x, \theta)}{d\theta} = \pi r_e^2 \frac{1}{x^2} \left[x + \frac{1}{x} + \cos^2\theta - 1 \right] \sin\theta \quad (24)$$

Donde $x = \alpha/\alpha' = 1 + \alpha(1 - \cos\theta)$, siguiendo la metodología explicada en [47] se obtiene la función de densidad de probabilidad de como:

$$f(x, \theta, \alpha) = \frac{1}{\alpha x^2} \left[x + \frac{1}{x} + \cos^2\theta - 1 \right] \quad (25)$$

Con $\cos(\theta) = 1 - (x-1)/\alpha$, para el valor de $\theta = 0$ el valor de x es mínimo y cuando $\theta = \pi$ el valor de x es máximo, es decir $1 \leq x \leq 1+2\alpha$, debido a que el método de muestro de Kahn es un reajuste de la FDP representada en la ecuación 25 [27,47].

Método EGS para dispersión Compton

El código de transporte de radiación ionizante EGS (Electron Gamma Shower) es un código de propósito general donde se realiza el transporte acoplado de electrones y fotones con geometrías distintas en intervalos de energía de keV hasta TeV [15,47], en este código se propone un muestreo del ángulo de dispersión causado por el efecto Compton, el cual propone una solución de la ecuación de KN de la siguiente forma:

$$\frac{d\sigma(h\nu)}{dh\nu'} = \frac{X_0 n \pi r_e^2 m_e c^2}{(h\nu)^2} \left[\frac{C_1}{\varepsilon} + C_2 + C_3 + \varepsilon \right] \quad (26)$$

Donde:

- X_0 = longitud de la radiación (cm).
- n = densidad de electrones (electron/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).
- $\varepsilon = h\nu/h\nu'$
- $C_1 = (h\nu_0)^{-2}$
- $C_2 = 1 - 2(1 + h\nu_0)/(h\nu_0)^2$
- $C_3 = 1 + 2h\nu_0/(h\nu_0)^2$
- $h\nu_0 = h\nu/m_e c^2$

Al resolver esta ecuación de acuerdo al procedimiento descrito en [47] se obtiene la ecuación de la FDP como:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon = \sum_{i=1}^2 \alpha_i f_i(\varepsilon) \quad (27)$$

Con:

$$\alpha_1 = \text{Ln}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \text{ y } f_1(\varepsilon) = \frac{1}{\text{Ln}\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\right)} \left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \quad (28)$$

$$\alpha_2 = \frac{1 - \varepsilon_0^2}{2} \text{ y } f_2(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon}{1 - \varepsilon_0^2} \quad (29)$$

Donde $\varepsilon \in (\varepsilon_{0,1})$, se muestrea la FDP por el método del rechazo y se obtienen los valores de los ángulos polares y azimutales.

Código MCNPX

Es un código de propósito general Monte Carlo de N-partículas que se puede utilizar para simular el transporte de neutrones, fotones, electrones, o el transporte de neutrones / fotones / electrones acoplado. Las áreas específicas de aplicación son la protección radiológica, dosimetría, la radiografía, la física médica, diseño y

análisis detectores, diseño de aceleradores de fisión, diseño de reactores de fusión, entre otros. El código trata una configuración tridimensional arbitraria de materiales en celdas geométricas delimitadas por superficies de primer y segundo grado y toros elípticos de cuarto grado. Datos de corte transversal puntual normalmente se utilizan, aunque los datos de grupos están también disponibles. Para los fotones, el código representa la dispersión incoherente y coherente, la posibilidad de la emisión fluorescente después de la absorción fotoeléctrica, la absorción en la producción de pares con la emisión local de radiación de aniquilación y la radiación de frenado [12], este código tiene una gran aceptación en la comunidad científica siendo uno de los más utilizados por ende se utilizó para la comparación y validación del depósito de energía en una geometría dada entre el código desarrollado y este código de propósito general MCNPX.

Capítulo 4: Metodología

Se desarrolló el núcleo del código de transporte de fotones ionizantes con la metodología Monte Carlo utilizando la técnica de evento-por-evento con el propósito de utilizarlo en las áreas de imagenología, medicina nuclear y radioterapia, este código permite visualizar la trayectoria completa de los fotones ionizantes, obteniendo y guardando su posición en todo el recorrido que tiene antes de su absorción total, además se conoce a través de la simulación cuál es el tipo de interacción con la materia que efectúa el fotón en todo su recorrido, esto determino si cede parte o nada de su energía así como la nueva posición hacia donde el fotón se dispersó (efecto Compton y Rayleigh), el otro caso es si el fotón cede completamente su energía se realiza el depósito completo de esta misma en la posición donde interacciono (efecto Fotoeléctrico y Producción de Pares), se consideró un medio homogéneo de agua debido a que actualmente la dosimetría se sigue desarrollando en este medio principalmente.

En general se consideró una fuente puntual de emisión isotrópica de fotones monoenergéticos con una localización en el centro del plano coordinado en 3 dimensiones (0,0,0), se utilizaron esferas concéntricas con centro en el origen con radio inicial de 2 cm y un incremento de 2 cm hasta un radio máximo de 30 cm donde se realizó el depósito de energía, se utilizó el código MCNPX para desarrollar la comparación y validación del código, donde se simularon las mismas condiciones iniciales descritas en el código desarrollado y se realizó la comparación de la energía depositada por fotón, en una segunda validación se comparó los datos de la fracción de energía depositada en una geometría esférica para una energía de 140 keV publicada por Furhang EE y colaboradores [35].

Núcleo del código de transporte de fotones ionizantes

El código de transporte de fotones ionizantes se desarrolló en C++ en el editor DevC++ en su última versión, para la realización del código se necesitaron valores iniciales que el usuario debe de introducir, una vez declaradas las paqueterías necesarias en C++ se requiere de la siguiente información:

- Energía de los fotones: es la energía inicial con la cual los fotones deben de ser emitidos desde la fuente puntual, esta emisión es isotrópica y tiene un rango de energía de 1 keV a 6000 KeV.
- Posición de emisión: son las coordenadas de lanzamiento inicial de los fotones ionizantes, puede ser centrada en los ejes coordinados p_0 (0,0,0) o distribuida uniformemente en una geometría específica, para la validación se considera el primer caso.

- Energía de corte inferior: es la energía final hasta la cual se seguirá el recorrido del fotón en caso de que este último no haya depositado previamente toda su energía.
- Número de historias que se simularan: repeticiones que se harán del programa, cada historia representa un fotón, este se ira siguiendo hasta que deposite toda su energía en el medio o se finalice en la energía de corte inferior.
- Geometría: el núcleo del código se desarrolló en un medio semi-infinito de agua, para la realización de la validación se definió una geometría esférica donde se realizó el depósito de la energía por fotón y la fracción de energía depositada en el medio homogéneo.

El funcionamiento del núcleo base del programa de simulación de fotones ionizantes se describe en el diagrama de flujo de la figura 9.

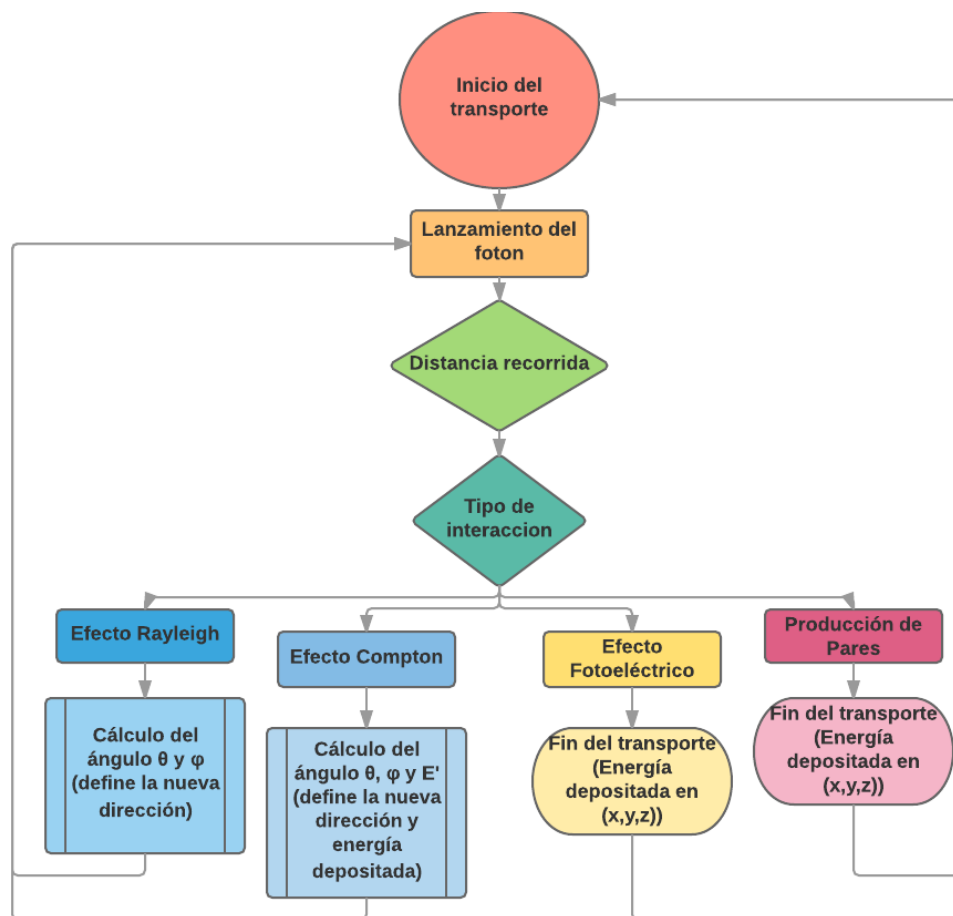


Figura 9: Diagrama de flujo del núcleo del programa de transporte de radiación

Una vez que se introdujeron las condiciones iniciales del transporte de radiación ionizante en la figura 9 se observa el proceso que seguirá el fotón a seguir, se calcula la distancia que este recorrió antes de interactuar, una vez obtenido este dato se determinó el tipo de interacción que se efectuó donde si es por causa del efecto Rayleigh o Compton se calculó la nueva posición a donde se dirigió el fotón, así como la energía que depósito y con la que se quedó si fue por efecto Compton, de nuevo se lanza el mismo fotón determinando la distancia que recorrió hasta su nueva posición de interacción donde nuevamente se calculó el efecto con el que interacciona, si el fotón inicial o el fotón que se sigue previamente una interacción del tipo Rayleigh o Compton interacciona por el efecto Fotoeléctrico y Producción de Pares como se observa en el diagrama, se deposita toda su energía en esa posición y se lanzó un fotón nuevo, este procedimiento se repite hasta la extinción del fotón para el número total de historias que se determinaron en las condiciones iniciales.

Generador de números aleatorios

En la simulación con la metodología de Monte Carlo es muy importante la generación correcta de números aleatorios uniformemente distribuidos en un intervalo, esto quiere decir que los números deben de tener la misma probabilidad de ocurrencia, en C++ existen muchos generadores de números aleatorios entre ellos está la función rand dada la siguiente instrucción [49,50]:

```
i = rand ( ) ;
```

Esta función genera un número de tipo entero entre los valores de 0 y RAND_MAX que es una constante simbólica definida en el encabezado <cstdlib>. Este valor está alrededor de 1 a 32767 - 32768 dependiendo del tipo de compilador que se use, pero esta función no genera 100% números aleatorios sino que genera números pseudoaleatorios con el problema de que si se llama repetidas veces la función rand se repiten las secuencias de números generadas lo cual para la implementación de la metodología MC no es útil pues se deben tener números aleatorios diferentes y uniformemente distribuidos en un intervalo establecido, la solución al problema de rand se obtiene al randomizar mediante la función srand, que básicamente lo que hace esta nueva función es depurar y condicionar para que se produzca una serie de números pseudoaleatorios diferentes cada vez que se ejecute el programa, esto se logra introduciendo una semilla para lo cual se utilizaron el siguiente comando [49,50]:

- `srand(time(NULL));`

Con esta línea se puede randomizar sin introducir una semilla diferente cada vez pues lo que realiza en la computadora es leer su reloj para obtener el valor de la semilla [49,50].

Donde un buen generador de números aleatorios debe de cumplir las siguientes condiciones [51]:

- Distribución de números uniforme en el intervalo de [0,1].
- Los números generados son independientes dentro de la serie generada.
- El ciclo del generador deberá ser lo más grande posible, debido a que si se repite un número debe de ser después de la generación de un gran número de números aleatorios previos.
- El generador debe ocupar poco espacio en la memoria y deberá de ser lo más rápido posible.

Se validó la uniformidad del generador utilizado en este trabajo, para comprobar su aleatoriedad.

Inicio de transporte y lanzamiento del fotón

Dado el valor de la posición $p_0(0,0,0)$ y energía inicial, se generarán tres números aleatorios uniformemente distribuidos ξ_1, ξ_2, ξ_3 en el intervalo de [0,1] para obtener la posición de la emisión isotrópica inicial de los fotones ionizantes, esta distribución considera los ejes negativos y positivos por lo cual se expande el intervalo de [0,1] a [-1,1] con la función para el eje x:

$$x = (2(\xi_1) - 1) + x_0 \quad (30)$$

Con ξ_1 el número aleatorio en el intervalo de [0,1] distribuido uniformemente a este se le suma x_0 que es la posición inicial de emisión para el caso de que la fuente puntual este centro de los ejes su valor es de 0, lo mismo se hace para el eje y, z:

$$y = (2(\xi_2) - 1) + y_0 \quad (30)$$

$$z = (2(\xi_3) - 1) + z_0 \quad (30)$$

Con estos tres valores se calculó la magnitud del vector que forman; para determinar los valores de los ángulos que forman en cada eje coordenado se calculó el valor de los cosenos directores, renombrados como:

- l para el eje x

$$l = \frac{x}{d} \quad (31)$$

- m para el eje y

$$l = \frac{y}{d} \quad (31)$$

- n para el eje z

$$l = \frac{z}{d} \quad (32)$$

Donde d es la magnitud del vector de la emisión isotrópica (figura 10), la suma de los cuadrados de los cosenos directores es igual a 1.

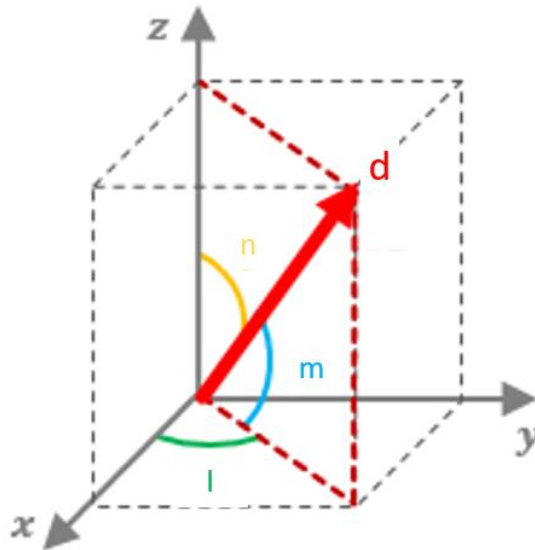


Figura 10: Cosenos directores del vector de emisión isotrópica de los fotones ionizantes

Con el valor del coseno director n del eje z se calculo el valor del ángulo azimutal y polar iniciales con la ecuación 33 y 34:

$$\text{ángulo azimutal} = \text{acos}(n) \quad (33)$$

$$\text{ángulo polar} = \text{acos}(1/\sin(\text{azimutal})) \quad (34)$$

Coeficiente másico de atenuación, coeficiente de atenuación lineal y distancia recorrida de fotón

Se utilizó la base de datos del XCOM NIST para obtener la sección eficaz de cada tipo de interacción de la radiación con la materia, así como el coeficiente másico de atenuación, para ello a los datos obtenidos se les ajustaron funciones que describen su comportamiento, el método de ajuste de funciones lo que busca es una función matemática $T = f(t)$ que con criterios característicos se ajuste lo más posible a todos los valores de la serie [52]; debido a que no existió una sola función que describa el comportamiento completo de cada efecto en el rango de energía de 1 a 6000 keV se dividió el rango completo en varios subintervalos y a cada uno de ellos se le ajustó la función que describió mejor su comportamiento, este procedimiento se realizó para cada efecto de interacción de la radiación con la materia.

Para realizar un correcto método de ajuste se realizaron los siguientes pasos [52]:

- Elección de la función analítica de ajuste.
- Determinación de los parámetros de la función de ajuste.
- Contraste de la bondad del ajuste.

Donde la bondad del ajuste se refiere a los parámetros de error del ajuste, mientras este error sea lo menor posible el ajuste propuesto será mejor [52], las funciones obtenidas se introdujeron al núcleo del código cuya variable está determinada por la energía del fotón.

El coeficiente masico de atenuación total $(\mu/\rho)_T$ está determinado por la suma de los coeficientes de atenuación másicos de cada efecto:

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T = \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{Rayleigh} + \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{Fotoeléctrico} + \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{Compton} + \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{P. \text{ núcleo}} + \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{P. \text{ electrón}} \quad (35)$$

El coeficiente de atenuación lineal total se determinó por la siguiente ecuación:

$$\mu_T = \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T * \rho \quad (36)$$

Por lo cual la probabilidad de interacción de cada proceso está determinada por las siguientes ecuaciones:

- Probabilidad del efecto Rayleigh

$$Prob_{\text{Rayleigh}} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{Rayleigh}}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T} \quad (37)$$

- Probabilidad del Efecto Fotoeléctrico

$$Prob_{\text{Fotoeléctrico}} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{Fotoeléctrico}}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T} \quad (38)$$

- Probabilidad de Compton

$$Prob_{\text{Compton}} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{Compton}}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T} \quad (39)$$

- Probabilidad del Producción de Pares en el Núcleo

$$Prob_{\text{p. núcleo}} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{p. núcleo}}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T} \quad (40)$$

- Probabilidad de Producción de Pares en los Electrones

$$Prob_{\text{p. electrón}} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{p. electrón}}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_T} \quad (41)$$

Una vez calculado el coeficiente lineal de atenuación total se genera un número aleatorio uniformemente distribuido “ ξ ” para el cálculo del camino libre medio “ s ” que recorre el fotón mediante la ecuación 17:

$$s = -\frac{\ln(\xi)}{\mu_T}$$

Con los valores de la posición inicial o anterior, la dirección hacia donde se movió el fotón (cosenos directores) y la distancia que recorrió el fotón se calcula las nuevas coordenadas de interacción en la ecuación 42:

$$\begin{aligned} x &= x_0 + l * s \\ y &= y_0 + m * s \\ z &= z_0 + n * s \end{aligned} \tag{42}$$

Donde x, y, z es la posición de interacción en los ejes coordenados, x_0 , y_0 , z_0 representan la posición inicial o anterior de interacción del fotón, l, m, n son los cosenos directores en los ejes y s es la distancia que recorre el fotón.

Tipo de interacción

El tipo de efecto con el que interacciona el fotón se calculó con las probabilidades de cada efecto descritas en las ecuaciones 37 a 41, a las cuales se le asignó un intervalo que representa la probabilidad de que ocurra ese efecto como se observa en la figura 11, la suma total de las probabilidades de todos los efectos es igual a 1.

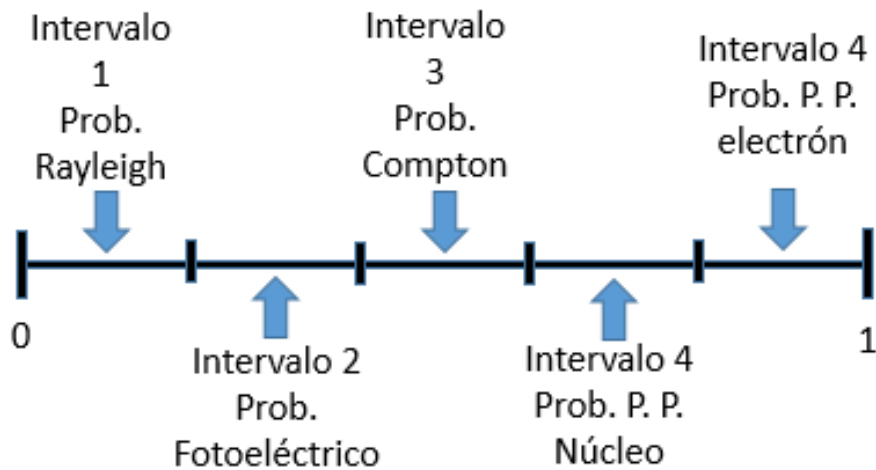


Figura 11: Probabilidad de ocurrencia de la interacción de la radiación con la materia

Después de haber construido los intervalos para cada efecto, se genera un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo de [0,1] y se compara este número con el valor de los diferentes intervalos construidos, al intervalo que

pertenezca el número aleatorio es el efecto por el cual el fotón interacciona en ese punto.

Interacción efecto Rayleigh

Cuando el fotón interacciona por este efecto no se pierde energía y solamente se calculó la nueva dirección hacia donde se dispersa el fotón, ya que el diámetro de la molécula de agua es mucho menor que la longitud de onda de los fotones gamma, el fotón dispersado va mayormente hacia enfrente, el muestreo de este efecto se realiza mediante la sección eficaz de Thompson descrita en la ecuación 2, el muestreo de este efecto se observa en la figura 12, donde se genera un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo de [0,1], con él se calculó el ángulo polar, una vez determinado el ángulo polar se calcula la función de peso establecida por la sección eficaz de Thompson, si esta cumple la condición de que es menor que la multiplicación de 2 por el número aleatorio inicialmente generado se acepta el ángulo polar calculado, en caso contrario se repite el procedimiento.

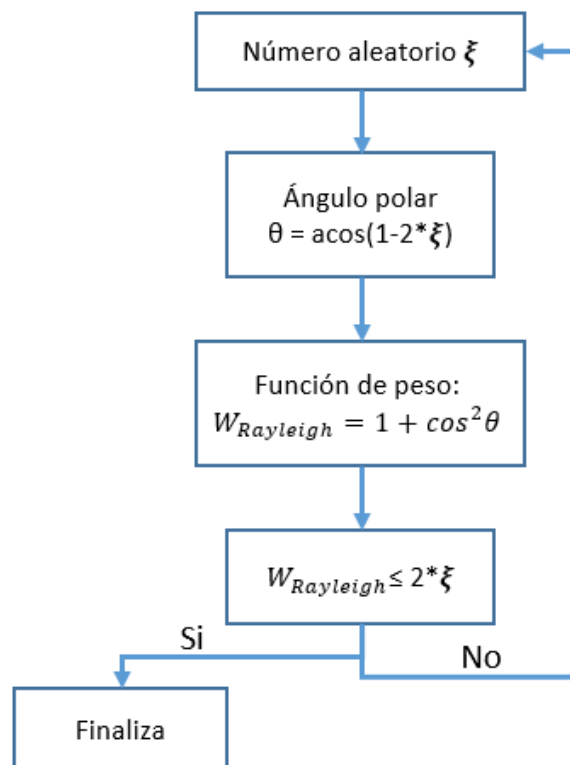


Figura 12: Muestreo del efecto Rayleigh

El ángulo azimutal debe de ser igual o menor que el ángulo polar generado para que la dispersión que representa este efecto sea pequeña por ende el ángulo azimutal se calculó con la siguiente ecuación:

$$\varphi = (2 * \xi_{azimutal} - 1) * \theta \quad (43)$$

Donde φ es el ángulo azimutal, $\xi_{azimutal}$ es un número aleatorio uniformemente distribuido generado para el ángulo azimutal y θ es el ángulo polar aceptado previamente. Determinados estos dos ángulos se calculó los nuevos cosenos directores hacia donde se dispersó el fotón.

Interacción efecto Fotoeléctrico

Si la interacción fue de debido al efecto fotoeléctrico, el fotón deposita toda su energía en ese punto:

$$Energía\ depositada = Energía\ del\ fotón \quad (44)$$

El fotón es absorbido, por lo cual el seguimiento para ese fotón (historia) termina en ese punto y se procedió a lanzar otro nuevo fotón o a terminar con la simulación.

Interacción Efecto Compton

Si el fotón interacciona a través del efecto Compton, este deposita parte de su energía a un electrón y sale dispersado de su trayectoria inicial, este muestreo se realizó a través de dos metodologías diferentes.

Método Kahn

Este método brinda un muestreo del ángulo polar generado en la dispersión Compton, con él se le da solución a la ecuación de KN descrita en el marco teórico, el muestreo sigue el algoritmo representado en el diagrama de la figura 13, donde se generan 3 números aleatorios γ_1 , γ_2 , γ_3 con γ_2 calculo la variable η , después se comparó si el número aleatorio γ_1 es menor o igual a la variable calculada T:

- Si se cumple esta condición se calcula la función de peso w conforme a la figura 13 y esta se usa para compararla con el número aleatorio γ_3 , de satisfacer la nueva condición para este número aleatorio, se calcula el ángulo polar como:

$$\theta = \text{acos}(1 - \eta) \quad (45)$$

Con ello se determina que la energía que pierde el fotón α' es determinada por la ecuación 23, de no satisfacer la condición para γ_3 se volvieron a generar 3 números aleatorios y se repite el proceso.

- Si no se cumple la condición de que γ_1 es menor o igual a la variable calculada T, la variable de peso w se calcula como se describe en la figura 13, si se sigue este camino ahora el ángulo polar se calculó de la siguiente manera:

$$\theta = \text{acos}(u) \quad (46)$$

Donde $u = 1 - (w-1/\alpha)$ y $\alpha = h\nu/m_e c^2$, aceptado el valor se calcula la energía del fotón dispersado α' .

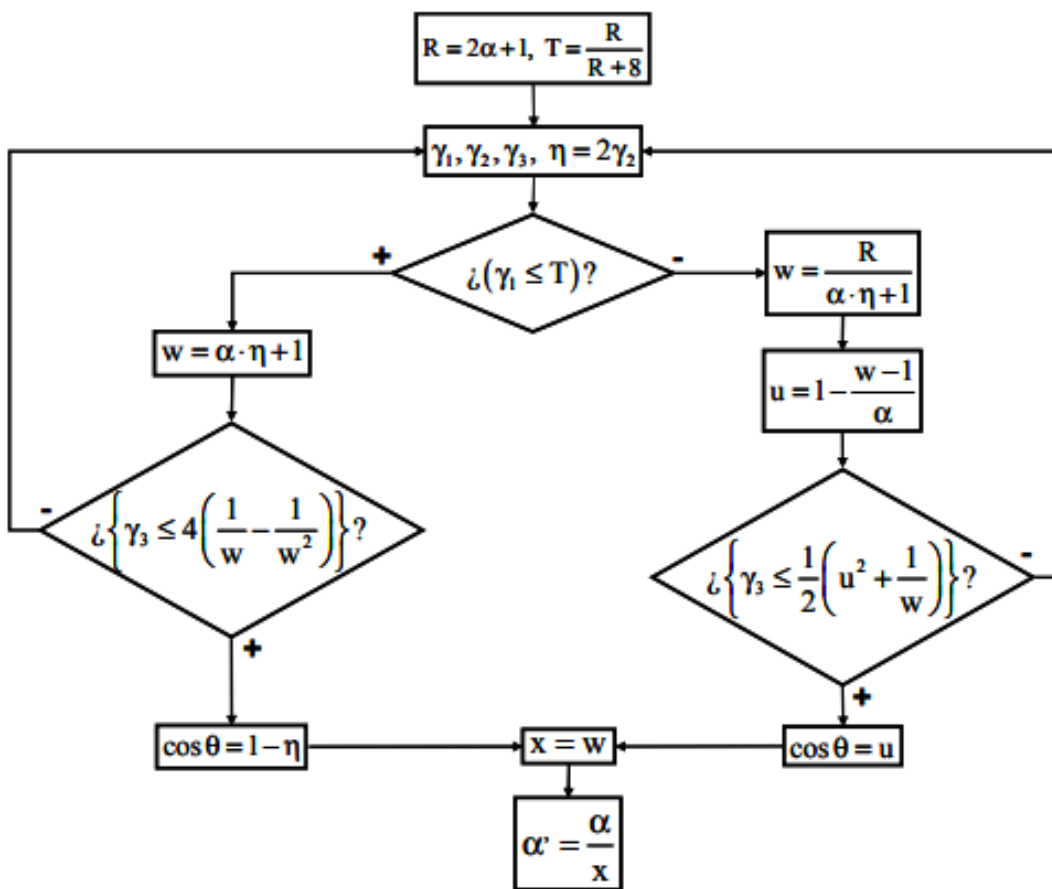


Figura 13: Muestreo del ángulo polar Compton por medio del método de Kahn

Aceptado el valor del ángulo polar se calculó el ángulo azimutal, este ángulo tiene una distribución uniforme de 0 a 2π , por lo que se calcula con la siguiente ecuación:

$$\varphi = 2\pi * \xi_{azimutal} \quad (46)$$

Donde $\xi_{azimutal}$ es un número uniformemente distribuido.

Método EGS

El diagrama que describe la solución de la ecuación de KN propuesta por este método para la obtención del ángulo polar debido al efecto Compton está representado en la figura 14.

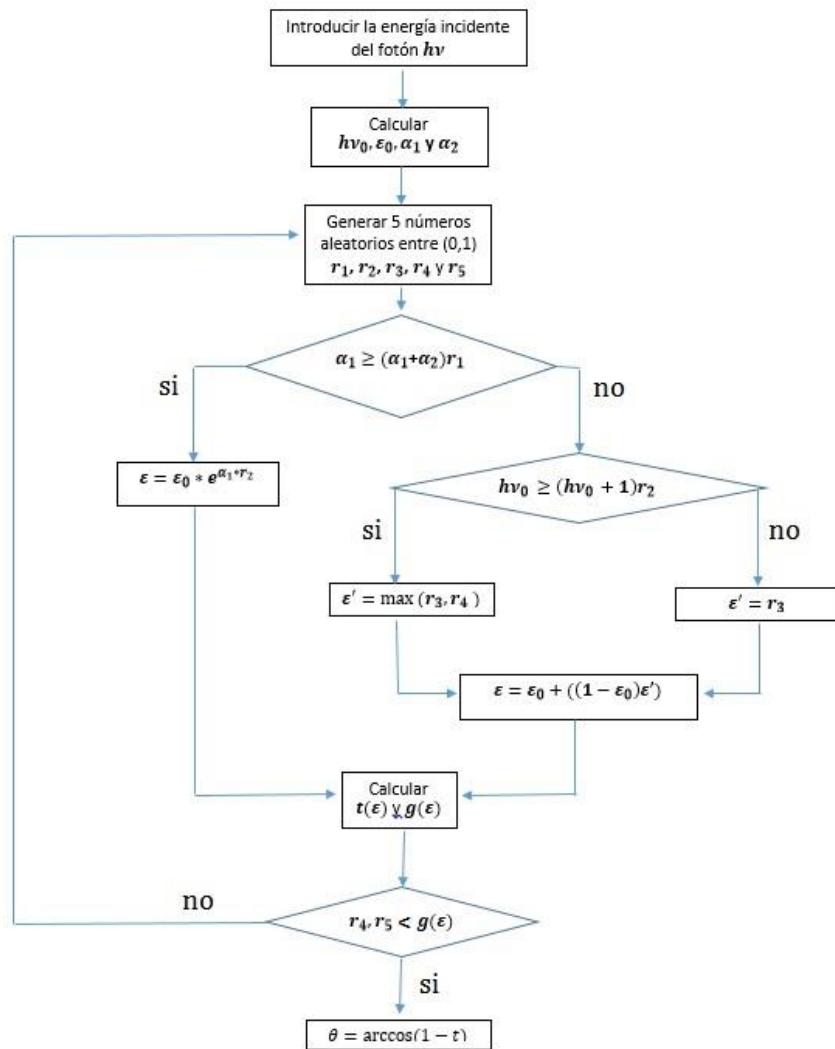


Figura 14: Muestreo del ángulo polar Compton por medio del método de EGS

Donde se necesita de los valores de $h\nu_0$, ϵ_0 , α_1 y α_2 , de las ecuaciones 28 y 29 descritas en el marco teórico, se generaron 5 números aleatorios distribuidos uniformemente (r_1 , r_2 , r_3 , r_4 , y r_5) y se comparó si $\alpha_1 \geq (\alpha_1 + \alpha_2) * r_1$:

- En caso afirmativo se calcula la variable ϵ y las funciones $t(\epsilon)$ y $g(\epsilon)$, si el valor de la función $g(\epsilon)$ es mayor a los valores de r_4 , y r_5 se calculó el valor del ángulo polar $\theta = \text{acos}(1-t)$, si $g(\epsilon)$ es menor se generaron nuevamente los 5 números aleatorios iniciales y se repitió el procedimiento.
- En caso negativo se comparó que la energía del fotón incidente $h\nu_0 \geq (h\nu_0 + 1) * r_2$, si se cumplió esta segunda condición se calculó el valor de ϵ' y con él se calculó el valor de ϵ , este valor se utiliza para el cálculo de las funciones $t(\epsilon)$ y $g(\epsilon)$, si el valor de la función $g(\epsilon)$ es mayor a los valores de r_4 , y r_5 se calculó el valor del ángulo polar $\theta = \text{acos}(1-t)$, si $g(\epsilon)$ es menor se generaron nuevamente los 5 números aleatorios iniciales y se repitió el procedimiento.

Interacción Producción de Pares

La interacción de producción de pares tiene dos principales causas la primera de ellas es la interacción del fotón con el campo nuclear del átomo y la segunda es por la interacción con el campo de un electrón; en este proceso el fotón deposita toda su energía y se convierte en un par electrón-positrón, por lo tanto, si el fotón deposita toda su energía en este punto, se finalizó la historia y se lanzó un nuevo fotón o en su defecto se terminó con la simulación si es el caso que sea la última historia a simular.

Geometría

La geometría que se uso para el depósito de energía por fotón y la fracción de energía depositada fue de una esfera con un radio inicial de 2 cm y con incrementos de 2 en 2 cm hasta un radio máximo de 30 cm, la fuente de emisión isotrópica de fotones se originó en el centro de la esfera (origen coordenado), y en cada interacción que ocurrió dentro de esta geometría se contabilizó para las dos cantidades antes expresadas, un ejemplo de esto se observa en la figura 15 donde la esfera de radio "r" con tiene a la fuente emisora de radiación gamma en el centro, esta emitió un fotón en dirección isotrópica, el fotón interactuó un determinado número de veces dentro de la esfera y dependiendo del tipo de efecto con el que interactuó deposita energía o solamente se dispersó, si el fotón al ser emitido no interactúa ninguna vez dentro del volumen de interés este no contribuyó al conteo de la energía por fotón y la fracción de energía.

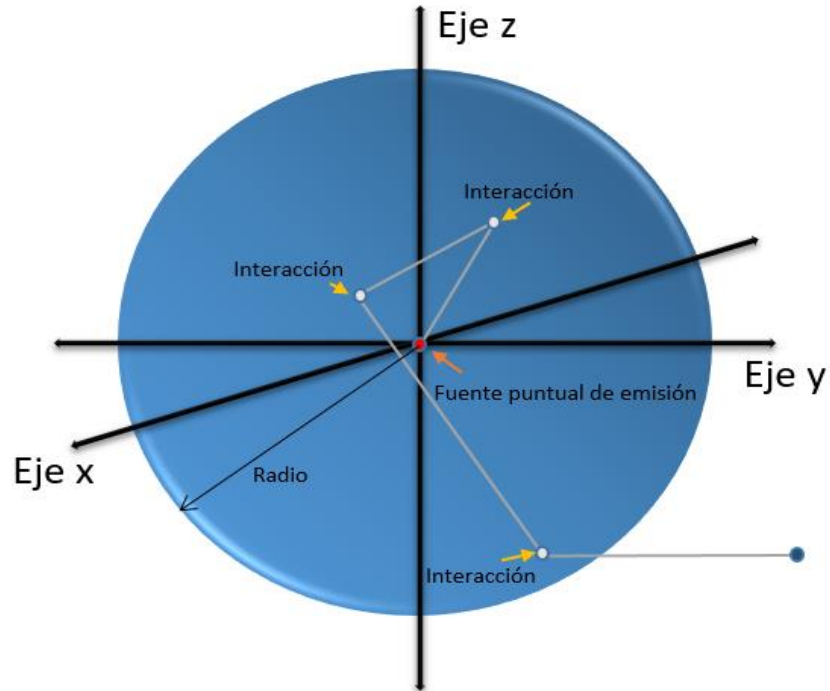


Figura 15: Geometría esférica utilizada

Código MCNPX (primera validación)

Se creó un input en MCNPX utilizando las mismas características geométricas que uso el código desarrollado en este trabajo, esto para la realización de la comparación en la energía depositada por fotón para ambos códigos, cabe mencionar que la metodología que utiliza la simulación del código MCNPX es de historias condensadas y la desarrollada en este trabajo es evento-por-evento.

El input desarrollado en MCNPX establece las celdas utilizadas en la simulación como se observa en la figura 16, después de ello se establece la geometría a utilizar en la parte denominada como superficie, donde se generan dos esferas concéntricas, una de ellas es la geometría donde se realizó el depósito de energía por fotón y la segunda es la fuente puntual de emisión de fotones monoenergéticos, la segunda esfera tubo un radio de milésimas de cm (casi puntual), el material que se definió en la primera la esfera donde se realizó el depósito de energía es agua y la simulación se realizó para un total de 1×10^7 historias.


```

c      Created on: Wednesday, September 21, 2016 at 13:20
c Celdas
  10   0      -2
  20   1     -1 -1 2
  30   0       1

c Superficies
  1      so 2
  2      so 0.001

mode p
c Materiales
m1  1001.      0.6667 $MAT1
    8016.      0.3332 8017.      0.0001

c Particulas
imp:p  1 1r      0      $ 10, 30
c Fuente
sdef erg= 0.1 cel=10 par=2 pos=0 0 0
*f8:p 10 20
dbcn 17j 1
c Número de Historias
nps 10000000

```

Figura 16: Input MCNPX

Fracción de energía depositada (segunda validación)

En la segunda validación se realizó una comparación con los datos proporcionados en el estudio publicado por Furhang EE y colaboradores [35], donde se desarrolló un código de transporte de fotones y realizaron el cálculo de la fracción de energía depositada, la geometría utilizada es la misma representada en la figura 15, una esfera con radio inicial de 2 cm con incrementos de 2 cm hasta 30 cm, la energía que se utilizó para la comparación fue la de 140 keV correspondiente al radionúclido del ^{140m}Tc , adicionalmente se realizó la comparación de la fracción de energía representada en la ecuación 16 descrita por Attix [6] para una energía de 150 keV.

Capítulo 5: Resultados y discusión

Uniformidad del generador de números aleatorios

Se comprobó la uniformidad del generador srand, para ello se diseñó un programa que conto la frecuencia con la que se generan los números pseudoaleatorios en el intervalo de [0, 1], para ello se dividió el intervalo de [0,1] en 50 subintervalos y se contabilizo la frecuencia con que cada número que se generara cae en cada subintervalo. La semilla que se puede generar para la función srand es de 1 hasta 32768 por lo que se verifico con el valor de la raíz de 10000 obteniendo una gráfica como la que se muestra en la figura 17.

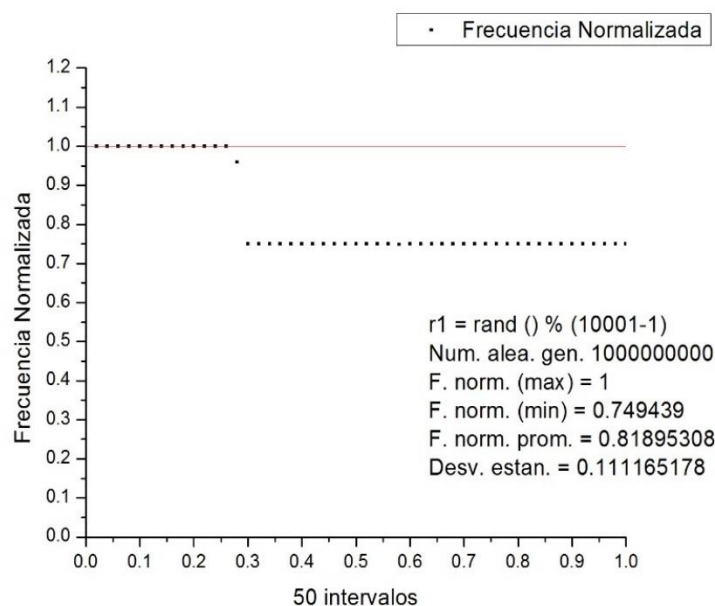


Figura 17: Grafica de frecuencias del generador srand con raíz 10000

Como se observa en la figura 17 el generador no es uniforme para esta semilla, pues a valores aproximadamente de 0.3 en el intervalo de [0,1] se presentó una caída en la frecuencia de generación de números pseudoaleatorios, lo cual contribuye a un error en los cálculos dosimétricos. Se verificaron varias semillas para el generador srand obteniendo para la semilla de 32768 que es el número máximo de números pseudoaleatorios que se pueden generar en el generador tiene un comportamiento como se muestra en la figura 18, en la cual se observa con una línea roja el valor normalizado de 1 y los puntos de color negro son las frecuencias, con esta semilla se obtuvo una desviación estándar menor al 1%, por lo que se concluye que la función srand tiene una mejor distribución con la semilla 32768 en el intervalo de [0,1].

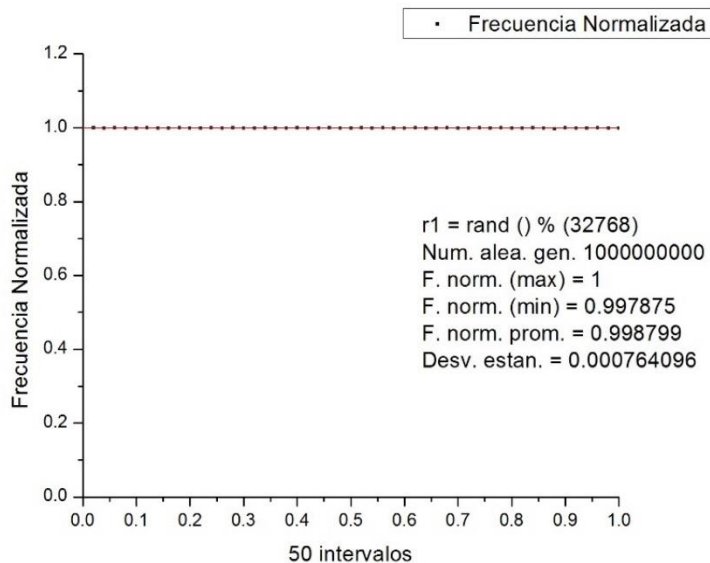


Figura 18: Grafica de frecuencias del generador srand con raíz 32768

Coeficiente másico de atenuación

El coeficiente másico de atenuación para los efectos Rayleigh, Compton, Fotoeléctrico y Producción de Pares, se determinó a través de los datos que ofrece la página NIST XCOM, en esta base de datos se encuentran datos del coeficiente másico de atenuación para átomos, moléculas y compuestos; para este trabajo se tomó en cuenta los coeficientes másicos para la molécula del agua H₂O, debido a que este representa un comportamiento complejo a través del rango de energía de 1 a 6000 keV como se observa en la figura 19 donde se representa el coeficiente másico de atenuación Compton y no existe una función que se le ajuste a todos los puntos, se realizó la división en dos o más intervalos de energía de modo que se le ajustara una o varias funciones por lo cual el coeficiente de determinación R² fue de 0.999 o lo más cercano a 1 como se observa en la figura 20.

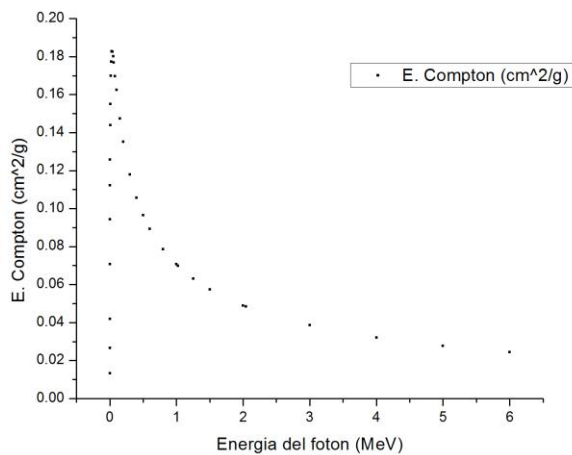


Figura 19: Sección eficaz Compton con energías de 1 keV a 6000 keV

En la figura 20 se observa el ajuste que se realizó a los datos del coeficiente másico de atenuación para el efecto fotoeléctrico de un intervalo de energía de 300 keV a 500 keV, este procedimiento se repitió para el rango de energía de 1 a 6000 keV para los diferentes procesos de interacción de la radiación con la materia.

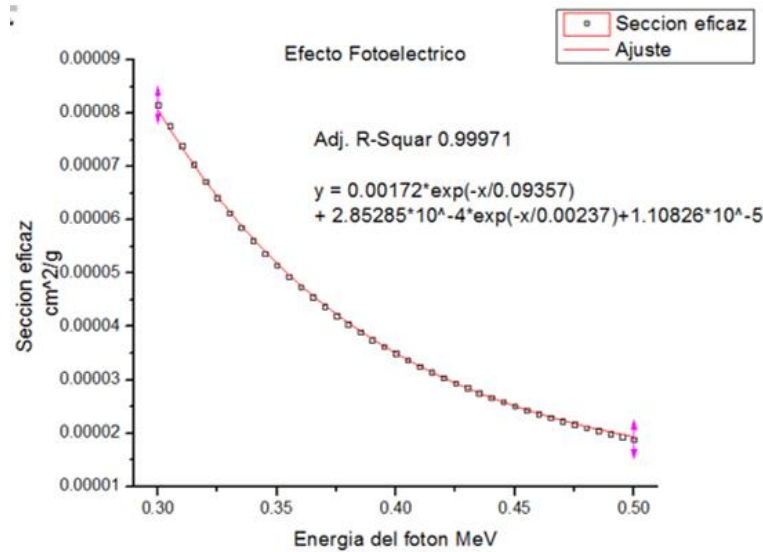


Figura 20: Sección eficaz del efecto fotoeléctrico de un intervalo de energía de 300 keV a 500 keV

Comparación de la energía depositada por fotón del código desarrollado vs MCNPX

En la primera validación del código de radiación ionizante se realizó mediante la comparación de la energía depositada por fotón contra el código MCNPX en el cual se simuló una geometría esférica con los radios de 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26 y 30 cm para las energías de fotones monoenergéticos de 50, 100, 140, 392, 511, 1173, 2000 y 5000 keV.

Comparación del muestreo del ángulo polar del efecto Compton por la metodología Kahn y EGS

Como ya se mencionó en el marco teórico y la metodología descrita en este proyecto la dispersión por efecto Compton es de suma importancia, por ende, un buen muestreo en el ángulo polar y azimutal del fotón dispersado por este efecto es fundamental.

Para comparar dichas diferencias que existen entre ambas metodologías de muestreo del ángulo polar (Kahn y EGS) se realizó la comparación de la energía depositada por fotón para ambos métodos versus el input desarrollado en MCNPX, obteniendo la gráfica de la figura 21 donde al comparar la diferencia que existe entre códigos, se estableció que el que representa una diferencia menor contra el input del MCNPX es el código desarrollado con la metodología EGS para el muestreo del ángulo polar debido al efecto Compton, esta diferencia oscila entre el 3 y el 12%,

esta medida contrasta con la reportada por el código con la metodología de Kahn donde se muestran diferencias de hasta el 43% en la comparación contra el código MCNPX.

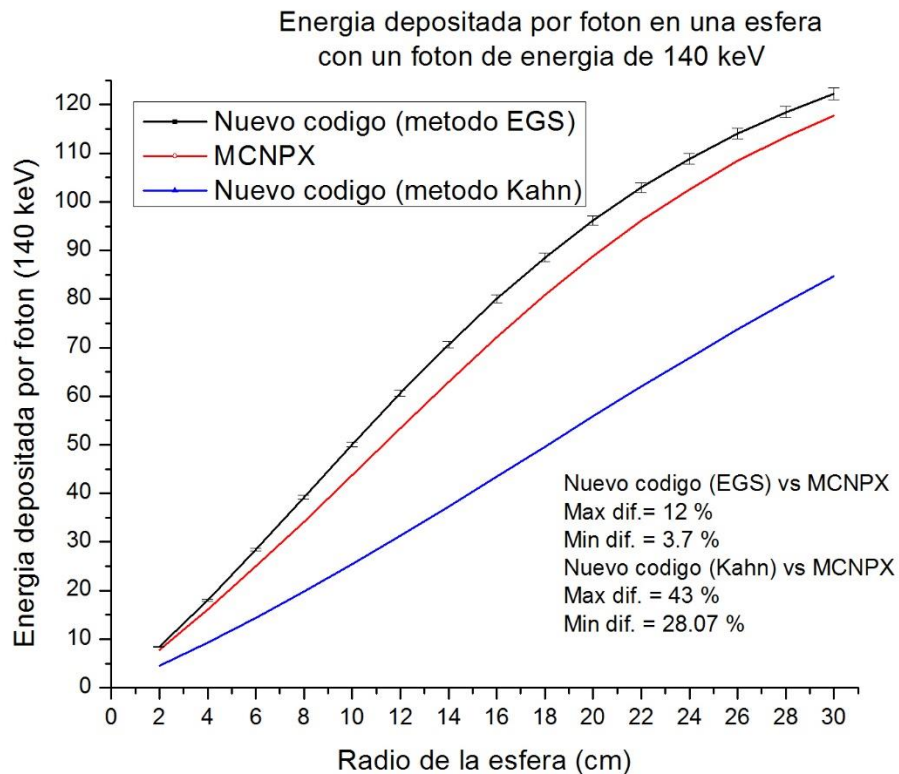


Figura 21: Comparación de energía depositada por fotones de 140 keV

Por lo cual los demás resultados que se presentaron del código se desarrollaron con el método EGS para el muestro del ángulo polar en el efecto Compton.

Código desarrollado vs MCNPX (primera validación)

De la figura 22 a la 28 se presentan los datos obtenidos al comparar el depósito de energía por fotón del código desarrollado vs MCNPX, donde las diferencias oscilan entre el 0.5% y el 13%, como se ve en todas las gráficas ambos códigos tienen el mismo comportamiento cuando se aumenta el radio de la geometría esférica, el error calculado en el código desarrollado es menor al 1% y este error se le atribuye al generador de números aleatorios.

En la figura 22 correspondiente a un fotón de energía de 50 keV se tiene una diferencia entre códigos mínima de 0.5% y máxima del 10%.

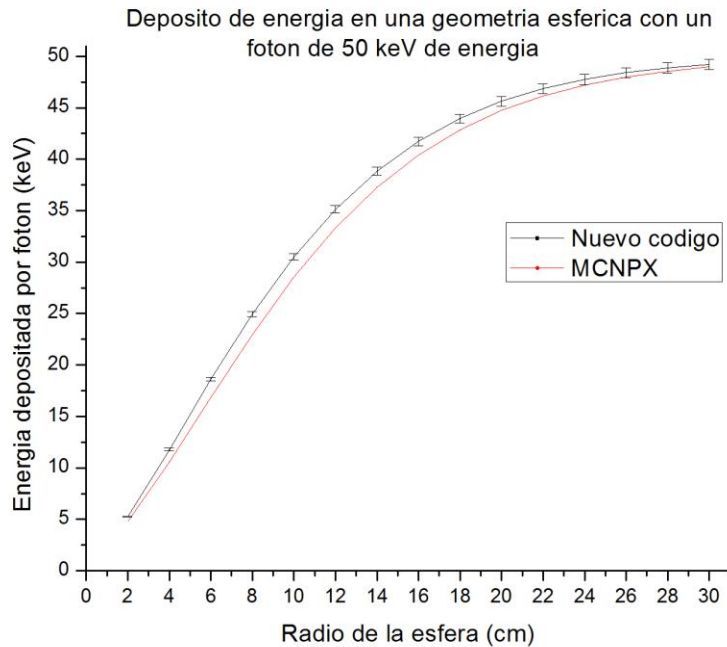


Figura 22: Deposito de energía por fotón de 50 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

La diferencia máxima entre códigos mostrada en la figura 23 es del 9% y la mínima diferencia representa el 5%, en todas las gráficas de las figuras 22 a la 28 se muestra como la diferencia mínima existe en los radios más pequeños, teniendo los máximos entre los radios de la esfera del 10 a 20 cm, en algunos casos disminuyendo ese error mientras se aumenta el radio de la geometría esferica.

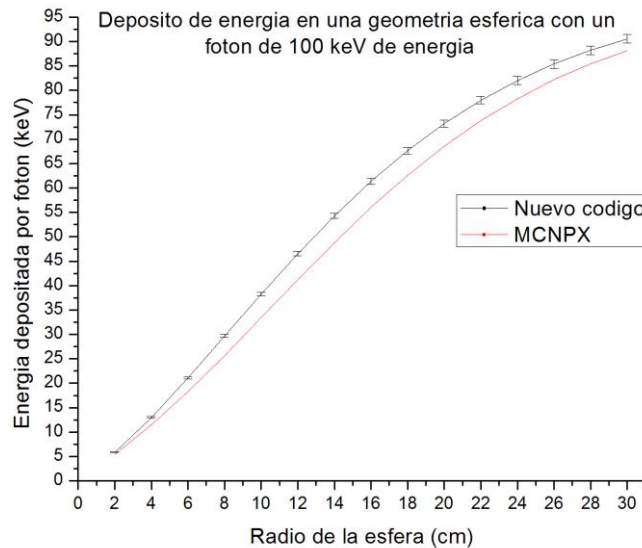


Figura 23: Deposito de energía por fotón de 100 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

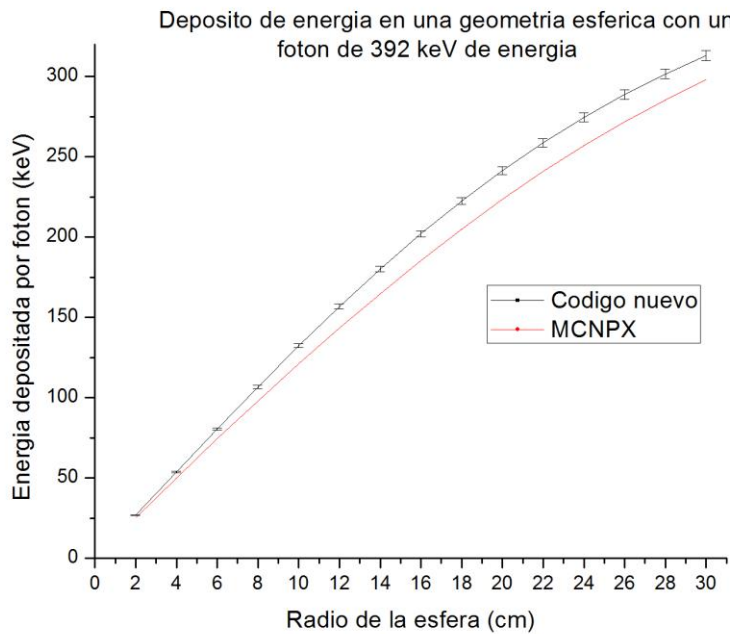


Figura 24: Deposito de energía por foton de 392 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

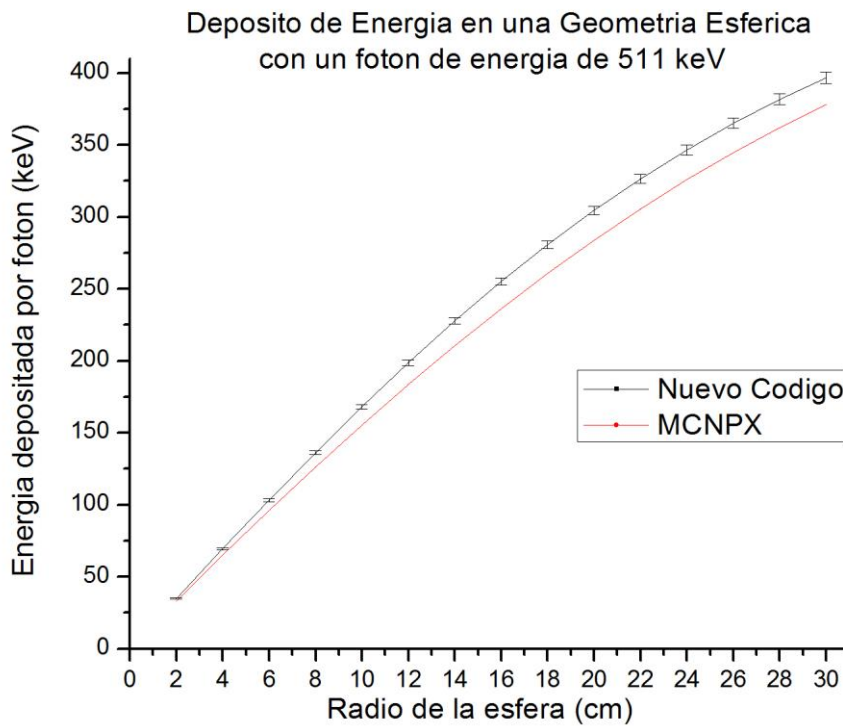


Figura 25: Deposito de energía por foton de 511 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

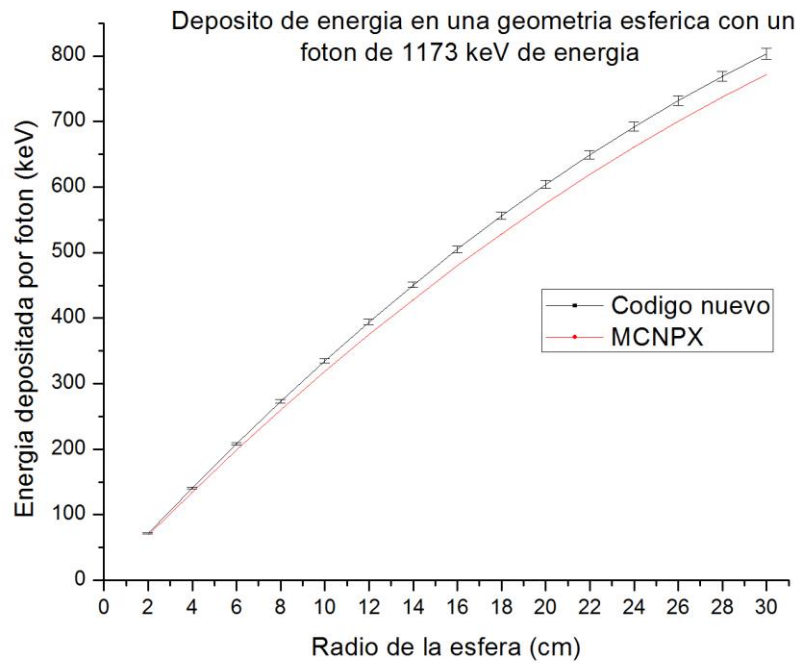


Figura 26: Deposito de energía por fotón de 511 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

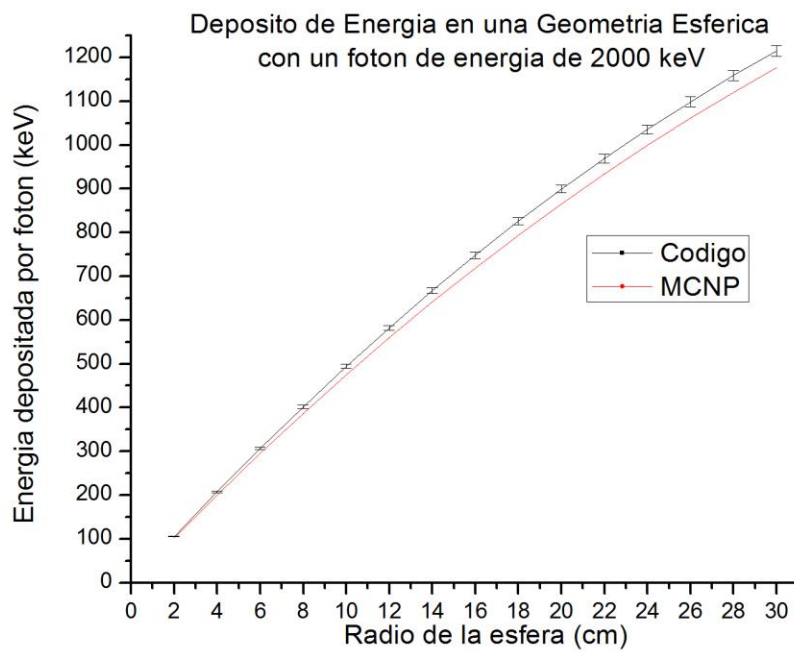


Figura 27: Deposito de energía por fotón de 2000 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

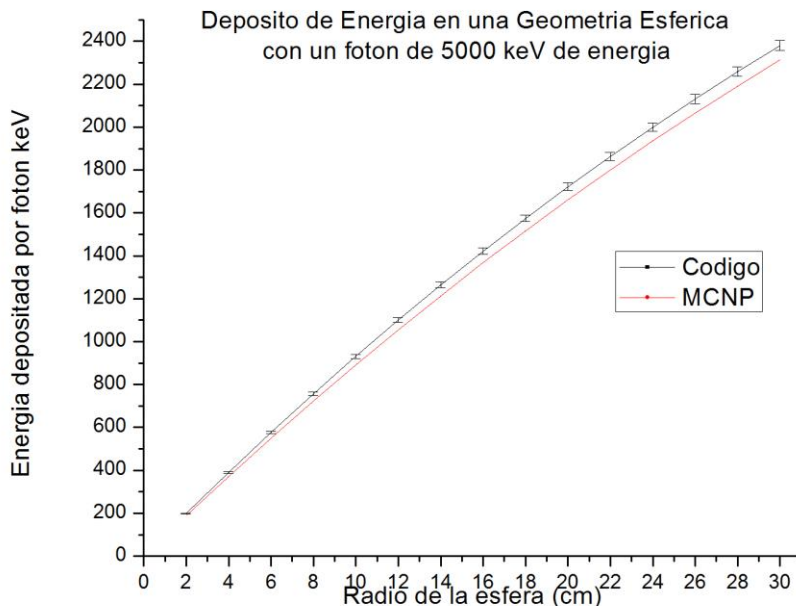


Figura 28: Deposito de energía por fotón de 5000 keV entre el código desarrollado vs MCNPX

En estas figuras se observa que el código desarrollado deposita mayor energía que el código MCNPX esto se debe a las diferencias en los métodos de simulación de evento-por-evento y el de historias condensadas, así mismo como efectos de retrodispersión que existen, además de que el código que se desarrolló solo sigue las interacciones y el depósito de energía que se da a través de radiación ionizante pero no realiza el seguimiento sucesivo de las partículas cargadas que se generan.

Fracción de energía depositada (segunda validación)

Se realizó una segunda validación del código de radiación ionizante, se tomó en consideración la fracción de energía depositada en un medio, las condiciones iniciales fueron las mismas (fuente de emisión isotrópica en el centro del sistema) y la comparación en una geometría esférica a la cual se le iba variando su radio de 2 en 2 hasta un radio máximo de 30 cm.

En la figura 29 se observa la comparación del código desarrollado en este proyecto contra el código propuesto por Eli E. Furhang, donde las diferencias que se presentan entre códigos son del 0.12% hasta el 10%, observamos como el comportamiento para ambos códigos es el mismo.

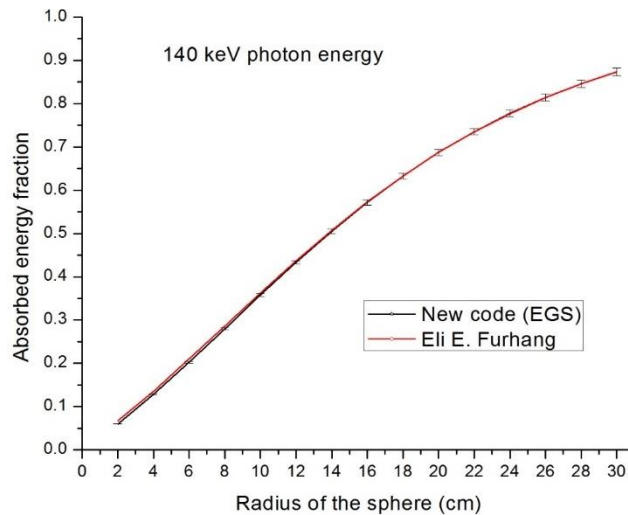


Figura 29: Fracción de energía depositada por fotón de 140 keV entre el código desarrollado vs el código de Eli E. Furhang

Adicionalmente se comparó la fracción de energía que se describe en la ecuación 16 propuesta por Attix [6] donde se ve que existe una diferencia de hasta el 40% para un fotón de energía de 150 keV, por lo que se concluye que el muestreo que realiza esta ecuación para energías bajas es incorrecto.

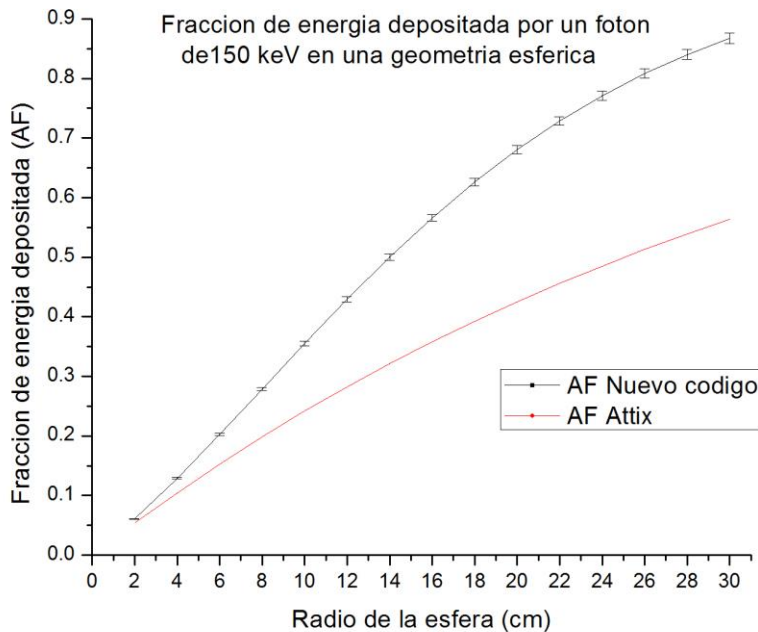


Figura 30: Fracción de energía depositada por fotón (AF) de 150 keV entre el código desarrollado vs la ecuación del AF propuesta en [6]

Capítulo 6: Conclusiones

- El ajuste de las secciones eficaces se dividió en varios intervalos de energía siempre con el coeficiente de determinación R^2 igual a 0.999 o lo más cercano a 1.
- Las discrepancias dosimétricas que existen en el depósito de energía por fotón y la fracción de energía se atribuyen a la metodología de transporte de radiación.
- La diferencia porcentual en la comparación entre códigos va del 0.12 % al 13 %, dependiendo de las energías de emisión del fotón por lo cual de acuerdo a lo reportado en otro artículo [Champion, 2013] el código es confiable.
- Al permitir la discriminación entre fotones primarios y secundarios este código se podrá usar en imagenología, corrigiendo o reconstruyendo imágenes de rayos X o rayos gamma.
- El código desarrollado permite seguir el fotón durante toda trayectoria, calcular la energía transferida por los fotones a un medio de agua.
- En el código desarrollado se podrá modificarse: la geometría, definir varios medios, energía y direcciones de emisión, etc.

Capítulo 7: Referencias

- [1] Stewart WB, Wild CW (2014) “World Cancer Report 2014”. International Agency for Research on Cancer - World Health Organization. Lyon.
- [2] Harrison TR, Resnick WR, et al (2012) Principios de Medicina Interna. MC Graw Hill, China
- [3] Macarulla T, Ramos FJ, Tabernero J (2009) Comprender el cáncer. Amat, Barcelona.
- [4] Alatorre A (2004) ¿Qué es el cáncer? Respuestas a las preguntas más frecuentes. Selector, CD de México.
- [5] Instituto Nacional Del Cáncer (2015) <https://www.cancer.gov/espanol>.
- [6] Attix FH (1986) Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry. Wiley-VCH, Weinheim.
- [7] Hall EJ, Giaccia AJ (2011) Radiobiology for the Radiologist. Lippincott Williams & Wilkins, Philadelphia.
- [8] Cember H, Johnson TE (2009) Introduction to Health Physics. Mc Graw Hill, United States.
- [9] Vega CG (2009) Simulación de la interacción de fotones en la materia usando el método Monte Carlo. Tesis doctoral, Instituto Politécnico Nacional.
- [10] Bielajew AF (2001) Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport. Dissertation, University of Michigan.
- [11] Salvat F, Varea JM, Sempau J (2008) PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. Nuclear energy agency organization for economic co-operation and development, Barcelona Spain.
- [12] Booth TE, Brown FB, Bull JS et al (2003) MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Dissertation, University of California.
- [13] Agostinelli S, Allison J, Amakoe K, Apostolakis J, et al (2003) Geant4-a simulation toolkit. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 506: 250–303. doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [14] Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Dubois PA, Asai M, Barrand G (2006) Geant4 developments and applications. IEEE Transactions on Nuclear Science 53(1): 270 – 278. doi: 10.1109/TNS.2006.869826.
- [15] EGSnrc: software tool to model radiation transport (2015) National Research Council Canada. <http://www.nrc->

cnrc.gc.ca/eng/solutions/advisory/egsnrc_index.html. Accessed 15 October 2016

- [16] Condensed history Monte Carlo methods for photon transport problems
- [17] Rossi HH, Zaider M (1996) *Microdosimetry and its applications*. Springer, Berlin.
- [18] Atención a los efectos secundarios de la radioterapia
- [19] Andreo P. Monte Carlo simulation of electron transport. In *The Computation of Dose Distributions in Electron Beam Radiotherapy*, ed. Nahum A. E., Umea University, Umeå, Sweden, pp. 80–97, 1985.
- [20] Bielajew A. F. and Rogers D. W. O. PRESTA: The parameter reduced electron-step transport algorithm for electron Monte Carlo transport. *Nucl. Instr. Methods*, B18:165–181, 1987.
- [21] Bielajew A. F. and Rogers D. W. O. Electron step-size artefacts and PRESTA. In *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, eds. T. M. Jenkins, W. R. Nelson, A. Rindi, A. E. Nahum, and D. W. O. Rogers. Plenum Press, New York, pp. 115–137, 1989.
- [22] Mackie T. R., Kubsad S. S., Rogers D. W. O., and Bielajew A. F. The OMEGA project: Electron dose planning using Monte Carlo simulation. *Med. Phys.* (abs), 17:730, 1990.
- [23] Rogers D. W. O. Fluence to dose equivalent conversion factors calculated with EGS3 for electrons from 100 keV to 20 GeV and photons from 20 keV to 20 GeV. *Health Phys.*, 46:891–914, 1984a.
- [24] Rogers D. W. O. Low energy electron transport with EGS. *Nucl. Inst. Meth.*, 227:535–548, 1984b.
- [25] Tobon JC (2011) *Cálculos Dosimétricos mediante código Monte Carlo a partir de imágenes de PET/CT*. Tesis maestría, Universidad Nacional de Cuyo.
- [26] Fulea D, Cosma C, Pop G. (2009) Monte Carlo method for radiological X-ray examinations. *Romanian Journal in Physics*, 54(7-8): 629-639.
- [27] Özmutlu EN (1992) Sampling of angular distribution in Compton scattering. *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation* 43(6): 713-715. doi: 10.1016/0883-2889(92)90231-3
- [28] Hirayama H, Namito Y (2005) *The EGS5 Code System*. SLAC-Report-730, United States.
- [29] Persliden J (1983) A Monte Carlo program for photon transport using analogue sampling of scattering angle in coherent and incoherent scattering

- processes. *Computer Programs in Biomedicine* 17(1-2): 115-128. doi: 10.1016/0010-468X(83)90032-6.
- [30] Papanikolaou N, Battista JJ, et al (2004) Tissue inhomogeneity corrections for megavoltage photon beams. *American Association of Physicists in Medicine, United States*.
- [31] Elschot M, Lam MG, van den Bosch MA, Viergever MA, de Jong HW (2013) Quantitative Monte Carlo–Based 90Y SPECT Reconstruction. *Journal of Nuclear Medicine* 54(9): 1557-63. doi: 10.2967/jnumed.112.119131.
- [32] Garza HM (2016) Stereotactic breast irradiation with kilovoltage x-ray beams. *Physics in Medicine and Biology* 61(2):983–995. doi: 10.1088/0031-9155/61/2/983.
- [33] Belley MD, Ashcraft KA, Ting CL, Brady MR, Chen JJ, Gunasingha R, et al (2015) Microdosimetric and Biological Effects of Photon Irradiation at Different Energies in Bone Marrow. *Radiation Research* 184(4):378-391. doi: 10.1667/RR14095.1.
- [34] Champion C, Incerti S, Perrot Y, et al (2013) Dose point kernels in liquid water: An intra-comparison between GEANT4-DNA and a variety of Monte Carlo codes. *Applied Radiation and Isotopes* 83:137-141. doi: 10.1016/j.apradiso.2013.01.037.
- [35] Furhang EE, Sgouros G, Shou CC (1996) Radionuclide photon dose kernels for internal emitter dosimetry. *Medical Physics* 23(5):759-764 doi: 10.1118/1.597670
- [36] A new Monte Carlo simulation code for transport of optical photons in 2D arrays of scintillation detectors
- [37] A Monte Carlo study of high-energy photon transport in matter: application for multiple scattering investigation in Compton spectroscopy
- [38] Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy
- [39] Diccionario de Electrónica, Informática Y Energía Nuclear, Mariano Mataix Lorda, Miguel Mataix Hidalgo
- [40] Morin, L. (1982). M (1982) molecular form factors and photon coherent scattering cross sections of water. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 11(4):1091{1098.
- [41] Delgadillo R A Cuantificación de la producción de luz en un medio dopado con material centellador expuesto a fotones de 140 keV

- [42] J. H. Hubbell, W. J. Veigele, E. A. Briggs, R. T. Brown, D. T. Cromer, and R. J. Howerton, "Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections," J. Phys. Chem. Ref. Data 4, 471 (1975).
- [43] R. D. Evans, The Atomic Nucleus (Kreiger, Malabar, FL, 1982); R. D. Evans, "The Compton Effect," in S. Flugge, Ed., Handbuch der Physik, vol. 34 (Springer-Verlag, Berlin, 1958), p. 218
- [44] J. H. Hubbell, H. A. Gimm, I. , "Pair, Triplet, and Total Atomic Cross Sections (and Mass Attenuation Coefficients) for 1 MeV–100 GeV Photons in Elements Z = 1 to 100," J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 1023 (1980).
- [45] Berger MJ, Hubbell JH, Seltzer SM, Chang J, Coursey JS, Sukumar R, Zucker DS, Olsen K, NIST PML Radiation Physics Division, NIST Standard Reference Database 8 (XGAM) <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>. Accessed 17 January 2017.
- [46] Rogers D W O (2006) Fifty years of Monte Carlo for medical Physics. Phys. Med. Biol. 51:R287-R30
- [47] Mercado AV (2016) Nuevo método de muestreo para dispersion Compton de fotones ionizantes en agua por Monte Carlo
- [48] Aranda L L (2013) Modelado de tejido biologico con maniqui en gel de agar para dosimetria del ^{99m}Tc
- [49] Deitel PJ, Deitel HM (2008) Como programar C++. Pearson Prentice Hall, México.
- [50] Sierra FJ (2004) Enciclopedia del lenguaje C++. Alfaomega Ra-Mal, México.
- [51] Raczynski S (1993) Simulación por computadora, Limusa.
- [52] Moreno JS (1998) Procedimientos estadísticos con Statgraphics

Anexo(s):

- Artículo de investigación

2017-4-25

Gmail - 3767294: Acknowledging Receipt



Jorge Diaz <jorgefis2014@gmail.com>

3767294: Acknowledging Receipt

2 mensajes

Computational and Mathematical Methods in Medicine <marihan.youssef@hindawi.com> 21 de marzo de 2017, 15:11
Para: jorgefis2014@gmail.com

Dear Dr. Jorge Diaz-Diaz,

This is to inform you that your Research Article titled "Track-structure Monte Carlo code for ionizing photon transport in water" by Jorge Diaz-Diaz, Eugenio Torres-Garcia and Rigoberto Oros-pantoja has been submitted to Computational and Mathematical Methods in Medicine by Eugenio Torres-Garcia, and it has been assigned the manuscript number 3767294.

You will be receiving a copy of all the correspondence regarding this manuscript. However, only the submitting author will be able to upload any revisions to the Manuscript Tracking System.

In order to view the status of your manuscript, we have created an account for you in the journal's Manuscript Tracking System at <http://mts.hindawi.com/>, which you may access after resetting your password using the link below:

<http://mts.hindawi.com/reset.password/8de01c72-601e-405f-b936-5bc3d76a20c8/>

Please feel free to contact me with any inquiries you may have.

Best regards,

Marihan Youssef
Editorial Office
Hindawi
<http://www.hindawi.com>

Computational and Mathematical Methods in Medicine <marihan.youssef@hindawi.com> 21 de marzo de 2017, 15:11
Para: etorresg@uaemex.mx
Cc: marihan.youssef@hindawi.com, jorgefis2014@gmail.com, rigoberto_ros@hotmail.com

Dear Dr. Torres-Garcia,

The Research Article titled "Track-structure Monte Carlo code for ionizing photon transport in water," by Jorge Diaz-Diaz, Eugenio Torres-Garcia and Rigoberto Oros-pantoja has been received and assigned the number 3767294.

All authors will receive a copy of all the correspondences regarding this manuscript.

Thank you for submitting your work to Computational and Mathematical Methods in Medicine.

Best regards,

Marihan Youssef
Editorial Office
Hindawi
<http://www.hindawi.com>

Track-structure Monte Carlo code for ionizing photon transport in water

Jorge A. Díaz-Díaz, Eugenio Torres-García*, Rigoberto Oros-Pantoja.

Facultad de Medicina, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, México, México.

*Corresponding Author: Eugenio Torres-García. Facultad de Medicina, Universidad Autónoma del Estado de México, Paseo Tollocan s/n esquina Jesús Carranza, Col. Moderna de la Cruz, CP 50180, Toluca, México, México. E-mail: eugenio_tg@yahoo.com.mx

Key words: Radiation dosimetry, imaging, ionizing radiation, Monte Carlo Simulation, track-structure.

Abstract

Purpose: The aim of this work was to develop a Monte Carlo code for ionizing photon transport in water with the track structure technique, that allows to discriminate primary and secondary photons, to calculate energy deposited and to know interaction coordinates. *Methods:* C++ programming language was used. Compton scattering is the most frequent, so it is important to make an adequate sampling of the polar and azimuthal angles: two sampling methods were applied: Kahn and EGS. Water spheres centered at the origin with an initial radius of 2 cm and an increase of 2 cm were used, up to 30 cm. isotropic point source was placed at (0, 0, 0) and using 50, 100, 140, 392, 511, 1173, 2000 y 5000 keV. *Results:* It was determined that the best sampling method for the polar angle generation in the Compton scattering was the EGS method. Energy deposited was compared with MCNPX 2.6 and results from literature. *Conclusions:* Quantities computed with new code are according to data reported, so the new code is reliable for photon transport in water using track structure method, this will allow to code become a useful tool in the areas of radiation dosimetry and imaging.

1. Introduction

Cancer is one of the leading causes of human deaths worldwide. Only in 2012, 8.2 million deaths were attributed to cancer worldwide [1], which has been increasing year after year, this pathology can be treated in different ways depending on the stage; with surgery, radiotherapy, chemotherapy, immunotherapy, targeted radiotherapy and stem cell transplantation [2,3,4], with high probability for eradication of pathology if it is treated in early stages [2].

Radiodiagnosis and radiation treatment, in each of their areas such as imaging, radiotherapy and nuclear medicine require precise calculations about the energy deposited and scattering of the ionizing radiation used. In health care applications, it is required to know the penetration and amount of energy deposited in the biological tissue irradiated by ionizing photons [5, 6, 7], these parameters are

function of the photon interaction processes with matter, which can be analyzed experimentally or by Monte Carlo simulation (MCS) [8,9]. In the MCS case, there are some general-purpose codes for transporting ionizing radiation as PENELOPE, MCNP, Geant4, EGS, etc. [10-14], each of them with characteristics slightly different from each other, these codes are continuously improving due to current needs. However, in the radiation treatment to solve specific problems in optimal way, different codes are developed all time [15-18]. Ionizing radiation transport by Monte Carlo simulation consists of solving a macroscopic problem through the simulation of its microscopic interactions [8], with this method it is possible to perform the ionizing radiation transport by two ways: condensed histories method [19] or track structure technique [20]. The first, which is implemented in most existing simulation codes [10-14], consists of using pre-simulated trajectories and averaged quantities to decrease the calculation time, which is very useful in clinical applications. The second, consists of modeling the entire trajectory of the particle, interaction by interaction considering all physical processes involved in its displacement through medium, the nature of this technique makes it more accurate but it consumes more computing time than condensed histories method [20]. The physical interactions involved in photon transport, depend on its energy and the medium where they are diffusing [5]. In general, the following effects are considered: Rayleigh, Compton, Photoelectric and Pair Production [4, 5, 6, 7, 19]. According to literature, the Compton scattering has a special interest since several studies have reported different sampling methods for polar and azimuthal angles [21,22,23], due to the fact that Compton effect has higher frequency than the other effects, so a wrong sampling of the polar and azimuthal angles leads to an inaccurate dosimetric calculation or a reconstructed image with poor quality [24, 25].

Therefore, the objective of this work is to develop a Monte Carlo code for ionizing photon transport in water with the track structure technique, that allows to discriminate primary and secondary photons, to calculate energy deposited and to know interaction coordinates, this will allow to code become a useful tool in the areas of radiation dosimetry, microdosimetry, nuclear medicine and imaging.

2. Methods

C++ programming language was used to develop the present code, the Monte Carlo technique was applied, this technique is based on the random numbers generation with uniform distribution in an interval to represent some random physical process. *srand* generator was used to generate random numbers between 0 and 1 [26,27], uniform distribution was verified. Energy deposited and scattering were calculated using non-uniform and uniform distributions, and the percentage differences were obtained.

Ionizing photon transport was performed according to the methodology shown in figure 1,

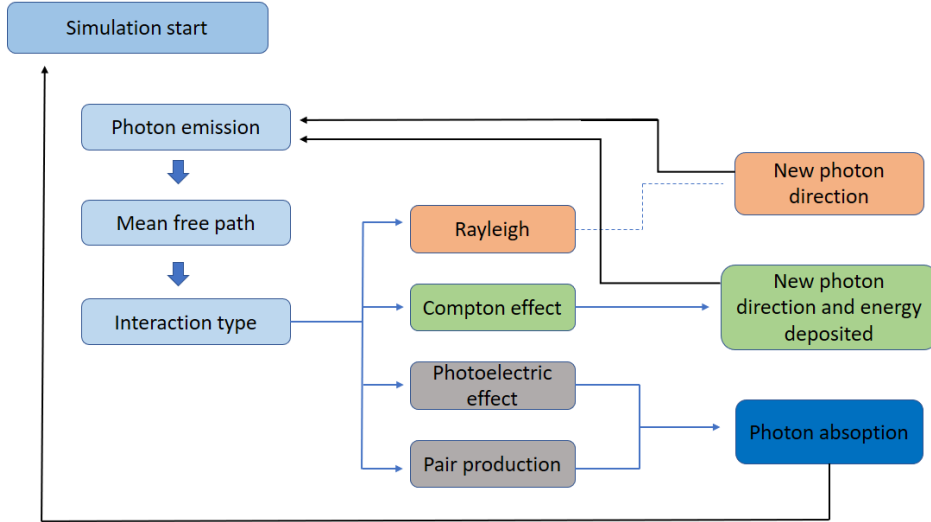


Fig. 1: Ionizing photon transport process.

Initial photon energy could be from 1 keV to 6000 keV. For H₂O, the partial cross sections corresponding to Rayleigh, Compton, photoelectric and pair production effects were obtained from the NIST XCOM database [28], data were fitted to one or more functions with the condition that the determination coefficient (R^2) was 0.999 or closer to 1, the code used these functions to calculate the partial cross sections to determine the probability and interaction type, as well as the total interaction cross section (μ_T). The mean free path was computed with equation 1,

$$d = -\frac{1}{\mu_T} \log(\xi) \quad (1)$$

Where ξ is a random number in (0, 1).

In photon absorption case caused by photoelectric and pair production effects, the transport is terminated, saving the interaction coordinates (x_i, y_i, z_i) and the energy deposited (e_i), then the next photon is launched.

For Rayleigh scattering, polar and azimuthal angles were calculated with equations 2 and 3.

$$polar = \text{acos}(1 - 2 * \text{random1}) \quad (2)$$

$$azimutal = (2 * \text{random2} - 1) * polar \quad (3)$$

Where $random1$ and $random2$ are random numbers uniformly distributed in $(0, 1)$, $0 \leq polar \leq \pi$ and azimuthal angle were constrained to be less or equal than polar.

Compton scattering is the most frequent among the above-mentioned effects, so it is important to make an adequate sampling of the polar and azimuthal angles, for the above, two sampling methods were applied: Kahn and EGS [21, 22, 23], to determine which is the best, since the energy deposited by Compton effect is a function dependent on polar angle, its effect is observed in the energy deposited in a target volume irradiated with ionizing photons.

Two validations were performed with the same geometry, calculating different quantities, water spheres centered at the origin with an initial radius of 2 cm and an increase of 2 cm were used, up to a maximum radius of 30 cm. For first validation, Khan and EGS sampling methods were implemented in the new code to compute polar angle, isotropic point source was placed at $(0, 0, 0)$ and using 50, 100, 140, 392, 511, 1173, 2000 y 5000 keV as initial photon energy to compute the energy deposited per photon inside each sphere, this quantity was compared with that obtained with MCNPX 2.6 under same conditions.

For second validation, the energy fraction deposited in each sphere was obtained and the results were compared with: a) those reported by Eli E. Furhang *et. al* [29] using 140 keV photon energy, b) those approximated by equation 4, reported in Attix [5] for 150 keV photon energy,

$$AF_{dv,V} \cong 1 - e^{-\mu_{en} * r} \quad (4)$$

Where μ_{en} is the energy absorption coefficient [5].

5 replications were used to compute the standard deviation.

3. Results and discussion

Random number generator could present non-uniform distributions in $(0, 1)$ dependent on its denominator, as shown in Figure 2, this was corrected until uniform distributions were obtained. Non-uniform distribution could produce percentage differences as large as 20% for primary photon transmission and 25% for energy deposition, in a water sphere with a 140 keV point source placed in its center, initial radius of 2 cm and an increase of 2 cm were used, up to a maximum radius of 30 cm.

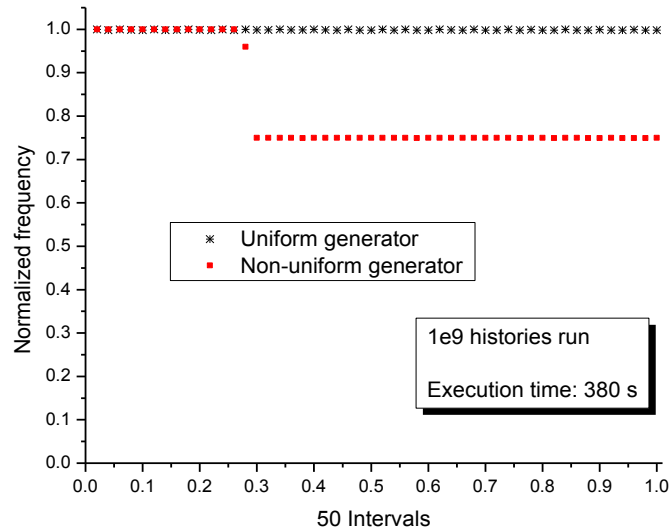


Fig. 2: Non-uniform vs uniform distributions of the random generator

For each interaction process, the cross sections obtained from the NIST XCOM database were divided into several energy intervals, each fitted functions had a determination coefficient (R^2) of 0.999 or closer to 1, this procedure was replicated for the entire range from 1 to 6000 keV, for all types of interaction.

It was verified that the amount of energy deposited to the medium under the photoelectric and pair production effects was correct according to remaining energy of photon, as well as the correct generation of the interaction coordinates.

It was determined that the best sampling method for the polar angle generation in the Compton scattering was the EGS method, since comparing the energy deposited by photons calculated with the new code against that obtained with MCNPX 2.6 code, this quantity was more similar than Kahn methods, as shown in Figure 3, $1e7$ histories were run and a maximum difference of 12% was obtained for the radius of 8 cm, this results are acceptable according to the results shown in Champion C. et al. [30] where the differences can be up to 25% comparing different codes, even the behavior of the energy deposited as a function of radius is similar for both codes.

Worth mentioning that maximum difference for the Kahn method was 43% for the radius of 2 cm as shown in Figure 3.

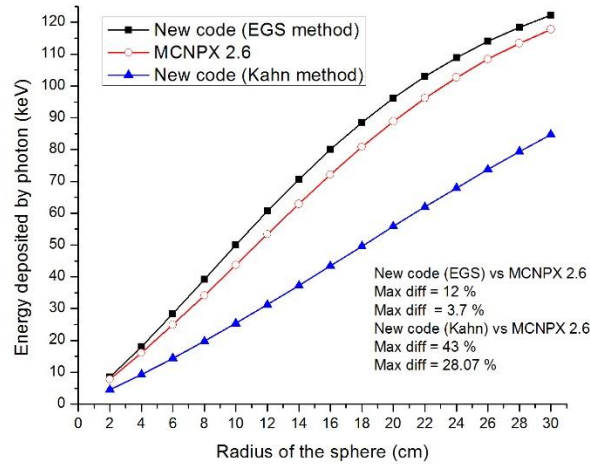


Fig. 3: Energy deposited by 140 keV photons inside a water sphere.

This shows the importance of a correct sampling of the polar angle in the Compton scattering since this is the interaction with greater probability of occurrence. Also, the energy deposited in each Compton interaction depends on that angle, which determines the accuracy of the calculation of the energy deposited in a volume of interest.

For first validation, photon energy deposition for different energies were obtained with the new code including EGS method, under the geometry mentioned, the above was also performed with MCNPX 2.6, their differences in the range of 1 to 6000 keV are shown in Table 1.

Worth mentioning that for the new code the standard deviation in all cases were less than 1%.

Table 1: Energy deposited comparison between new code vs MCNPX 2.6.

Radius	Photon energy (keV)											
	50 keV			100 keV			140 keV (^{99m} Tc)			392 keV		
	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %
2	5.23	4.81	8.14	5.85	5.41	7.52	8.41	7.82	7.00	26.83	25.33	5.58
4	11.79	10.60	10.07	13.02	11.51	11.62	17.99	16.15	10.25	53.78	50.18	6.69
6	18.61	16.86	9.35	21.11	18.28	13.43	28.39	24.94	12.13	80.51	74.40	7.58
8	24.96	22.99	7.88	29.67	25.65	13.54	39.21	34.17	12.85	106.79	98.03	8.20
10	30.51	28.56	6.39	38.25	33.39	12.70	50.05	43.72	12.63	132.33	120.97	8.58
12	35.13	33.34	5.08	46.55	41.21	11.46	60.62	53.39	11.92	156.84	143.22	8.68
14	38.84	37.27	4.03	54.30	48.83	10.06	70.66	62.94	10.93	180.09	164.75	8.51
16	41.72	40.41	3.14	61.38	56.02	8.72	80.01	72.16	9.80	202.01	185.39	8.22
18	43.95	42.86	2.47	67.67	62.62	7.45	88.52	80.83	8.68	222.40	205.00	7.82
20	45.62	44.74	1.93	73.19	68.55	6.32	96.17	88.85	7.61	241.28	223.49	7.37
22	46.86	46.15	1.51	77.97	73.77	5.37	102.97	96.13	6.64	258.63	240.86	6.87
24	47.76	47.20	1.16	82.01	78.30	4.52	108.91	102.64	5.76	274.44	257.00	6.35
26	48.41	47.98	0.88	85.40	82.17	3.78	114.06	108.39	4.96	288.68	271.84	5.83
28	48.88	48.55	0.67	88.23	85.44	3.16	118.48	113.43	4.25	301.52	285.46	5.32
30	49.22	48.96	0.51	90.57	88.18	2.63	122.24	117.78	3.64	313.07	297.85	4.85
Radius	511 keV			1173 keV			2000 keV			5000 keV		
	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %	New Code	MCNP	Dif. %

2	34.91	33.11	5.14	71.70	68.91	3.88	105.73	102.02	3.51	198.51	188.33	5.12
4	69.36	65.29	5.87	141.14	135.18	4.22	208.06	200.49	3.64	390.51	371.55	4.85
6	103.24	96.45	6.58	208.21	198.97	4.43	306.80	295.68	3.62	577.20	549.77	4.75
8	136.29	126.56	7.13	272.92	260.16	4.67	402.41	387.10	3.80	757.48	723.18	4.52
10	168.10	155.63	7.41	334.71	318.80	4.75	494.29	475.10	3.88	930.97	891.92	4.19
12	198.79	183.65	7.61	394.15	374.97	4.86	582.21	559.69	3.86	1101.13	1055.50	4.14
14	227.81	210.54	7.57	450.94	428.71	4.93	667.34	641.16	3.92	1264.86	1213.86	4.03
16	255.21	236.31	7.40	504.92	479.95	4.94	748.16	719.21	3.87	1421.86	1367.84	3.79
18	280.75	260.79	7.10	555.98	528.87	4.87	825.58	794.08	3.81	1574.80	1516.78	3.68
20	304.57	283.90	6.78	604.23	575.35	4.78	899.24	865.68	3.73	1721.75	1661.00	3.52
22	326.44	305.56	6.39	649.53	619.48	4.62	969.13	933.91	3.63	1862.95	1801.13	3.31
24	346.60	325.84	5.98	692.18	661.16	4.48	1035.79	999.20	3.53	1999.70	1936.12	3.17
26	365.06	344.68	5.58	731.83	700.54	4.27	1098.98	1061.4	3.41	2131.66	2066.40	3.06
28	381.70	362.01	5.15	768.99	737.46	4.10	1158.69	1120.6	3.28	2259.05	2192.31	2.95
30	396.86	377.94	4.76	803.56	772.08	3.91	1215.27	1176.8	3.16	2380.47	2313.65	2.80

From data in Table 1, it can be verified that between new code vs MCNPX 2.6, percentage differences are 13.5% maximum and 1% minimum. However, covering the entire range from 1 to 6000 keV the energy deposition pattern as radius size function is similar for both codes to any energy as shown in Table 1. It is worth noting that when increase the emission energy, percentage differences between two codes decreases.

In the second validation, the energy fraction was calculated with the new code, comparing its quantities calculated with that reported by E. Furhang Eli *et. al.* [29] under geometry described in the previous section. For 140 keV photons, maximum difference of 10% was found for smaller spheres. However, this difference was diminishing when radius was increasing, up to 0.12%, as shown in Figure 4 a).

Comparing the energy fraction lost by 150, 1000, 3000 and 5000 keV photons given by equation 4 against new code, it is observed that the difference increases with the radius of the sphere as shown in figure 4 b). However, the maximum difference decreased when photon energy increased, from 30% to 9% for 150 and 5000 keV respectively. Energy deposition presented a pattern as that shown in Figure 4-b for the energies mentioned. Since in other databases the energy absorption coefficient (μ_{en}) is almost equal to that reported in [5], maybe equation 4 does not make a suitable approximation of the energy fraction lost by photons.

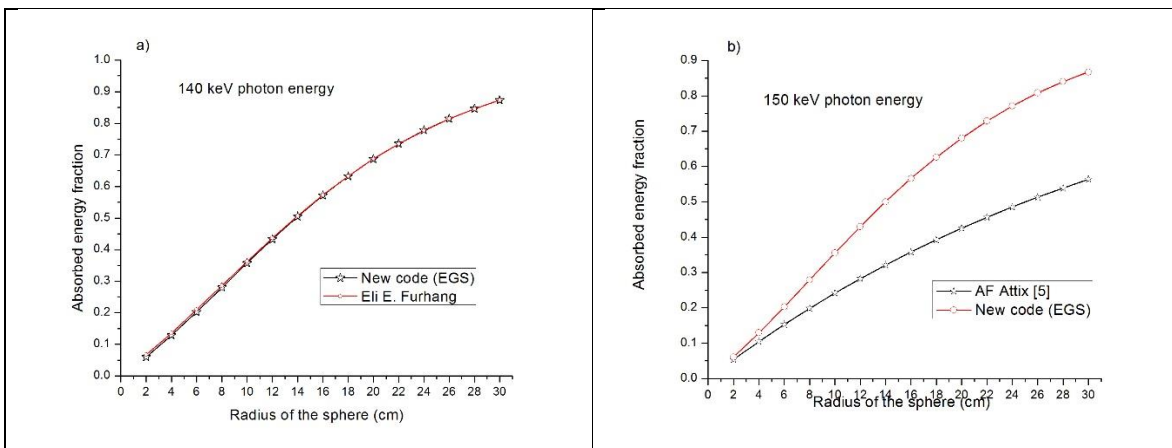


Fig. 4: Absorbed energy fraction in water spheres.

Usually in small volumes there are always large dosimetric discrepancies, so possibly these differences in small volumes are due to the transport methodology, since the new code does it with event-by-event technique. Also, interaction cross sections used in this work are the latest.

Based on the results shown, the new code developed in this work is reliable. This code allow to follow the photon during its entire trajectory, to obtain the energy transferred by photons to the medium and interaction coordinates.

This code become useful in imaging, due to it is able to discriminate between primary and secondary photons, so it is possible correcting or reconstructing X-ray or gamma ray images.

4. Conclusions

EGS is the best sampling method to obtain the polar angle and energy deposited in the Compton interaction.

The new track structure Monte Carlo code perform photon transport in water and it allows to obtain in each interaction: interaction type, energy transferred and interaction coordinates for photons with energy from 1 to 6000 keV.

The new code developed in C++ language can be modified: source and target geometry, photon energy and emission direction, etc., all parameters so that it becomes a specific purpose code.

Quantities computed with new code are according to data reported, so the new code is reliable for photon transport in water using track structure method.

References

- [1] Stewart WB, Wild CW (2014) "World Cancer Report 2014". International Agency for Research on Cancer - World Health Organization. Lyon.
- [2] Harrison TR, Resnick WR, et al (2012) Principios de Medicina Interna. MC Graw Hill, China
- [3] Macarulla T, Ramos FJ, Tabernero J (2009) Comprender el cáncer. Amat, Barcelona.

- [4] Alatorre A (2004) ¿Qué es el cáncer? Respuestas a las preguntas más frecuentes. Selector, CD de México.
- [5] Attix FH (1986) Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry. Wiley-VCH, Weinheim.
- [6] Hall EJ, Giaccia AJ (2011) Radiobiology for the Radiologist. Lippincott Williams & Wilkins, Philadelphia.
- [7] Cember H, Johnson TE (2009) Introduction to Health Physics. Mc Graw Hill, United States.
- [8] Vega CG (2009) Simulación de la interacción de fotones en la materia usando el método Monte Carlo. Tesis doctoral, Instituto Politécnico Nacional.
- [9] Bielajew AF (2001) Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport. Dissertation, University of Michigan.
- [10] Salvat F, Varea JM, Sempau J (2008) PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. Nuclear energy agency organisation for economic co-operation and development, Barcelona Spain.
- [11] Booth TE, Brown FB, Bull JS et al (2003) MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Dissertation, University of California.
- [12] Agostinelli S, Allison J, Amakoe K, Apostolakis J, et al (2003) Geant4-a simulation toolkit. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 506: 250–303. doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [13] Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Dubois PA, Asai M, Barrand G (2006) Geant4 developments and applications. IEEE Transactions on Nuclear Science 53(1): 270 – 278. doi: 10.1109/TNS.2006.869826.
- [14] EGSnrc: software tool to model radiation transport (2015) National Research Council Canada. http://www.nrc-cnrc.gc.ca/eng/solutions/advisory/egsnrc_index.html. Accessed 15 October 2016
- [15] Bert J, Lemaréchal Y, Visvikis D (2016) New hybrid voxelized/analytical primitive in Monte Carlo simulations for medical applications. Physics in Medicine and Biology 61(9): 3347–3364. doi: 10.1088/0031-9155/61/9/3347.
- [16] Elschot M, Lam MG, van den Bosch MA, Viergever MA, de Jong HW (2013) Quantitative Monte Carlo–Based 90Y SPECT Reconstruction. Journal of Nuclear Medicine 54(9): 1557-63. doi: 10.2967/jnumed.112.119131.

- [17] Garza HM (2016) Stereotactic breast irradiation with kilovoltage x-ray beams. *Physics in Medicine and Biology* 61(2):983–995. doi: 10.1088/0031-9155/61/2/983.
- [18] Belley MD, Ashcraft KA, Ting CL, Brady MR, Chen JJ, Gunasingha R, et al (2015) Microdosimetric and Biological Effects of Photon Irradiation at Different Energies in Bone Marrow. *Radiation Research* 184(4):378-391. doi: 10.1667/RR14095.1.
- [19] Tobon JC (2011) Cálculos Dosimétricos mediante código Monte Carlo a partir de imágenes de PET/CT. Tesis maestría, Universidad Nacional de Cuyo.
- [20] Rossi HH, Zaider M (1996) *Microdosimetry and its applications*. Springer, Berlin.
- [21] Fulea D, Cosma C, Pop G. (2009) Monte Carlo method for radiological X-ray examinations. *Romanian Journal in Physics*, 54(7-8): 629-639.
- [22] Özmütlu EN (1992) Sampling of angular distribution in Compton scattering. *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation* 43(6): 713-715. doi: 10.1016/0883-2889(92)90231-3
- [23] Hirayama H, Namito Y (2005) *The EGS5 Code System*. SLAC-Report-730, United States.
- [24] Persliden J (1983) A Monte Carlo program for photon transport using analogue sampling of scattering angle in coherent and incoherent scattering processes. *Computer Programs in Biomedicine* 17(1-2): 115-128. doi: 10.1016/0010-468X(83)90032-6.
- [25] Papanikolaou N, Battista JJ, et al (2004) Tissue inhomogeneity corrections for megavoltage photon beams. *American Association of Physicists in Medicine*, United States.
- [26] Deitel PJ, Deitel HM (2008) *Como programar C++*. Pearson Prentice Hall, México.
- [27] Sierra FJ (2004) *Enciclopedia del lenguaje C++*. Alfaomega Ra-Mal, México.
- [28] Berger MJ, Hubbell JH, Seltzer SM, Chang J, Coursey JS, Sukumar R, Zucker DS, Olsen K, NIST PML Radiation Physics Division, NIST Standard Reference Database 8 (XGAM) <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>. Accessed 17 January 2017.
- [29] Furhang EE, Sgouros G, Shou CC (1996) Radionuclide photon dose kernels for internal emitter dosimetry. *Medical Physics* 23(5):759-764 doi: 10.1118/1.597670

- [30] Champion C, Incerti S, Perrot Y, et al (2013) Dose point kernels in liquid water: An intra-comparison between GEANT4-DNA and a variety of Monte Carlo codes. *Applied Radiation and Isotopes* 83:137-141. doi: 10.1016/j.apradiso.2013.01.037.