

**APLICACIÓN DEL MÉTODO DE MONTE CARLO A LA
PLANIFICACIÓN EN RADIOTERAPIA Y A LA
RECONSTRUCCIÓN DE ESPECTROS DE FOTONES DE
ACELERADORES LINEALES DE PARTÍCULAS (LinAc)**

Belén Jeanne Juste Vidal

EDITORIAL
UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

Departamento de Ingeniería Química y Nuclear



Aplicación del Método de Monte Carlo a la Planificación en Radioterapia y a la Reconstrucción de Espectros de Fotones de Aceleradores Lineales de Partículas (LinAc).

TESIS DOCTORAL

Presentada por:

D. Belén Jeanne Juste Vidal

Dirigida por:

Dr. D. Rafael Miró Herrero

Dr. D. Gumersindo Verdú Martín

Valencia, Febrero de 2011



Esta editorial es miembro de la UNE, lo que garantiza la difusión y comercialización de sus publicaciones a nivel nacional e internacional.

© Belén Jeanne Juste Vidal, 2011

Primera edición, 2011

© de la presente edición:
Editorial Universitat Politècnica de València
www.editorial.upv.es

ISBN: -978-84-694-7185-2

Ref. editorial: 5503

Queda prohibida la reproducción, distribución, comercialización, transformación, y en general, cualquier otra forma de explotación, por cualquier procedimiento, de todo o parte de los contenidos de esta obra sin autorización expresa y por escrito de sus autores.

Agradecimientos

En primer lugar debo agradecer a Rafa Miró, director de esta Tesis Doctoral, no sólo el esfuerzo realizado y la competencia científica aportada, sino también todo lo que me ha enseñado durante estos años, su paciencia, todos sus consejos y sobretodo la amistad creada en este tiempo.

En segundo lugar quiero agradecer a Gumersindo Verdú, también director de esta Tesis Doctoral, su apoyo constante en lo profesional y en lo humano. Su implicación en los problemas, estímulo y ayuda ha sido fundamental para llevar este trabajo a buen término.

Estoy muy agradecida a Juanma Campayo y Sergio Díez, radiofísicos del Hospital Clínic Universitari de València, por todo su amable interés y ayuda, especialmente en lo referente a las medidas experimentales.

En el Departamento de Química Nuclear de la Universidad Politécnica de Valencia he encontrado un gran apoyo, ánimo y cariño en Sergio, Patri, Bea, Pepe, Sebas, Vicente, Teresa, Mónica, Andrea, Sebastián, y Sofi, así como en el Laboratorio de Radiactividad Ambiental en Luisa, Pepa, Vicente, Magda y Marga.

Por otro lado, la información facilitada por la empresa *Elekta* ha sido fundamental para la realización de todas las simulaciones.

A nivel más personal me gustaría dar las gracias a todos los que me han ayudado y a todas las buenas personas con las que he coincidido hasta ahora. A mi familia por haberme querido tanto, especialmente a mis padres y mis hermanos Isa y Nico, además de Marti, Rous, Diego y Mandi. También a mis amigas de siempre: Laia, Such, Corre y Ana, a Panzer y al resto de amigos y compañeros de estudios. Y por supuesto agradecer a Fer hacerme siempre tan feliz.

RESUMEN

La radioterapia es uno de los tratamientos más generalizados aplicados a los pacientes que padecen determinados tipos de cáncer. Sin embargo, la efectividad de este tipo de tratamientos en la destrucción de las células cancerígenas lleva asociada la posibilidad de sufrir los efectos secundarios de la radiación sobre los tejidos sanos circundantes. El riesgo de lesión de las células sanas depende fundamentalmente de la orientación del haz emitido por la unidad de radioterapia y de la intensidad de la radiación recibida por el paciente.

Los avances tecnológicos están permitiendo optimizar los tratamientos, disminuyendo las dosis administradas y los efectos indeseables de éstas, pero uno de los principales problemas en el cálculo de dosis de estos sistemas es la exactitud de los algoritmos de cálculo en presencia de tejidos con densidades muy diferentes, así como el conocimiento exacto del espectro emitido por los aceleradores lineales médicos.

Una de las herramientas aplicadas en este campo es el método de Monte Carlo frente a procedimientos de cálculo deterministas. Este método, es una técnica de cálculo que permite, entre otras aplicaciones, simular el efecto de las radiaciones que se utilizan en la terapia contra el cáncer y otras afecciones similares.

El trabajo que aquí se presenta, pretende demostrar la posibilidad de trasladar el uso de las simulaciones Monte Carlo a la planificación de los tratamientos en radioterapia, mejorando la eficacia en el cálculo de la distribución de dosis en un determinado medio frente a los sistemas tradicionales. Además pretende validar el uso de las simulaciones a otras aplicaciones relacionadas como es la reconstrucción de espectros fotónicos.

Una simulación de este tipo implica modelizar con realismo la geometría del cabezal del acelerador, así como definir los parámetros físicos que rigen el transporte de las partículas. Además, es imprescindible el conocimiento detallado del espectro emitido por el acelerador lineal modelizado, pues de la energía del haz dependen los factores dosimétricos a cuantificar. Una parte importante de este trabajo se centra en la reconstrucción del espectro de un acelerador lineal y su utilización en la simulación del transporte de fotones y electrones durante el funcionamiento de la unidad de radioterapia.

El procedimiento desarrollado para caracterizar los haces de radiación generados en un acelerador lineal está basado en la deconvolución mediante los algoritmos de *Hansen* de las curvas de dosis en profundidad simuladas y medidas en una cuba de agua. Las comparaciones realizadas entre las medidas experimentales y los cálculos realizados demuestran que el algoritmo desarrollado en este trabajo es una vía válida para reconstruir los espectros fotónicos emitidos por unidades de radioterapia. En el desarrollo de esta tesis se explica detallada y rigurosamente todo este proceso, a la vez que se aportan los datos experimentales que justifican que es una metodología fiable para lograr el propósito de reconstruir espectros fotónicos.

El código de transporte de partículas utilizado en las simulaciones de esta tesis ha sido el *Monte Carlo N-Particle Transport Code System (MCNP)*, versión 5, desarrollado en el laboratorio de los Álamos, en Estados Unidos y escogido por ser uno de los programas de cálculo más usados y precisos en el ámbito de simulaciones del transporte de neutrones, fotones y electrones.

SINOPSI

La radioteràpia és un dels tractaments més generalitzats aplicats als pacients que pateixen determinats tipus de càncer. No obstant això, l'efectivitat d'aquest tipus de tractaments en la destrucció de les cèl·lules cancerígenes porta associada la possibilitat de patir els efectes secundaris de la radiació sobre els teixits sans circumdants. El risc de lesió de les cèl·lules sanes depèn fonamentalment de l'orientació del feix emès per la unitat de radioteràpia i de la intensitat de la radiació rebuda pel pacient.

Els avanços tecnològics estan permetent optimitzar els tractaments, disminuint les dosis administrades i els efectes indesitjables d'aquestes, però un dels principals problemes en el càlcul de dosi d'aquests sistemes és l'exactitud dels algorismes de càlcul en presència de teixits amb densitats molt diferents, així com el coneixement exacte de l'espectre emès pels acceleradors lineals mèdics.

Una de les ferramentes aplicades en aquest camp és el mètode de Monte Carlo davant procediments de càlcul deterministes. Aquest mètode, és una tècnica de càlcul que permet, entre d'altres aplicacions, simular l'efecte de les radiacions que s'utilitzen en la teràpia contra el càncer i altres afeccions semblants.

El treball que ací es presenta, pretén demostrar la possibilitat de traslladar l'ús de les simulacions Monte Carlo a la planificació dels tractaments en radioteràpia, millorant l'eficàcia en el càlcul de la distribució de dosi en un determinat medi davant els sistemes tradicionals. A més pretén validar l'ús de les simulacions a altres aplicacions relacionades com és la reconstrucció d'espectres fotònics.

Una simulació d'aquest tipus implica modelitzar amb realisme la geometria del capçal de l'accelerador, així com definir els paràmetres físics que regeixen el transport de les partícules. A més, és imprescindible el coneixement detallat de l'espectre emès per l'accelerador lineal modelitzat, perquè de l'energia del feix depenen els factors dosimètrics a quantificar.

Una part important d'aquest treball es centra en la reconstrucció de l'espectre d'un accelerador lineal i la seua utilització en la simulació del transport de fotons i electrons durant el funcionament de la unitat de radioteràpia. El procediment desenvolupat per a caracteritzar els feixos de radiació generats en un accelerador lineal està basat en la deconvolució per mitjà dels algorismes de *Hansen* de les corbes de dosi en profunditat simulades i mesurades en una cuba d'aigua.

Les comparacions realitzades entre les mesures experimentals i els càlculs realitzats demostren que l'algorisme desenrotllat en aquest treball és una via vàlida per a reconstruir els espectres fotònics emesos per unitats de radioteràpia. En el desenvolupament d'esta tesi s'explica detallada i rigorosament tot aquest procés, al mateix temps que s'aporten les dades experimentals que justifiquen que és una metodologia fiable per a aconseguir el propòsit de reconstruir espectres fotònics.

El codi de transport de partícules utilitzat en les simulacions d'esta tesi ha sigut el *Monte Carlo N-Particle Transport Code System (MCNP)*, versió 5, desenrotllat en el laboratori de Los Alamos, als Estats Units i triat per ser un dels programes de càlcul més usats i precisos en l'àmbit de simulacions del transport de neutrons, fotons i electrons.

ABSTRACT

Radiation therapy is one of the most widespread treatments applied to certain types of cancer patients. However, the effectiveness of this type of treatment destructing the cancer cells is related to the side effects of radiation possibility on the surrounding healthy tissues. The risk of damage at healthy cells depends primarily on the direction of the emitted beam by the radiation unit and the intensity of the radiation received by the patient.

Technological advances are enabling optimize treatments, decreasing administered doses and its undesirable effects, but one of the main problems in these systems dose calculation is the calculation accuracy of the algorithms in the presence of tissues with different densities, as well as the exact knowledge of the spectrum emitted by medical linear accelerators.

One of the tools used in this field is the Monte Carlo method instead of deterministic calculation procedures. This method is a calculation technique that allows, among other applications, simulate the effect of radiation used in cancer therapy and other similar conditions.

The work presented here tries to demonstrate the possibility of using Monte Carlo simulations in radiotherapy treatment planning, improving the efficiency in dose distribution calculation in a particular environment compared to traditional systems. In addition, the work also tries to validate the use of simulations in other related applications such as the reconstruction of photonic spectra.

A simulation of this type involves modeling with realism the linear accelerator head geometry and defining the physical parameters governing the particles transport. Detailed knowledge of the spectrum emitted by the linear accelerator is also essential, since the dosimetric factors depend directly on the beam energy. An important part of this work has been focused on the spectrum reconstruction of a linear accelerator and its use in simulating the photon and electron transport during the radiotherapy unit operation. The developed procedure to characterize the beams generated in a linear accelerator irradiation is based on *Hansen* deconvolution algorithms using the simulated and measured depth dose curves in a water phantom.

Comparisons between experimental measures and calculations results show that the developed algorithm in this work is a valid way to reconstruct the photon spectrum emitted by radiation therapy unit. The reconstruction process is explained in detail and rigorously throughout this work, in which experimental data will be provided to justify that this methodology is a reliable technique to achieve the purpose of reconstructing photonic spectra.

The particles transport code used in the simulations of this thesis has been the *Monte Carlo N-Particle Transport Code System (MCNP)*, fifth version, developed at the Alamos Laboratory, (United States) and chosen as one of the most accurate calculation programs in the field of neutrons, photons and electron transport simulations.

ÍNDICE

Agradecimientos

RESUMEN

ÍNDICE

Capítulo 1. Introducción.	1
1.1. Aspectos relativos a los tratamientos radioterapéuticos.	1
1.2. Objetivos de la tesis.	2
1.3. Estructura de la tesis.	3
1.4. Marco de la tesis.	4
Capítulo 2. Estado del arte.	5
2.1. Evolución histórica de la Radioterapia.	5
2.2. Mecanismos de lesión por radiación ionizante.	6
2.2.1. Efectos de la irradiación celular a nivel molecular.	7
2.2.2. Modificación de los efectos por radiación.	8
2.3. Acelerador lineal de electrones.	9
2.3.1. Descripción del acelerador lineal clínico.	10
2.3.1.1. Guía de ondas.	13
2.3.1.2. Colimación de campos rectangulares.	14
2.3.1.3. Colimación multiláminas.	14
2.3.1.4. Colimador de electrones.	14
2.3.2. Aplicaciones médicas de los aceleradores lineales.	15
2.4. Sistema de planificación en radioterapia.	16
2.5. Normativa.	20
Capítulo 3. El método de Monte Carlo en el transporte de la radiación.	23
3.1. Introducción.	23
3.2. La historia del método Monte Carlo.	25
3.3. La filosofía del método de Monte Carlo.	25
3.4. Generación de números pseudo-aleatorios.	27
3.5. Variables discretas aleatorias.	27
3.6. Teorema central del límite.	31
3.7. Técnicas de muestreo.	32
3.7.1. Función densidad de probabilidad.	32
3.7.2. Función de distribución.	33
3.7.3. Método directo.	34
3.7.4. Método de rechazo.	35
3.8. Análisis estadístico. Estimación de la precisión.	36
Capítulo 4. Física de la radioterapia.	37
4.1. Interacción de las partículas con la materia.	37
4.1.1. Procesos de interacción de los fotones.	38

4.1.1.1. Efecto fotoeléctrico (absorción).	40
4.1.1.2. Efecto <i>Compton</i> (dispersión incoherente).	41
4.1.1.3. Dispersión coherente (<i>Rayleigh</i>).	44
4.1.1.4. Producción de pares.	45
4.1.1.5. Fotodesintegración.	46
4.1.1.6. Importancia relativa de los distintos procesos.	46
4.1.2. Procesos de interacción de los electrones.	46
4.1.2.1. Dispersiones inelásticas con los electrones atómicos (colisiones débiles).	47
4.1.2.2. Dispersiones elásticas con los electrones atómicos (colisiones fuertes).	48
4.1.2.3. Dispersiones inelásticas con los núcleos atómicos (<i>Bremsstrahlung</i>).	49
4.1.2.4. Dispersiones elásticas con los núcleos.	51
4.1.2.5. Aniquilación electrón-positrón.	51
4.2. Cantidades físicas para describir haces de fotones.	51
4.2.1. Unidades básicas.	52
4.3. Capacidad de penetración de los haces de fotones en un maniquí dosimétrico.	55
4.4. Distribución de dosis en agua.	56
4.4.1. Porcentaje de dosis en profundidad sobre el eje central.	56
4.4.1.1. Región de <i>Build up</i> .	57
4.4.2. Dosis fuera del Eje (<i>off-axis</i>) y perfiles laterales de campo.	58
4.5. Correcciones por presencia de heterogeneidades.	59
4.6. Modelos para algoritmos de cálculo dosimétrico.	60
4.7. Dosis relativa medida con cámara de ionización.	60
4.8. Teoría de la cavidad de <i>Bragg-Gray</i>.	60
4.9. Rutas dosimétricas.	62
Capítulo 5. El código Monte Carlo MCNP (versión 5). Descripción general.	65
5.1. Introducción.	65
5.2. El código MCNP5.	67
5.3. Librería de transporte de fotones: MCPLIB04.	68
5.4. Librería de transporte de electrones: EL03.	68
5.5. <i>Tallies</i> o registros dosimétricos en MCNP5.	71
5.6. Los métodos de reducción de varianza en MCNP5.	73
5.7. Paralelización del código.	77
Capítulo 6. Materiales y métodos.	79
6.1. Descripción de la metodología.	79
6.2. Modelización del funcionamiento de la unidad de radioterapia <i>Elekta Precise</i>.	81
6.2.1. Simulación del cabezal de irradiación.	82
6.2.1.1. Espectro de emisión.	83
6.2.1.2. Sistema de colimación.	85
6.2.2. Simulación de la cuba de agua.	88
6.2.3. Registros.	89
6.2.4. Física de la simulación.	89
6.2.5. Otros parámetros de la simulación.	90
6.2.6. Datos experimentales.	91
6.2.6.1. Curvas relativas de dosis en el interior de la cuba.	92
6.2.6.2. Valores absolutos de dosis en el interior de la heterogeneidad.	94
6.2.7. Curvas extraídas del Planificador.	96
6.3. Cálculo del espectro por análisis de la dispersión.	98
6.3.1. Metodología de análisis de la dispersión.	99

6.3.1.1. El modelo de radiación de frenado de <i>Schiff</i> .	101
6.3.1.2. Método de reconstrucción del espectro.	102
6.3.1.3. Método de optimización.	104
6.3.1.4. Procedimiento experimental.	109
6.3.1.5. Simulación Monte Carlo de haces de fotones monoenergéticos.	111
6.3.1.6. Validación del espectro reconstruido.	112
6.4. Reconstrucción del espectro a partir de curvas de dosis en profundidad.	114
6.4.1. Reconstrucción del espectro como un problema lineal.	114
6.4.2. Problema lineal inverso.	116
6.4.2.1. Soluciones del problema lineal inverso.	119
6.4.2.2. Sistema mal condicionado e inestabilidad numérica.	119
6.4.3. Discretización del problema.	120
6.4.4. El método de Descomposición en Valores Singulares (SVD).	121
6.4.4.1. Condición de Picard Discreta.	123
6.4.4.2. La Curva <i>L</i> .	125
6.4.5. Procedimiento de regularización.	127
6.4.5.1. Método de Descomposición en Valores Singulares Truncada (TSVD).	127
6.4.5.1.1. Elección del parámetro para la regularización de TSVD.	129
6.4.5.2. Descomposición en valores singulares truncada modificada (MTSVD).	129
6.4.5.2.1. Elección del parámetro para la regularización de MTSVD.	130
6.4.5.3. Procedimiento de Regularización de <i>Tikhonov</i> .	130
6.4.5.3.1. Elección del parámetro para la regularización de <i>Tikhonov</i> .	133
6.5. Metodología del gradiente de la curva de dosis en profundidad (GDP).	134
Capítulo 7. Resultados.	136
7.1. Validación del modelo de simulación de la unidad de radioterapia.	136
7.1.1. Presentación de los resultados.	136
7.1.2. Validación de los resultados del modelo del equipo de radioterapia.	139
7.1.2.1. Cuba de agua homogénea.	139
7.1.2.2. Cuba de agua heterogénea.	145
7.1.2.3. Interior de la heterogeneidad.	146
7.2. Validación del espectro reconstruido por <i>Schiff</i>.	147
7.2.1. Diferencia espectral.	148
7.2.2. Dosis en profundidad.	149
7.3. Validación del espectro reconstruido por deconvolución.	150
7.3.1. Cálculo del espectro a partir de las curvas de dosis en profundidad.	151
7.3.1.1. Características físicas del problema.	151
7.3.1.2. Condición de Picard Discreta.	154
7.3.1.3. El método TSVD.	155
7.3.1.4. El método MTSVD.	157
7.3.1.5. Procedimiento de Regularización de <i>Tikhonov</i> .	160
7.3.1.6. Estudio inverso.	162
7.3.1.7. Estudio considerando la contribución en la matriz respuesta de sólo los fotones.	165
7.3.2. Método del gradiente: Derivada de la matriz respuesta.	167
7.3.2.1. Comportamiento físico del sistema.	169
7.3.2.2. El método TSVD.	171
7.3.2.3. El método de <i>Tikhonov</i> .	173
7.3.3. Validación del espectro.	176
7.3.4. Filtrado del espectro obtenido.	177
7.4. Comparación de las diferentes técnicas de reconstrucción de espectros.	180
7.5. Cálculo del espectro de 15 MeV.	183
Capítulo 8. Conclusiones.	192
8.1. Discusión de los resultados.	192
8.1.1. Simulación de la unidad de radioterapia.	192
8.1.2. Reconstrucción del espectro por el método de <i>Schiff</i> .	193

8.1.3. Reconstrucción del espectro por análisis de deconvolución. _____	194
8.2. Conclusiones generales. _____	194
8.3. Líneas futuras. _____	195
8.4. Publicaciones. _____	196
8.4.1. Publicaciones internacionales. _____	196
8.4.2. Publicaciones nacionales. _____	197
8.4.3. Comunicaciones internacionales. _____	197
8.4.4. Comunicaciones nacionales. _____	201
BIBLIOGRAFÍA _____	206

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 4.1. Condiciones de referencia para la determinación de la calidad del haz de fotones.

Tabla 5.1. Características clave de los códigos de Monte Carlo utilizados en aplicaciones terapéuticas de medicina nuclear.

Tabla 5.2. Posibilidades estándares de programación de tallies o registros del código MCNP.

Tabla 6.1. Coeficiente de calibración de dosis para el acelerador lineal *Elekta Precise* del Hospital Clínic Universitari de València.

Tabla 6.2. Ángulos de dispersión de las posiciones de la cámara de ionización.

Tabla 6.3. Lecturas experimentales en nC de la cámara de ionización para un haz de fotones de 6 MeV.

Tabla 7.1. Criterios de aceptabilidad para cálculos de dosis para haces externos en campos cuadrados.

Tabla 7.2. Tiempos de computación.

Tabla 7.3. Errores de las simulaciones.

Tabla 7.4. Tiempo de cálculo con 16 CPU's.

Tabla 7.5. Comparación del comportamiento de la matriz respuesta y la matriz de gradientes.

Tabla 7.6. Diferencia espectral de la deconvolución con respecto al espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Tabla 7.7. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para los diferentes espectros calculados.

Tabla 7.8. Precisión de las simulaciones.

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 2.1. La primera radiografía.
- Figura 2.2. Daño a nivel molecular por acción directa o indirecta.
- Figura 2.3. Acelerador lineal de electrones de uso médico (*Linac*).
- Figura 2.4. Representación de los componentes de un acelerador lineal (*Linac*).
- Figura 2.5. Esquema de los componentes de un acelerador lineal (*Linac*).
- Figura 2.6. Guía de ondas.
- Figura 2.7. Colimador multiláminas.
- Figura 2.8. Colimador de electrones.
- Figura 2.9. Acelerador lineal Elekta Precise en una sala de tratamiento de radioterapia.
- Figura 2.10. Pasos en el proceso de planificación en tratamientos de radioterapia.
- Figura 3.1. Métodos determinísticos vs. Monte Carlo.
- Figura 3.2. Ingredientes básicos en la resolución de problemas mediante el método de Monte Carlo.
- Figura 3.3. Ejemplo de función densidad de probabilidad, $p(x)$.
- Figura 3.4. Función de distribución, $c(x)$, obtenida de la integración de la función densidad de probabilidad.
- Figura 3.5. Función de distribución inversa, $c^{-1}(x)$.
- Figura 3.6. Función densidad de probabilidad.
- Figura 3.7. Función densidad de probabilidad normalizada.
- Figura 4.1. Mecanismos básicos de interacción de fotones.
- Figura 4.2. Diagrama de *Feynmann* correspondiente al efecto fotoeléctrico.
- Figura 4.3. Diagrama de *Feynmann* correspondiente al efecto *Compton*.
- Figura 4.4. Diagrama polar de la sección eficaz diferencial en función del ángulo de dispersión θ .
- Figura 4.5. Diagrama de *Feynmann* correspondiente a la dispersión coherente.
- Figura 4.6. Importancia relativa de las distintas interacciones fotónicas en carbono y plomo.
- Figura 4.7. Mecanismos básicos de interacción de electrones y positrones.
- Figura 4.8. Depósito de dosis en profundidad de un haz de fotones de megavoltaje.
- Figura 4.9. *Build up* de la curva de dosis en profundidad.
- Figura 4.10. Perfiles laterales de campo de fotones para un haz de 6 MeV.
- Figura 5.1. Evolución histórica del código MCNP.
- Figura 5.2. Esquema de la forma de operar la técnica de reducción de varianza *Weight Window* o "Ventana de Peso".
- Figura 6.1. Diagrama del cabezal de tratamiento de energía dual de un acelerador *Elekta Precise* (*Elekta Oncology Systems*).
- Figura 6.2. Diagrama del cabezal multiláminas *Elekta*.
- Figura 6.3. Vista esquemática de la geometría modelizada con MCNP5 del cabezal del acelerador lineal medico *Elekta Precise* para un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.4. Modelo geométrico del bloque del alojamiento del blanco.

- Figura 6.5. Espectro de energía de fotones de 6 MV.
- Figura 6.7. Renderizado tridimensional de la geometría del cabezal modelizada con MCNP5.
- Figura 6.8. Colimador primario.
- Figura 6.9. Perfil de dosis con filtro aplanador.
- Figura 6.10. Filtro aplanador.
- Figura 6.11. Cámara de ionización para monitorización del haz.
- Figura 6.12. Vista inferior del colimador multiláminas.
- Figura 6.13. Geometría modelizada de las láminas.
- Figura 6.14. Cuba de agua.
- Figura 6.15. Simulación del transporte de radiación en dos etapas.
- Figura 6.16. Cabezal del acelerador lineal *Elekta* y la cuba de agua del Hospital Clínic Universitari de València.
- Figura 6.17. Guía y cámara de ionización.
- Figura 6.18. RFA-300, cuba de agua con heterogeneidad utilizada en el proyecto.
- Figura 6.19. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua para un tamaño de campo de irradiación 10 cm x 10 cm y un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.20. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua para un tamaño de campo de irradiación 20 cm x 20 cm y un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.21. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua heterogénea para un tamaño de campo de irradiación 10 cm x 10 cm y un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.22. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua heterogénea para un tamaño de campo de irradiación 20 cm x 20 cm y un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.23. Piezas de poliestireno utilizadas en las medidas absolutas.
- Figura 6.24. Medidas experimentales absolutas realizadas en el interior de la heterogeneidad de la cuba de agua. Tamaño de campo de irradiación 10 cm x 10 cm y haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.25. Dosis relativa en profundidad calculada a partir del planificador.
- Figura 6.26. Vista superior del montaje para medir la señal de la dispersión en función del ángulo (no está a escala).
- Figura 6.27. Zona preferencial de interacción.
- Figura 6.28. Representación esquemática del dispositivo experimental.
- Figura 6.29. Simulación de la dispersión de partículas al incidir sobre el bloque dispersor.
- Figura 6.30. Valores de la dispersión obtenidos en cada intervalo de energía para las posiciones P1, P2, P3, P4 y P5.
- Figura 6.31. Fotografías tomadas durante la toma de medidas.
- Figura 6.32. Vista esquemática de la geometría del modelo del cabezal del acelerador lineal *Elekta* para un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.33. Simulación del transporte de partículas a través del cabezal lineal *Elekta* para un haz de fotones de 6 MeV.
- Figura 6.34. Forma genérica de la Curva *L*.
- Figura 6.35. Comparación del factor de filtro para TSVD y *Tikhonov*.

Figura 7.1. Esquema de las curvas en profundidad y perfil calculadas por simulación Monte Carlo y validadas con datos experimentales.

Figura 7.2. Definición de las zonas geométricas del haz.

Figura 7.3. Ilustración de las diferentes regiones donde se aplican los criterios de aceptabilidad.

Figura 7.4. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV.

Figura 7.5. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV. Cálculos recogidos con el tally FMESH.

Figura 7.6. Distribución de dosis tridimensional a 10 cm de la superficie de la cuba de agua para un haz de 6 MeV. Cálculos recogidos con el tally FMESH.

Figura 7.7. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 5 cm x 5 cm.

Figura 7.8. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 10 cm x 10 cm.

Figura 7.9. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 15 cm x 15 cm.

Figura 7.10. Curva de dosis relativa en profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 20 cm x 20 cm y 30 cm x 30 cm.

Figura 7.11. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV y tamaño de campo de 10 cm x 10 cm. Cálculos recogidos con el tally *F8.

Figura 7.12. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV y tamaño de campo de 20 cm x 20 cm. Cálculos recogidos con el tally *F8.

Figura 7.13. Curvas de dosis relativa en profundidad para un haz de 6 MeV y tamaño de campo de 10 cm x 10 cm.

Figura 7.14. Comparación del espectro de fotones de 6MeV reconstruido con el ofrecido por *Sheikh-Bagheri y Rogers*.

Figura 7.15. 'Diferencia espectral' es la relación de la suma del área rallada y el área total bajo el espectro de *Schiff*, ambos normalizados a un área bajo la curva espectral de 1.

Figura 7.16. Curva de dosis en profundidad obtenida en el eje central de una cuba de agua utilizando el espectro reconstruido de 6 MeV a partir del método de análisis de la dispersión de *Schiff*.

Figura 7.17. Matriz respuesta $A_{M \times N}$, registro de la dosis por fotones y electrones.

Figura 7.18. Evolución de los vectores singulares u_i .

Figura 7.19. Evolución de los vectores singulares v_i .

Figura 7.20. Valores singulares σ_i .

Figura 7.21. Comparación del espectro de *Rogers-Bagheri* con el espectro obtenido directamente utilizando la pseudoinversa de la matriz A.

Figura 7.22. Condición discreta de *Picard*.

Figura 7.23. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.

Figura 7.24. Reconstrucción del espectro por TSVD.

Figura 7.25. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de MTSVD (L1).

Figura 7.26. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de MTSVD (L2).

Figura 7.27. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L1) utilizando el parámetro de truncamiento $k=193$

Figura 7.28. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L1).

- Figura 7.29. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L2).
- Figura 7.30. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de *Tikhonov*.
- Figura 7.31. Reconstrucción del espectro por *Tikhonov*.
- Figura 7.32. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro teórico de *Sheik-Bagheri y Rogers*.
- Figura 7.33. Comparación del espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* con el espectro reconstruido a partir de la curva de dosis en profundidad b_{RB} y la matriz respuesta.
- Figura 7.34. Curva de dosis en profundidad obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro teórico monoenergético de 4 MeV.
- Figura 7.35. Comparación del espectro monoenergético teórico de 4 MeV con el espectro reconstruido a partir de la curva de dosis en profundidad b_{Ei} y la matriz respuesta.
- Figura 7.36. Matriz respuesta $A_{M \times N}$ registrando solo fotones.
- Figura 7.37. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta considerando sólo fotones y el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.
- Figura 7.38. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta considerando sólo fotones y el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.
- Figura 7.39. Derivada de la matriz respuesta $A'_{M \times N}$.
- Figura 7.40. Evolución de los vectores singulares u_i .
- Figura 7.41. Valores singulares σ_i .
- Figura 7.42. Representación de la condición de Picard discreta de la matriz de gradientes.
- Figura 7.43. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.
- Figura 7.44. Reconstrucción del espectro por TSVD, con parámetro de truncamiento $k=10$.
- Figura 7.45. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de *Tikhonov*.
- Figura 7.46. Reconstrucción del espectro por *Tikhonov*.
- Figura 7.47. Comparación de la Curva L en la metodología de *Tikhonov* para DP y GDP.
- Figura 7.48. Comparación de los espectros obtenidos con la metodología de *Tikhonov* para DP y GDP.
- Figura 7.49. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro obtenido por *Tikhonov*.
- Figura 7.50. Aplicación del filtro de *haar* al espectro reconstruido por *Tikhonov*.
- Figura 7.51. Filtrado del espectro por Wavelet.
- Figura 7.52. Filtrado del espectro por interpolación polinómica.
- Figura 7.53. Curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y ajustado por polinomio.
- Figura 7.54. Curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y filtrado por Wavelet.
- Figura 7.55. Comparación de las curvas en profundidad para los diferentes espectros calculados.
- Figura 7.56. Comparación de los espectros calculados y sus correspondientes curvas de dosis en profundidad.
- Figura 7.57. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para diferentes tamaños de campos (5 cm x 5 cm y 15 cm x 15 cm) con el espectro reconstruido por *Tikhonov* y filtrado.

Figura 7.58. Comparación de las curvas simuladas de dosis en profundidad y perfil para un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm con el espectro reconstruido por *Tikhonov* y filtrado con las curvas medidas experimentalmente.

Figura 7.59. Matriz respuesta $A_{M \times N}$, registro de las curvas de dosis en profundidad para cada haz monoenergético.

Figura 7.60. Derivada de la matriz respuesta $A'_{M \times N}$.

Figura 7.61. Valores singulares σ_i .

Figura 7.62. Representación de la condición de Picard discreta de la matriz de gradientes.

Figura 7.63. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.

Figura 7.64. Reconstrucción del espectro por TSVD, con parámetro de truncamiento $k=10$.

Figura 7.65. Aplicación del filtro de *haar* al espectro de 15 MeV reconstruido por TSVD.

Figura 7.66. Filtrado del espectro de 15 MeV.

Figura 7.67. Vista esquemática de la geometría modelizada con MCNP5 del cabezal del acelerador lineal medico *Electa Precise* para un haz de fotones de 15 MeV.

Figura 7.68. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm con el espectro de 15 MeV reconstruido por TSVD y filtrado.

ÍNDICE DE SIGLAS

AAPM	(American Association of Physicists in Medicine).
AERO	(Asociación Española de Radioterapia y Oncología).
AKR	(Tasa de Kerma en Aire).
CSN	(Consejo de Seguridad Nuclear).
CT	(Tomografía Computerizada).
DP	(Dosis en Profundidad).
EFOMP	(European Federation of Organisations in Medical Physics).
ENDF	(Evaluated Nuclear Data File).
EPID	(Electronic Portal Imaging Device).
FKN	(Factor de Klein-Nishina).
FWHM	(Full Width at Half Maximum).
GDP	(Gradientes de las curvas de Dosis en Profundidad).
IAEA	(International Atomic Energy Agency).
ICRP	(International Commission on Radiological Protection).
ICRU	(International Commission on Radiation Units and Measurements).
IMRT	(Intensity-Modulated Radiation Therapy).
IOMP	(International Organization for Medical Physics).
ISIRYM	(Instituto de Seguridad Industrial Radiofísica y Medioambiental).
LINAC	(LINear ACcelerator).
MCNP	(Monte Carlo N-Particle).
MLC	(Multi-Leaf Collimator).
MRI	(Imagen por Resonancia Magnética).
MTSVD	(Modified Truncated Singular Value Decomposition).
NEA	(Nuclear Energy Agency).
NIST	(National Institute of Standards and Technology).
OF	(Output Factor).
OIE	(Organización Internacional de Estandarización).
OMS	(Organización Mundial de la Salud).
PDD	(Percentage Depth Dose).
PET	(Positron Emission Tomography).
RF	(RadioFrecuencias).
RRD	(Radiografía Reconstruida Digitalmente).
RSICC	(Radiation Safety Information Computational Center).
SEFM	(Sociedad Española de Física Médica).
SPECT	(Singular Photon Emission Computerized Tomography).

SSD	(Source Surface Distance).
SSR	(Surface Source Read).
SSW	(Surface Source Write).
SVD	(Singular Value Decomposition).
TAC	(Tomografía Axial Computerizada).
TAR	(Tissue to Air Ratio).
TLE	(Transferencia Lineal de Energía).
TPR	(Tissue Phantom Ratio).
TPS	(Treatment Planning System).
TRV	(Técnica de Reducción de Varianza).
TSVD	(Truncated Singular Value Decomposition).
UM	(Unidades de Monitor).

Capítulo 1

Introducción

1.1. Aspectos relativos a los tratamientos radioterapéuticos.

En la segunda mitad del siglo XX, el rápido crecimiento de los avances científicos y tecnológicos, convirtieron el diagnóstico y el tratamiento de diversas enfermedades en el punto de encuentro de diversas áreas de la ciencia. En especial, en enfermedades relacionadas con el cáncer, afección en la que ciertas células del organismo se multiplican sin control aparente destruyendo tejidos y órganos sanos [Plazas, 2005].

El cáncer continúa siendo una de las principales causas de muerte en todo el mundo, con un diagnóstico anual de más de 10 millones de casos y que sólo en España incluye más de 160.000 nuevos casos diagnosticados anualmente. Sin embargo, si a mediados del siglo XX, un paciente diagnosticado de cáncer difícilmente podía recuperarse, hoy en día es posible controlar muchos tipos de cáncer. Esto se debe en gran medida a importantes avances logrados en la oncología por radiación, ahora utilizada de manera independiente o combinada con otras terapias para tratar hasta el 60 por ciento de todos los pacientes de cáncer.

Médicos, físicos e ingenieros han aportado sus conocimientos y trabajo conjunto en beneficio de la salud del ser humano, mejorando así notablemente la calidad y la esperanza de vida de la sociedad del siglo XXI. La Física ha sido partícipe del nacimiento de estas nuevas tendencias y su influencia ha sido determinante en esta nueva disciplina conocida como **Física Médica**.

El cáncer, como principal objetivo de aplicación de estas nuevas tecnologías, es combatido con distintas medidas terapéuticas que incluyen la cirugía, la radioterapia y la quimioterapia. La radioterapia es la exposición de una zona determinada del organismo a una fuente de radiación ionizante; dicha radiación puede provenir de una fuente natural como los isótopos radiactivos, o de una fuente artificial como los tubos de rayos X, aceleradores u otros radioisótopos activados artificialmente.

Este tratamiento incluye la localización precisa del tumor y la utilización de dosis fraccionadas múltiples, diarias o periódicas, de irradiación durante un periodo de tiempo determinado. La radiación ionizante lesiona las células mediante su interacción con el ácido desoxirribonucleico del núcleo (ADN), e impide la división celular normal. De esta manera, el haz de radiación ionizante atraviesa los tejidos del paciente para eliminar las células cancerígenas que proliferan desordenadamente en el cuerpo. Ello es posible dada la naturaleza de estas radiaciones de mínima longitud de onda y de alta frecuencia, capaces de penetrar el órgano afectado con dosis previamente cuantificadas.

La demanda de estos nuevos tratamientos es cada vez mayor, por lo tanto, dentro de la física aplicada y de la ingeniería existe un especial interés teórico y práctico de investigar la mejora de estas técnicas. El desafío al que se enfrentan los radiofísicos es cómo administrar suficiente radiación para destruir las células nocivas sin exceder el nivel de tolerancia de las células sanas circundantes. Solucionar este problema de manera simple y eficaz ha sido el principal objetivo de los desarrollos tecnológicos que se han producido en la radioterapia en las últimas décadas.

Las técnicas Monte Carlo se han convertido en una de las herramientas más populares en diferentes áreas de la Física Médica tras el desarrollo y la posterior ejecución de potentes sistemas computacionales para uso clínico. En particular, han sido ampliamente solicitadas para simular procesos que implican un comportamiento aleatorio y para cuantificar determinados parámetros físicos que son muy difíciles o imposibles de calcular desde el punto de vista analítico o determinar por mediciones experimentales. Las aplicaciones del método Monte Carlo en la Física Médica cubren casi todos los temas, incluyendo la protección contra las radiaciones, la medicina nuclear, el diagnóstico en radiología y la radioterapia. Además, con el rápido incremento de la potencia de cálculo de los ordenadores modernos, los tratamientos basados en Monte Carlo para la planificación en radioterapia comienzan a resultar factibles.

Esta tesis se justifica en la necesidad de conocer, estimar y mejorar los sistemas de planificación en radioterapia utilizados en el tratamiento de determinados tipos de cáncer.

1.2. Objetivos de la tesis.

El conocimiento del espectro energético de fotones emitido por un acelerador lineal médico es fundamental para que los cálculos de dosis realizados en la planificación sean exactos, además de ser útil para realizar los controles de calidad.

Sin embargo, el espectro de energía de un haz de fotones *Bremsstrahlung* utilizado para el diagnóstico y tratamiento de enfermedades de cáncer es difícil de caracterizar por medición directa ya que el flujo de fotones emitido es muy elevado. El mayor problema al medir directamente los espectros es que la alta fluencia de fotones producido en cada pulso hace imposible el recuento de pulsos de manera tradicional. Por otro lado, un espectro de fotones *Bremsstrahlung* es una función compleja dependiente de la energía de los electrones incidiendo en el blanco, del material y espesor del blanco, así como de la configuración del haz. Puede variar del eje central al borde del campo debido a la dominación de fotones de alta energía y a la variación de la configuración de los dispositivos de conformación de campo. Además, puede variar con el tiempo debido al uso y rendimiento del acelerador lineal. De ahí la imposibilidad de caracterizar de manera genérica los espectros según su energía y la necesidad de establecer una metodología de reconstrucción de espectros para determinar el de cada máquina en particular.

El objetivo principal de esta tesis es la mejora de los procedimientos de cálculo de radiación utilizados en los tratamientos de radioterapia. En esencia se abordan dos cuestiones principales, la reconstrucción del espectro emitido por un acelerador lineal (se detalla el estudio de diferentes técnicas de reconstrucción de espectros basadas en el análisis de la radiación de dispersión y la utilización de las curvas de dosis en profundidad en cuba de agua) y el cálculo de la distribución de dosis en medios homogéneos o heterogéneos de baja densidad.

A partir de este objetivo general se derivan las líneas de trabajo que se enumeran a continuación:

1. Simulación mediante código Monte Carlo de un haz de fotones y electrones de uso clínico aplicado a tratamientos de radioterapia que proporcione la caracterización física necesaria que exigen los sistemas de planificación.

En el desarrollo de la tesis se describe la metodología seguida para reproducir la incidencia de un haz de energía nominal de 6 MeV generado por un acelerador lineal en condiciones estándar de tratamiento, bajo la precisión requerida.

En concreto se simula el funcionamiento del acelerador *Elekta Precise* utilizado en el Hospital Clínic Universitari de València. La metodología empleada es extensible a otros aceleradores en condiciones de irradiación similares.

2. Validación del modelo mediante la comparación de la distribución de dosis experimental en una cuba de agua heterogénea para diferentes tamaños de campo con las curvas calculadas a partir de la simulación Monte Carlo.

La correcta caracterización del modelo geométrico y físico de la unidad de radioterapia bajo condiciones de referencia, se ha verificado comparando la distribución de dosis proporcionada por el haz en una cuba de agua siguiendo el método de simulación, con las curvas de dosis experimentales.

3. Análisis de la distribución de dosis en medios heterogéneos calculada mediante algoritmos Monte Carlo frente a los algoritmos deterministas vigentes.

4. Desarrollo de una metodología de reconstrucción y validación del espectro emitido por el acelerador lineal.

Se han estudiado dos diferentes métodos de reconstrucción del espectro. Por un lado se ha analizado la dispersión del haz primario al incidir en un objeto dispersor para calcular el espectro utilizando la fórmula de *Schiff Bremsstrahlung*, y por otro lado se ha utilizado metodologías de deconvolución para reconstruir el espectro de haz primario a partir de las curvas de dosis en profundidad en una cuba de agua.

1.3. Estructura de la tesis.

La tesis se estructura en capítulos, para alcanzar los objetivos comentados en la sección anterior.

En el presente capítulo se presenta la motivación que ha llevado a desarrollar este trabajo, describiendo la justificación y los objetivos del trabajo realizado, así como el marco que ha rodeado la realización de la presente tesis doctoral. Además, el capítulo resume brevemente el contenido de los distintos apartados del documento.

En el **Capítulo 2** se realiza una revisión de la actualidad en cuanto a la práctica diaria de la radioterapia abordándola desde su evolución histórica hasta su relevancia actual. En su contenido se encuentra la descripción de los aceleradores lineales y sus aplicaciones médicas.

El **Capítulo 3** resume las bases de los códigos de Monte Carlo que existen actualmente aplicados al transporte de radiación y se detallan las bases matemáticas y probabilísticas en las que se apoya el método Monte Carlo.

El **Capítulo 4** realiza una introducción a la física de las partículas y a la dosimetría física, centrándose en la dosimetría en radioterapia, donde se analiza brevemente la interacción de la radiación con la materia.

La evolución del código de Monte Carlo MCNP, en particular la versión 5, las librerías de secciones eficaces utilizadas en el transporte de fotones y electrones y los registros o *tallies* dosimétricos se describe brevemente en el **Capítulo 5**. Finalmente se comenta la implementación computacional del código y el entorno informático donde se realizaron las simulaciones.

El **Capítulo 6** desarrolla la metodología llevada a cabo tanto para la reconstrucción del espectro como para la simulación del funcionamiento de una unidad de radioterapia.

El **Capítulo 7** presenta los resultados obtenidos comparándolos con datos experimentales y evalúa la posibilidad de utilizar el método Monte Carlo en sistemas de planificación de radioterapia.

Por último, el **Capítulo 8** recoge la discusión de los resultados obtenidos, la conclusión del trabajo realizado y las líneas futuras.

1.4. Marco de la tesis.

Esta tesis doctoral se ha desarrollado en el Área de Ingeniería Nuclear del Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la Universidad Politécnica de Valencia, dentro de la línea de investigación en la planificación de tratamientos de radioterapia con Monte Carlo del ISIRYM (Instituto de Seguridad Industrial Radiofísica y Medioambiental). El trabajo presentado resume una parte de la labor de investigación desarrollada a través de una beca especialización en el mismo departamento.

El grupo de investigación ISIRYM ha colaborado en distintos proyectos de investigación multidisciplinarios de ámbito nacional e internacional relacionados con la Seguridad Nuclear y la Física Médica.

En Noviembre de 2004, la autora de esta tesis se incorporó al Departamento de Ingeniería Química y Nuclear para realizar el programa de Doctorado en Tecnología de Membranas, Electroquímica, Medio Ambiente y Seguridad Nuclear, comenzando la tesis doctoral y desarrollando trabajos de investigación centrados principalmente en el área de radiofísica, imagen médica y la protección radiológica.

En Diciembre de 2006 la autora presentó el DEA: *“Sistema de planificación en radioterapia utilizando el método Monte Carlo”*, en el cual se simulaba el funcionamiento de una unidad de radioterapia de Cobalto-60 [Miró, 2006]. Este trabajo de investigación dejó probadas las posibilidades y fiabilidad de cálculo del método Monte Carlo en la Física Médica, por lo que el estudio se amplió a su aplicación a un acelerador lineal médico. Este proyecto implicaba por tanto, la reconstrucción del espectro emitido, que a diferencia de la unidad de Cobaltoterapia, no es conocido para los aceleradores lineales médicos.

Capítulo 2

Estado del arte

2.1. Evolución histórica de la Radioterapia.

Wilhelm Conrad Roentgen fue el primero que describió la producción y el uso médico de los Rayos X en 1895. El 22 de diciembre de ese mismo año tomó la primera radiografía hecha a un ser humano: la mano de su esposa.



Figura 2.1. La primera radiografía.

Los rayos invisibles emitidos por el tubo de vidrio lleno de gas a baja presión en el que aplicaban campos eléctricos intensos fueron llamados por el propio *Roentgen* rayos X, para distinguirlos de otras radiaciones. La divulgación mundial de estos hechos fue inmensa y los rayos X pasaron a ser un elemento indispensable tanto en hospitales como en centros de investigación. *Roentgen* recibió el primer premio Nobel de Física en el año 1901 [Stone, 1946].

Después del descubrimiento de *Roentgen*, *Becquerel* comenzó a investigar la posible conexión entre la radiación invisible y la luz visible, pues pensaba que tal vez todos los materiales luminiscentes, estimulados de cualquier forma, también pudieran producir rayos X. Descubrió que cualquier sal de uranio, producía estas radiaciones penetrantes. En 1898 encontró que otro elemento, además del uranio, producía este efecto, el torio. La emisión de estas radiaciones es lo que hoy se conoce como radioactividad.

Madame *Curie* se interesó por los informes de *Roentgen* acerca de los rayos X y los de *Becquerel* acerca de la radiactividad natural, así que escogió como tema de tesis doctoral, "*Investigaciones acerca de las sustancias radiactivas*". En 1903, *Henri Becquerel* y los esposos *Pierre* y *Marie Curie* fueron galardonados con el premio Nobel de Física por el descubrimiento del Radio.

Siete años más tarde, Madame *Curie* recibía además el premio Nobel de Química y, en 1911, con el apoyo del Instituto Pasteur y de la Universidad de París, lograba fundar el Instituto del Radio instalado en dos edificios gemelos, uno para estudios en física y matemáticas, dirigido por *Marie Curie* y, otro,

para los estudios médicos bajo la dirección de *Paul Regaud*. De esta nueva institución surgen las primeras contribuciones radiobiológicas y se establecen las bases de la radioterapia moderna.

Desde entonces, la radioterapia evolucionó lentamente, con los inconvenientes de la tecnología, que no permitía energías mayores de 140 kV y que llegó a 200 kV en 1922.

Puede decirse que el campo de la radioterapia clínica científica empezó en París en 1922, durante el Congreso Internacional de Oncología, en el que los profesores *Coutart* y *Hautant* presentaron la evidencia de que lesiones avanzadas de cáncer laríngeo podían ser tratadas sin secuelas desastrosas. En 1934, el profesor *Coutart* había desarrollado un esquema de radioterapia fraccionada, que sigue siendo la base para la Radioterapia moderna. Consistía en lograr administrar altas dosis con una buena distribución de la radiación en el área afectada, como el tumor, y con el mejor umbral posible con los tejidos vecinos, para reducir los efectos secundarios.

La radioterapia, como bien es sabido, puede ser administrada a distancia, hoy llamada Teleterapia y de cerca, llamada Braquiterapia. Los desarrollos de ambas técnicas han sido notables y si bien se usan muchas veces de manera combinada, en este trabajo sólo haremos referencia a la Radioterapia, la aplicación a distancia de fotones de Rayos X o Rayos Gamma o haces de electrones [*Pointon*, 1991].

A partir de los años 30, el desarrollo científico tecnológico llevó progresivamente al uso de equipos de teleterapia de mayor energía, así como a la utilización de isótopos, como el Cobalto 60. Estos permitieron una mayor facilidad técnica, mayor factibilidad de reproducción del tratamiento y, por lo tanto, mayor posibilidad de curación de pacientes con cáncer. Con el desarrollo de la informática y la electrónica el crecimiento de la radioterapia ha sido exponencial.

En la actualidad las bombas de Cobalto han sido sustituidas por los *LINAC*, del inglés *LI*Near *AC*celerator, acelerador lineal, que producen haces de fotones o electrones de alta energía. Los haces emitidos por los *Linacs* presentan varias ventajas respecto a los rayos gamma del cobalto. Por un lado pueden ser mucho más intensos que los haces emitidos por el cobalto 60, acortando de esta manera el tiempo de tratamiento. Además, debido a su alta energía son más penetrantes y depositan una dosis mayor en profundidad. Por otro lado, la dosis suministrada es más precisa ya que los haces están mejor definidos.

Hasta la década de 1980, la planificación de la radioterapia se realizaba con radiografías simples y verificaciones en dos dimensiones. El radioterapeuta no tenía una idea certera de la localización exacta del tumor. A partir de 1980, con la radioterapia conformada en tres dimensiones, gracias a la ayuda del TAC (Tomografía Axial Computerizada) y a los sistemas informáticos de cálculo dosimétrico, se obtienen imágenes virtuales de los volúmenes a tratar, que permiten concentrar mejor la dosis.

La radioterapia por intensidad modulada (*IMRT: Intensity-Modulated Radiation Therapy*) es una forma avanzada de radioterapia 3D más precisa, en la que se modula o controla la intensidad del haz de radiación, obteniendo alta dosis de radiación en el tumor y minimizando la dosis en los tejidos sanos. Para ello utiliza modernos aceleradores lineales con colimador multiláminas y sofisticados sistemas informáticos de planificación dosimétrica y verificación de dosis.

Las líneas actuales dirigen los sistemas de radioterapia hacia el 4D, es decir, una radioterapia que tiene en cuenta los movimientos fisiológicos de los órganos como los pulmones durante la respiración.

2.2. Mecanismos de lesión por radiación ionizante.

Clásicamente se ha considerado al material genético de la célula, el ADN, como la diana de la radiación ionizante ya que los efectos de la radiación se derivan del daño que se provoca en el mismo [*Unesa*, 2009].

Para organismos complejos como el humano, hay dos tipos de efectos relacionados con la dosis según el tipo de células afectadas: somáticos y genéticos.

- **Efectos somáticos:** El efecto somático se manifiesta en el individuo que absorbe la dosis de radiación, pudiendo clasificarse en dos tipos: efectos de relativa certeza (efectos determinísticos) y los que ocurren al azar o estocásticos (efectos no determinísticos). A medio o largo plazo, estos efectos pueden dar origen al cáncer y a cambios fisiológicos y estructurales degenerativos.
- **Efectos genéticos:** Describen las alteraciones genotípicas hereditarias resultantes de mutaciones en los genes o cromosomas de células germinales. Cualquier mutación que sufran esas células y que no comprometan su viabilidad, puede ser transmitida de una generación a otra.

2.2.1. Efectos de la irradiación celular a nivel molecular.

La absorción de energía por radiación ionizante produce daño a nivel molecular por acción directa o indirecta. Por acción directa el daño ocurre como resultado de la ionización de los átomos de moléculas claves para el sistema biológico. Esto causa inactivación o alteración funcional de la molécula. La acción indirecta involucra la producción de radicales libres reactivos cuyo daño tóxico en moléculas claves resultará en un efecto biológico [Mayles *et al.*, 2007].

- Acción directa:** la ionización directa en átomos de moléculas ocurre como resultado de la absorción de energía por efecto fotoeléctrico e interacción *Compton*. La ionización se produce con todos los tipos de radiación pero el daño predominante es provocado por aquellas radiaciones con alta TLE (Transferencia Lineal de Energía). La absorción de energía suficiente para eliminar un electrón puede causar rupturas de uniones. También puede ocurrir la excitación de átomos en moléculas claves resultando en rupturas de uniones. En este caso, la energía puede ser transferida a un sitio de unión más débil de la molécula, causando la ruptura.
- Acción indirecta:** involucra la transferencia de energía a un átomo con el subsiguiente decaimiento a una especie de radical libre. Un radical libre es un átomo eléctricamente neutro con un electrón no ocupado en la posición orbital. El radical es electrofílico y altamente reactivo. Dado que la molécula predominante en los sistemas biológicos es el agua, ésta es usualmente el intermediario entre la formación de radicales y la propagación. La molécula de agua absorbe energía y se disocia en dos radicales con electrones no compartidos en la capa de valencia. Los radicales libres se recombinan rápidamente para neutralizarse electrónicamente y orbitalmente. Sin embargo, cuando se generan muchos, como en los elevados flujos de radiación, la neutralidad orbital puede ser lograda por dimerización (H_2) de los radicales de hidrógeno y la formación de peróxido de hidrógeno tóxico (H_2O_2). El radical también puede ser transferido a una molécula orgánica en la célula. La vida media de los radicales libres simples ($H\cdot$ ó $OH\cdot$) es muy corta, y aunque generalmente son altamente reactivos, no viven lo suficiente para migrar del sitio de formación al núcleo celular. Sin embargo, el oxígeno derivado de especies como el radical libre hidroperóxido ($HO_2\cdot$) no se recombina rápidamente en formas neutras y representa una forma más estable con una vida suficientemente larga para migrar hacia el núcleo, donde puede causar serio daño. La transferencia de un radical libre a una molécula biológica puede ser suficientemente dañina como para causar rupturas de uniones o inactivación de funciones claves. Además, el radical

libre orgánico *peroxi* puede transmitirse de molécula a molécula causando daño en cada encuentro, por lo tanto puede ocurrir un efecto acumulativo mayor que la simple ionización o ruptura de uniones.

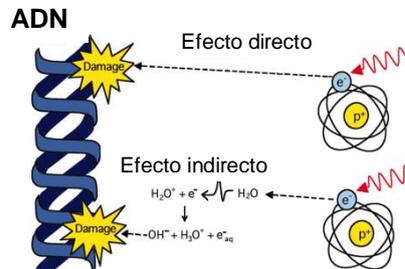


Figura 2.2. Daño a nivel molecular por acción directa o indirecta.

Todos los componentes de la célula se dañan de alguna de estas maneras: proteínas, enzimas, componentes de la membrana, etc. Sin embargo, tales moléculas están presentes en gran número en cada célula y el daño producido en alguno de ellos probablemente tiene poco impacto sobre la viabilidad de la celda; se regenerará rápidamente. Pero hay un componente celular que es casi único: el ADN.

El ADN es una molécula muy larga de doble hélice que consiste en una secuencia repetida de bases, y cada cromosoma tiene aproximadamente 200 millones de bases. Los grupos de bases forman los genes que contienen instrucciones para las proteínas y, por tanto, para todos los aspectos de la función celular. Generalmente, hay algunas duplicaciones de genes, pero aún así existe un grave riesgo de que el daño producido por la radiación pueda llevar a la pérdida (o modificación) de algunos genes y por lo tanto a una pérdida de funciones específicas (algunos de los cuales pueden ser esenciales para la supervivencia). Esta es la razón por la que el ADN es la parte más vulnerable de las células frente a los daños de la radiación [Ortega, 1996].

2.2.2. Modificación de los efectos por radiación.

Existen varios factores ambientales que pueden modificar en general el grado de daño debido a la radiación. Estos factores físicos incluyen tasa de dosis y fraccionamiento, calidad de la radiación y temperatura. Además, un número de sustancias químicas pueden modificar el efecto de la radiación.

- a) **Tasa de dosis y fraccionamiento:** en general, cuanto menor es la tasa de entrega de la dosis de radiación y mayor el tiempo transcurrido entre las exposiciones, más resistente se vuelve el sistema biológico. Se cree que pueden ocurrir reparaciones de las lesiones subletales antes que se adicionen nuevas lesiones, cuya acumulación es letal. Llevado a la estructura celular, los eventos de irradiación muy próximos entre sí, probablemente producirán daño letal en el ADN o en la estructura de la cromatina. En cambio, si los eventos están separados por un período suficientemente largo, ocurrirá la reparación natural y la célula sobrevivirá. En el ADN, una ruptura simple puede ser reparada, pero una ruptura de ambas cadenas es en general irreparable. Sin embargo, si las dos rupturas ocurren suficientemente separadas en el tiempo la reparación es posible. Además, si la ruptura ocurre en diferentes puntos de la molécula, el ADN no se romperá y la reparación también será posible.

- b) **Calidad de las radiaciones:** dado que las radiaciones con una alta Transferencia Lineal de Energía (TLE) depositan grandes cantidades de energía por unidad de distancia en su travesía a través de la materia, la posibilidad de múltiples lesiones en un corto período en las proximidades es muy alta. Por lo tanto, para la misma dosis total, las radiaciones con un alto TLE son más letales que aquellas con bajo TLE.

2.3. Acelerador lineal de electrones.

Los haces de rayos X de kilovoltaje son útiles para el tratamiento de las lesiones de la piel y los tumores superficiales, pero para tumores profundos, la dosis que puede ser impartida está limitada por la dosis que recibiría la piel. Los haces de megavoltaje no son sólo más penetrantes, sino que tienen la gran ventaja de que la dosis máxima se entrega por debajo de la superficie de la piel.

Los haces de energía superiores pueden ser producidos de diferentes formas. A partir de 1940 se empezaron a construir distintos aceleradores de electrones (betatrón, ciclotrón, microtrón, acelerador lineal). Los betatrones fueron ampliamente usados en Europa y pueden producir haces de electrones de muy alta energía (hasta 50 MeV). Sin embargo, son voluminosos, la corriente del haz es limitada, y han quedado obsoletos. El microtrón (de *Scanditronix*) es capaz de producir los haces de electrones de alta energía en las corrientes más altas, pero el alto coste de los equipos ha limitado las ventas fuera de Escandinavia. El Acelerador lineal es ahora el principal medio de generar haces de megavoltaje.

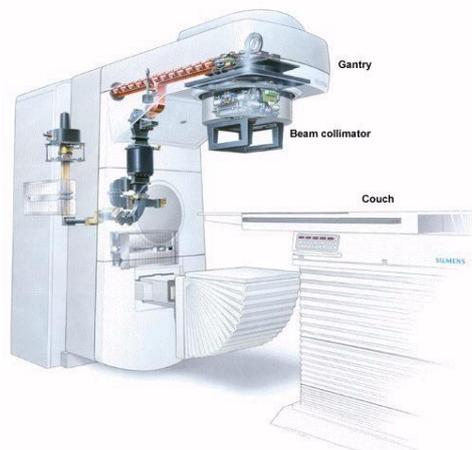


Figura 2.3. Acelerador lineal de electrones de uso médico (*Linac*).

En 1962 Varian introduce el primer acelerador lineal (*Linac*) de uso clínico isocéntrico y completamente rotatable. Hoy en día, los aceleradores lineales son capaces de generar haces de fotones y de electrones de varias energías, con lo cual pueden cubrir todas las necesidades de radioterapia externa. Hay que unir además una gran cantidad de accesorios, como colimadores asimétricos y multilaminas, dispositivos de imagen portal, cuñas dinámicas, aplicadores para radiocirugía, etc. Por todo esto son máquinas que requieren gran preparación y mucho tiempo, tanto para la puesta en marcha como para el programa de garantía de calidad y el mantenimiento [Mayles *et al.*, 2007].

En un *Linac* los electrones se generan en un cátodo incandescente, son acelerados hasta un cuarto de la velocidad de la luz en el cañón mediante la aplicación de un campo eléctrico pulsado. Entonces se introducen en la guía de ondas que forma la estructura aceleradora y en donde existe un campo electromagnético de alta frecuencia y alta potencia. Se crean pequeños paquetes y se aceleran hasta el 99 % de la velocidad de la luz. Estos electrones acelerados pueden utilizarse directamente o bien ser frenados haciéndolos chocar contra un blanco de material pesado para que cedan su energía cinética en forma de fotones de rayos X. Con este sistema pueden alcanzarse energías muy altas. En la utilización clínica son del orden de la decena de MeV: 100 veces mayor que los equipos de rayos X y 10 ó más veces mayor que los rayos γ del Co-60.

2.3.1. Descripción del acelerador lineal clínico.

La configuración más básica de un acelerador lineal es la de emplear la aceleración de electrones entre dos electrodos a raíz del gradiente eléctrico entre ellos. Los electrones son acelerados hasta energías cinéticas entre 4 y 25 MeV siguiendo trayectorias lineales rectas utilizando campos no conservativos de radiofrecuencias (RF) de microondas (rango de frecuencias de 106 MHz), dentro de una estructura especial al vacío denominada guía de ondas. Los electrones al incidir sobre el blanco u objetivo (*target*), el cual normalmente es de tungsteno, producen rayos X [Mayles *et al.*, 2007].

Estos rayos pasan por un primer colimador y luego pasan por un filtro cónico. Existen cámaras de colimadores variables que modifican la forma del haz, así como sistemas ópticos que determinan el tamaño del campo y la distancia entre el emisor y área a irradiar.

En el cabezal se incluyen los sistemas de colimación, estabilización y monitorización del haz.

Los colimadores que se encuentran a continuación del blanco determinan la forma y el tamaño del haz que incide sobre el paciente. Para poder aplicar una dosis uniformemente distribuida sobre el tumor, el equipo gira alrededor de un eje de rotación de tal manera que el paciente pueda ser tratado desde varias orientaciones.

La unidad de tratamiento y la estructura de aceleración de las partículas están contenidas en el *gantry* el cual puede rotar 360° alrededor de su eje de rotación. El área a irradiar debe estar localizada en el isocentro, un punto definido por la intersección ortogonal de los ejes de rotación de la unidad de tratamiento y del haz emitido.

Si bien el montaje básico se mantiene entre los diferentes constructores de *Linacs*, los diseños pueden variar según el fabricante. En particular, la longitud de la guía de onda depende de la energía cinética final de los electrones acelerados, y varía de unos 30 cm para 4 MeV a casi 150 cm para haces de 25 MeV. Algunos equipos proveen rayos X sólo de baja energía (de 4 a 6 MV), mientras otros ofrecen tanto rayos X como electrones con varias energías en el rango de megavoltaje.

Un equipamiento moderno típico de *Linac* de alta energía provee 2 energías de fotones (por ejemplo, el Hospital Clínic Universitari de València, equipo con el que se ha trabajado para la realización de esta tesis, provee 6 y 15 MeV) y varias energías de electrones, por ejemplo 6, 9, 12, 16 y 22 MeV.

La siguiente figura (Figura 2.4) muestra los componentes básicos de un acelerador lineal.

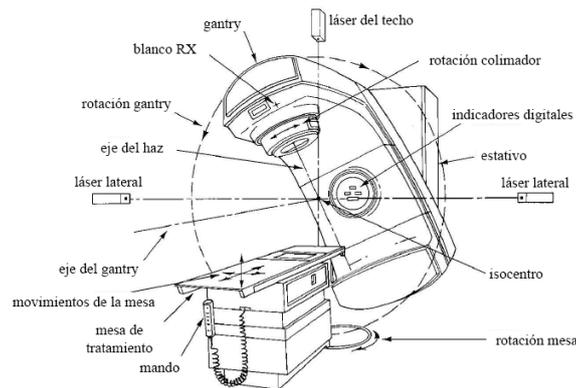


Figura 2.4. Representación de los componentes de un acelerador lineal (*Linac*).

Los principales componentes que determinan el haz generado en un *Linac* moderno se agrupan en 6 clases:

- Sistema de inyección.
- Sistema de generación de potencia para RF.
- Guía de onda para aceleración.
- Sistema auxiliar.
- Sistema de transporte del haz.
- Sistema de colimación y monitorización del haz.

El modulador genera pulsos de alto voltaje los cuales son enviados al generador de RF y al emisor de electrones. La longitud de los pulsos es del orden de los microsegundos.

Los electrones recorren, una y otra vez, (hacia adelante y hacia atrás) una trayectoria recta sometidos a una diferencia de potencial (relativamente baja). Los campos de alta potencia de RF utilizados para la aceleración de los electrones en la guía de ondas son producidos por medio del proceso de desaceleración de los electrones en potenciales retardados dentro de dispositivos especiales conocidos como *Magnetron* y *Klystron*. La estructura de aceleración esta acoplada al generador de RF por medio de un control de frecuencia automática (CFA), que sintoniza la onda dentro de un rango muy estrecho alrededor de la frecuencia de resonancia. De esta manera los electrones se aceleran a cerca del 90% de la velocidad de la luz.

La fuente de alto voltaje y el modulador de pulsos se encuentran normalmente en un armario dentro de la sala de tratamiento. El *Magnetron* (cuyo nombre proviene de unir magneto y electrón) es un oscilador que produce microondas de alta potencia (3 MW). El magnetrón presenta las desventajas de su menor potencia y duración pero a cambio es más económico y necesita un voltaje y un aislamiento menor.

El *Klystron* (cuyo nombre proviene el griego y significa oleaje de electrones) es un amplificador de potencia de alta frecuencia, es decir, recibe a la entrada ondas electromagnéticas de alta frecuencia (microondas) y baja potencia (400 W) y da a la salida microondas de alta potencia (7 MW). Los electrones producidos en el cañón son acelerados en la guía de ondas principal por las microondas producidas en el *Klystron*.

La guía y el cabezal están blindados con plomo para reducir la radiación de fuga. En la salida de los electrones del electroimán de curvatura se encuentra el blanco retráctil para la producción de rayos X.

El blanco de tungsteno se retrae, de manera que los electrones salen sin impedimento de la guía. El carrusel se coloca de forma que la lámina dispersora quede en el camino del haz.

Más adelante están la lámina dispersora y el filtro aplanador montados sobre un carrusel que permite situar una u otro según se tenga un haz de electrones o de fotones. A continuación se encuentra la cámara de ionización monitora que muestrea la salida permitiendo estabilizar el haz.

La cámara monitora muestrea a cada momento el haz y realimenta la salida para aumentar la estabilidad. Es decir, si la señal aumenta por encima de un valor dado, esta cámara lo detecta y hace que el acelerador disminuya la salida (disminuye la intensidad de electrones que circulan por la guía). De la misma forma, si la salida disminuye por debajo de otro valor determinado la cámara envía el mensaje de que se aumente la salida.

La cámara monitora controla la simetría y homogeneidad del haz tanto en la dirección radial como en la transversal del haz (considerando las señales independientemente). Si tanto la salida total como la simetría y homogeneidad no son las correctas durante un tiempo determinado el acelerador detiene su funcionamiento. Esta es otra característica que pone de manifiesto la superioridad de los aceleradores lineales, el aumento de la seguridad proporcionado por la gran cantidad de controles.

Por último se encuentran los colimadores y los dispositivos ópticos de distancia y simulación de campo. Los colimadores secundarios se colocan en una posición fija que depende de la energía y del aplicador elegidos. La guía de ondas para acelerar los electrones y el sistema de colimación del *Linac* son, seguramente, dos de los principales componentes que afectan y determinan las características físicas del haz producido, por ello merecen un tratamiento particular, más detallado.

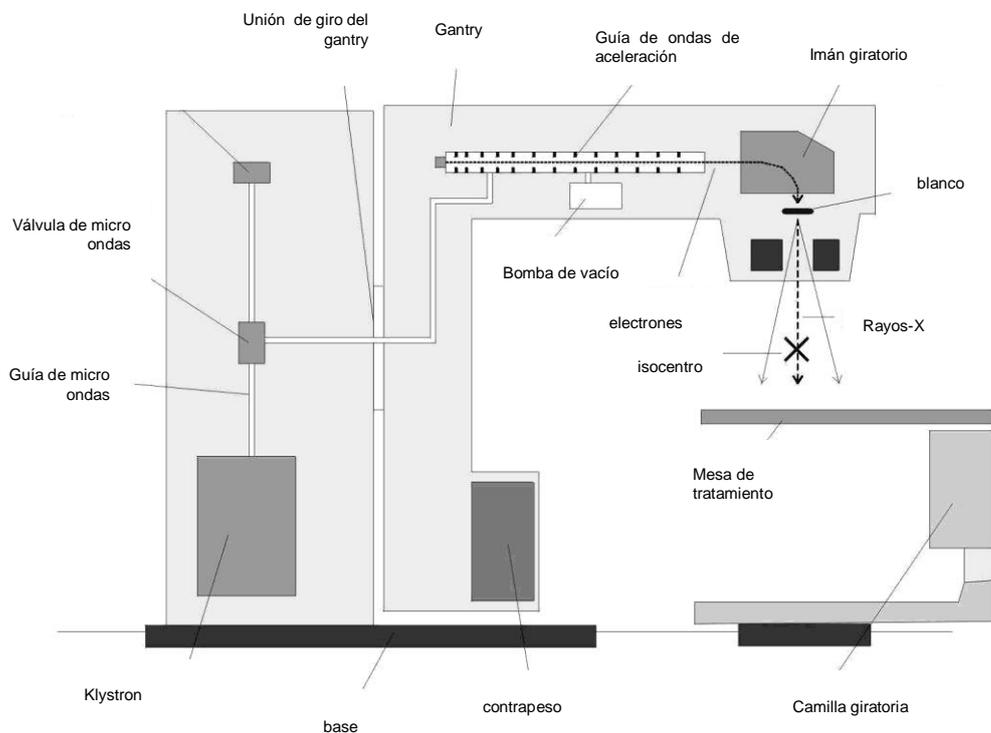


Figura 2.5. Esquema de los componentes de un acelerador lineal (*Linac*).

2.3.1.1. Guía de ondas.

Las guías de onda son estructuras metálicas en forma de cavidad, en las que se practica el vacío o se rellenan con gas, así que es necesario el funcionamiento continuo de bombas de extracción física e iónica. La cavidad puede ser de sección transversal circular o rectangular, según el fabricante. La principal función de la guía de ondas es la transmisión de las microondas.

La guía aceleradora está dividida en cavidades de resonancia. El campo eléctrico oscila (valor positivo → cero → valor negativo → cero → valor positivo...) en cada cavidad con la frecuencia de las microondas producidas por el *Klystron*. Los electrones son inyectados formando pequeños paquetes en fase, es decir, encuentran en cada cavidad el campo 'a favor', de forma que van siendo acelerados a lo largo de la guía.

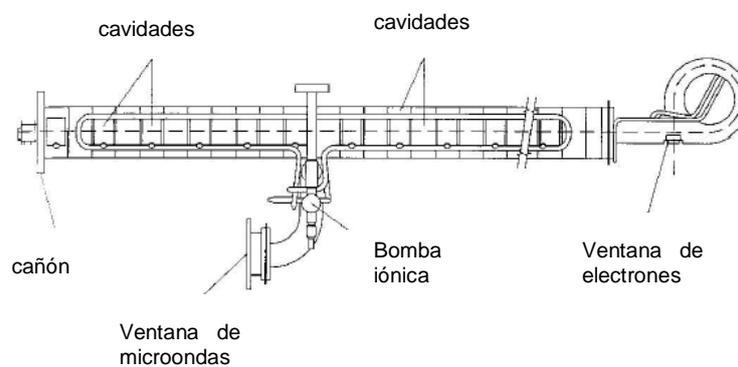


Figura 2.6. Guía de ondas.

Se utilizan generalmente, dos tipos diferentes de guías de ondas en los *Linacs* de uso clínico: guía de ondas para la transmisión de potencia de RF y guía de ondas de aceleración.

Las primeras se emplean para transmitir la potencia de RF desde la fuente de potencia a la guía de ondas de aceleración, donde los electrones son acelerados.

La aceleración de los electrones en la guía de ondas de aceleración se realiza por medio de transferencia de energía desde el campo de potencia de RF (producidos en el generador de RF e introducido en la guía de aceleración).

La versión más simple de una guía de ondas de aceleración se obtiene de una guía de onda cilíndrica uniforme incluyendo discos con agujeros circulares en el centro y posicionados equidistantemente a lo largo del tubo cilíndrico. La función de los discos es dividir la guía de ondas (tubo) en una serie de cavidades cilíndricas que constituyen la estructura principal (en términos de electromagnetismo clásico, cavidad resonante o cavidad de guía, según corresponda) para la guía de ondas de aceleración. La guía de ondas de aceleración se mantiene al vacío para facilitar la propagación de electrones en su interior. Las cavidades de la guía de ondas de aceleración sirven para acoplar y distribuir la potencia de microondas hacia las estructuras adyacentes; y para proveer un patrón oportuno de campo eléctrico para los electrones que son acelerados.

Para conseguir rayos X de alta energía (mayor que 6 MV) son necesarias guías de uno o dos metros de longitud, por lo que para construir una máquina isocéntrica es necesario girar el haz 90° (o 270°) antes de enviarlo a la ventana de salida. Esto hace que el cabezal aumente de tamaño, con lo que se aumenta la altura del isocentro desde el suelo.

2.3.1.2. Colimación de campos rectangulares.

El haz de radiación debe estar restringido de algún modo para garantizar que sólo la parte requerida del paciente es irradiado. Con el fin de satisfacer los requisitos de las tasas de dosis muy bajas a una gran distancia más allá del borde del campo de radiación, los aceleradores tienen un colimador principal circular cercano a la fuente. Esto limita el campo a una forma circular.

En el *Elekta Precise*, el tamaño del campo máximo es de 40 cm x 40 cm a una distancia de 100 cm a la fuente, pero el colimador principal limita el campo a un círculo máximo de 50 cm.

La IEC 601 (IEC 1998) establece el sistema de colimación y el blindaje del cabezal necesario para garantizar que:

- *La tasa de Kerma en Aire (AKR) a causa de la radiación de fuga en cualquier punto fuera del haz útil máximo, pero dentro de un área plana circular de radio 2 metros centrada y perpendicular al eje central del haz a la distancia normal de tratamiento [isocentro] no ha de exceder 0.2% de AKR en el eje central del haz abierto.*

2.3.1.3. Colimación multiláminas.

Los colimadores convencionales sólo son capaces de restringir la radiación a una forma rectangular. A fin de proporcionar más flexibilidad, se han introducido colimadores multiláminas (*MLC, Multileaf collimator*). En lugar de un solo bloque de metal, éstos tienen hasta 80 pares de hojas que se pueden mover de forma independiente, lo que permite producir cualquier forma de haz sujeto a la anchura de las láminas. Hay muchas variantes de colimador multiláminas; algunos están comercialmente disponibles, y otros son diseñados y construidos para aplicaciones específicas por grupos de investigación. El principio es el mismo en cada caso.

Los colimadores multiláminas modernos que se utilizan en radioterapia empezaron a aparecer en la década de 1980. Los primeros desarrollos tuvieron lugar en Japón. El primer desarrollo europeo tuvo lugar en Escandinavia, donde MLCs especializados fueron diseñados para encajar en el microtrón de *Scanditronix*. *Elekta* y *Varian* introdujeron MLCs disponibles comercialmente en 1990 en Europa y en los Estados Unidos.

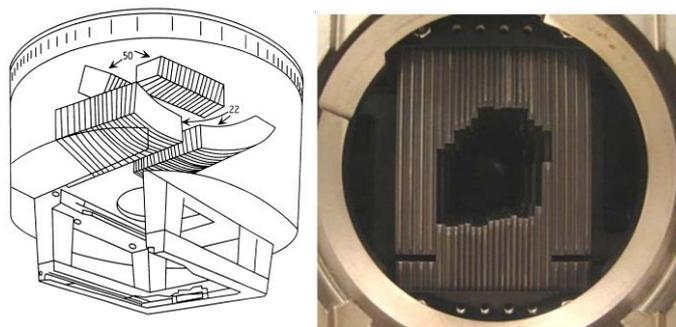


Figura 2.7. Colimador multiláminas (MLC).

2.3.1.4. Colimador de electrones.

Además de los colimadores primarios y secundarios, para el caso de haces de electrones se utilizan dispositivos denominados aplicadores o conos para dar la colimación definitiva del haz.

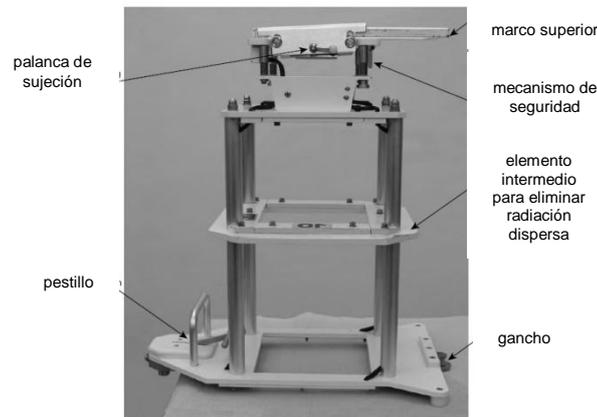


Figura 2.8. Colimador de electrones.

2.3.2. Aplicaciones médicas de los aceleradores lineales.

Los aceleradores lineales tienen una gran aplicación en el campo de la medicina, más específicamente en el campo de oncología radioterapéutica, haciendo que el cáncer se convierta en una enfermedad mejor controlada y tratada dando así una esperanza para la erradicación de tumores anteriormente inalcanzables, puesto que proporciona una mayor precisión, suministrando una mayor seguridad al paciente.

Este equipo es primordialmente útil gracias a los múltiples colimadores que se posicionan de tal forma que pueden ser usados en el tratamiento de tumores pequeños de morfología irregular, tanto benignos como malignos.

La radioterapia se indica sobre todo para los casos de tumores malignos de cabeza y cuello, cáncer de próstata, tumores ginecológicos, de partes blandas y tumores del sistema nervioso central. Es especialmente eficaz en el caso del cáncer de mama ya que evita en muchos casos que tenga que realizarse una mastectomía, o extirpación del pecho. Sucede lo mismo en el caso del cáncer de vejiga.

También se utiliza en aquellos casos en los que la enfermedad está ya en una fase demasiado avanzada. En estas ocasiones el objetivo no es curar el cáncer, ni siquiera reducirlo, sino ayudar a calmar el dolor, reducir la masa tumoral y evitar fracturas óseas. Es lo que se conoce como radioterapia paliativa.

Entre otras aplicaciones encontramos:

- **La radiocirugía** que consiste en la administración de una dosis elevada de radiación focalizada. La técnica es de alta precisión y está dirigida a pacientes con tumores cerebrales benignos, malformaciones arterio-venosas o con metástasis cerebral. Aunque esta aplicación implica el término de cirugía, cabe resaltar que no hay ninguna incisión en absoluto y se realiza en régimen ambulatorio, eliminando las complicaciones, la hospitalización y el tiempo de recuperación asociado con la cirugía craneal convencional.
- También es posible realizar **radiación extereotáxica**, que consiste en la administración de la misma cantidad de radiación (o superior) que la radiocirugía convencional, pero es aplicada en pequeñas dosis distribuidas en una serie de tratamientos diarios (dosis fraccionada). El fraccionamiento de la dosis favorece la reparación del tejido sano cercano a la lesión, especialmente de estructuras críticas tales como las vías ópticas o cerebrales.

- **La Radioterapia de Intensidad Modulada (IMRT)** es una modalidad avanzada de radioterapia de alta precisión donde la dosis de radiación está diseñada para conformarse a la forma tridimensional del tumor mediante la modulación de la intensidad del haz de radiación para enfocar una dosis más alta en el tumor, al tiempo que se reduce al mínimo la exposición a la radiación en los tejidos circundantes normales. Debido a que con IMRT la proporción de dosis al tejido normal respecto a la dosis al tumor es baja, es posible administrar dosis de irradiación más altas y eficaces al tumor con menos efectos secundarios que con las técnicas de radioterapia convencional.
- **Radioterapia intraoperatoria:** es la radioterapia para cáncer u otras enfermedades que se realiza durante una operación.

Para todas las anteriores aplicaciones se lleva a cabo una preparación donde se hace una simulación del tratamiento, un TAC que le permite al oncólogo especificar la forma tridimensional del tumor y los tejidos normales, gracias a un software especializado que dispone cada equipo.

Seguidamente el radiofísico calcula cuidadosamente la dosis de radiación necesaria para el tratamiento y se diseñan los haces que se usarán en el tratamiento elaborando y dirigiendo programas de control de calidad del equipo y ayudando a asegurar que los tratamientos complejos sean adaptados personalmente para cada paciente.

Posteriormente el paciente entra en una sala con paredes de plomo y hormigón que impide el escape de los rayos X de alta energía. El radioterapeuta coloca un molde corporal de poliuretano previamente hecho a la medida del paciente o una máscara hecha según sea el caso de cáncer a tratar, para evitar así algún movimiento del paciente durante el tratamiento. Cada tratamiento individual dura unos pocos minutos y el paciente puede abandonar el área de radioterapia después de 30 a 45 minutos en cada sesión. Durante la radioterapia no se siente nada, y los efectos secundarios en general tardan dos semanas o más en aparecer.

2.4. Sistema de planificación en radioterapia.

En radioterapia, la planificación del tratamiento es el proceso en el que un equipo formado por oncólogos y radiofísicos planifica la técnica de radioterapia apropiada para un paciente determinado, con un cáncer concreto. Normalmente, se utilizan imágenes médicas (tomografía computerizada, imágenes de resonancia magnética, y tomografía por emisión de positrones) para formar un paciente virtual sobre el cual diseñar el tratamiento. La simulación del tratamiento planifica la geometría, los aspectos radiológicos y los dosimétricos de la terapia utilizando la simulación del transporte de partículas. El proceso consiste en seleccionar el tipo de haz apropiado (electrones o fotones), energía y características de colimación del haz.



Figura 2.9. Acelerador lineal *Elekta Precise* en una sala de tratamiento de radioterapia.

Inicialmente se utilizó la ecuación de *Boltzmann* para el estudio del transporte de radiación en medios materiales, pero debido a las dificultades que surgen cuando se trata de problemas que involucran geometrías limitadas se comenzaron a utilizar metodologías numéricas. Con el aumento de la capacidad informática de cálculo, actualmente es posible realizar cálculos más realistas con el método Monte Carlo.

El proceso de tratamiento con radioterapia es complejo y consta de varios pasos, como se muestra en el esquema siguiente (Figura 2.10). El proceso comienza con el diagnóstico del paciente, seguido de la decisión de tratar con radiación. Esto conduce a una planificación del tratamiento que incluye un procedimiento de colocación e inmovilización de paciente. Esta parte es muy importante, ya que todo el tratamiento deberá realizarse con el paciente en la posición de tratamiento adecuada, y de manera que la configuración del paciente pueda ser reproducida fácilmente de un día para otro. Si en esta etapa se producen errores o grandes incertidumbres, éstas se trasladarán a todo el proceso de tratamiento.

La región sombreada del esquema (Figura 2.10) pone de relieve las etapas del proceso de radioterapia que se refieren específicamente a la planificación del tratamiento. Estas incluyen la utilización de la información anatómica del paciente, que de una manera simple puede ser un contorno externo fijado mediante ayuda eléctrica o mecánica, o de manera más sofisticada utilizando datos generados a partir de algún procedimiento de imágenes, como CT (Tomografía Computerizada) o MRI (Imagen por Resonancia Magnética).

A veces, la información de los procedimientos de medicina nuclear tales como SPECT (Tomografía Computerizada por Emisión de un Fotón Único) o PET (Tomografía por Emisión de Positrones) también se utiliza para determinar los volúmenes de destino. El uso de la ecografía está ganando importancia, especialmente para la braquiterapia de próstata.

Como parte del proceso de creación de imágenes, se colocan en el paciente varias marcas de referencia. Esto puede hacerse antes de tomar las imágenes, utilizando marcadores radio-opacos que aparecen en las imágenes y sirven de referencia en las posiciones durante el proceso de planificación.

De forma alternativa, esto también puede hacerse después de que al paciente se le hayan tomado las imágenes, normalmente usando el sistema de láser que se incluye en algunos simuladores de CT,

para colocar las marcas de referencia en la superficie de la piel. Estas marcas se utilizan normalmente para definir un isocentro predeterminado en el paciente.

Una vez que se han obtenido los datos de contornos externos o las imágenes adecuadas, el oncólogo describirá los volúmenes y los órganos en situación de riesgo. En los tejidos que no presentan heterogeneidades, se puede utilizar directamente los datos de contorno de cualquier fuente de imágenes para el cálculo de la dosis, asumiendo que los contornos derivados no contienen distorsiones y que la densidad del tejido es igual a la del agua.

Con esta información, se determinará la mejor disposición del haz para cubrir el volumen a irradiar adecuadamente, al tiempo que se minimiza la dosis (Unidades de Monitor, UM) de los tejidos sanos. Esto incluirá una selección de direcciones del haz y una elección de colimador (bloques divergentes, mordazas asimétricas y MLCs). Una radiografía reconstruida digitalmente (RRD) puede generarse para permitir comprobaciones con imágenes portales (*Electronic Portal Imaging Device*, EPID) obtenidas durante el tratamiento. Con esto se realiza un cálculo de la dosis.

La distribución de dosis se evalúa a continuación, mediante uno o varios posibles procedimientos; por ejemplo, un simple examen de la distribución confirmará si el volumen a irradiar está cubierto adecuadamente y si se limitan a dosis aceptables los tejidos normales.

Por último, algunos Sistemas de Planificación de Tratamiento (TPS) permiten el uso de modelos radiobiológicos para estimar las probabilidades de control tumoral o las probabilidades de afectación del tejido normal para dar una estimación de la calidad del plan. Tales cálculos radiobiológicos están todavía empezando y deben utilizarse con precaución, ya que su precisión es cuestionable e incluso la evaluación de las tendencias dependen del modelo en particular que se utiliza. Dependiendo de los equipos utilizados, un plan de tratamiento puede ser confirmado por el uso de simulaciones o en el equipo de radioterapia mediante el uso de una imagen de portal (ya sea electrónico o película).

Como parte del proceso preparatorio de tratamiento, deben diseñarse los dispositivos auxiliares. Algunos ejemplos de estos dispositivos son moldes, sistemas de inmovilización termoplásticos, compensadores de contornos de superficies o en general de variaciones de la dosis y bloques para blindaje u otros dispositivos para ayuda en el tratamiento.

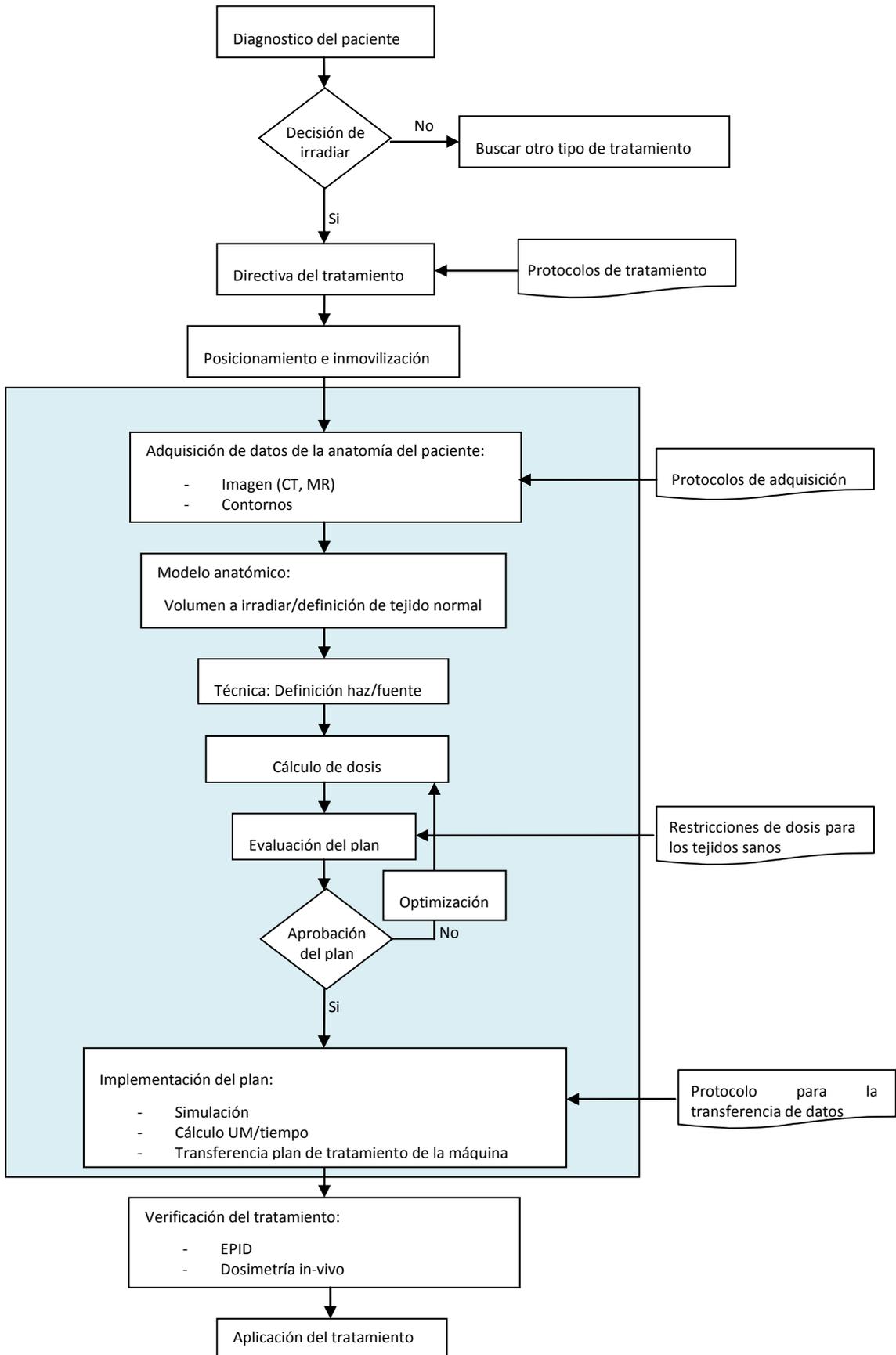


Figura 2.10. Pasos en el proceso de planificación en tratamientos de radioterapia.

2.5. Normativa.

El campo de la Radioterapia Oncológica se encuentra en constante desarrollo por la introducción de nuevas tecnologías, metodologías de tratamiento y procedimientos de trabajo, lo cual lo convierten en un campo de especial interés para la investigación y el desarrollo. Paralelamente a su desarrollo, durante los últimos años se ha hecho evidente la necesidad de llevar a cabo acciones sistemáticas para garantizar la calidad de los tratamientos de radioterapia, y esta necesidad se justifica en el requerimiento de proporcionar a los pacientes el mejor tratamiento posible.

La Organización Mundial de la Salud (OMS) ha definido la Garantía de Calidad en Radioterapia como:

“Todas las acciones que garantizan la consistencia entre la prescripción clínica y su administración al paciente, con respecto a la dosis en el volumen blanco, la dosis mínima en el tejido sano, la exposición mínima de personal, y las verificaciones en el paciente para la determinación del resultado del tratamiento” [OMS, Quality Assurance in Radiotherapy, 1988].

Por otro lado, la Organización Internacional de Estandarización (OIE) ha definido Garantía de Calidad como *“Todas las acciones planificadas y sistemáticas necesarias para garantizar de forma inequívoca que una estructura, sistema o componente se comporta satisfactoriamente” (ISO-6215-1980).*

La OMS ha justificado la necesidad de Garantía de Calidad en Radioterapia en base a los siguientes argumentos:

- La Garantía de Calidad minimiza los errores en la planificación de tratamientos y administración de la dosis al paciente, y por tanto mejora los resultados de la radioterapia, aumentando la tasa de remisiones y disminuyendo la tasa de complicaciones y recidivas.
- La Garantía de Calidad permite la intercomparación veraz de resultados entre distintos centros de radioterapia, tanto a nivel nacional como internacional, garantizando una dosimetría y administración del tratamiento más uniformes y exactas.
- Las características superiores de los equipos modernos de radioterapia no pueden aprovecharse completamente a menos que se alcance un elevado nivel de exactitud y consistencia.

A los argumentos de la OMS habría que añadir uno cuya importancia se ha visto aumentada recientemente: un programa de Garantía de Calidad es el método más sencillo y eficaz de reducir accidentes en radioterapia.

Existen numerosas publicaciones que con mayor o menor profundidad discuten diferentes aspectos de la Garantía de Calidad en radioterapia, y una de las pioneras fue la publicación de la OMS citada arriba. Le siguieron muchas otras recomendaciones publicadas por distintas organizaciones y sociedades nacionales e internacionales. La Asociación Americana de Físicos en Medicina (AAPM) organizó un grupo compuesto por físicos médicos y oncólogos radioterapeutas para desarrollar un “Programa General de Garantía de Calidad en radioterapia” que actualizara y agrupara las recomendaciones más importantes de las distintas publicaciones. Este programa general se publicó como el informe AAPM TG-40 [AAPM, 1994], actualizado recientemente en el informe 142, [AAPM, 2009] y constituye la contribución más importante en el área de Garantía de Calidad en radioterapia en los últimos años. El informe TG-40 se ocupa principalmente de los aspectos físicos de la Garantía de Calidad en radioterapia y discute con menor detalle temas que son esencialmente médicos (por ejemplo, la decisión de tratamiento, prescripción de dosis, delineamiento de volúmenes blanco y órganos críticos, etc.), pero presta especial atención a los temas en los que intervienen conjuntamente aspectos físicos y médicos.

Este informe junto con el emitido por el IAEA en 2004 y otros emitidos por otras comisiones internacionales europeas (ESTRO 2004), agrupan los procedimientos que deben seguirse para realizar el control calidad de los cálculos de dosis de los sistemas de planificación en radioterapia. Estos informes proponen series de pruebas que van del más simple (cálculo de rendimientos en profundidad para distintos tamaños de campos de irradiación...) a más sofisticados (cálculo de dosis para campos de formas complejas, en maniquís heterogéneos, en presencia del filtro de cuña...).

A nivel europeo, el trabajo de la Comisión Europea en el campo de la protección radiológica se rige por el Tratado del Euratom y las Directivas del Consejo que de él se derivan. La más importante es la Directiva relativa a normas básicas de protección sanitaria de la población y los trabajadores expuestos [80/836/Euratom], revisada en 1996 [96/29/Euratom].

En 1997, el Consejo revisó otra Directiva, complementaria de la anterior, sobre protección de las personas sometidas a exposiciones médicas [97/43/Euratom].

Ambas directivas exigen que los Estados miembros establezcan criterios de aceptabilidad de las instalaciones radiológicas (incluidas las de radioterapia) y de las instalaciones de medicina nuclear. Como estado miembro, a nivel nacional, la protección contra las radiaciones ionizantes está reglamentada mediante normas específicas basadas en estas directrices internacionales a las que España se ha adherido:

- **Ley 25/1964**, de 29 de abril, sobre energía nuclear. Jefatura del Estado. Rango: Ley. Publicado en: BOE número 107 de 4/5/1964.
- **Ley 15/1980**, de 22 de abril, de creación del Consejo de Seguridad Nuclear.
- **Ley 41/2002**, de 14 de noviembre, básica reguladora de la autonomía del paciente y de derechos y obligaciones en materia de información y documentación clínica.
- **Real Decreto 1132/1990**, de 14 de septiembre, por el que se establecen medidas fundamentales de protección radiológica de las personas sometidas a exámenes y tratamientos médicos.
- **Real Decreto 413/1997**, de 21 de marzo, sobre protección operacional de los trabajadores externos con riesgo de exposición a radiaciones ionizantes por intervención en zona controlada.
- **Real Decreto 1566/1998**, de 17 de julio, por el que se establecen los criterios de calidad en radioterapia.
- **Real Decreto 1836/1999**, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento sobre instalaciones nucleares y radiactivas.
- **Real Decreto 783/2001**, de 6 de julio, por el que se aprueba el Reglamento sobre protección sanitaria contra radiaciones ionizantes.
- **Real Decreto 815/2001**, de 13 de julio, sobre justificación del uso de las radiaciones ionizantes para la protección radiológica de las personas con ocasión de exposiciones médicas.

La competencia máxima de vigilancia y control de todo tipo de instalaciones radiactivas la ostenta el Consejo de Seguridad Nuclear (CSN), que es un organismo independiente del Gobierno, si bien algunas funciones son desempeñadas por los ministerios competentes en razón de la actividad (Industria, Sanidad, Trabajo, etc.), o por organismos propios de las Comunidades Autónomas a los que el CSN les ha concedido una Encomienda.

Muchas han sido las publicaciones relacionadas con la garantía de calidad en los tratamientos de radioterapia, entre las más importantes destacan:

- SEFM: Procedimientos recomendados para la dosimetría de fotones y electrones de energías comprendidas entre 1 MeV y 50 MeV en radioterapia de haces externos, SEFM 84-1 y suplemento SEFM 87-1(1994).
- IAEA TRS-398: Determinación de la dosis absorbida en radioterapia con haces externos: Un Código de Práctica Internacional para la dosimetría basada en patrones de dosis absorbida en agua (2004).
- ICRP Publicación 44: *Protection of the patient in Radiation Therapy* (1985).
- ICRP Publicación 75: *General Principles for the Radiation Protection of Workers* (1997).
- ICRP Publicación 86: *Prevention of Accidents to Patients Undergoing Radiation Therapy* (2001).
- ICRP Publicación 60: Instalaciones de aceleradores electrónicos lineales para uso médico (1990).
- AAPM informe nº 56: *Medical Accelerator Safety Considerations*. Med. Phys. 20-4 (1993).
- IAEA-TECDOC-1040: *Design and Implementation of a radiotherapy programme: clinical, medical physics, radiation protection and safety aspects* (1998).

Además, multitud de artículos han sido publicadas en prestigiosas revistas científicas como:

- La revista *Physics in Medicine and Biology* publicada por International Organization for Medical Physics.
- La revista *Medical Physics* publicada por la Asociación Americana de física médica
- La revista *International Journal of Radiation Oncology, Biology and Physics*.
- La revista *Física Médica* de la Sociedad Española de Física Médica.
- La revista *European Journal of Radiology*.

Capítulo 3

El método de Monte Carlo en el transporte de la radiación

3.1. Introducción.

En general, para modelar las interacciones de la radiación con la materia con objeto de obtener la distribución de dosis absorbida existen dos estrategias: una de ellas es básicamente determinística y la otra se basa en el método de Monte Carlo.

En el transporte de radiación intervienen las siguientes variables: posición de la partícula, ángulos de incidencia, energía y tiempo. Como la posición de la partícula es un vector de tres dimensiones y los ángulos de incidencia son dos, en total son 7 dimensiones que se deben tener en cuenta.

El enfoque determinístico construye el modelo mediante un sistema acoplado de ecuaciones lineales de *Bolzmann*, que describen el comportamiento del transporte de fotones, electrones, positrones, etc. en un medio determinado. Esta técnica funciona bien en medios homogéneos a nivel macroscópico pero presenta ciertos inconvenientes en las interfaces entre medios diferentes.

La simulación de Monte Carlo, por otro lado, es una técnica cuantitativa que utiliza la estadística y la computación para imitar, mediante modelos matemáticos, el comportamiento aleatorio de sistemas reales; así los procesos físicos son simulados teóricamente sin necesidad de resolver completamente las ecuaciones del sistema.

En los últimos años, los métodos de Monte Carlo han sido explorados como una alternativa a los métodos determinísticos, si bien son más precisos, tienen la limitante del tiempo de ejecución. Los algoritmos que utilizan el método de Monte Carlo tienen la ventaja de poder tratar a nivel microscópico medios distribuidos de forma compleja.

En general cuando la complejidad del problema crece, por ejemplo cuando aumenta el número de variables involucradas, los métodos de Monte Carlo logran mejores resultados en cuanto al tiempo de cálculo que los métodos determinísticos [Bielajew, 2001].

En términos de complejidad computacional ocurre que el orden de los métodos determinísticos es superior al del método de Monte Carlo. En la figura siguiente (Figura 3.1) se puede observar el comportamiento de los métodos determinísticos versus Monte Carlo.

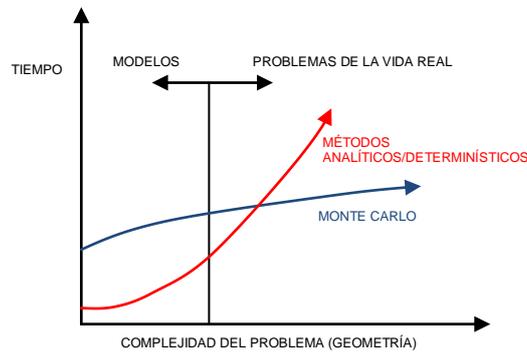


Figura 3.1. Métodos determinísticos vs. Monte Carlo.

El término Monte Carlo se utiliza para hacer referencia a un método universal que utiliza información estadística con el objeto de obtener una solución a un determinado problema utilizando números aleatorios.

En lo referente al transporte de radiación, la historia de una partícula puede ser vista como una cadena de hechos aleatorios donde la partícula modifica su posición, dirección, energía, deposita energía en el medio y produce partículas secundarias.

Las ecuaciones que modelan el camino libre de las partículas y las que determinan ángulos y energías pueden ser manipuladas para obtener sus funciones de distribución acumuladas y por lo tanto utilizar números aleatorios para obtener estos datos.

Es imprescindible modelar una gran cantidad de historias para lograr un resultado coherente con la realidad de un procedimiento de irradiación.

Dependiendo de la energía de las partículas iniciales y del tipo de radiación empleada, se producirán gran cantidad de historias, ya sea de partículas iniciales o secundarias generadas durante el proceso. Esto lleva a que debamos realizar gran cantidad de cálculos para cada interacción y además se utilizarán grandes cantidades de números aleatorios para modelar estas interacciones.

En el método de Monte Carlo, las trayectorias de las partículas individuales se simulan mediante números aleatorios para muestrear los procesos físicos implicados. Cada partícula inicial y todos sus productos secundarios son usualmente referidos como una historia. Cuando un haz atraviesa un medio, por ejemplo, una cuba de agua, los fotones experimentan relativamente pocas interacciones ya que el camino libre medio (en agua) de los fotones de alta energía es del orden de decímetros. El punto de la distancia a la interacción y las propiedades de la interacción, por tanto, se pueden simular para fotones individuales basándose en datos de corte transversal total y diferenciado.

La simulación de electrones es una tarea más compleja debido a la gran cantidad de colisiones que se experimentan durante el proceso de ralentización. Un electrón y sus partículas secundarias pueden sufrir cientos de miles de colisiones elásticas e inelásticas hasta que estén localmente absorbidas. Una simulación de cada evento, como para los fotones, sería extremadamente lenta. Esto condujo al desarrollo de la técnica de las historias condensadas [Berger, 1963]. En esta técnica, un gran número de colisiones se condensa en un solo electrón, paso donde se muestrean el efecto acumulativo de la pérdida de energía y los cambios en la dirección y posición de varias distribuciones de dispersión. La técnica de las historias condensadas es factible, debido al hecho de que la mayoría de las interacciones tienen como resultado sólo cambios menores en la energía y la dirección. La energía de las cantidades de interés, por ejemplo, la energía depositada, la dosis absorbida o la fluencia, se dan como la cantidad media sobre un gran número de historias simuladas, normalmente 10^9 .

3.2. La historia del método Monte Carlo.

El método Monte Carlo debe su nombre a la ciudad de Montecarlo en Mónaco donde se juega a la ruleta rusa, el juego de azar que genera números aleatorios. Este método surge formalmente en 1944, sin embargo, ya existían prototipos y procesos anteriores que se basaban en los mismos principios.

La utilización del método de Monte Carlo para fines de investigación comenzó con el desarrollo de la bomba atómica en la Segunda Guerra Mundial.

Durante el proyecto Manhattan, los científicos *Von Neumann* y *Ulam* perfeccionaron la técnica y la aplicaron a problemas de cálculo de difusión de neutrones en un material. Ambos llevaron a la edad moderna el método Monte Carlo y fueron pioneros en el desarrollo de técnicas de Monte Carlo y sus realizaciones en equipos digitales. La primera aplicación del método de Monte Carlo a problemas de transporte de la radiación parece ser un estudio llevado a cabo por *Spencer* [*Spencer*, 1954] sobre los efectos de la polarización múltiple, un problema que sería examinado más tarde con la teoría de la ecuación de *Boltzmann*. En 1948, *Fermi*, *Metropolis* y *Ulam* calcularon los autovalores de la ecuación de *Schrödinger* recurriendo a Monte Carlo. Hoy en día, el método Monte Carlo se utiliza en el desarrollo de reactores nucleares, cromodinámica cuántica, radioterapia, comportamiento de radiación en la atmósfera terrestre, evolución estelar, cálculos y predicciones económicas, búsqueda de petróleo, entre otros. El principal programador de MCNP fue el Dr. *Thomas N. K. Godfrey* durante los años 1975-1989; sin embargo, hasta la fecha el código incorpora el trabajo de casi 500 personas.

3.3. La filosofía del método de Monte Carlo.

Si se conocen las leyes físicas con suficiente precisión y se tiene acceso a los recursos informáticos necesarios, puede calcularse la respuesta a cualquier pregunta física determinada. Afortunadamente, las leyes físicas necesarias para la mayoría de las aplicaciones en radioterapia y dosimetría son bien conocidas. Además, los recursos necesarios para la mayoría de estas aplicaciones son modestos, y pueden ser ejecutados con suficiente precisión en *clusters* de ordenadores asequibles. Esta confluencia de la teoría y la capacidad computacional pone al método de Monte Carlo en la caja de herramientas estándar de los radiofísicos, especialmente si están involucrados en investigación.

La utilización del método de Monte Carlo en aplicaciones de transporte de radiación en radioterapia y dosimetría, proporciona una solución numérica para la ecuación de transporte de *Boltzmann* [*Kase y Nelson*, 1978], [*Duderstadt y Martin*, 1979] que emplea directamente las leyes fundamentales de la física microscópica de las interacciones de electrones y fotones. La simulación Monte Carlo reproduce fielmente las trayectorias de cada partícula individual, en un sentido estadístico, con el conocimiento de las leyes de la física: las secciones eficaces de dispersión y absorción, ángulos de dispersión, energías, etc.

La simulación de Monte Carlo es una técnica que combina conceptos estadísticos (muestreo aleatorio) con la generación de números pseudo-aleatorios y la automatización de los cálculos. Es, en general, un procedimiento matemático que nos permite simular cualquier sistema físico, o de cualquier otra rama de la ciencia, que tenga unas leyes que puedan ser traducidas a un lenguaje matemático. Se aplica a procesos de naturaleza estadística y también en aquellos casos en los que se puede inventar un modelo probabilístico artificial, exigiéndose la condición de que los puntos estén uniformemente distribuidos.

En otras palabras, la simulación de Monte Carlo está presente en todos aquellos ámbitos en los que el comportamiento aleatorio o estocástico desempeña un papel fundamental y también en aquellos que son difícilmente abordables por métodos numéricos determinísticos.

El siguiente diagrama de bloques (Figura 3.2), sintetiza de forma gráfica la manera de operar de este método. Tal y como se observa, como entradas del problema se tendría una fuente de números

aleatorios de gran calidad y las leyes de distribución de probabilidades relativas al problema abordado. Como salida, el resultado de un muestreo aleatorio de la distribución de probabilidades de la magnitud estudiada.

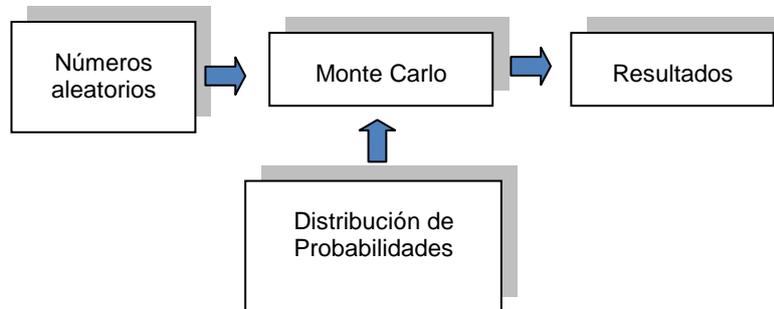


Figura 3.2. Ingredientes básicos en la resolución de problemas mediante el método de Monte Carlo.

Representa una tentativa de modelar la naturaleza con la simulación directa del sistema estudiado. En este sentido el método de Monte Carlo es una herramienta que nos sirve para obtener una solución de un sistema macroscópico con la simulación de sus interacciones microscópicas.

La simulación de Monte Carlo es una técnica cuantitativa que hace uso de la estadística y de los ordenadores para imitar, mediante modelos matemáticos, el comportamiento aleatorio de sistemas reales. En esencia, el método aplicado al transporte de partículas, consiste en la generación numérica de trayectorias de partículas mediante un muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad determinadas a partir de las secciones eficaces de interacción. Una vez fijadas las características del modelo que queremos estudiar, la simulación detallada del comportamiento de un gran número de partículas proporciona esencialmente la misma información que un modelo real y otra suplementaria que experimentalmente sería, o bien imposible de realizar, o bien a un alto coste, tanto material como temporal. Obviamente, nuestro análisis será tanto más preciso cuanto mayor sea el número de procesos (número de historias) simulados.

Todos los procesos que involucran el transporte de partículas tienen naturaleza estocástica, es decir, no se puede prever qué tipo de interacción se va a producir en cada momento y lugar sino que solamente se puede asignar una probabilidad a cada uno de los posibles sucesos. Sin embargo, las distribuciones de probabilidad que gobiernan los procesos que queremos estudiar son bien conocidas. El método de Monte Carlo hace uso de las distribuciones de probabilidad de las interacciones individuales en los materiales, para simular la trayectoria de las partículas. Todos los datos físicos que van a determinar este transporte estarán implementados en el código, de modo que mediante secuencias de números aleatorios se puede simular lo que realmente ocurre en la naturaleza. Cuando una partícula con carga, un fotón o un neutrón se hacen incidir sobre la materia se producen una serie de interacciones con los átomos y núcleos que la forman. Todos estos fenómenos de absorción, dispersión y producción de partículas secundarias siguen un proceso aleatorio.

El desarrollo y aplicación del método de Monte Carlo al transporte de la radiación ionizante en la materia se debió a tres razones fundamentalmente.

En primer lugar el desarrollo de la teoría cuántica permitió conocer exhaustivamente las distintas secciones eficaces de interacción de las partículas en los diversos materiales.

En segundo lugar el problema de la dispersión de la radiación no es fácilmente tratable si no se usan métodos estadísticos, debido al gran número de interacciones que se producen.

Por último, el uso de ordenadores cada vez más rápidos y potentes ha supuesto un gran avance en este campo.

Los números aleatorios usados se obtienen de una distribución de probabilidad que describe el comportamiento de la partícula. Al realizar un gran número de historias al azar, aumentará la precisión del valor promedio o de otras cantidades de interés. En contraposición con los métodos analíticos, las simulaciones de Monte Carlo pueden usar secciones eficaces reales, modelos reales de haces, y modelos con geometrías complejas. El precio que se debe pagar al aumentar la complejidad es el aumento de los tiempos de cálculo.

La emisión de radiación atómica y su interacción con la materia es un ejemplo de un proceso estocástico natural puesto que cada evento es, en cierto modo, impredecible. Una partícula subatómica puede interactuar de distintas formas con la materia en función de parámetros variables como su energía, su naturaleza y el tipo de material con que se encuentre. Cada clase de interacción tendrá asociada una probabilidad y al mismo tiempo producirá unos efectos sobre la partícula (cambio de energía y de dirección, absorción, etc.) y podrán generarse otras partículas en la reacción. En resumen, dada una partícula determinada, sus formas de interacción pueden ser múltiples y los resultados variados. Si cada posibilidad tiene asociada una probabilidad, empleando un número aleatorio que podemos equiparar al resultado de una tirada en la ruleta de un casino, y estableciendo una correspondencia entre el conjunto de números y las reacciones posibles, en virtud de ese resultado podemos suponer que la interacción que se producirá es una concreta. Así, cada partícula será seguida hasta su absorción o escape del volumen de interés, recurriendo a tantos números aleatorios como sean necesarios y siguiéndose de forma análoga cada una de las partículas secundarias producidas en las distintas interacciones que han intervenido en el curso de la historia. Es obvio que el seguimiento de la historia de una partícula y, por ejemplo, el cálculo de la energía depositada en la región estudiada tras las distintas reacciones producidas por la partícula y las secundarias, no nos va a dar una idea de cuál es la energía impartida a dicho volumen en la realidad; pero si dicha operación se repite para una infinidad de partículas, cada una de ellas con su historia y trayectoria particular, el promedio de los resultados será un buen simulador de la realidad, tanto mejor cuanto más se cuide la estadística. He aquí una exposición intuitiva de la aplicación del método de Monte Carlo a la medida de la interacción de las radiaciones con la materia.

3.4. Generación de números pseudo-aleatorios.

La base de las simulaciones es la viabilidad de poder obtener largas secuencias de números aleatorios tales que la aparición de cada número en la secuencia sea impredecible y que la secuencia de números supere tests estadísticos para detectar desviaciones de la aleatoriedad.

Habitualmente las secuencias de números se obtienen de algún algoritmo y se denominan números pseudo-aleatorios, reflejando así el origen determinístico [Lehmer, 1951]. Por ejemplo, el algoritmo responsable de generar números aleatorios en el código MCNP [LA-UR 02-3782] es de la forma:

$$S_{k+1} = g \cdot S_k + c \cdot |2^M| \quad (3.1)$$

$$r_{k+1} = \frac{S_{k+1}}{2^M} \quad (3.2)$$

donde S_k , g , y c son enteros expresados en M bits como máximo, y r_{k+1} es un número variable.

El valor inicial de S_k , S_0 , es la semilla inicial del generador.

Los valores tradicionales utilizados por el MCNP son $g = 519$, $c = 0$, $S_0 = 519$, y $M = 48$.

Una aplicación repetida de la ecuación (3.1) permite expresar el valor k -ésimo de la semilla en términos del valor de la semilla inicial:

$$S_k = g^k \cdot S_0 + c \cdot \frac{g^k - 1}{g - 1} \left| 2^M \right| \quad (3.3)$$

Estos algoritmos han de generar números de una manera realmente estocástica si se quieren simular correctamente los sucesos de interacción que sufren las partículas en la materia [Bielajew, 1993]. Esto hace que los generadores hayan de cumplir una serie de características:

- a) Buena distribución; se entiende que los números obtenidos estén uniformemente distribuidos en el intervalo en el que se obtienen (0, 1). Si tomamos un subintervalo cualquiera, la fracción de números aleatorios que aparece respecto del total tiene que ser la misma para todo subintervalo de la misma amplitud.
- b) Al ser generados mediante un algoritmo, siempre tienen un periodo más o menos largo. En el caso de simulaciones en que se usa una gran cantidad de números aleatorios sería, pues, importante que estos no se repitieran para que no hubiera correlaciones.
- c) Por otro lado también nos interesa que se pueda reproducir la sucesión de números usados. Si se repite la simulación en las mismas condiciones el resultado ha de ser el mismo.

3.5. Variables aleatorias discretas.

Una variable aleatoria ξ se dice que es discreta si puede asumir un conjunto de variables discretas $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Una variable aleatoria discreta se define, por lo tanto, mediante una tabla [Sobol, 1980]:

$$\xi \sim \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \dots & x_n \\ p_1 & p_2 \dots & p_n \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

donde x_1, x_2, \dots, x_n son los valores posibles de ξ , y p_1, p_2, \dots, p_n son sus correspondientes probabilidades.

Para ser precisos, la probabilidad de que la variable aleatoria ξ sea igual a x_i (es decir, $P(\xi) = x_i$) equivale a:

$$P(\xi = x_i) = p_i \quad (3.5)$$

La tabla (ecuación 3.4) se denomina la tabla de distribución de la variable ξ . Los valores x_1, x_2, \dots, x_n pueden ser arbitrarios, sin embargo, las probabilidades p_1, p_2, \dots, p_n deben satisfacer dos condiciones:

1. Todos las p_i son positivas: $p_i > 0$
2. La suma de todas las p_i es igual a 1: $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$

La última condición requiere que en cada muestreo, ξ debe asumir necesariamente uno de los valores de la lista. El número:

$$M\xi = \sum_{i=1}^n x_i \quad (3.6)$$

se denomina la media aritmética, o el valor esperado de la variable aleatoria ξ .

Para aclarar el significado de este valor, se puede reescribir de la siguiente forma:

$$M\xi = \frac{\sum_{i=1}^n x_i p_i}{\sum_{i=1}^n p_i} \quad (3.7)$$

De esta relación, vemos que $M\xi$ es el valor medio de la variable ξ , en la cual los valores más probables tienen pesos más grandes.

Se mencionan ahora las propiedades básicas del valor esperado. Si c es un número arbitrario no aleatorio, entonces:

$$M(\xi + c) = M\xi + c \quad (3.8)$$

y

$$M(c\xi) = cM\xi \quad (3.9)$$

Si ξ y η son dos variables aleatorias arbitrarias, entonces:

$$\begin{aligned} M(\xi + \eta) &= M\xi + M\eta \\ V\xi &= M([\xi - M\xi]^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

El número $V\xi$ hace referencia a la varianza de la variable aleatoria ξ . Entonces, la varianza es el valor esperado del cuadrado de la desviación de la variable aleatoria ξ a partir de su valor medio $M\xi$. Obviamente, $V\xi$ es siempre mayor que cero.

El valor esperado y la varianza son las características numéricas más importantes de la variable aleatoria ξ . Si se observa la variable ξ muchas veces y se obtienen los valores $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ (cada uno de los cuales es igual a uno de los números x_1, x_2, \dots, x_n), entonces la media aritmética de estos valores es cercana a $M\xi$, y la varianza $V\xi$ caracteriza la dispersión de estos valores alrededor de la media $M\xi$.

$$M\xi \approx \frac{1}{N} \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n \quad (3.11)$$

La ecuación (3.11) es un caso simple de la famosa ley de los números grandes y se puede explicar mediante las consideraciones siguientes. Si se asume que entre los valores obtenidos $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$

el número x_1 se repite k_1 veces, el número x_2 se repite k_2 veces, . . . , y el número x_n se repite k_n veces, entonces:

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j = x_1 k_1 + x_2 k_2 + \cdots + x_n k_n \quad (3.12)$$

Así,

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j = x_1 \frac{k_1}{N} + x_2 \frac{k_2}{N} + \cdots + x_n \frac{k_n}{N} \quad (3.13)$$

Para valores grandes de N , la frecuencia $\frac{k_i}{N}$ del valor x_i se acerca a su probabilidad p_i de tal manera que $\frac{k_i}{N} \approx p_i$. Por lo tanto,

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j = \sum_{j=1}^N x_i \frac{k_i}{N} \approx \sum_{j=1}^N x_i p_i = M\xi \quad (3.14)$$

La ecuación (3.10) para la varianza puede transformarse usando las ecuaciones (3.8), (3.9), y (3.10):

$$V\xi = M(\xi^2 - 2\xi \cdot M\xi + [M\xi]^2) = M(\xi^2) - 2\xi \cdot M\xi + [M\xi]^2 \quad (3.15)$$

De donde se deduce que:

$$V\xi = M(\xi^2) - [M\xi]^2 \quad (3.16)$$

Por lo general, el cálculo de la varianza mediante la ecuación (3.16) es más sencillo que mediante la ecuación (3.10). La varianza tiene las siguientes propiedades básicas. Si c es un número arbitrario no aleatorio, entonces:

$$V(\xi + c) = V\xi \quad (3.17)$$

y

$$V(c\xi) = c^2 V\xi \quad (3.18)$$

El concepto de independencia de las variables aleatorias desempeña un papel importante en la teoría de la probabilidad. La independencia es un concepto bastante complicado, aunque puede ser más claro en los casos más simples. Supongamos que estamos observando simultáneamente dos variables aleatorias ξ y η .

Si la distribución de ξ no varía cuando se conoce el valor que η asume, entonces es natural considerar a ξ independiente de η .

Las relaciones siguientes se aplican a las variables aleatorias independientes ξ y η .

$$\begin{aligned}
 M(\xi\eta) &= M\xi \cdot M\eta \\
 V(\xi + \eta) &= V\xi + V\eta
 \end{aligned}
 \tag{3.19}$$

3.6. Teorema central del límite.

El fundamento del método de Monte Carlo hay que buscarlo en el “Teorema central del límite” de la teoría de probabilidades, el cual afirma que si se consideran N variables aleatorias $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ independientes, cuyas leyes de probabilidad coinciden y, por tanto, también sus valores medios (M) y su variancia (V), [Sobol, 1980]:

$$\begin{aligned}
 M\xi_1 &= M\xi_2 = \dots = M\xi_N = m \\
 V_{\xi_1} &= V_{\xi_2} = \dots = V_{\xi_N} = b^2
 \end{aligned}
 \tag{3.20}$$

Si se designa por ρ_N la suma de todas estas variables:

$$\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N \tag{3.21}$$

y se deduce que:

$$\begin{aligned}
 M\rho_N &= M(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = N \cdot m \\
 V_{\rho_N} &= V_{\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N} = N \cdot b^2
 \end{aligned}
 \tag{3.22}$$

Consideremos ahora la variable aleatoria normal ζ_N con los mismos parámetros: $a = N \cdot m$ y $\sigma^2 = N \cdot b^2$.

El teorema central del límite afirma que cualquiera que sea el intervalo (a', b') se tiene para valores grandes de N :

$$p(a' \leq \rho_N \leq b') \approx \int_{a'}^{b'} p_{\zeta_N}(x) dx \tag{3.23}$$

El significado real de este teorema es obvio: la suma ρ_N de una gran cantidad de variables aleatorias idénticas es aproximadamente normal ($p_{\rho_N}(x) \approx p_{\zeta_N}(x)$).

Tomando este teorema como base, si se ha de calcular una magnitud m desconocida, tal que su valor medio y variancia sean respectivamente:

$$\begin{aligned}
 M\xi &= m \\
 V_{\xi} &= b^2
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

Consideramos las N variables aleatorias independientes $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ con la misma distribución que ξ . Si N es suficientemente grande, la distribución de la suma $\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$ será aproximadamente normal, con un valor medio $a = N \cdot m$ y una varianza $\sigma^2 = N \cdot b^2$. Para un intervalo de confianza $\pm 3\sigma$, de acuerdo con las propiedades de la ley normal de Gauss, tenemos que:

$$P(Nm - 3b\sqrt{N} \leq \rho_N \leq Nm + 3b\sqrt{N}) \approx 0.997 \quad (3.25)$$

Expresión equivalente a:

$$P\left(m - \frac{3b}{\sqrt{N}} \leq \frac{\rho_N}{N} \leq m + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right) \approx 0.997 \quad (3.26)$$

Este resultado indica que el valor medio de los N valores resultantes del sorteo de la variable ξ es una estimación del valor m , al tiempo que este error es inversamente proporcional a \sqrt{N} , lo cual exige, en muchos casos, escoger una muestra de gran tamaño para conseguir un error pequeño.

Para el tipo de problemas que nos ocupan bastará, pues, conocer las leyes de probabilidad de los diversos sucesos que pueden afectar a las partículas en sus interacciones con el medio, sorteando en cada caso los valores de las variables y hallando finalmente el valor medio de aquella o aquellas que nos interesen para la solución del problema. Esta forma de proceder implica conocer con detalle cada uno de los procesos o fenómenos físicos que pueden influir sobre la partícula.

3.7. Técnicas de muestreo.

El análisis, aunque sea de una forma elemental, de la teoría de probabilidades nos va a permitir conocer más a fondo el funcionamiento interno de la técnica de Monte Carlo y poder interpretar los resultados obtenidos.

3.7.1. Función densidad de probabilidad.

En el método de Monte Carlo para análisis numéricos se obtienen resultados estadísticos de determinadas variables físicas (energía, posición, etc.) sacando una muestra apropiada de la distribución de probabilidad. Para ello escogemos un conjunto de muestras aleatorias x_i basado en un conjunto de números aleatorios $\{\xi_i\}$ que están uniformemente distribuidos a lo largo de un intervalo unitario. Las muestras x_i están distribuidas de acuerdo con la función de densidad de probabilidad denominada $p(x)$ tal como se muestra en la figura siguiente (Figura 3.3). Así, $p(x)dx$ nos indica la probabilidad que cualquier x_i quede incluido entre x y $x + dx$. En general, $p(x)$ debe cumplir algunos requisitos;

- Se define positiva ($p(x) \geq 0$)
- Es integrable y normalizada, $\int_a^b p(x)dx = 1$
- a y b son números reales que cumplen $-\infty < a < b < \infty$

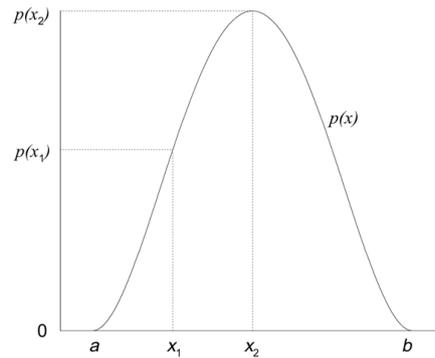


Figura 3.3. Ejemplo de función densidad de probabilidad, $p(x)$.

3.7.2. Función de distribución.

Asociada a cada función densidad de probabilidad, $p(x)$, podemos definir la función de distribución, denominada $c(x)$, como la suma de las probabilidades de cada x_i perteneciente al interior de cada intervalo diferencial entre a y x ,

$$c(x) = \int_a^x p(x') dx' \quad (3.27)$$

de tal forma que $p(x)$ y $c(x)$ están relacionadas por la derivada $p(x) = \frac{d(c(x))}{dx}$

Como la probabilidad de eventos excluyentes es aditiva, $c(x)$ se interpreta como la probabilidad que cualquier x_i dado, sea menor o igual que x . La función $c(x)$ es monótona creciente en x , ya que $p(x) \geq 0$ para todo x . Como se muestra en la imagen a continuación (Figura 3.4), la probabilidad integrada, a lo largo de todos los posibles resultados es la unidad, $c(b) = 1$.

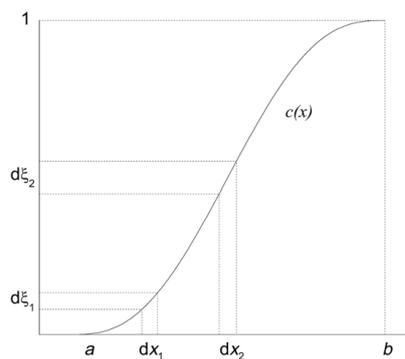


Figura 3.4. Función de distribución, $c(x)$, obtenida de la integración de la función densidad de probabilidad.

Hasta ahora han quedado explicados algunos principios básicos de la teoría de probabilidades y la generación de números aleatorios. La combinación de estos dos aspectos nos va a permitir utilizar los números aleatorios para realizar un muestreo de las distribuciones de probabilidad.

3.7.3. Método directo.

Si tenemos una función densidad de probabilidad, $p(x)$, definida en el intervalo $[a, b]$, podemos construir la función de distribución, $c(x)$, definida en el mismo intervalo. Se puede muestrear sobre esta función en el rango las variables aleatorias $0 \leq \xi \leq 1$, y reescribir la función de distribución como $\xi = c(x)$. Consideramos dos intervalos dx_1 y dx_2 de igual longitud (Figura 3.4), podemos ver que se cumple:

$$\frac{d\xi_1}{d\xi_2} = \frac{\left. \frac{dc(x)}{dx} \right|_{x=x_1}}{\left. \frac{dc(x)}{dx} \right|_{x=x_2}} = \frac{p(x_1)}{p(x_2)} \quad (3.28)$$

Esto nos indica que si generamos números aleatorios ξ , pertenecientes al intervalo unitario, el número de los que se encuentran en $d\xi_1$ respecto al de los que se encuentran en $d\xi_2$ representa la misma relación que el cociente de probabilidades en x_1 y x_2 .

Debemos tener en cuenta que todas las funciones de distribución, obtenidas a partir de funciones de densidad de probabilidad correctamente definidas, siempre serán invertibles (analítica o numéricamente). Si escogemos números aleatorios sobre la función de distribución, podemos invertir la ecuación para obtener (Figura 3.5):

$$x = c^{-1}(\xi) \quad (3.29)$$

Escogiendo ξ sobre una distribución aleatoria uniforme y sustituyéndolo en la ecuación anterior, generamos los valores de x según la función de densidad de probabilidad apropiada.

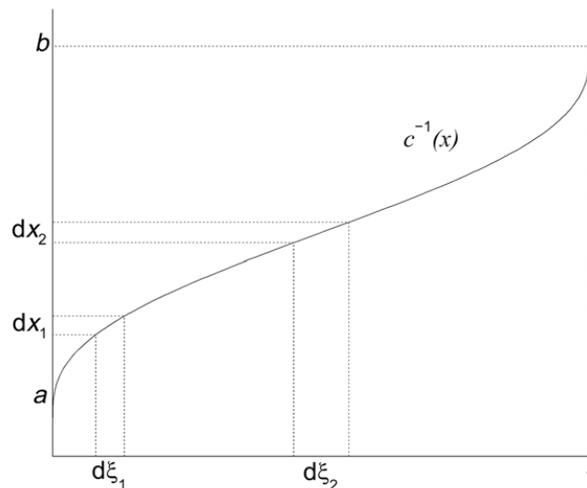


Figura 3.5. Función de distribución inversa, $c^{-1}(x)$.

3.7.4. Método de descarte.

Cuando la función de densidad de probabilidad, $p(x)$, no es integrable, o cuando la función de distribución, $c(x)$, es difícilmente invertible, el método directo no nos aportará una solución al problema. En estos casos se usa el método de descarte.

La función de densidad de probabilidad, $p(x)$, tiene que estar limitada y su valor máximo, $p(x_{max})$, ha de ser conocido (Figura 3.6). Normalizamos la función de densidad de probabilidad y obtenemos una nueva función de densidad, $f(x) = \frac{p(x)}{p(x_{max})}$, cuyo valor máximo es la unidad para x_{max} como se observa en las figuras siguientes (Figura 3.7).

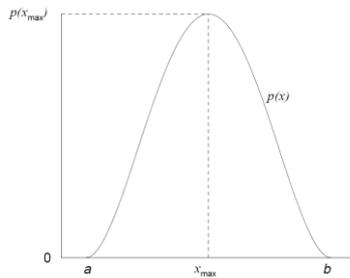


Figura 3.6. Función de densidad de probabilidad.

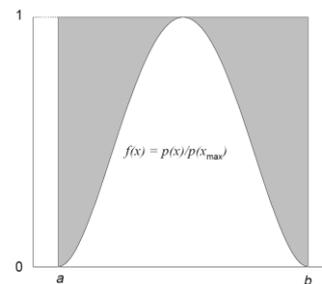


Figura 3.7. Función de densidad de probabilidad normalizada.

Generando un número aleatorio $\xi_1 \in [0,1]$ podemos obtener un valor de x , distribuido según la función densidad de probabilidad, calculando $x = a + (b - a)\xi_1$, donde $[a, b]$ es el rango de validez de la función de densidad de probabilidad.

Escogemos un segundo número aleatorio ξ_2 . Si $\xi_2 < f(x) = \frac{p(x)}{p(x_{max})}$, se acepta el valor de x . En caso contrario se vuelve a generar un número aleatorio ζ_1 y se repite el proceso. El método aumenta el tiempo de cálculo ya que muchas veces no se cumple la condición anterior y se tiene que desechar el valor encontrado de x y volver a empezar, con el correspondiente tiempo adicional que supone.

La eficiencia del método de descarte es: $\epsilon = \frac{1}{p(x_{max})} \cdot \int_a^b p(x) \cdot dx$

3.7.5. Método mixto.

Este método utiliza una mezcla de los dos métodos explicados anteriormente. Para ello se descompone la función densidad de probabilidad en un producto, $p(x) = f(x)g(x)$, donde $f(x)$ es invertible y $g(x)$ contiene la complejidad matemática.

Debemos normalizar ambas funciones para obtener $\tilde{f}(x)$ tal que $\int_a^b \tilde{f}(x)dx = 1$ y, $\tilde{g}(x) \leq 1$, para todo $x \in [a, b]$. Usando el método directo descrito anteriormente, generamos un número aleatorio ξ_1 , y escogemos x a partir de $\tilde{f}(x)$. Utilizando el valor de x hallado, aplicamos el método de descarte a la función $\tilde{g}(x)$ a través de la generación de un segundo número aleatorio ξ_2 , de manera que si $\xi_2 \leq \tilde{g}(x)$ se acepta el valor de x . En caso contrario se vuelve a generar un número aleatorio ζ_1 , y se repite el proceso.

3.8. Análisis estadístico. Estimación de la precisión.

El método de Monte Carlo es un método estadístico y, por consiguiente para que los resultados obtenidos tengan sentido deben ir acompañados de su correspondiente incertidumbre.

En general se puede decir que la incertidumbre asociada a un resultado es inversamente proporcional a \sqrt{N} , siendo N el número de historias que se simulan. Por consiguiente, si se quiere reducir la incertidumbre a la mitad se debe aumentar cuatro veces el número de historias que se simulan.

Los distintos parámetros se calculan mediante la simulación y se acumulan en el valor x_i para cada historia i , donde $1 \leq i \leq N$. Podemos calcular el valor medio de x ,

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (3.30)$$

La estimación de la varianza asociada a la distribución de x_i valdrá:

$$S_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (3.31)$$

La estimación de la varianza de \bar{x} es la varianza estándar de la media.

$$S_{\bar{x}}^2 = \frac{S_x^2}{n} \quad (3.32)$$

Escribiremos los resultados de la forma $x = \bar{x} \pm S_{\bar{x}}$.

Capítulo 4

Física de la radioterapia

4.1. Interacción de las partículas con la materia.

En el capítulo anterior se detallaron los principios básicos de una simulación Monte Carlo. En este tipo de simulaciones es importante conocer cómo se realiza el transporte de las distintas partículas generadas en el cálculo, las interacciones que se generan entre ellas y las distintas aproximaciones que se pueden hacer en cada caso.

Además, los fenómenos asociados a la interacción de las partículas con la materia son de una importancia fundamental en dosimetría ya que, en definitiva, se pretende determinar la energía disipada por la radiación en un medio. El estudio de los mecanismos mediante los cuales las partículas ceden energía al medio pertenece al ámbito de la física atómica y nuclear y su conocimiento es indispensable para abordar cualquier tema relacionado con la dosimetría.

La energía de las partículas tiene una gran influencia en la determinación de las características y de los tipos de interacción que se producirán. En el presente trabajo el mayor interés se centrará en el transporte de fotones y electrones de energía por debajo de los 6 MeV, (energía máxima del espectro del acelerador lineal utilizado en esta tesis), donde la mayor contribución de la dosis al paciente es debida a los fotones primarios.

El objetivo en radioterapia es la rotura de enlaces en las moléculas de ácido desoxirribonucleico (ADN). Este efecto puede producirse mediante la interacción física de la radiación incidente con los electrones de los puentes de hidrógeno presentes en las moléculas de ADN, o de manera indirecta, a través de la producción en agua de radicales que reaccionan químicamente con dichas moléculas destruyendo su estructura.

En cualquier caso, la energía transportada por el campo de radiación ha de transferirse a los electrones del medio, que sufren ionizaciones y excitaciones. Este propósito se consigue empleando haces de partículas cargadas o de radiación electromagnética de alta frecuencia, cuya longitud de onda sea menor que las dimensiones de la mayor parte de los átomos.

Las radiaciones ionizantes pueden clasificarse en dos grandes grupos: radiaciones directamente ionizantes y radiaciones indirectamente ionizantes. Al primer grupo pertenecen las partículas cargadas. Continuamente interaccionan con los electrones y demás partículas cargadas del medio a través del campo coulombiano, cediendo paulatinamente su energía. Las radiaciones indirectamente ionizantes son los fotones y los neutrones. Su interacción con los electrones y otras partículas cargadas del medio es probabilística, regida por el concepto de sección eficaz, y catastrófica: en una sola interacción pueden perder una parte importante de su energía, e incluso toda ella. En el caso de las radiaciones indirectamente ionizantes, la cesión de energía al medio es un proceso en dos etapas: los fotones (o neutrones) ceden energía a las partículas cargadas, que son puestas en movimiento, y son quienes en última instancia ceden la energía al medio.

Hoy en día se emplean diversos tipos de partículas en el tratamiento del cáncer con radioterapia: fotones, electrones, neutrones, protones e iones de carbono. También se han empleado otros tipos de iones, como helio, y otros tipos de partículas, como mesones. Los mecanismos de interacción de cada tipo de partícula con el medio determinan en qué condiciones se puede aplicar cada tipo de radiación.

4.1.1. Procesos de interacción de los fotones.

Las interacciones de los fotones son estocásticas, es decir, aleatorias por naturaleza. A diferencia de los electrones, los fotones que atraviesan la materia pueden generar algunas, una o ninguna interacción. En este apartado se describen los procesos de interacción básica y las probabilidades de interacción que se producen cuando un haz de fotones entra en un medio.

En cada interacción, se generan partículas ionizantes secundarias y éstas pueden ser partículas cargadas (usualmente electrones) o partículas sin carga (generalmente fotones). Las partículas cargadas depositan su energía cerca del lugar de interacción y contribuyen a la deposición de energía local, mientras que, los fotones secundarios pueden desplazarse una cierta distancia antes de interactuar. Los fotones secundarios son importantes porque contribuyen a la fluencia de fotones dentro y alrededor del órgano irradiado y a la dosis cuando interactúan y producen electrones secundarios. La importancia relativa de los fotones secundarios depende de las energías de los fotones principales. En radioterapia, la contribución dominante a la dosis absorbida dentro del paciente es debido a los fotones primarios.

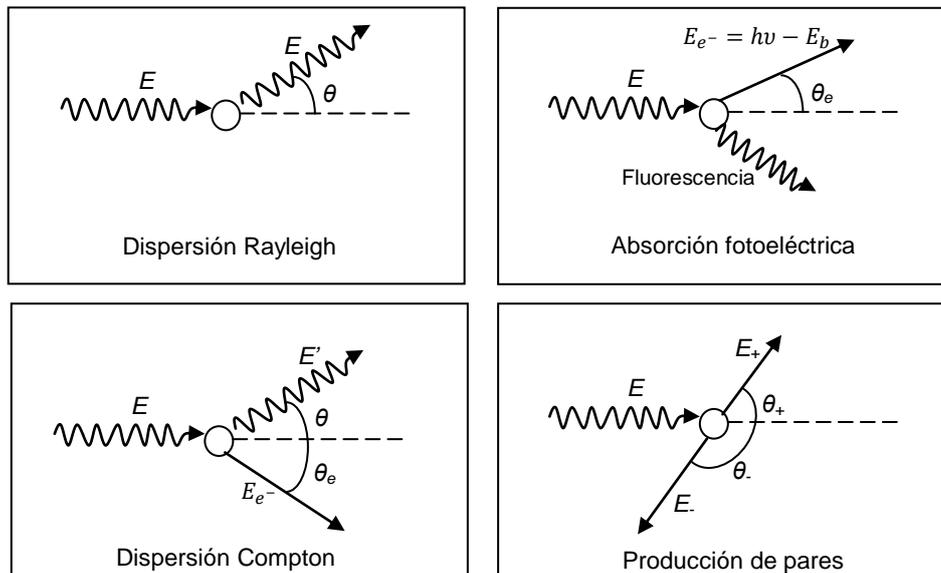


Figura 4.1. Mecanismos básicos de interacción de fotones.

Se presenta a continuación la descripción de los procesos de interacción de los fotones modelados en una simulación Monte Carlo (Figura 4.1).

La interacción de los fotones en la materia es debida mayoritariamente a estos cinco tipos de reacciones:

- Dispersión coherente
- Interacción fotoeléctrica
- Interacción *Compton* (dispersión incoherente)
- Producción de pares
- Reacciones fotonucleares

Se debe tener en cuenta que las reacciones fotonucleares sólo tienen importancia para altas energías (superiores a 10 MeV), por lo tanto estas interacciones serán despreciables para el rango de energías utilizado en los equipos de radioterapia que trabajen a 6 MeV. Si se ha considerado, en cambio, la producción de pares, que se empieza a producir para fotones con energías mayores que 1.022 MeV, y empieza a ser relevante a partir de unos 5 MeV.

Cada uno de estos procesos puede ser representado por sus secciones eficaces, que dependen de la energía de los fotones incidentes, de la densidad de los blancos y del tipo de interacción.

El coeficiente total de atenuación lineal, o sección macroscópica de atenuación, μ (sin tener en cuenta las interacciones fotonucleares) será la suma de los coeficientes individuales de cada uno de los procesos:

$$\mu = \mu_{\text{Compton}} + \mu_{\text{Ef.fotoeléctrico}} + \mu_{\text{Disp.coherente}} + \mu_{\text{Prod.pares}} \quad (4.1)$$

donde μ_{Compton} , $\mu_{\text{Ef.fotoeléctrico}}$, $\mu_{\text{Disp.coherente}}$ y $\mu_{\text{Prod.pares}}$ son los coeficientes de atenuación lineales para la interacción *Compton*, el efecto fotoeléctrico, la dispersión coherente y la producción de pares respectivamente [Bielajew, 1988].

El coeficiente total de atenuación lineal representa la probabilidad de interacción de los fotones por unidad de recorrido y puede ser representado mediante:

$$\mu = N \cdot \sigma \quad (4.2)$$

donde σ es la sección eficaz microscópica y N es el número de átomos blanco por unidad de volumen.

La sección eficaz σ , medida en cm^2 , indica el área efectiva del blanco para la radiación y puede escribirse:

$$\sigma = \frac{P}{\Phi} \quad (4.3)$$

donde P es la probabilidad de la interacción y Φ es la fluencia de partículas.

Como μ es directamente proporcional a la densidad, $\frac{\mu}{\rho}$ es independiente de la densidad del material, y consecuentemente representa un coeficiente de mayor interés: el coeficiente de atenuación másico.

A continuación se describe brevemente cada uno de los procesos de interacción mencionados anteriormente.

4.1.1.1. Efecto fotoeléctrico (absorción).

Para fotones de baja energía (por debajo de unos 100 keV), el efecto fotoeléctrico es el mecanismo dominante de interacción entre fotones y materia. La interacción fotoeléctrica tiene lugar cuando un fotón interacciona con un electrón que está ligado a un átomo. La energía del fotón incidente es absorbida completamente por el átomo, emitiendo un electrón que estaba ligado (normalmente de las capas más internas K , L o M) con una energía cinética igual a la diferencia entre la energía del fotón incidente ($h\nu$) y la energía de enlace del electrón, E_b (Figura 4.2). Para que se produzca esta interacción el fotón ha de tener al menos la energía de enlace del electrón de capa K correspondiente ($E = h\nu > E_b$) y la probabilidad se hace máxima cuando la energía del fotón es ligeramente superior a la de enlace. La energía cinética del electrón emitido vendrá dada por la diferencia entre la energía del fotón incidente y la energía de enlace del electrón emitido:

$$E_{e^-} = h\nu - E_b \quad (4.4)$$

Al emitirse un electrón queda un hueco en la capa de la que éste ha saltado. Esta vacante será cubierta por electrones de las órbitas superiores. Este proceso va acompañado de emisión de radiación electromagnética de energía o electrones de *Auger*. El hecho de que la fluorescencia emitida sea de muy baja energía hace que ésta sea absorbida en la misma zona, muy cerca de donde se ha originado, lo que justifica la consideración de que toda la energía es absorbida en el punto de interacción.

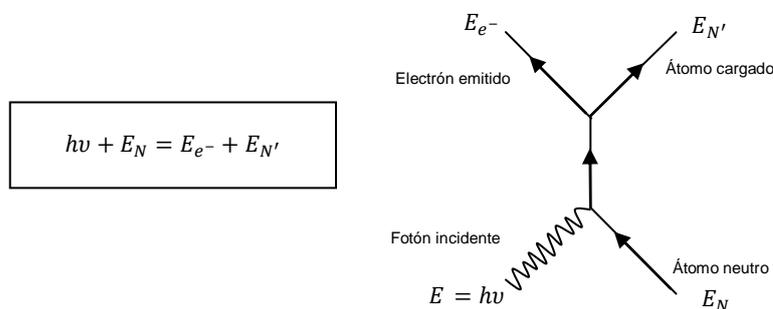


Figura 4.2. Diagrama de *Feynmann* correspondiente al efecto fotoeléctrico.

En la mayoría de los casos, los fotones secundarios emitidos son rayos X característicos que viajan algunos milímetros antes de volver a sufrir otra interacción; sin embargo algunas veces puede tener lugar el efecto *Auger*. Durante este proceso, el fotón emitido después de la transición puede colisionar con otro electrón de una capa superior del mismo átomo, arrancándolo del orbital e impartándole energía cinética. A ese electrón se le llama electrón *Auger*. La energía del electrón *Auger* corresponde a la diferencia entre la energía de la transición electrónica primaria y la energía de ionización para la capa de la cual el electrón *Auger* fue emitido.

De nuevo, como se desprende un electrón, el átomo sigue ionizado. Se produce entonces otra transición del nivel de energía del otro electrón, teniendo como resultado una segunda fluorescencia que puede dar lugar a un nuevo electrón *Auger*. Los electrones y fotones *Auger* son de baja energía ($E < 1$ keV) por lo que tienen una trayectoria libre media muy corta.

La teoría de este fenómeno no es simple. Las fórmulas de la sección eficaz vienen dadas a través de formulaciones semi-empíricas, y se expresan de la siguiente forma:

$$\sigma_{Ef.fotoel\acute{e}ctrico}(E) = \frac{Z^m}{E^n} \quad (4.5)$$

donde el exponente en Z se extiende desde 4 (energías por debajo de 100 keV) hasta 4.6 (energías por encima de 500 keV) y el exponente de la energía del fotón incidente ($E = h\nu$) se extiende desde 3 (energías por debajo de 100 keV) hasta 1 (energías por encima de 500 keV). Sin embargo, la mayoría de códigos Monte Carlo utilizan tablas para modelar la interacción fotoeléctrica.

El manual del MCNP explica que durante una simulación, el efecto fotoeléctrico implica la terminación de la historia aleatoria del fotón con elementos con $Z < 12$ y considera que estos fotones depositan toda su energía en el punto donde se crean, ya que la posible energía de fluorescencia es menor que 1 KeV. Sin embargo, la trayectoria del electrón expulsado es muestreada y transportada hasta que su energía es inferior a la energía de corte fijada en el modelo o hasta que sale fuera de la región de simulación. Puede ocurrir una primera fluorescencia en elementos con $12 < Z < 31$ y una segunda fluorescencia con $31 \leq Z$.

La incertidumbre en las bibliotecas de MCNP que contienen las secciones eficaces de los fotones en el rango aproximado de 0.1 a 10 MeV son mucho mayores para el efecto fotoeléctrico que para cualquier otra interacción.

4.1.1.2. Efecto *Compton* (dispersión incoherente).

Para fotones con energías entre unos 0.1 MeV y 10 MeV, el efecto *Compton* es el proceso de interacción predominante. La dispersión *Compton* tiene lugar cuando un fotón de energía E interacciona con un electrón atómico de la corteza del átomo, transfiriendo parte de su energía y su momento. También se conoce como dispersión incoherente al corresponder a un choque elástico del fotón con pérdida de energía. Debido a esta interacción, el electrón es arrancado del átomo con una cierta energía cinética, mientras que el fotón es dispersado un ángulo θ y cuya energía E' viene dada por:

$$E' = \frac{E}{1 + \alpha(1 - \cos(\theta))} = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_0 c^2}(1 - \cos(\theta))} \quad (4.6)$$

donde: $\alpha = \frac{E}{m_0 c^2}$ es el cociente entre la energía del fotón incidente y la energía en reposo del electrón.

La interacción *Compton* da como resultado un átomo ionizado, un fotón desviado (radiación dispersa) y un electrón de retroceso (Figura 4.3).

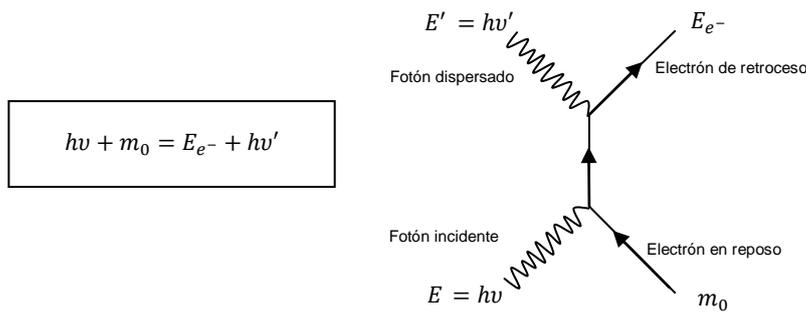


Figura 4.3. Diagrama de *Feynmann* correspondiente al efecto *Compton*.

La cantidad de energía que se transfiere a este electrón dispersado varía con la energía del fotón incidente y, por la ley de conservación de la energía, es igual a la diferencia de energías entre ambos fotones:

$$E_{e^-} = E - E' = E - \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos(\theta))} \right] = E \left[\frac{\alpha(1 - \cos(\theta))}{1 + (1 - \cos(\theta))} \right] \quad (4.7)$$

La energía máxima corresponde a $\theta = 180^\circ$, y la mínima a $\theta = 0^\circ$. En el primer caso estamos en el choque frontal y en el segundo el fotón no es dispersado.

De las ecuaciones de energía podemos observar que para fotones de baja energía ($\alpha \ll 1$) hay poca cesión de energía al medio y el principal efecto es la radiación dispersa.

El coeficiente de atenuación lineal *Compton* o la probabilidad de que se produzca una interacción *Compton* disminuye al aumentar la energía de los fotones (aproximadamente en $1/E$), varía poco con el número atómico del material (Z), y es proporcional a la densidad atómica del medio.

A título de ejemplo, la energía media necesaria para provocar una ionización en una molécula es de 33.7 eV, por lo que un haz de rayos X de 100 keV que transfiere su energía mediante interacción *Compton* arrancará un electrón de la molécula y lo impulsará con una energía cinética de aproximadamente 100000 eV (100000 - 33.7) y podrá crear una cascada de aproximadamente 3000 electrones.

La probabilidad que se produzca radiación dispersa es proporcional a la densidad electrónica del medio, definida como la probabilidad de encontrar un electrón en una cierta región del átomo y disminuye al aumentar la energía de los fotones incidentes ($\propto E^{-1}$).

La sección eficaz diferencial para un ángulo θ y por unidad de ángulo sólido para cada electrón viene dada por la ecuación de *Klein-Nishina* [*Klein y Nishina*, 1929] y corresponde a la sección eficaz clásica de *Thomson* modificada por el factor de *Klein-Nishina* (F_{KN}):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_\theta} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2(\theta)) F_{KN} \quad (4.8)$$

donde r_0 es el radio del electrón, y el diferencial de ángulo sólido viene dado por $d\Omega_\theta = 2\pi \cdot \sin\theta \cdot d\theta$. El factor de *Klein-Nishina* (F_{KN}) se expresa como:

$$F_{KN} = \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos(\theta))} \right]^2 \cdot \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos(\theta))^2}{(1 + \cos^2(\theta))(1 + \alpha(1 - \cos(\theta)))} \right] \quad (4.9)$$

El factor F_{KN} representa la probabilidad de que, al incidir el fotón, el átomo se excite o se ionice al recibir el momento del electrón de retroceso.

El diagrama que se puede observar a continuación (Figura 4.4) representa el diagrama polar de la sección eficaz diferencial dada por esta ecuación (4.8) en función del ángulo de dispersión θ .

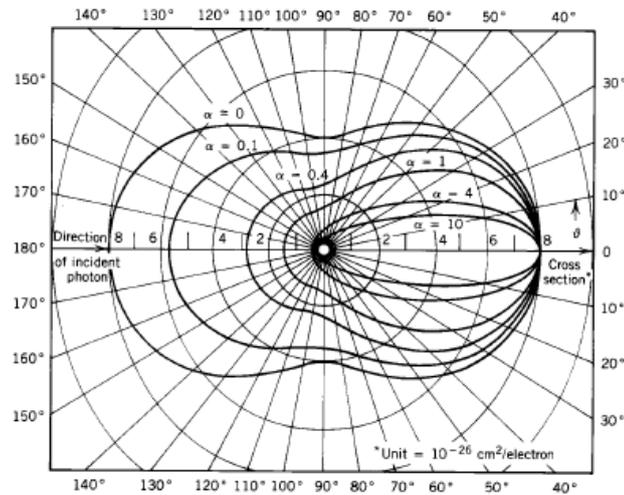


Figura 4.4. Diagrama polar de la sección eficaz diferencial en función del ángulo de dispersión θ .

La sección eficaz debida a la interacción *Compton* vendrá determinada por;

$$\sigma = 2\pi Z \int \frac{d\sigma}{d\Omega_\theta} \sin\theta d\theta \quad (4.10)$$

Para bajas energías es una buena aproximación decir que la sección eficaz *Compton* permanece constante con la energía. Así,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \sigma_{Compton}(\alpha) = 2\sigma_{Compton_0} Z \quad (4.11)$$

$$\text{donde } \sigma_{Compton_0} = 3.33 \cdot 10^{25} \frac{cm^2}{\text{núcleo}}$$

Éste es el límite clásico y corresponde a la dispersión *Thomson*, que describe la dispersión de electrones libres. En casi todas las aplicaciones los electrones están ligados a los átomos y esta ligadura, modelada a través del factor de *Klein-Nishina* (F_{KN}), tiene un profundo efecto en la sección eficaz para bajas energías.

Este límite inferior está definido como la energía de la capa K , aunque los efectos pueden tener una gran influencia si vamos a energías mucho mayores, particularmente para los elementos de número atómico bajo. Por debajo de esta energía, la sección eficaz disminuye, hasta que los electrones la capa K están demasiado ligados para ser arrancados por el fotón incidente.

Por encima de unos 100 keV se puede considerar que estos electrones ligados como “libres”, y se desprecia los efectos de ligadura atómica. Ésta es una buena aproximación para las energías de fotones inferiores a 100 keV para la mayoría de materiales.

El código MCNP utiliza una aproximación *Klein-Nishina* para calcular las secciones eficaces del efecto *Compton*, y asume, entre otras cosas, que los electrones se encuentran libres y en reposo.

4.1.1.3. Dispersión coherente (*Rayleigh*).

Este tipo de interacción se produce cuando un fotón incidente interacciona con un electrón de la nube electrónica del átomo, dando como resultado un fotón con la energía incidente y dispersado un pequeño ángulo respecto la trayectoria inicial, es decir, los fotones sufren cambios en la dirección sin cambios en la energía.

La dispersión coherente puede describirse en términos de interacción onda-partícula. Según esta teoría, los electrones bajo la acción de radiación de baja energía (10 keV), oscilan de forma forzada a la misma frecuencia que la onda electromagnética incidente comportándose como una fuente de radiación electromagnética de esta misma frecuencia. El proceso puede esquematizarse como: absorción de radiación, vibración del átomo y emisión de la radiación al volver el átomo a su estado de reposo, como puede verse del diagrama *Feynmann* (Figura 4.5).

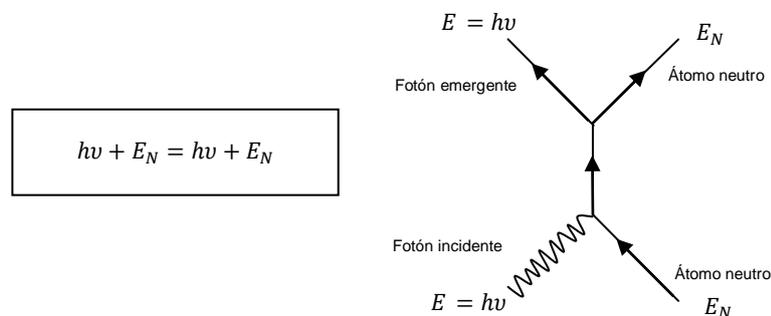


Figura 4.5. Diagrama de *Feynmann* correspondiente a la dispersión coherente.

Éste es el único tipo de interacción entre los fotones y la materia que no produce ionización ya que en la dispersión coherente no se transfiere energía y por tanto no se producen ionizaciones. Su único efecto es que se modifica la dirección de la radiación incidente. En términos de sección eficaz, la interacción coherente es por lo menos un orden de magnitud menor que la sección eficaz fotoeléctrica.

Cuando el medio está formado por distintos tipos de átomos, la sección eficaz debida a la dispersión *Rayleigh* se obtiene sumando los pesos (ponderación) de las secciones eficaces de cada uno de los átomos del medio, donde el “peso” es la proporción de átomos de un determinado tipo. La sección eficaz *Rayleigh* tiene la siguiente forma [Storm, 1970]:

$$\sigma_{Ray}(E, \theta) = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2(\theta)) [F(q, Z)]^2 \quad (4.12)$$

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, $q = \left(\frac{E}{hc}\right) \sin(\theta/2)$ 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 E tiende a cero y/o porque θ tiende a cero. El factor de forma atómico también disminuye rápidamente con el ángulo aunque la dependencia en Z aumenta con el ángulo aproximadamente como $Z^{3/2}$.

Para incrementar la eficiencia de cálculo, el código MCNP5 lleva incorporadas tablas de los factores de forma $F(q, Z)$, [Hubbell, 1979]. Una vez determinado el ángulo polar de dispersión, el ángulo acimutal es aleatoriamente muestreado entre 0 y 2π , y se le da un valor $2\pi\xi$, donde ξ es un número aleatorio dentro del intervalo unitario.

La única variable que se calcula en MCNP es el ángulo de dispersión. Esta interacción es ignorada por el software cuando las energías son mayores a 100 keV porque la interacción es despreciable.

4.1.1.4. Producción de pares.

El proceso de producción de pares es un tipo de absorción que sucede espontáneamente cuando el fotón incidente interactúa con la fuerza coulombiana de un núcleo. Solo puede ocurrir cuando los fotones incidentes poseen una energía igual o mayor a 1.022 MeV, debido a que el fotón se materializa en un par electrón-positrón, y la energía electromagnética se convierte en energía en reposo (0.511 MeV tanto para el electrón como para el positrón). La energía sobrante se convierte en energía cinética de las partículas recién creadas.

La producción de pares es la interacción dominante para energías mayores a 1 MeV. La sección eficaz de este proceso físico aumenta monótonamente a partir de la energía umbral de 1.022 MeV y es proporcional al cuadrado del número atómico del material

$$\sigma_{pp} \propto Z^2 (E - 1.022) \quad (4.13)$$

Cuando la trayectoria del fotón finaliza, se crea un electrón y un positrón en la posición exacta donde se generó la interacción. El código MCNP asume que el positrón se aniquila con otro electrón de los alrededores en el mismo lugar de la colisión, produciendo así dos fotones de 0.511 MeV cada uno. El primer fotón es emitido isotrópicamente y el segundo se crea en dirección opuesta.

Es posible que la producción de pares tenga lugar en presencia del campo electrostático de un electrón en vez de un núcleo. Se habla en este caso de producción de tripletes. Este fenómeno es mucho menos frecuente que la producción de pares en presencia de un núcleo atómico [Johns y Cunningham, 1983]. El momento lineal recibido por el electrón hace que la fracción de energía cinética recibida por éste sea significativa, saliendo a gran velocidad y generando un hueco. La energía mínima para que se produzca un triplete es de 2.044 MeV [Podgorsak, 2006], [Mayles, 2007].

4.1.1.5. Fotodesintegración.

Cuando la energía del fotón es superior a la energía de enlace de un nucleón, pueden ser absorbidos en una reacción nuclear. Como resultado de la reacción, uno o más nucleones (neutrones y/o protones) son expulsados. La sección eficaz de la fotodesintegración depende, de manera compleja, del número atómico, Z , de la masa atómica, A , y, de la abundancia isotópica del elemento.

A causa de estas irregularidades, no se encuentran en formato tabulado. La sección eficaz tiene un umbral de energía, y su forma consiste en un pico de resonancia gigante. El pico se produce entre 5 y 40 MeV, dependiendo del elemento, y puede contribuir entre el 2% (elemento de alta Z) y el 6% (elemento de baja Z) a la sección eficaz.

4.1.1.6. Importancia relativa de los distintos procesos.

Para materiales con Z relativamente bajo, la importancia relativa de las distintas interacciones de los fotones con la energía se muestra en la figura siguiente (Figura 4.6), para carbono y plomo respectivamente. Para estos materiales diferenciamos tres regiones distintas: interacción fotoeléctrica por debajo de unos 100 keV, producción de pares por encima de 10 MeV y *Compton* en medio. Como se puede observar, estos límites no son estrictos, y dependen fuertemente del material estudiado.

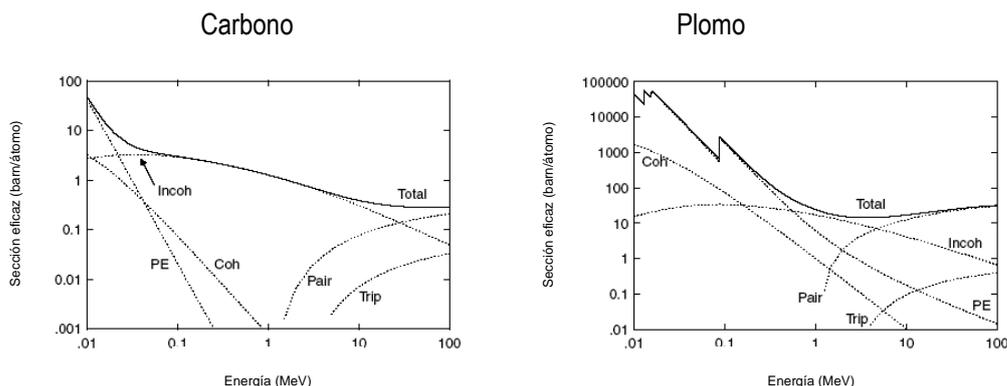


Figura 4.6. Importancia relativa de las distintas interacciones fotónicas en carbono y plomo, [NIST].

4.1.2. Procesos de interacción de los electrones.

Cada fotón de rayos X que es absorbido, ocasiona por lo menos uno o probablemente muchos más electrones de alta velocidad como resultado del efecto fotoeléctrico y el efecto *Compton*. La energía cinética de cada uno de estos electrones deberá ser también absorbida en alguna forma.

Hacer un cálculo análogo al de los fotones donde se calcula cada evento o colisión, ocasionaría que el resolver un problema en MCNP fuera extremadamente lento. Por esta razón, para electrones y otras partículas cargadas se utilizan teorías de dispersión múltiple de las que deriva una compilación de los poderes de frenado, de manera similar a las de las secciones eficaces de los fotones.

En esta sección se repasan algunos conceptos básicos de la física involucrada en los procesos de interacción de electrones incidentes con energía cinética E con la materia. Por simplicidad, se asume que el material irradiado con electrones es homogéneo, de densidad ρ y número atómico Z .

Los poderes de frenado son una aproximación de cómo se deposita la energía en función de la distancia recorrida dentro del material, y se asume que esta energía depositada es muy pequeña comparada con la energía cinética del electrón. La trayectoria del electrón es simulada con una serie

de pasos, después de los cuales, la dirección, energía y posición del electrón se vuelve a calcular. Para los cálculos de los poderes de frenado se toma en cuenta que los electrones interactúan con la materia por medio de distintos procesos con el campo externo nuclear, tales como las colisiones débiles, fuertes, *Bremsstrahlung*, y dispersiones elásticas con núcleos.

A continuación se describen las interacciones más importantes en dosimetría de las partículas cargadas. Agrupadas en cuatro categorías, tal como se muestran en las figuras siguientes (Figura 4.7): “Dispersión inelástica”, “Dispersión elástica”, “Emisión de *Bremsstrahlung*” (captura radiactiva o absorción) y “Aniquilación electrón-positrón”.

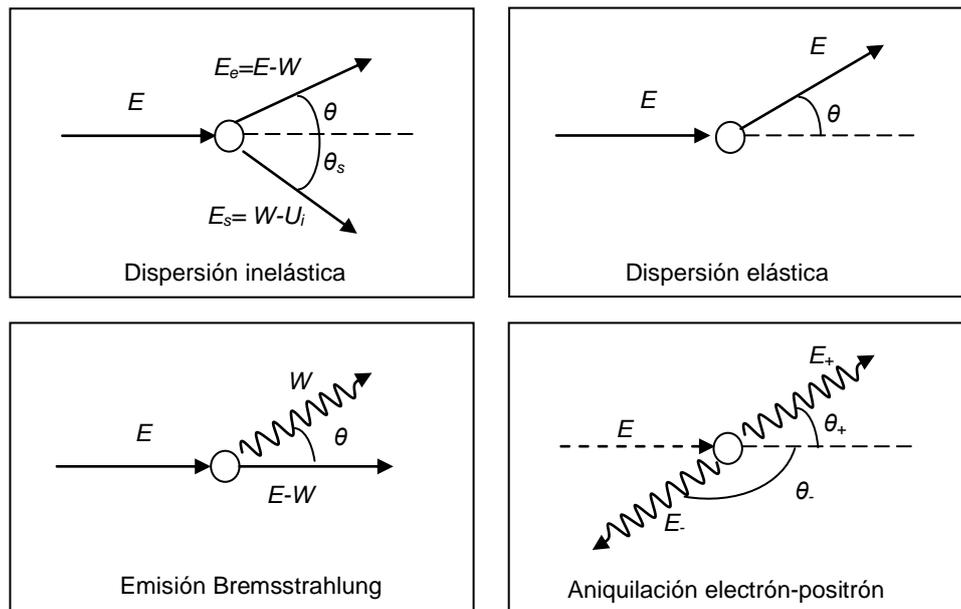


Figura 4.7. Mecanismos básicos de interacción de electrones y positrones.

Los trabajos teóricos que describen el transporte de electrones de decenas de keV, [Kotera, 1981] y [Valkealahti, 1989], están habitualmente basados en técnicas de Monte Carlo. Por otro lado, estudios experimentales, [Everhart, 1971] y [Matsukawa, 1974], dan expresiones aproximadas de la densidad de energía depositada en función de la profundidad para algunos materiales y ciertos rangos de energía.

4.1.2.1. Dispersiones inelásticas con los electrones atómicos (colisiones débiles).

Las dispersiones inelásticas se producen cuando la trayectoria de los electrones está relativamente alejada del átomo y la interacción se realiza con todo el átomo como un conjunto. Un electrón de alta velocidad, choca contra un electrón de un átomo y lo expulsa de su órbita (ionización), reduciendo la energía del primer electrón y cediéndola al segundo electrón. Uno o ambos de estos electrones, pueden repetir el proceso hasta que la cantidad de energía para cada electrón sea inferior al umbral fijado en la simulación. Estos electrones de baja energía (iones negativos), eventualmente reaccionarán con átomos produciendo lo que se conoce como ionización secundaria. En este caso los

átomos no son ionizados, pero a los electrones orbitales se les provee de un pequeño exceso de energía que eventualmente ceden en una forma de radiación electromagnética de muy baja energía.

Para energías bajas e intermedias (energías no relativistas), los mecanismos dominantes para la pérdida de energía de partículas cargadas incidentes, en particular electrones (o positrones), son las colisiones inelásticas, que pueden ser de tipo excitaciones electrónicas o ionizaciones en el medio.

Las secciones eficaces para colisiones inelásticas pueden calcularse utilizando los modelos cuánticos de *Bethe* [*Bethe*, 1957], aunque para materiales densos se requieren correcciones específicas como las sugeridas por *Fano* [*Fano*, 1956] y *Fermi*.

El efecto de una colisión inelástica individual sobre el proyectil (partícula cargada) queda completamente descrito por la pérdida de energía W y la dirección de dispersión, dada por los ángulos (θ, φ) . Para el caso de materiales amorfos, es decir, sin orientaciones preferenciales como los cristales, la sección eficaz inelástica σ_{Inel} resulta independiente del ángulo acimutal φ . En estas condiciones, la sección eficaz diferencial inelástica se calcula como:

$$\frac{d\sigma_{Inel}}{d\Omega} = \frac{2\pi q_e^4}{m_e v^2} \left(\frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} + \frac{\beta^2 \sin^2(\theta_R) W 2m_e c^2}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \right) \frac{df(Q, W)}{dW} \quad (4.14)$$

donde: Q es la energía de retroceso, $\beta = \frac{v}{c}$, el factor $\frac{df(Q, W)}{dW}$ representa la intensidad del oscilador, que determina completamente los efectos de la colisión inelástica sobre el proyectil y θ_R es el ángulo entre la dirección inicial del proyectil y el momento transferido.

4.1.2.2. Dispersiones elásticas con los electrones atómicos (colisiones fuertes).

La colisión elástica es una dispersión del electrón incidente debido al campo electrostático del núcleo del blanco. Cuando un electrón colisiona elásticamente no ocurre una pérdida de energía, ni emisión de rayos X, ni excitación del átomo. El electrón es simplemente desviado bruscamente de su trayectoria original, lo que hace que los electrones tengan una trayectoria tan discontinua.

Se presenta una breve descripción de la teoría de colisiones elásticas de electrones (o positrones), asumiendo la aproximación de materia irradiada formada por átomos neutros en reposo. Por definición, las colisiones elásticas son aquellas en las que los estados cuánticos inicial y final del átomo blanco bombardeado con electrones (o positrones) es el mismo. Las deflexiones angulares de electrones (o positrones) interactuando en la materia se deben, principalmente, a colisiones elásticas. Las colisiones elásticas para energía cinética de unos pocos cientos de eV pueden describirse satisfactoriamente por medio de interacción Culombiana electrostática con el campo del blanco, considerando la correspondiente densidad de carga de cada átomo en términos de la nube electrónica. Para energías mayores, del orden de algunos MeV, el efecto del tamaño finito del átomo cobra una importancia significativa, y debe entonces introducirse la densidad de protones en el núcleo, dada por la distribución de *Fermi* [*Walecka*, 2001]:

$$\rho_{Nucl} = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-\bar{r})/a}} \quad (4.15)$$

donde: \bar{r} es el radio medio, dado por: $\bar{r} = 1.07 \cdot A_{Nucl}^{\frac{1}{3}} fm$ y t es el espesor de corteza superficial nuclear, con valor típico alrededor de $2.04 fm$ donde A_{Nucl} es la masa atómica. Aquí, $fm = 10^{-13} cm$ (femtómetro), también llamado *Fermi*.

Mientras ρ_0 está dado por la condición de normalización:

$$Z = 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \rho_0(\vec{r}) r^2 d\vec{r} \quad (4.16)$$

La distribución angular de las deflexiones resultantes de colisiones elásticas, $\frac{d\sigma_{Elas}}{d\Omega}$ por ángulo sólido ($d\Omega$), puede calcularse teóricamente en la aproximación de campo central, como sigue:

$$\frac{d\sigma_{Elas}}{d\Omega} = |F(\theta)|^2 + |G(\theta)|^2 \quad (4.17)$$

donde: $F(\theta)$ y $G(\theta)$ se expresan en términos del ángulo polar θ como funciones polinómicas de *Legendre*.

La sección eficaz total para colisiones elásticas σ_{Elas} depende de Z^2 y se obtiene de:

$$\sigma_{Elas} = \int \frac{d\sigma_{Elas}}{d\Omega} d\Omega \quad (4.18)$$

Se define también el recorrido libre medio entre dos colisiones elásticas consecutivas λ_{Elas} , a través de:

$$\lambda_{Elas} = \frac{1}{N\sigma_{Elas}} \quad (4.19)$$

donde N es el número de átomos por unidad de volumen.

4.1.2.3. Dispersiones inelásticas con los núcleos atómicos (*Bremsstrahlung*).

Cuando las trayectorias son más cercanas al núcleo, con distancias comprendidas entre el radio atómico y el nuclear, las partículas incidentes sufren fuertes cambios de dirección al interactuar con el campo electrostático de los núcleos (la carga positiva del núcleo actúa sobre la carga negativa del electrón). El electrón es atraído hacia el núcleo desviándose de su trayectoria original, lo cual origina la emisión de energía mediante radiación electromagnética (fotones) denominada radiación de frenado o *Bremsstrahlung*.

Como consecuencia del cambio de velocidad (aceleración, desaceleración, deflexiones) de partículas cargadas que interactúan electrostáticamente con el campo Culombiano, se emite radiación de

Bremsstrahlung. En este tipo de evento, la partícula cargada incidente con energía cinética E genera un fotón con energía W , que puede variar entre 0 y E .

Ocasionalmente, el electrón puede chocar frontalmente con el núcleo. En este tipo de colisión toda la energía del electrón aparece como un único fotón de rayos X (radiación secundaria).

El proceso se describe por medio de la sección eficaz diferencial en la pérdida de energía W , la dirección final del proyectil y la dirección de emisión del fotón. Uno de los modelos más sencillos para describir la emisión de *Bremsstrahlung* es el modelo de *Bethe y Heitler* [*Bethe y Heitler*, 1934] con apantallamiento, que resulta válido sólo si la energía cinética del proyectil antes y después de la emisión es mucho mayor a la energía en reposo ($m_0 \cdot c^2$).

Introduciendo un modelo de apantallamiento tipo exponencial con radio característico R , la sección eficaz diferencial de emisión *Bremsstrahlung*, $\left(\frac{d\sigma_{Br}}{dW}\right)$, por parte de electrones incidiendo sobre un blanco de número atómico Z resulta:

$$\frac{d\sigma_{Br}}{dW} = r_e^2 \alpha Z(Z + \eta) \frac{1}{W} \left[\epsilon^2 \varphi_1(b) + \frac{4}{3} (1 - \epsilon) \varphi_2(b) \right] \quad (4.20)$$

donde η es la eficiencia de producción de *Bremsstrahlung* en el campo de electrones atómicos, α es la constante de estructura fina, r_e es el radio clásico del electrón, los parámetros ϵ y b están definidos por:

$$\epsilon = \frac{W}{E + m_e c^2} = \frac{W}{\gamma m_e c^2} \quad (4.21)$$

$$b = \frac{R m_e c}{\hbar} \frac{1}{2\gamma} \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \quad (4.22)$$

donde $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6.58211915 \cdot 10^{-16} eV$.

Mientras que las funciones φ_1 , φ_2 están dadas por:

$$\varphi_1(b) = 4 \ln \left(\frac{R m_e c}{\hbar} \right) + 2 - 2 \ln(1 + b^2) - 4b \operatorname{arctg}(b^{-1}) \quad (4.23)$$

$$\varphi_2(b) = 4 \ln \left(\frac{R m_e c}{\hbar} \right) + \frac{7}{3} 2 \ln(1 + b^2) - 6b \operatorname{arctg}(b^{-1}) - b^2 [4 - 4b \operatorname{arctg}(b^{-1}) - 3(1 + b^{-2})] \quad (4.24)$$

Si la probabilidad determina que se cree un fotón *Bremsstrahlung* se deberá calcular la energía y la deflexión angular del nuevo fotón: la dirección y energía del electrón no cambian porque el promedio ya ha sido tomado en cuenta en las teorías de dispersión múltiple (poder de frenado).

4.1.2.4. Dispersiones elásticas con los núcleos.

Este tipo de reacción no genera fotones de energía apreciable, por lo que es un tipo de reacción de escaso interés en dosimetría ya que la partícula incidente apenas pierde energía, aunque origina fuertes desviaciones en la trayectoria del electrón incidente. Se trata de la clásica dispersión de *Rutherford*.

$$\frac{d\sigma_{Rut}}{dW} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right) \frac{1}{\text{sen}^4(\theta)} \quad (4.25)$$

donde, E es la energía del proyectil antes de la colisión y θ es el ángulo de dispersión. Si la energía la expresamos en MeV, es conveniente tomar $e^2 = 1.44 \cdot 10^{13}$ MeV·cm.

Debido a la dependencia funcional $\frac{1}{\text{sen}^4(\theta)}$ la mayoría de estas colisiones resultan en una pequeña deflexión angular de la partícula. Pero a medida que la partícula va penetrando se ve expuesta a muchas de estas interacciones y el efecto final neto es un desvío con respecto a su dirección original.

4.1.2.5. Aniquilación electrón-positrón.

El proceso de aniquilación implica la conversión de la energía total de un positrón y un electrón en dos fotones de rayos gamma. Se trata de un proceso muy poco probable, (inferior al 1%). Debido a la conservación de la energía y el momento, los fotones emitidos en la desintegración tienen energías de aproximadamente $mc^2 = 0.511$ MeV, y sus momentos son casi opuestos.

4.2. Cantidades físicas para describir haces de fotones.

La determinación de manera precisa de la dosis absorbida en un determinado medio es crucial para el éxito de los tratamientos de radioterapia. La diferencia de sólo un pequeño porcentaje de la dosis aplicada al tumor puede ser sustancial para erradicarlo sin complicaciones. Una dosis menor podría ser insuficiente para controlar el tumor y una sobredosis podría ocasionar daños graves al tejido sano circundante. Hay muchos pasos diferentes implicados en la determinación de la distribución de dosis absorbida en el paciente. Uno de los más importantes de éstos implica las mediciones con un detector en un maniquí (a menudo de agua, a veces de agua sólida) colocado en el campo de irradiación. Tales medidas incluyen determinar la dosis absoluta a una profundidad de referencia con un tamaño de campo determinado, dosis relativas en muchas posiciones en el maniquí con el fin de trazar una distribución completa de dosis, e 'in vivo' llamado dosis en la piel del paciente durante el tratamiento. En todos los casos el detector, a través de un factor de calibración, devolverá la dosis D_{det} de su propio material frente a una cantidad de carga, luz, ennegrecimiento de película, etc. Por lo general, la dosis es necesaria en una posición r en el medio en ausencia del detector, $D_{med}(r)$. La conversión de D_{det} a D_{med} , por lo tanto, es un paso fundamental y requiere un conocimiento de los aspectos teóricos de la dosimetría de radiación. Lo mismo ocurre con el cálculo de la distribución de dosis dentro de la complicada geometría heterogénea de un paciente.

Esta sección cubre las ideas fundamentales y los principios involucrados en la dosimetría de la radiación, independiente del detector particular que se utilice. Se centra además en analizar las magnitudes físicas más significativas que describen los haces de fotones para radioterapia externa.

Los haces de fotones externos se caracterizan según sus parámetros físicos y se clasifican de acuerdo a su origen, medio de producción y energía.

Tal y como se ha explicado en apartados anteriores, existen dos orígenes posibles para haces de fotones: radiación proveniente de decaimientos/transiciones nucleares y rayos X producidos por bombardeo de un blanco con partículas cargadas (típicamente electrones). Los rayos X provenientes del blanco irradiado consisten en fotones de *Bremsstrahlung* y fotones característicos.

El origen de los fotones característicos, se basa en el modelo de *Bohr*, en el que se establece los electrones de un átomo se encuentran en capas designadas *K, L, M, N*, etc., siendo *K* la más cercana al núcleo. Los electrones en cada capa se clasifican de acuerdo al momento angular y dirección de spin, designándose a cada parámetro un número cuántico obedeciendo el principio de exclusión de *Pauli*: dos electrones en un átomo no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos.

A cada una de las capas le corresponde lo que se denomina energía de enlace, la cual es la mínima energía que debe tener un fotón para expulsar un electrón de un dado nivel en un átomo de un elemento en particular [*Jenkins*, 1976]. Para cada elemento, la energía de enlace de cada nivel es mayor cuanto más cerca del núcleo se encuentre. Para cada nivel, la energía de enlace aumenta al aumentar el número atómico.

De esta manera, si un fotón de rayos X incide con una energía tal que puede arrancar un electrón de un nivel dado, se produce una vacante que será llenada por un electrón de una capa superior. En esa transición se libera energía que puede salir como un fotón de rayos X característico. Como la transición corresponde a la diferencia en energía entre los dos orbitales atómicos involucrados, el fotón emitido tiene una energía característica de esa diferencia y por lo tanto, del átomo.

La dosimetría para radioterapia estudia dos aspectos diferentes: por un lado el haz de fotones en sí mismo (en términos de propiedades físicas de éste, como espectro, características geométricas e intensidad) y, por otro, la cantidad de energía que es transferida desde el haz de fotones al medio irradiado y que será depositada en el material (típicamente considerando aire, agua o materiales biológicos).

Para poder estudiar cómo se deposita en un medio la energía de un haz de radiación, es de gran interés relacionar las propiedades del haz con sus efectos en el medio absorbente. Se introduce en primer lugar la dosis absorbida, que está directamente relacionada con la energía absorbida en el medio por los electrones puestos en movimiento por los fotones. Posteriormente, se define la fluencia, que es la magnitud que caracteriza el haz de radiación. Finalmente, se define el Kerma, que hace referencia a la energía transferida por los fotones a los electrones, que son los que directamente ceden su energía al medio. El Kerma es fundamental para relacionar la dosis con la fluencia. Estas magnitudes tienen una importancia crucial para el desarrollo tanto de la teoría de la medida de la dosis como de los modelos de cálculo de dosis a partir de la representación del haz.

Las teorías de la medida de la dosis, llamadas teorías de la cavidad (*Bragg-Gray*, *Spencer-Attix* y *Burlin*), permiten establecer las condiciones para medir la dosis en un medio y el procedimiento a seguir para ello. En el apartado 4.8 se explica la teoría de la cavidad de *Bragg-Gray*. Para profundizar en este punto, se pueden consultar las referencias de [*Attix*, 1986], [*Podgorsak*, 1996], [*Johns* y *Cunningham*, 1983].

4.2.1. Unidades básicas.

- **Dosis absorbida**

La dosis absorbida (*D*) se define como [ICRU 60]:

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm} \quad (4.26)$$

donde $d\bar{\epsilon}$ es la energía media impartida por las radiaciones ionizantes en la materia de masa dm .

La unidad de dosis absorbida es el Gray (Gy), equivalente a $1 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$.

- **Fluencia y tasa de fluencia de fotones**

La fluencia de fotones (ϕ) se define como:

$$\phi = \frac{dN}{dA} \quad (4.27)$$

donde dN indica el número de fotones que ingresa a una esfera (imaginaria) de sección transversal dA .

La unidad de fluencia de fotones es: $[\phi] = \text{cm}^{-2}$.

La tasa de fluencia de fotones (φ) se define como la fluencia de fotones por unidad de tiempo, como:

$$\varphi = \frac{d\phi}{dt} \quad (4.28)$$

La unidad de la tasa de fluencia de fotones es: $[\varphi] = \text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$.

- **Fluencia y tasa de fluencia de energía**

La fluencia de energía (Ψ) describe el flujo de energía en un haz de fotones y está definida según:

$$\Psi = \frac{dE}{dA} \quad (4.29)$$

donde dE representa la cantidad de energía que atraviesa la unidad de área dA .

La unidad de fluencia de energía es: $[\Psi] = \text{MeV cm}^{-2}$.

En el caso de un haz monoenergético, dE es el número de fotones dN por su energía ($h\nu$), y la fluencia de energía Ψ puede expresarse en términos de la fluencia de fotones ϕ como:

$$\Psi = \phi h\nu \quad (4.30)$$

La tasa de fluencia de energía (ψ) se define como la fluencia de energía por unidad de tiempo,

$$\psi = \frac{d\Psi}{dt} \quad (4.31)$$

La unidad de tasa de fluencia de energía es: $[\psi] = \text{MeV cm}^{-2}\text{s}^{-1}$.

- **Kerma en aire**

Para el caso de un haz de fotones monoenergético en aire, se define el Kerma en aire $(K_{\text{aire}})_{\text{aire}}$ en un punto dado alejado de la fuente de radiación como una cantidad proporcional a la fluencia de energía Ψ o bien, a la fluencia de fotones ϕ a través de la siguiente relación:

$$(K_{\text{aire}})_{\text{aire}} = \Psi \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{\text{aire}} = \phi \cdot h \cdot \nu \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{\text{aire}} \quad (4.32)$$

donde $\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{\text{aire}}$ es el coeficiente másico de transferencia de energía para el aire evaluado a la energía del haz de fotones $(h \cdot \nu)$.

Se puede separar en el Kerma una parte de la energía que se depositará en el medio debido a colisiones fuertes y débiles y otra que se depositará debido a pérdidas radiativas. Así consideramos el Kerma total como suma del Kerma de colisión y el Kerma radiativo.

$$K = K^{col} + K^{rad} \quad (4.33)$$

Si denotamos por \bar{g} la fracción media de energía perdida por los electrones por *Bremsstrahlung* (es decir, la fracción de energía de las partículas secundarias cargadas que es transformada en radiación de *Bremsstrahlung*, en lugar de ser depositada en el medio material), entonces:

$$\begin{aligned} K^{col} &= K(1 - \bar{g}) \\ K^{rad} &= K\bar{g} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Para el caso de un haz de fotones monoenergético en aire, el Kerma por colisión K^{col} es proporcional a la fluencia de energía Ψ y la fluencia de fotones ϕ de acuerdo con la relación:

$$(K^{col})_{\text{aire}} = \Psi \left(\frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{\text{aire}} = \phi h \nu \left(\frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{\text{aire}} \quad (4.35)$$

donde $\left(\frac{\mu_{ab}}{\rho} \right)_{\text{aire}}$ es el coeficiente de absorción másico para aire evaluado a la energía del haz de fotones $(h \cdot \nu)$.

Los coeficientes másicos de transferencia de energía y de absorción se relacionan en condición de equilibrio electrónico por medio de:

$$\frac{\mu_{ab}}{\rho} = \frac{\mu_{tr}}{\rho} (1 - \bar{g}) \quad (4.36)$$

Para el caso de materiales de bajo número atómico Z y energías de fotones de megavoltaje, la fracción radiativa resulta $\bar{g} \approx 0$, ya que $\frac{\mu_{ab}}{\rho} \approx \frac{\mu_{tr}}{\rho}$, y por tanto $K \approx K^{col}$.

- **Exposición en aire**

El Kerma en aire de colisión en aire $(K_{aire}^{col})_{aire}$ se relaciona con la Exposición en el caso de equilibrio electrónico por medio de:

$$(K_{aire}^{col})_{aire} \equiv X \left(\frac{W_{air}}{q_e} \right) \quad (4.37)$$

donde $\frac{W_{air}}{q_e}$ es la energía media requerida para producir un par iónico en aire seco (alrededor de 33.97 eV/par).

La unidad especial para la Exposición es: $[W] = R$ (R es *Roentgen* y equivale a $2.58 \cdot 10^{-4} \text{ C} \cdot \text{kg}^{-1}$ en el Sistema Internacional). Entonces, en unidades SI, se tiene:

$$(K_{air}^{col})_{air} = \left(2.54 \cdot 10^{-4} \frac{\text{C}}{\text{kg}_{air} \cdot \text{R}} 33.97 \frac{\text{J}}{\text{C}} \right) X = \left(0.876 \frac{\text{cGy}}{\text{R}} \right) X \quad (4.38)$$

donde se ha asumido $[X] = R$.

4.3. Capacidad de penetración de los haces de fotones en un maniquí dosimétrico.

Un haz de fotones viajando por el vacío (o, en primera aproximación en aire) es gobernado por la Ley del Inverso al cuadrado, mientras que un haz de fotones propagándose en un medio material como un maniquí o algún material, contrariamente, es afectado no sólo por la distancia a la fuente, sino también por la atenuación y dispersión del haz de fotones por parte del medio irradiado. Estos efectos provocan que la deposición de dosis en el material irradiado resulte un proceso complicado, cuya determinación representa un significativo desafío para la dosimetría.

La medición directa de la distribución de dosis en el paciente es imposible, sin embargo es absolutamente necesario conocer con gran precisión la distribución de dosis en el volumen irradiado para practicar tratamientos efectivos y fiables.

Este objetivo se consigue por medio de determinaciones indirectas que relacionan, por medio de funciones específicas, la dosis absorbida en cualquier posición dentro del volumen irradiado del paciente con valores de dosis conocidos determinados en fantasmas por medio de calibraciones de referencia.

Las funciones de relación se miden usualmente con detectores de radiación en maniquí a tejido-equivalentes, y el punto de referencia para la dosis o tasa de dosis se determina según estos fantomas. Además, debe definirse un conjunto de condiciones de referencia, como profundidad, tamaño de campo, distancia fuente superficie (*SSD*; *Source-Surface Distance*), etc.

4.4. Distribución de dosis en agua.

La distribución de dosis en profundidad sobre el eje central del campo es una de las principales cantidades utilizadas en radioterapia externa y se emplea para caracterizar las propiedades del depósito de dosis del haz.

4.4.1. Porcentaje de dosis en profundidad sobre el eje central.

La variación de la dosis en profundidad a lo largo del eje central, conocido como dosis en profundidad relativa o porcentaje, es uno de los parámetros fundamentales que caracterizan un haz de radiación

Una distribución típica de dosis en profundidad sobre el eje central del campo para un haz de megavoltaje incidiendo sobre un maniquí o fantoma que simula a un paciente se muestra en la figura (Figura 4.8). En esta curva se pueden identificar diferentes puntos y regiones de importancia. El haz entra en el paciente a través de la superficie de ingreso, donde deposita una dosis DS . Más allá de la superficie de entrada, la dosis crece rápidamente alcanzando un valor máximo a la profundidad Z_{max} y luego disminuye casi exponencialmente hasta la superficie de salida.

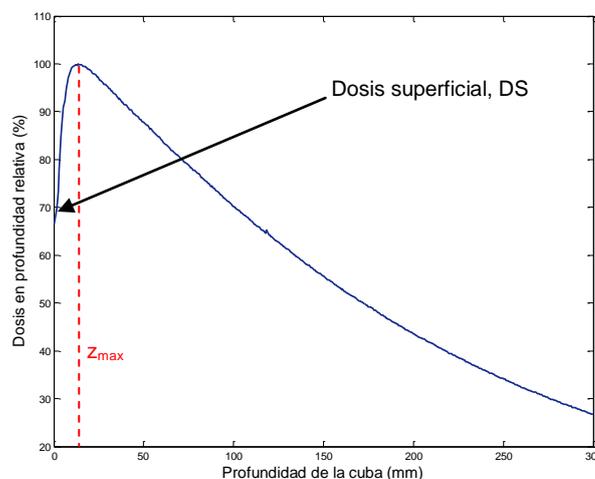


Figura 4.8. Depósito de dosis en profundidad de un haz de fotones de megavoltaje.

Esta curva debe recopilarse para varios tamaños de campo, desde el más pequeño al más grande disponible, así como para algunos campos rectangulares y con la superficie del agua superficial en el origen estándar a distancia de superficie (*SSD*) (generalmente 100 cm). El análisis debería empezar con el detector en la posición más profunda posible y en dirección a la superficie. Este procedimiento minimiza el efecto de las ondas de agua.

La distribución de dosis en profundidad en paciente o fantoma es usualmente normalizada a $D_{max}=100\%$ en la profundidad de máxima dosis Z_{max} , y posteriormente a esta normalización, la distribución de porcentajes de dosis en profundidad (*PDD*; de sus siglas en inglés *Percentage Depth Dose*), se define formalmente como sigue:

$$PDD(z, \text{tamaño de campo}, SSD, h\nu) = \frac{100D_Q}{D_P} = \frac{100\dot{D}_Q}{\dot{D}_P} \quad (4.39)$$

donde D_Q , D_P , \dot{D}_Q y \dot{D}_P son los valores de dosis y tasa de dosis en el punto Q, que representa una profundidad arbitraria z y P, que representa la profundidad de referencia (z_{max}) sobre el eje del campo.

La PDD depende de cuatro parámetros:

1. Profundidad del fantoma, (z).
2. Tamaño de campo.
3. Distancia de la fuente a la superficie de la cuba de agua (SSD).
4. Energía del haz de fotones ($h\nu$).

4.4.1.1. Región de *Build up*.

La dosis en profundidad relativa de un haz de fotones de alta energía aumenta desde la superficie hasta un máximo, a una profundidad que depende de su energía, antes de disminuir de manera casi exponencial. La capa entre la superficie y la profundidad de la dosis máxima es conocida como la región de *Build up* o acumulación, y el conocimiento de sus características es muy importante a fin de estimar el riesgo de una dosificación inferior en una lesión superficial.

Esta zona en la curva de dosis en profundidad, comprendida entre la superficie ($z = 0$) y la profundidad de máxima dosis z_{max} es consecuencia de los relativamente largos recorridos de las partículas secundarias (cargadas) con alta energía (electrones y positrones). Estas partículas secundarias originadas dentro del material irradiado por interacciones de los fotones primarios, viajan una cierta distancia y a lo largo de esta trayectoria depositan su energía en el material. En la región inmediata a la superficie de ingreso dentro del material irradiado, no se satisfacen las condiciones de equilibrio electrónico, y consecuentemente la dosis absorbida es mucho menor al Kerma de colisión. Sin embargo, a medida que la profundidad z aumenta, las condiciones de equilibrio electrónico son alcanzadas para un cierto valor de profundidad, $z = z_{max}$.

Más allá de z_{max} , tanto la dosis como el Kerma de colisión disminuyen debido al efecto de atenuación de los fotones incidentes por parte del material irradiado, resultando en una especie de pseudo-equilibrio electrónico.

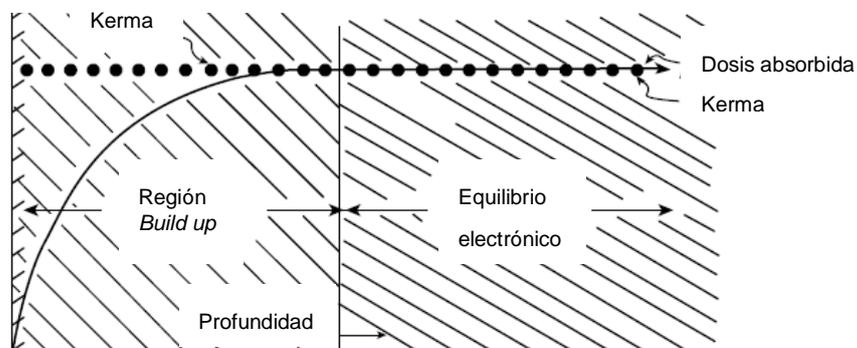


Figura 4.9. *Build up* de la curva de dosis en profundidad.

4.4.2. Dosis fuera del Eje (off-axis) y perfiles laterales de campo.

Las distribuciones de dosis en profundidad a lo largo del eje central del campo no son información suficiente para describir completamente el depósito de dosis en el material, fantoma o paciente irradiado. Se requieren distribuciones de dosis 2D y 3D para determinar completamente el depósito de dosis. Para ello, se realizan mediciones de dosis fuera del eje central del campo, las cuales se denominan *off-axis*.

Combinando datos de perfiles de dosis en profundidad con datos *off-axis*, como perfiles laterales de campo, se reconstruye una distribución matricial 2D o 3D de la deposición de dosis.

En el modo más simple, los datos *off-axis* se consiguen por medio de perfiles (transversales) de campo que se miden en ejes perpendiculares al eje central del campo a una dada profundidad en fantoma, típicamente z_{max} ó 10 cm, aunque se requieren mediciones de perfiles laterales de campo para profundidades específicas como dato necesario para algunos sistemas de planificación (*TPS*, *Treatment Planning System*). La figura situada a continuación (Figura 4.10) muestra curvas de perfiles laterales de campo típicos para un haz de fotones de 6 MeV y cinco tamaños de campo (5 cm x 5 cm, 10 cm x 10 cm, 15 cm x 15 cm, 20 cm x 20 cm y 30 cm x 30 cm), mostrando el perfil a 10 cm de profundidad en el fantoma (de agua).

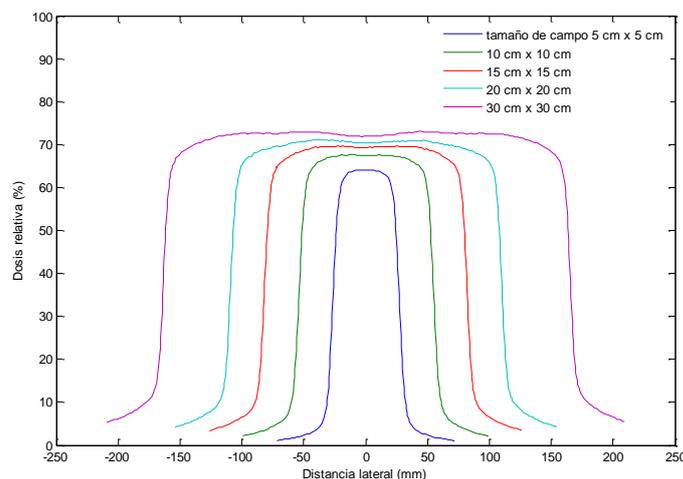


Figura 4.10. Perfiles laterales a 10 cm de profundidad de la superficie del agua para un haz de fotones de 6 MeV.

Los perfiles laterales de campo para haces de megavoltaje constan, básicamente de tres regiones: zona central, penumbra y sombra.

La **zona central** representa la parte central del campo, hasta unos 10 a 15 mm del borde geométrico del campo. En la zona central, el perfil lateral del campo, depende de los electrones que inciden en el blanco (*target*), el número atómico de este, el filtro aplanador y la disposición geométrica del cabezal.

La **región de penumbra** del perfil lateral de campo se caracteriza por una rápida variación de dosis, la cual depende fuertemente del sistema de colimación, el tamaño focal de la fuente de radiación y las propiedades de dispersión lateral de las partículas cargadas.

La caída del valor de dosis en esta región es de forma sigmoide (en forma de "S") y se extiende desde los bordes de colimadores hasta la cola del perfil, donde existe una pequeña componente de dosis debido a la transmisión a través de los colimadores, denominada "penumbra por transmisión", y una componente debida al tamaño de la fuente, denominada "penumbra geométrica" y finalmente, una

contribución significativa proveniente de dispersión en material irradiado, designada “penumbra por dispersión”. La “penumbra total” se define como la penumbra física y es la suma de las tres contribuciones: penumbra por transmisión, penumbra geométrica y penumbra por dispersión. La penumbra física depende de la energía del haz de fotones, dimensiones de la fuente de radiación, SSD, distancia fuente-colimadores y profundidad del fantoma.

La sombra es la región fuera del campo de radiación, lejos de los bordes de campo. La dosis en esta región es, generalmente muy baja, y es debida a radiación transmitida por el cabezal de la máquina de tratamiento.

La uniformidad de los perfiles laterales de campo es usualmente medida por medio de un escáner a lo largo de los dos ejes perpendiculares al eje central del campo a varias profundidades en la cuba. Hay dos parámetros que cuantifican la uniformidad del campo: la planicidad del campo (haz) y la simetría del haz.

4.5. Correcciones por presencia de heterogeneidades.

La aplicabilidad de mapas de isodosis y tablas de distribuciones de dosis en profundidad estándares asume homogeneidad del medio irradiado. Para el caso real de un paciente, sin embargo, estas condiciones de homogeneidad no se satisfacen y el campo atraviesa zonas con diferentes materiales, como grasa, hueso, músculo, pulmón y aire, entre otros. La presencia de estas heterogeneidades provoca cambios en las distribuciones de dosis correspondientes a situaciones estándares de homogeneidad. El efecto de la presencia de heterogeneidades depende del tipo y de la cantidad de material que es atravesada por el haz, así como de la calidad de la radiación del haz. El efecto de las heterogeneidades en el tejido irradiado puede clasificarse en dos categorías:

- Cambios en la absorción del haz primario y las consecuentes propiedades de fotones dispersados.
- Cambios en la fluencia de electrones secundarios.

La importancia relativa de cada uno de estos dos efectos depende, principalmente, de la zona del paciente en cuestión, donde se requiere determinar las alteraciones en la dosis absorbida. Para puntos ubicados más allá de la heterogeneidad, el efecto predominante es la atenuación del haz primario. Los cambios en los fotones dispersados afectan mayormente en cercanías de la heterogeneidad que en regiones alejadas. Los cambios en la fluencia de electrones secundarios, contrariamente, afectan principalmente a la distribución de dosis dentro de la heterogeneidad y en los bordes de las interfaces.

Para el caso de haces de fotones de megavoltaje, para los cuales el efecto de interacción dominante es el efecto *Compton*, la atenuación del haz en cualquier medio material está dominada por la densidad electrónica ρ_e , que es el número de electrones por unidad de volumen. Por tanto, puede definirse una profundidad efectiva para calcular la transmisión a través de materiales que no sean tejido equivalentes. Sin embargo, en cercanía de límites de material o interfaces la distribución es más compleja.

4.6. Modelos para algoritmos de cálculo dosimétrico.

Diversos algoritmos, basados en modelizaciones para el cálculo de la distribución de dosis en paciente utilizados en radioterapia se clasifican en tres categorías:

- **Método de cálculo directo** relativamente simple, basado en una aproximación de primer orden para la dispersión *Compton*, adicionada a la componente primaria del haz directo a la dosis. El método es bastante rudimentario y asume un haz incidente paralelo y monoenergético, además ignora las heterogeneidades presentes.
- **Método de convolución-superposición**, el cual tiene en cuenta la componente indirecta a la dosis absorbida debida a interacciones de los fotones incidentes, separa las interacciones de fotones primarios de interacciones de fotones dispersados y de partículas cargadas secundarias producidos por efecto fotoeléctrico, *Compton* y producción de pares.
- **Método Monte Carlo**, el cual resulta ser la técnica más prometedora entre los métodos computacionales basados en modelizado, utiliza descripciones bien establecidas y confiables de los parámetros de interacción (secciones eficaces) que gobiernan las propiedades de interacción de las partículas involucradas y el proceso de transporte se modeliza computacionalmente dentro del volumen definido de interés. Las técnicas Monte Carlo resultan particularmente importantes para todos los algoritmos basados en modelos de transporte de radiación, particularmente para caracterizar los haces que emergen de las fuentes de radiación y también para cálculos clínicos de distribución de dosis absorbida. Algunas limitaciones de la técnica Monte Carlo puede ser el tiempo de cálculo requerido para realizar una cantidad suficiente de historias para lograr las incertidumbres estadísticas deseadas.

4.7. Dosis relativa medida con cámara de ionización.

Las cámaras de ionización son los dispositivos más utilizados en radioterapia externa, sirven tanto para haces de fotones como de electrones. La dependencia respecto de factores de corrección (como polaridad de la cámara, recombinación de iones, relaciones de poder de frenado y correcciones por fluencia) que afectan la a lectura deben ser considerados para mediciones de distribuciones de dosis relativa.

Generalmente, para cada tipo de medición existe un tipo de cámara diseñada exclusivamente para ello, por ejemplo: mediciones de dosis y tasa de dosis en los puntos de referencia de un fantoma para haces de fotones de megavoltaje y electrones con energías mayores a 10 MeV, se recomienda el uso de una cámara de ionización cilíndrica de relativamente gran volumen sensible 0.6 cm^3 , lo cual genera una buena relación señal-ruido. Para mediciones de distribuciones relativas de dosis (como PDD y perfiles laterales de campo) para haces de fotones en profundidades mayores a z_{max} y para haces de electrones, se recomienda el uso de cámaras de menor volumen (0.1 cm^3) para mejorar la resolución espacial.

4.8. Teoría de la cavidad de *Bragg-Gray*.

Cuando se realiza una medición con un detector, el material del detector, en general, diferirá del medio en el que se introduce. La señal de un detector de radiación generalmente será proporcional a la energía absorbida en su material sensible y, por lo tanto, a la dosis absorbida en este material, D_{det} .

Este apartado contiene las ideas clave y expresiones en lo que se refiere a la aplicación de la teoría de la cavidad, y a la dosimetría experimental en radioterapia. El tratamiento depende en gran medida de los resultados obtenidos en las secciones anteriores y se basa mucho en el concepto de fluencia de partículas.

Para medir la dosis en un medio, es necesario introducir un dispositivo sensible a la radiación dentro de ese medio. Por lo general el detector no está hecho del mismo material que el medio en que queremos medir la dosis.

La teoría de cavidades relaciona la dosis absorbida en el medio del sensor con la dosis en el medio de interés. Para cavidades pequeñas, cuando el alcance de los electrones es mucho mayor que el tamaño de la cavidad, se utiliza el modelo de *Bragg-Gray*.

Se considera una región donde se produce un cambio de medio (det-detector, med-medio). Se supone que a través de esta interfaz se propaga una fluencia ϕ de partículas cargadas (electrones) que es continua en la frontera (no hay retrodispersión). Entonces la dosis en la frontera entre los dos materiales viene dada por:

$$D_{det} = \phi_{det} \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right)_{det} ; D_{med} = \phi_{med} \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right)_{med} \quad (4.40)$$

Donde $\frac{S_{col}}{\rho}$ es el poder de frenado másico por colisión en cada medio material y para la energía correspondiente a las partículas cargadas que se propagan en él. Podemos entonces afirmar que el cociente de las dosis a ambos lados de la frontera verifica:

$$\frac{D_{med}}{D_{det}} = \frac{\phi_{med} \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right)_{med}}{\phi_{det} \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right)_{det}} \quad (4.41)$$

Este planteamiento corresponde a la inserción de una cámara de aire en el seno de un tanque de agua (o maniquí equivalente).

La teoría de *Bragg-Gray* para obtener la dosis en un medio material continuo mediante la inserción de una cavidad está basada en dos hipótesis principales:

1. La cavidad debe ser pequeña comparada con el alcance de las partículas cargadas que inciden sobre ella. De este modo su presencia no perturba la fluencia de partículas cargadas en el medio material.
2. La dosis absorbida en la cavidad se debe únicamente a las interacciones de las partículas cargadas que cruzan (las interacciones de los fotones no contribuyen de modo significativo a la dosis en la cavidad)

Si se asume que la introducción del detector no perturba la fluencia de electrones que existe en el medio, se establece que $\phi_{det} = \phi_{med}$.

Entonces las fluencias de la ecuación (4.41) se pueden expresar:

$$\frac{D_{med}}{D_{det}} = \frac{\left(\frac{S_{col}}{\rho}\right)_{med}}{\left(\frac{S_{col}}{\rho}\right)_{det}} \quad (4.42)$$

Esta ecuación (4.42) se conoce como la relación de poderes de frenado másicos, a menudo expresada simplemente como $S_{med,med}$.

$$S_{med,med} = \frac{D_{med}}{D_{det}} = \frac{\int_0^{E_{max}} \phi_{med} \left(\frac{S_{col}(E)}{\rho}\right)_{med} dE}{\int_0^{E_{max}} \phi_{med} \left(\frac{S_{col}(E)}{\rho}\right)_{det} dE} \quad (4.43)$$

donde ϕ_{med} es la distribución diferencial de fluencia espectral de las partículas cargadas en el medio.

4.9. Rutas dosimétricas.

Las cámaras de ionización se calibran fundamentalmente mediante dos métodos fundamentales para la determinación de la dosis:

1. Protocolos basados en coeficientes de calibración de Kerma de aire en aire.
2. Protocolos basados en coeficientes de calibración de dosis absorbida en agua.

En el segundo método, para la dosimetría de referencia (calibración de haces) en haces clínicos de fotones de alta energía se utiliza el Código de Práctica [IAEA TRS-398] y recomendaciones para la dosimetría relativa. Se basa en un factor de calibración para un dosímetro, en términos de dosis absorbida en agua. Este Código de Práctica se aplica a haces de fotones generados por aceleradores de electrones con energías en el rango de 1 a 50 MeV.

El código establece que la dosis absorbida en agua en la profundidad de referencia, Z_{ref} , en un haz de fotones de calidad Q , y en ausencia de la cámara, viene dada por:

$$D_{w,Q} = M_Q \cdot N_{D,w,Q_0} \cdot k_{Q,Q_0} \quad (4.44)$$

donde M_Q es la lectura del dosímetro, con el punto de referencia de la cámara colocado en Z_{ref} , de acuerdo con las condiciones de referencia dadas en la tabla siguiente (Tabla 4.1), y corregida por las magnitudes de influencia temperatura y presión, calibración del electrómetro, efecto de polaridad y de recombinación de iones, según se describe en la hoja de trabajo. N_{D,w,Q_0} es el factor de calibración del dosímetro, en términos de dosis absorbida en agua, en la calidad de referencia Q_0 , y k_{Q,Q_0} es el factor específico de la cámara que corrige por las diferencias entre la calidad Q_0 de referencia y la calidad real, Q , utilizada.

Tabla 4.1. Condiciones de referencia para la determinación de la calidad del haz de fotones.

Magnitud de influencia	Valor o características de referencia
Material del maniquí	Agua
Tipo de cámara	Cilíndrica o plano paralela
Profundidad de medida	20 g/cm ² y 10 g/cm ²
Punto de referencia de la cámara	Para cámaras cilíndricas en el eje central, en el centro del volumen de la cavidad. Para cámaras plano-paralelas, en la superficie interna de la ventana, en el centro de la misma
Posición del punto de referencia de la cámara	Para cámaras cilíndricas y plano-paralelas, en las profundidades de medida
SSD	100 cm
Tamaño de campo en la SSD	10 cm x 10 cm

Capítulo 5

El código Monte Carlo MCNP (versión 5). Descripción general

5.1. Introducción.

Durante los últimos años y paralelamente al aumento de las prestaciones tecnológicas computacionales, la utilización del método de Monte Carlo en el transporte de radiación ha aumentado significativamente, desde aplicaciones en medicina hasta en protección radiológica [Carter y Cashwell, 1975], [Jenkins et al., 1988], [Lux y Koblinger, 1991].

Esta metodología genera las trayectorias de las partículas reproduciendo aleatoriamente las probabilidades físicas naturales de interacción con el medio. Sin la ayuda de los ordenadores, la estimación precisa de estas magnitudes con métodos de Monte Carlo sería excesivamente laboriosa, debido a la necesidad de producir una gran cantidad de números aleatorios durante el transporte de cada partícula.

Desde las primeras aplicaciones de los métodos de Monte Carlo, se han desarrollado diferentes códigos específicos para resolver estos problemas y facilitar el muestreo y registro de partículas y de magnitudes dosimétricas. La tabla situada a continuación (Tabla 5.1) detalla alguno de los códigos Monte Carlo más ampliamente utilizados junto con una breve descripción de sus características fundamentales. Los paquetes que se mencionan a continuación se ejecutan en diferentes plataformas y sistemas operativos y muchos de ellos están disponibles de forma gratuita a través de los canales oficiales *Radiation Safety Information Computational Center* [RSICC] o *Nuclear Energy Agency* [NEA].

De entre todos estos códigos de Monte Carlo, se ha escogido el MCNP para los cálculos realizados en esta tesis, porque es un código flexible que permite utilizar tarjetas para el modelado de fuentes y geometrías no convencionales, activar o desactivar efectos físicos durante el transporte de partículas y utilizar técnicas de reducción de varianza, así como diferentes registros de magnitudes dosimétricas. Éste código ha sido desarrollado en el *Laboratorio Nacional de Los Álamos* (EEUU), es de acceso público y es distribuido gratuitamente por *Nuclear Energy Agency* (NEA) *Data Bank*.

Tabla 5.1. Características clave de los códigos de Monte Carlo utilizados en aplicaciones terapéuticas de medicina nuclear.

Código Monte Carlo	Descripción general
EGS	<p>El código EGS [Nelson et al. 1985], desarrollado originalmente en el <i>Stanford Linear Accelerator Center</i> en Fortran 77 ANSI estándar y utilizado principalmente para transporte de fotones y electrones en cualquier material y geometrías especificadas por el usuario. Se encuentra estructurado en subrutinas por procesos físicos, lo que facilita el desarrollo de geometrías y de registros. La simulación para los cálculos de dosimetría interna no está específicamente incluida y requiere una gran cantidad de programación de usuario.</p> <p>El código BEAMnrc técnicamente no es un código independiente, pero sí una versión del sistema EGS diseñado para la modelización de máquinas de tratamiento en radioterapia. Principalmente es todavía una herramienta de investigación, que no se ha optimizado para la velocidad.</p>
GEANT	<p>El código GEANT [Agostinelli et al., 2003], simula el transporte de fotones y electrones en cualquier material a través de geometría combinatoria. Aunque programado inicialmente en C++ para el transporte de partículas a altas energías, actualmente se aplica también en el transporte a bajas energías. La simulación para los cálculos de dosimetría interna no está específicamente incluida y requiere una gran cantidad de programación de usuario.</p>
PENELOPE	<p>El código PENELOPE [Baró et al., 1994], desarrollado por la <i>Facultat de Ciències Físiques</i> de la <i>Universitat de Barcelona</i> para el transporte de fotones, electrones y positrones.</p> <p>Basado en el PENELOPE, el código DPM se ha desarrollado específicamente para la planificación rápida de tratamiento de radioterapia.</p>
MCNP	<p>El código MCNP [Briesmaster, 2000], desarrollado en <i>Los Alamos National Laboratory</i> originalmente en Fortran 77 y en Fortran 90 ANSI estándar actualmente, para el transporte de fotones, neutrones y electrones. La simulación para los cálculos de dosimetría interna no está específicamente incluida.</p> <p>El MCNPX incluye transporte de casi todo tipo de partículas para todas las energías y tiene amplio uso en la industria de la energía nuclear y cada vez más en Física Médica.</p>
TIGER	<p>La serie de códigos TIGER [Halbleib et al., 1992], desarrollado en Fortran 77 para el transporte de fotones y electrones.</p>

El código MCNP es un programa de propósito general que puede utilizarse para simular el transporte combinado de neutrones, fotones y electrones en un amplio rango energético. El transporte de las partículas puede simularse en cualquier elemento, compuesto químico o mezcla a partir de las tablas de secciones eficaces para los primeros 100 elementos de la tabla periódica.

El código trata una configuración tridimensional arbitraria de materiales en celdas geométricas limitadas por superficies de primer y segundo grado y toros elípticos de cuarto grado.

Características importantes que hacen del MCNP un código muy versátil y fácil de usar incluyen una poderosa caracterización de la fuente y superficies de origen, una rica colección de técnicas de reducción de varianza y una estructura flexible de registros (*tallies*). Esta versatilidad y el hecho de estar dotado de una física muy completa, lo capacitan para una amplia gama de problemas y lo convierten en uno de los códigos basados en métodos de Monte Carlo de uso más extendido en el ámbito científico y tecnológico.

Además de los documentos propios del código, el número de artículos, libros y publicaciones relacionadas con MCNP5 y sus aplicaciones es enorme (dosimetría con partículas de alta energía, radioterapia, protección radiológica, física de partículas...).

Este capítulo se divide en apartados que explican la estructura del código y las librerías de secciones eficaces. En la sección 5.2 se describe la evolución histórica del código MCNP, enlazando con la descripción de la librería MCPLIB04 de secciones eficaces para fotones y la descripción de la librería EL03 para el transporte de electrones en las secciones 5.3 y 5.4. En la sección 5.5 se describen los registros o *tallies* para la estimación de magnitudes dosimétricas con MCNP. En la sección 5.6 se exponen las condiciones técnicas para la implementación del código durante las simulaciones y por último, el punto 5.7 describe las técnicas de paralelización del código utilizadas.

5.2. El código MCNP5.

El código MCNP (Monte Carlo N-Particle) es un código general de transporte de radiación (fotones, neutrones y electrones) por métodos de Monte Carlo, que permite la estimación de magnitudes dosimétricas, como la corriente, el flujo, la energía depositada o la energía depositada por unidad de masa, normalizadas al número de historias simuladas.

Los primeros códigos Monte Carlo para la simulación del transporte de partículas se desarrollaron a principios de los años 60. Desde entonces, cada vez han sido más utilizados gracias al aumento de velocidad y memoria de los equipos informáticos.

El código MCNP surge en *Los Alamos National Laboratory* a partir de la unión de códigos de transporte de radiación por Monte Carlo. En 1963 se desarrolló el código MCS que resolvía problemas sencillos con neutrones, siendo sustituido por el código MCN en 1965, permitiendo el modelado de geometrías 3D y con las librerías de secciones eficaces almacenadas en ficheros independientes. Posteriormente, en 1973 surgió el código MCNG, que unía el anterior código MCN con el MCG, utilizado en el transporte acoplado de neutrones y fotones a altas energías. En 1977 surge la primera versión del código MCNP, respondiendo al nombre Monte Carlo Neutron Photon, formado por la unión del código MCNG con el código MCP, resolviendo problemas de transporte de fotones y neutrones hasta 1 keV. Desde 1977 el código MCNP ha evolucionado considerablemente, incluyendo desde la versión 4B la serie de códigos TIGER 3.0 (ITS) para el transporte de electrones [Hendricks, 1997].

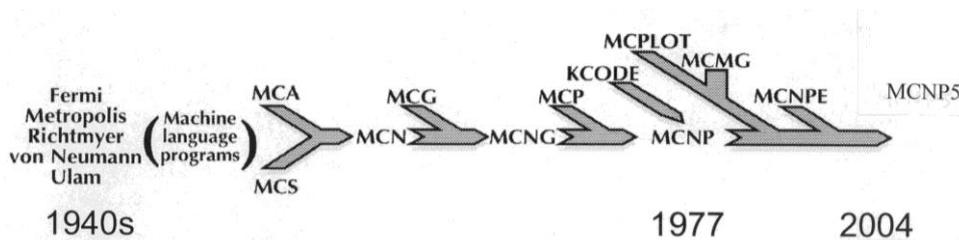


Figura 5.1. Evolución histórica del código MCNP.

En cuanto a la física contemplada en él, para los fotones, el código tiene en cuenta la dispersión coherente e incoherente de los fotones, la posibilidad de emisiones fluorescentes tras la absorción fotoeléctrica, la absorción en la producción de pares con emisión local de radiación de aniquilación, y la radiación de frenado.

Los algoritmos de transporte de electrones del código de transporte MCNP5 Monte Carlo se basan en las de los códigos ETRAN [Stephen M., 1988] y en las series integradas TIGER (ITS) [Halbleib, 1988].

Para la definición de la fuente del problema, el MCNP ofrece gran variedad de recursos que permiten multitud de configuraciones sin necesidad de modificar el código. Es posible establecer funciones de probabilidad independientes para las distintas variables: energía, posición, tiempo, dirección, etc. Además, pueden utilizarse funciones de probabilidad ya definidas en el código. También es practicable especificar una relación de dependencia entre estas variables, como por ejemplo la energía de la partícula y la dirección de emisión.

Por otro lado, el MCNP dispone de librerías de secciones eficaces atómicas y nucleares sustentadas en los valores presentes en *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF), *Evaluated Nuclear Data Library* (ENDL) y *Activation Library* (ACTL) compilados por Livermore, además de las evaluaciones del grupo de investigación *Applied Nuclear Science T-2* de Los Alamos. Todos estos datos están listados en el fichero *XDIR* y son susceptibles de ser seleccionados por el usuario en la ejecución de un caso concreto.

En líneas generales, cuando se programa la entrada al código MCNP relativa a un problema de fotones, se deben incluir los siguientes ingredientes:

- Definición de la geometría del problema.
- Definición de la fuente.
- Definición del tipo de registro o "Tally".
- Definición de los materiales.
- Programación de los parámetros relacionados con la física del problema y las condiciones de simulación.

5.3. Librería de transporte de fotones: MCPLIB04.

El código de Monte Carlo MCNP5 utiliza por defecto la librería MCPLIB04 para el transporte de fotones [White, 2002], basada en la librería EPDL97 para cálculos de transporte de fotones del LLNL (*Lawrence Livermore National Laboratory*), [Cullen et al., 1997]. La librería MCPLIB04 incluye las secciones eficaces de fotones para los elementos con números atómicos $Z=1$ (hidrógeno) hasta $Z=100$ (fermio) en un rango de energías entre 1 keV y 100 GeV .

Para cada elemento, el número de intervalos de energía es variable, por lo que el código interpola logarítmicamente los valores tabulados en el caso de compuestos y mezclas. Esta librería incluye además las energías medias por interacción $H(E)$ (*heating number*) para cada elemento.

5.4. Librería de transporte de electrones: EL03.

La librería EL03 de secciones eficaces y otros datos para electrones está basada en la serie integrada de códigos TIGER (ITS) versión 3.0. El código de Monte Carlo MCNP5 utiliza por defecto la librería EL03 para el transporte de electrones, sustituyendo a la anterior librería EL01, que fue introducida en el código por primera vez en la versión 4C. Esta librería es una ampliación de la anterior librería EL01, basada a su vez en los códigos ITS versión 1.0.

MCNP5 incorpora un modelo de transporte para partículas cargadas condensado (*condensed random walk*), que consiste en dividir la trayectoria de la partícula en pasos y subpasos de energía, condensando el número de sucesos al final del subpaso de forma probabilística (*colisiones duras y blandas*) o determinística (*Bremsstrahlung*).

En algunos códigos de Monte Carlo, el transporte de electrones se realiza bajo la hipótesis CSDA (*Continuous Slowing Down Approximation*), que considera que la pérdida de energía cinética es continua y constante. El rango CSDA o de *Bethe*, que se define como la longitud media de trayectoria

que recorre un electrón con energía E_k en un medio infinito antes de ser absorbido completamente y se calcula como:

$$\lambda_{tot} = - \int_0^{E_k} \frac{dy}{S_{tot}(y)} \quad (5.1)$$

donde S_{tot} es el poder de frenado total del material,

$$S_{tot} = - \frac{dE}{ds} \quad (5.2)$$

El tamaño del paso $\Delta_{S_{tot}}$ bajo la hipótesis CSDA se calcula como:

$$\Delta_{S_{tot}} = \lambda_{tot}(E_k) - \lambda_{tot}(E_{k-1}) = - \int_{E_{k-1}}^{E_k} \frac{dy}{S_{tot}(y)} \quad (5.3)$$

MCNP5 calcula la disminución de energía entre pasos $\Delta E = E_k - E_{k-1}$ como $E_k = \alpha E_{k-1}$, donde $\alpha=2^{1/8}$ es la disminución de energía en cada paso. Como consecuencia de la acumulación de un gran número de colisiones en un paso s , pueden ocurrir fluctuaciones estocásticas en la pérdida de energía (*energy straggling*).

Además, debido a que en el método condensado, la producción de electrones por colisión fuerte (electrones *knock-on*) y fotones de *Bremsstrahlung* y característicos se realiza de forma determinística, la longitud del paso se calcula únicamente a partir de las pérdidas debidas a las colisiones de electrones, es decir, $\Delta_{S_{tot}} = \Delta_{S_{col}}$, siendo:

$$\Delta_{S_{col}} = \lambda_{col}(E_k) - \lambda_{col}(E_{k-1}) = - \int_{E_{k-1}}^{E_k} \frac{dy}{S_{col}(y)} \quad (5.4)$$

donde S_{col} es el poder de frenado debido únicamente a las colisiones de electrones.

MCNP5 calcula esta integral aproximándola como:

$$\Delta_{S_{col}} \cong - \frac{S_{col}(E_k) + S_{col}(E_{k-1})}{S_{tot}(E_k) + S_{tot}(E_{k-1})} \int_{E_{k-1}}^{E_k} \frac{dy}{S_{tot}(y)} \quad (5.5)$$

donde el primer factor representa la fracción de poder de frenado de colisión en el intervalo de energías entre E_k y E_{k-1} .

La pérdida de energía por unidad de longitud se estima como:

$$\epsilon = \frac{\Delta E}{\Delta_{scol}} + \hat{\epsilon} \quad (5.6)$$

donde $\hat{\epsilon}$ es la energía perdida debida a las fluctuaciones, con una función de probabilidad $f(\hat{\epsilon}, \Delta_{scol})$.

Landau estudió la distribución de probabilidad de estas fluctuaciones, expresándola como [Landau, 1944]

$$f(\hat{\epsilon}, \Delta_{scol})d\hat{\epsilon} = \phi(\lambda)d\lambda \quad (5.7)$$

donde

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} e^{\mu \ln \mu + \lambda \mu} d\mu \quad (5.8)$$

siendo x un número positivo que indica la línea de integración de la función.

La variable λ se define como:

$$\lambda = \frac{\hat{\epsilon}}{\xi} - \ln \left[\frac{2\xi m v^2}{(1 - \beta^2) I^2} \right] + \delta_F + \beta^2 - 1 + \gamma \quad (5.9)$$

siendo I el potencial medio de ionización, δ_F la corrección de *Fermi* por efecto de la densidad, γ la constante de Euler, $\beta = v/c$, siendo v la velocidad del electrón, y ξ un parámetro definido como:

$$\xi = \frac{2\pi e^4 N Z}{m v^2} \Delta_{scol} \quad (5.10)$$

donde $N Z$ es la densidad atómica de electrones en el material.

El número de subpasos m se define empíricamente entre $m = 2$ para $\bar{Z} < 6$ y $m = 15$ para $\bar{Z} < 15$, donde \bar{Z} es el número atómico promedio del compuesto, definido como:

$$\bar{Z} = \frac{\sum_i Z_i N_i}{\sum_i N_i} \quad (5.11)$$

calculado para cada material en la subrutina XSGEN.F90 del código, donde N_i es la densidad atómica del elemento i .

MCNP5 calcula el tamaño del subpaso como Δ_{scol}/m , donde únicamente se consideran las pérdidas debidas a colisiones inelásticas fuertes y débiles. La energía al final del subpaso se calcula como $E_j = E_{k-1} - \epsilon \frac{\Delta_{scol}}{m} - \sum_i E_i$, donde E_i es la energía de los fotones producidos por *Bremsstrahlung*, de los rayos X característicos producidos por la ionización del medio y de los electrones producidos

por colisión fuerte. Si al final de algún subpaso $E_j < \alpha E_{k-1}$ la simulación del paso se termina, y se calcula de nuevo la pérdida de energía ϵ del nuevo paso con la energía inicial $E_k = E_j$.

5.5. Tallies o registros dosimétricos en MCNP5.

En una simulación por Monte Carlo, cada partícula emitida por la fuente puede contribuir a la magnitud dosimétrica que se desea estimar, por lo que es necesario registrar cada una de dichas contribuciones. Un registro o *tally* es un contador de las contribuciones producidas por cada historia durante una simulación de Monte Carlo. Se trata de contadores o registros de ciertas magnitudes dosimétricas relacionadas con la corriente de partículas, su flujo y la deposición de energía.

Existe un número limitado de tipos de *tallies* que en combinación con otras posibilidades del código facilitan el cálculo de gran cantidad de magnitudes de interés en este tipo de problemas. En concreto, el código MCNP5 incluye siete *tallies* distintos para la estimación de resultados durante una simulación.

Cada *tally* en MCNP5 funciona de forma particular, registrando una magnitud distinta en situaciones diferentes. De esta forma se clasifican en *tallies* de superficie ($F1$, $F2$), de volumen ($F4$, $F6$, $F7$, $F8$) y puntuales ($F5$). En las primeras, el registro se realiza cada vez que una partícula atraviesa la superficie de control, mientras que las segundas se producen cada vez que la partícula entra y sale del volumen considerado. Las *tallies* puntuales ($F5$, $FIR5$, $FIP5$, $FIC5$) realizan un registro cada vez que una partícula es generada o interacciona físicamente en el modelo. En cada uno de estos sucesos, se realiza el transporte de una pseudopartícula, una partícula virtual que llega al detector en condiciones normales sin ser absorbida en el trayecto y que es eliminada después de registrar su contribución. Un asterisco (*) delante de cada *tally* indica que multiplica el resultado por la energía de la partícula.

La siguiente tabla (Tabla 5.2) recoge su designación, la magnitud que contabilizan y las unidades en que se expresa:

Tabla 5.2. Posibilidades estándares de programación de *tallies* o registros del código MCNP.

Designación	Descripción	Unidad Fn	Unidad *Fn
F1:N F1:P F1:E	Corriente integrada sobre una superficie	Partículas	MeV
F2:N F2:P F2:E	Flujo promediado en una superficie	Partículas/cm ²	MeV/cm ²
F4:N F4:P F4:E	Flujo promediado en una celda	Partículas/cm ²	MeV/cm ²
F5:N F5:P	Flujo en un punto o en un anillo detector	Partículas/cm ²	MeV/cm ²
F6:N F6:N,P F6:P	Energía media depositada en una celda	MeV/g	jerks/g
F7:N	Energía de fisión media depositada en una celda	MeV/g	jerks/g
F8:P F8:E F8:P,E	Distribución de pulsos de energía creados en un detector	Pulsos	MeV
F8:E	Deposición de carga	Carga	N/A

Las formulaciones concretas de los contadores o registros más relevantes desde el punto de vista del presente trabajo son:

- **Tally deposición de carga.**

El registro de altura de pulsos proporciona la distribución de energía de pulsos creados en una celda que representa un detector. También puede proporcionar la deposición de energía en una celda. El recuento de altura de pulsos es análogo a un detector físico. Los rangos de energía del *tally* F8 corresponden a la energía total depositada en un detector en los canales especificados por cada partícula física (historia).

En una configuración experimental, se supone que una fuente emite 100 fotones de 10 MeV, y diez de ellos alcanzan la celda del detector. Además, se supone que el primer fotón (y cualquiera de su progenie creado en la celda) deposita 1 keV en el detector antes de escapar, los segundos depositan 2 keV, y así sucesivamente hasta el décimo fotón que deposita 10 keV. A continuación, la medición de altura de pulso en el detector sería un pulso en el rango de energía de 1 keV, 1 pulso en el rango de energía de 2 keV, y así sucesivamente hasta 1 pulso en el rango de energía de 10 keV. En el recuento de altura de pulsos del MCNP, a la celda de origen se le acredita la energía por el peso de la partícula de origen. Cuando una partícula cruza una superficie, se resta la energía multiplicada por el peso de esta partícula al recuento de la celda que abandona y se agrega al recuento de la celda en la que está entrando. La energía es la energía cinética de la partícula más $2m_0c^2 = 1.022016$ MeV, si la partícula es un positrón. Al final de la historia, el recuento en cada celda de *tally* está dividido por el peso de la fuente.

La energía resultante determina en qué intervalo de energía se debe colocar la puntuación. El valor de la puntuación es el peso de fuente para un recuento de *tally* F8 y el peso de la fuente multiplicado por la energía si se trata de un recuento del *tally* *F8.

El valor del registro es cero si ninguna partícula entró en la celda durante la historia.

Otro aspecto del recuento de la altura de pulsos que es diferente de otros recuentos del código MCNP es que, F8:P, F8:E y F8:P,E son equivalentes. Toda la energía de los fotones y electrones, si está presente, será depositada en la celda, no importa que se especifique en el recuento.

- **Tally de flujo.**

El *tally* F4 se trata de un estimador de la longitud de la trayectoria del flujo de una celda.

Si se tienen en cuenta que el flujo de una partícula se puede definir como:

$$\Phi(\vec{r}, E, t) = v \cdot N(\vec{r}, E, t) \quad (5.12)$$

donde v es la velocidad de desplazamiento de la partícula y $N(\vec{r}, E, t)$ es la densidad de partículas o, lo que es lo mismo, el peso de la partícula W por unidad de volumen V , la integral del flujo queda:

$$F4 = \iiint_{V t E} \Phi(\vec{r}, E, t) \cdot dE \cdot \frac{dV}{V} = W \cdot v \cdot \frac{t}{V} = \frac{W \cdot T_l}{V} \quad (5.13)$$

Siendo T_l la longitud de traza de la partícula. MCNP calcula la integral sumando los valores

$\frac{W \cdot T_l}{V}$ de todas las partículas que atraviesan una celda.

- **FMESH**

La tarjeta FMESH permite definir una malla superpuesta a la geometría del problema y establecer el recuento en cada uno de los *voxels* generados. Los resultados se escriben en un archivo de salida independiente, con el nombre predeterminado MESHTAL. Por defecto, el recuento de malla calcula la estimación del flujo de partículas, promediada sobre una celda de la malla, en unidades de *partículas/cm²*. Si un asterisco precede a la tarjeta FMESH, se registra en unidades de MeV/cm².

- **Tarjetas DE/DF (DEn Dose Energy Card / DFn Dose Function Card)**

Estas tarjetas permiten al usuario introducir una función de respuesta que multiplique el flujo previamente calculado en un resultado dosimétrico introduciendo una función de respuesta (tales como los factores de conversión de flujo-a-dosis) en función de la energía para modificar un recuento regular. Si se introduce el coeficiente másico de absorción lineal de energía (μ_{en}/ρ) en las tarjetas DE/DF y se calcula el flujo medio energético en un volumen (*tally *F4*), el resultado será la dosis media absorbida en dicho volumen por el material considerado. Ambas tarjetas deben tener el mismo número de entradas numéricas y deben aumentar monótonamente en energía. Por defecto el MCNP utiliza una interpolación *log-log* entre los puntos.

5.6. Los métodos de reducción de varianza en MCNP5.

Una simulación de Monte Carlo análoga (AN) es aquella en la que se utilizan las probabilidades naturales para el transporte de partículas, en contraposición a la simulación no-análoga, en la que las probabilidades naturales se modifican para conseguir un mayor número de contribuciones y reducir por tanto el error relativo. Una técnica de reducción de varianza (TRV) es un método general que aumenta el número total de contribuciones efectivas en una simulación de Monte Carlo.

Una de las máximas preocupaciones del usuario del código es lograr tiempos de ejecución más o menos breves obteniendo resultados cuya validez no quede en entredicho. En problemas en los que el muestreo de partículas en la región objeto de estudio resulta más bien escaso por la propia configuración geométrica y energética del caso, para conseguir una buena estadística se requiere el uso de técnicas de reducción de varianza, que disminuyen el tiempo de computación necesario para obtener resultados de suficiente precisión. En definitiva, se trata de seguir las historias de las partículas "interesantes" en detrimento de las "no interesantes", de realizar una selección de partículas conforme a su contribución a la magnitud que se quiere estimar.

MCNP dispone de diversas técnicas de reducción de varianza (TRV) que si se emplean de forma adecuada pueden mejorar la eficiencia del cálculo. Se clasifican en:

- **Métodos de Corte.** Son los más sencillos y se fundamentan en suprimir aquellas partes del espacio fásico que no contribuyen significativamente a la solución. El MCNP incluye:
 - *Energy cutoff.* Se establece un valor de energía de corte de manera que cuando la energía de una partícula cae por debajo de ese valor, su historia finaliza automáticamente.

- *Time cutoff*: Cesa el seguimiento de una partícula cuando el tiempo que se le ha dedicado excede un valor simple introducido por el usuario y válido para todo el problema.
- **Métodos de control de la población**. Combinan las técnicas de multiplicación de partículas y ruleta rusa en el espacio físico, ya sea realizando una selección geométrica, ya sea estableciendo unos intervalos energéticos de interés. La alteración del número de partículas conlleva una modificación en relación inversa del peso de las mismas. Se tiene:
 - *Geometry splitting with Russian roulette*: cada región del espacio recibe un peso o importancia representada por un número real positivo.
La importancia de una celda es un parámetro que se utiliza para ayudar a las partículas a moverse de una región a otra, siguiendo importancias mayores.
Cuando las partículas se mueven en una dirección de interés, es decir, pasan de una región de importancia menor a otra de importancia mayor, su número es multiplicado para mejorar su muestreo modificando su peso en relación inversa al factor multiplicador. Por el contrario, cuando se mueven en una dirección menos importante son eliminadas o seguidas con probabilidad relacionada con la pérdida de importancia producida al atravesar los límites entre regiones.
Así, cuando una partícula de peso w atraviesa una superficie que define dos celdas con importancias imp_1 e imp_2 , puede ocurrir que:
 - Si $imp_2 > imp_1$, la partícula se dividirá en n partículas de peso w/n , siendo $n=imp_2/imp_1$ el cociente de importancias.
 - Si $imp_2 < imp_1$, la partícula sufrirá una ruleta rusa con una probabilidad de ser eliminada de $p = 1-(imp_2/imp_1)$. Si la partícula sobrevive, su peso será w/n , siendo $n = imp_1/imp_2$.
 - Si $imp_2=0$, la partícula es aniquilada al entrar en la nueva celda.
 La forma de asignar importancias a las distintas regiones puede realizarse de forma manual a partir de la experiencia y los conocimientos del usuario, o de forma automática recurriendo al recurso de MCNP "*Weight Window Generator*".
 - *Energy splitting with Russian roulette*. Es una técnica análoga a la anterior solo que en este caso la división o eliminación de partículas se produce en función de la energía y no de la región del espacio en que se encuentran.
 - *Weight window*: se trata de una técnica de reducción de varianza que aplica la estrategia división/ruleta rusa de manera selectiva con dependencia espacial y de la energía. A grandes rasgos consiste en definir un intervalo delimitado por W_u y W_l de manera que las partículas cuyo peso se encuentre entre dos valores no sufrirán reducción de varianza alguna. Partículas cuyo peso sea superior a W_u son divididas en varias partículas con peso dentro del intervalo de ejecución normal. Por el contrario, las partículas cuyo peso no alcance el valor mínimo W_l , sufrirán Ruleta Rusa y, en caso de supervivencia, su nuevo peso será W_s .

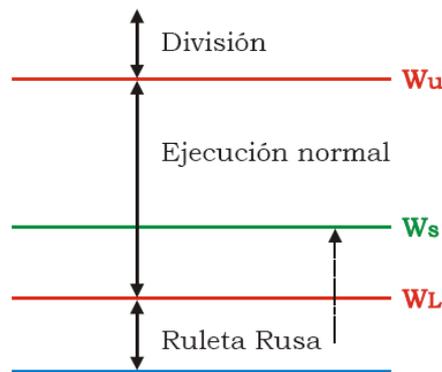


Figura 5.2. Esquema de la forma de operar la técnica de reducción de varianza *Weight Window* o “Ventana de Peso”.

- **Interacción implícita (SB)**

La interacción implícita o *Survival Biasing* (SB) es una TRV que consiste en reducir el peso de la partícula en lugar de eliminarla después de una absorción por efecto fotoeléctrico. Si esta técnica está activa durante la simulación, se reduce el número de partículas que son absorbidas por efecto fotoeléctrico. El peso w_j de la partícula después de la interacción implícita con el elemento i se estima como:

$$w_j = w_0 \left(1 - \frac{\sigma_{ph,i}}{\sigma_{t,i}} \right) \quad (5.14)$$

donde w_0 es el peso antes de la captura, $\sigma_{ph,i}$ es la sección eficaz microscópica por efecto fotoeléctrico y $\sigma_{t,i}$ es la sección eficaz microscópica total.

MCNP tiene dos modelos físicos diferentes de interacción para el transporte de partículas: simple y detallado. El modelo simple ignora el efecto *Rayleigh* o dispersión coherente y la generación de fotones de fluorescencia por efecto fotoeléctrico, activando la interacción implícita durante el transporte de fotones. Este modelo se encuentra activo por defecto para fotones con energías mayores de 100 MeV. El modelo detallado, además de incluir los anteriormente citados efectos, utiliza los factores de forma y los perfiles *Compton*, usados para tener en cuenta la energía de ligadura del electrón al átomo, en la dispersión incoherente. Además, considera el ensanchamiento *Doppler* en la energía de escape del fotón en la dispersión *Compton*. El modelo detallado se encuentra activo por defecto para fotones con energías inferiores a 100 MeV.

La tarjeta PHYS:p permite seleccionar el tipo de modelo físico que se desea utilizar en las simulaciones. La interacción implícita solo se encuentra activa en el modelo simple, que por defecto sólo se utiliza para energías mayores a 100 MeV. Sin embargo, el modelo detallado incluye efectos físicos que pueden ser importantes a bajas energías. Para evitar esto, se ha activado un modelo simple a energías mayores de 1 keV, activando la variable NOCOH (dispersiones coherentes) de dicha tarjeta para producir los efectos deseados.

Cuando la interacción implícita está activa puede ocurrir que existan partículas interaccionando en el modelo con un peso cada vez menor sin ser absorbidas. De este modo, la interacción implícita se utiliza con alguna técnica de control de pesos, como puede ser el *weight cutoff*.

- **Contribución a detector puntual (PD)**

La tarjeta PD controla el número de contribuciones de determinadas celdas del modelo al resultado de un *tally* estimada con un detector puntual (*point detector*). De esta forma, se pueden eliminar o reducir las contribuciones de las celdas menos importantes al resultado final, reduciendo el tiempo de simulación.

- **Métodos de modificación del muestreo.** Modifican el muestreo estadístico del problema para elevar el número de partículas por registro o *tally*. El muestreo se realizaría con distribuciones probabilísticas que enviaran partículas en la dirección deseada, o a otras regiones del espacio físico como la energía, el tipo de colisión, el tiempo, etc. Entre ellos se tiene:

- *Transformada exponencial:* Actúa haciendo que la partícula se mueva en una dirección preferente reduciendo artificialmente la sección eficaz macroscópica en dicha dirección, y aumentándola en otras direcciones.
- *Captura implícita:* También denominada “supervivencia condicional y “absorción mediante reducción de peso”. Las partículas nunca son absorbidas sino que sobreviven a esta reacción con un peso menor.
- *Colisión forzada:* Se aplica a una celda donde se quiere evaluar alguna magnitud y consiste en dividir todas aquellas partículas que entran en esa región en dos partes: una colisionada y otra no colisionada, asignando a cada parte un peso. La primera de las fracciones es obligada a colisionar, la segunda abandona la celda.

La interacción forzada o *forced interaction* (FCL) es una TRV que aumenta el número de interacciones en celdas específicas. Sin embargo, esta técnica se puede utilizar para modelar de forma más precisa la atenuación en celdas de espesores muy pequeños. Esta técnica se activa por celdas, y divide a las partículas que penetran en la celda en dos partes: directa y dispersa.

La parte directa atraviesa la celda sin sufrir ninguna interacción, y su peso w_j se estima como:

$$w_j = w_0 e^{-\mu(E_t)\Delta'} \quad (5.15)$$

donde w_0 es el peso inicial de la partícula al entrar en la celda, y $\mu(E_t)$ es el coeficiente de atenuación del material de la celda a la energía incidente E . La distancia entre bordes de la celda en la dirección de la partícula se expresa como $\Delta' = \Delta'/w$, donde w es el coseno director del fotón con el eje Z en el momento de la incidencia.

La parte dispersa, con un peso inicial

$$w_j = w_0(1 - e^{-\mu(E_t)\Delta'}) \quad (5.16)$$

interacciona en la celda a una distancia x en la dirección de incidencia

$$x = -\mu^{-1} \ln[1 - \xi(1 - e^{-\mu(E_t)\Delta'})] \quad (5.17)$$

siendo ξ un número aleatorio entre $[0,1]$.

La tarjeta FCL permite activar la interacción forzada en las celdas según el usuario.

- *Condicionamiento de la fuente*: Cualquiera de las variables de definición de la fuente radiactiva puede ser condicionada para que se produzcan más partículas, con la correspondiente adecuación de su peso, dentro de los regímenes de interés de cada variable: energía, dirección, etc.
- **Método del adjunto**. En un proceso de transporte de radiación, las interacciones de los fotones con la materia pueden ser descritas por la ecuación integro-diferencial de *Boltzmann* [Bell y Glasstone, 1970]. Los fotones que se originan en el cabezal de un acelerador lineal se caracterizan por la posición, la dirección y la energía. Estos fotones provocan interacciones en sus caminos hacia el cuerpo del paciente, tales como el efecto fotoeléctrico, dispersión Compton y producción de pares. Finalmente, la dosis total en la región de interés se determina multiplicando el flujo de fotones en esta región por la función de la conversión de flujo a dosis correspondiente e integrando sobre todas las variables independientes (la posición, la dirección y la energía).
La ecuación de transporte adjunto [Bell y Glasstone, 1970] describe la propagación de los fotones adjuntos desde la región de interés con una posición, dirección y energía determinada por la función de respuesta (flujo a dosis). Los fotones adjuntos son transportados de manera similar a los fotones usuales, salvo que ellos están “retrocediendo” y realmente ganan energía en lugar de perderla.
El flujo adjunto en un punto del espacio de fase es la contribución a la dosis en la región de interés de un fotón emergente desde ese mismo punto del espacio de fase.
Por lo tanto, la dosis total en la región de interés puede calcularse multiplicando la función de la fuente, que se caracteriza por el espectro del cabezal del *Linac*, por el flujo adjunto e integrado para todas las variables independientes (convolución de la función de la fuente externa con el flujo adjunto).
Puesto que los cálculos de dosis en Monte Carlo consumen mucho tiempo, cualquier planificación de tratamiento basada en Monte Carlo debe ser lo más eficiente posible mediante el seguimiento sólo de los fotones 'más importantes' que contribuyen más a la dosis en la región de interés, haciendo caso omiso de los menos importantes. En un cálculo de Monte Carlo adjunto, la mayor parte del tiempo de cómputo es utilizado en seguir a los fotones adjuntos a través de las regiones con altos flujos adjuntos, que son las regiones con mayores contribuciones a la dosis (al operador adjunto también se le denomina función Importancia). Sin embargo, durante un cálculo de Monte Carlo normal, la mayor parte del tiempo de cómputo se utiliza siguiendo los fotones y electrones a través de las regiones en el espacio de fase que se caracterizan por flujos altos. Lamentablemente, algunos de estos flujos altos no contribuyen a la dosis final. En otras palabras, los flujos altos no siempre significan altas contribuciones a la dosis y por lo tanto, se desperdicia el tiempo de cálculo. En resumen, los cálculos de Monte Carlo adjunto centran la importancia en el muestreo y realizan un seguimiento de los fotones que tienen mayores contribuciones a las dosis, por tanto, la relevancia física esencial del método adjunto es ser más eficiente que la simulación tradicional [Wang, 2005].

5.7. Paralelización del código.

Por su naturaleza, los métodos basados en Monte Carlo son aditivos. Esto se hace más evidente en los algoritmos de cálculo de dosis, ya que los resultados se obtienen a través de la suma de las dosis depositadas por las sucesivas historias simuladas. Esta aditividad simplifica el proceso de aplicar un enfoque de cálculo en paralelo.

Una implementación posible de un enfoque en paralelo en un sistema ya existente basado en Monte Carlo, implica considerar entre otras cosas: un método de división de la cantidad de cálculos a

realizar, un sistema para administrar estos cálculos entre las diferentes unidades disponibles y un programa integrador de resultados.

Este trabajo está pensado para sistemas con múltiples procesadores y logra como resultado una disminución del tiempo de cálculo muy próxima a la relación inversamente proporcional a la cantidad de procesadores utilizados, lo cual es esperable en este tipo de estrategias de múltiples procesadores.

El software MCNP es utilizado por el grupo de investigación desde hace más de 10 años, y actualmente se encuentra instalado en las máquinas *Aldebaran*, *Hyades* y *Pleiades* del ASIC (Área de Sistemas Computacionales) de la Universidad Politécnica de Valencia, utilizando los protocolos de paralelización, *MPI* y *PVM* respectivamente y pudiéndose utilizar de esta manera hasta 16 CPUs en paralelo. Por otro lado, el código MCNP también está instalado en *Bellatrix*, un cluster de 28 nodos en servicio en el grupo de investigación SENUBIO del Instituto de Seguridad Industrial Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM) de la UPV.

Capítulo 6

Materiales y métodos

6.1. Descripción de la metodología.

El uso del método Monte Carlo para simular el transporte de radiación se ha convertido en uno de los medios más precisos para la predicción de las distribuciones de dosis absorbida y otras cantidades de interés en el tratamiento de los pacientes de cáncer con radioterapia externa. Además, con el rápido desarrollo de la tecnología informática, la planificación de los tratamientos para radioterapia basada en Monte Carlo se está convirtiendo en algo más asequible [Nahum, 1988]. Si se conocen con suficiente precisión las leyes físicas que tienen lugar y se tiene acceso a los recursos informáticos suficientes, se puede calcular la respuesta a cualquier problema físico bien modelizado. Afortunadamente, se conocen bien las leyes físicas necesarias para la mayoría de las aplicaciones en radioterapia y dosimetría. Además se cuenta con los recursos informáticos necesarios para las aplicaciones de esta tesis, ya que se pueden ejecutar con precisión suficiente en los *clusters* con que cuenta el grupo de investigación.

Esta confluencia de la teoría y la capacidad computacional pone el método de Monte Carlo en la caja de herramientas estándar de los físicos médicos, especialmente si están involucrados en la investigación.

El objetivo de la radioterapia es aplicar una dosis absorbida muy precisa a un volumen bien definido manteniendo la mínima dosis absorbida en los tejidos sanos circundantes, especialmente los órganos altamente radiosensibles. La incertidumbre en la dosis suministrada al paciente debe ser inferior a 3-5% (1 desviación típica) (ICRU 1976). Sin embargo, se ha reconocido que en algunos casos, por ejemplo, en el tratamiento paliativo, mayores incertidumbres son aceptables (Wambersie 2001). Hoy en día, algunos algoritmos basados en Monte Carlo para la planificación de tratamiento de haces de electrones están comercialmente disponibles, pero la mayoría de los algoritmos de haces fotones en los sistemas de planificación de tratamiento comerciales todavía se basan en modelos analíticos de diversa complejidad.

Este capítulo pretende demostrar la potencia y la utilidad del método Monte Carlo tanto en su utilización como sistema de planificación, así como para calcular indirectamente el espectro de emisión de los aceleradores lineales. Se presentan a continuación los materiales y métodos utilizados en el desarrollo de esta tesis y se divide en tres apartados diferentes.

El primero de estos apartados describe detalladamente la modelización con el código Monte Carlo *MCNP5* de la unidad de radioterapia *Elekta Precise* utilizada en el Hospital Clínic Universitari de València. Este modelo se ha simulado en diferentes condiciones clínicas de irradiación: diferente energía del haz, diferentes tamaños de campo, así como utilizando distintos detectores. En concreto, se describe la modelización de la geometría de la unidad de radioterapia así como las condiciones particulares de la simulación del transporte de partículas que atraviesan el cabezal hasta llegar al detector situado en la cuba de agua. Se detallan los elementos más importantes utilizados en el desarrollo del modelo de simulación del cabezal del acelerador, así como la descripción de la modelización de los elementos específicos utilizados para recoger los valores de dosis: detectores y

cuba de agua. Se introduce también el procedimiento de obtención de las medidas experimentales en el Hospital Clínic Universitari de València.

Los dos capítulos siguientes 6.3 y 6.4 describen dos metodologías diferentes e independientes para la reconstrucción del espectro de un haz primario de fotones de 6 MeV emitido por el cabezal de irradiación médico *Elekta Precise*.

La determinación de la forma funcional de la distribución en energías de la radiación emitida por un tubo de rayos X o un acelerador lineal, usualmente denominada “espectro de fotones”, es una necesidad permanente y cada vez más exigente en muchas áreas de la ciencia y la tecnología.

En concreto, la reconstrucción del espectro de fotones es de especial importancia en el control de calidad de los aceleradores lineales médicos a raíz de la publicación del Real Decreto sobre criterios de calidad en radioterapia, (REAL DECRETO 1566/1998) por el que se establecen los criterios de calidad en radioterapia, [BOE 206: 29383-29394] que incluye entre las pruebas necesarias para fijar el estado de referencia, y entre las que deben realizarse en el control de calidad diario de un acelerador de electrones, la verificación de la energía del haz de radiación, tanto para los haces de fotones como de electrones, y establece en ambos casos una tolerancia de 2 mm o una variación equivalente en el rendimiento de la dosis absorbida medido a la profundidad del 50%.

A tales efectos existen métodos directos e indirectos para determinar la forma espectral, descritos en numerosas publicaciones de revistas especializadas. [Nisbet *et al*, 1993], [Desobry y Boyer, 1991], [Rogers *et al.*, 2002], [Faddegon *et al*, 1990], [Landry y Anderson, 1991], [Bloch *et al.*, 1998], [Archer *et al.*, 1985].

La determinación directa de un espectro de rayos X implica colocar un detector de alta resolución en energías en la trayectoria del haz o realizar una determinación secuencial con un cristal que dispersa el espectro en longitudes de onda.

Los inconvenientes con estos métodos directos de espectrometría aparecen cuando los flujos de radiación son intensos en un corto periodo de tiempo, como es el caso de los aceleradores lineales médicos, ya que se puede producir la saturación de los detectores, el apilamiento de pulsos y daños por radiación.

La saturación tiene lugar cuando el tiempo muerto de éste se hace mayor a medida que aumenta la tasa de recuento de eventos. Para radiación elevada, la electrónica de los detectores es incapaz de generar un pulso eléctrico para cada fotón que alcanza el detector, produciéndose una pérdida considerable de cuentas asociadas a ese punto que puede acabar incluso en un fenómeno de saturación del detector por apilamiento de impulsos.

Por otro lado existe un consenso generalizado de que la reducción del flujo de radiación en varios órdenes de magnitud a los utilizados en una aplicación determinada de un acelerador lineal, pueden alterar las condiciones de funcionamiento del mismo, por lo cual los protocolos existentes recomiendan que las mediciones espectrales deban realizarse en las condiciones reales de operación.

Considerando este hecho, los capítulos 6.3 y 6.4 explican el trabajo que se ha desarrollado en búsqueda de un método alternativo para calcular el espectro del haz de fotones de un acelerador lineal basado en utilizar medidas indirectas.

La reconstrucción del espectro ha sido estudiada mediante dos metodologías independientes, y descritas en los apartados siguientes.

La primera metodología de reconstrucción del espectro descrita en el apartado 6.3 consiste en el análisis de la dispersión de un haz de fotones de 6 MeV, la segunda metodología estudiada se basa en la deconvolución del espectro, y se describe en los apartados 6.4.

6.2. Modelización del funcionamiento de la unidad de radioterapia *Elekta Precise*.

La simulación del transporte de fotones y electrones que se desplazan a través del cabezal de la unidad de radioterapia *Elekta Precise*, (desde el blanco de la fuente hasta llegar al detector localizado en una cuba de agua), ha requerido la modelización con un alto nivel de detalle de todos los componentes que conforman el cabezal de irradiación.

Para ello, el modelo del acelerador lineal médico *Elekta Precise* se ha definido de acuerdo a las especificaciones dimensionales y composiciones químicas de los materiales proporcionadas por el fabricante [*Elekta*].

La figura siguiente (Figura 6.1) muestra el plano del cabezal de energía dual (6 y 15 MeV) del acelerador lineal *Elekta Precise* en el que se observa la posición del colimador principal, el filtro aplanador, el filtro de cuña y los colimadores secundarios. La configuración de cabezal varía según el modo de operación seleccionado, haces de electrones o haces de fotones. Esta última además permite diferenciar entre haces de 6 y 15 MeV. Para el haz de alta energía, el filtro aplanador de alta energía (que se muestra a la izquierda de los ejes del haz en el diagrama) debe utilizarse junto con el filtro aplanador de baja energía, que es el objeto sólido justo por encima de la cámara de ionización [*Elekta Oncology Systems*].

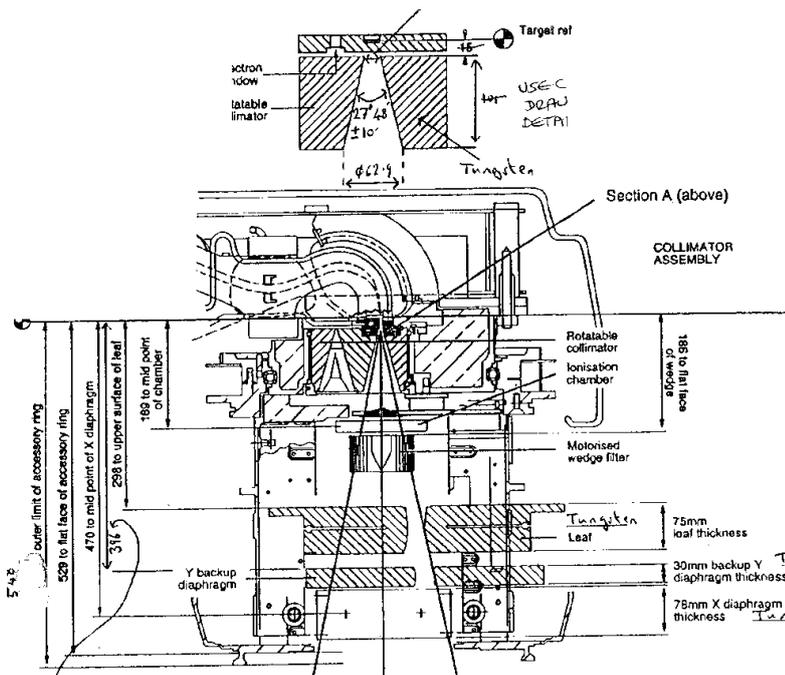


Figura 6.1. Diagrama del cabezal de tratamiento de energía dual de un acelerador *Elekta Precise* (*Elekta Oncology Systems*).

El modelo desarrollado en este trabajo incluye la salida del haz para el modo de operación de fotones de baja energía, 6 MeV.

El modelo incluye además el colimador multiláminas. En él, las láminas de tungsteno están montadas entre el filtro de cuña y los colimadores secundarios.

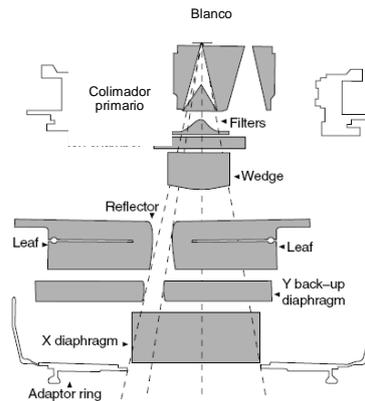


Figura 6.2. Diagrama del cabezal multiláminas *Elekta*.

6.2.1. Simulación del cabezal de irradiación.

La imagen del cabezal de radioterapia simulado (Figura 6.3) representa detalladamente la configuración geométrica del cabezal para un haz de fotones de baja energía modelizada con MCNP5. En esta figura se puede observar el bloque de la fuente para la obtención de fotones, el colimador primario de aleación de tungsteno con el puerto de baja energía, el montaje de la cámara de ionización y el conjunto de la autocuña, el cual incluye la cuña y el plato de retrodispersión.

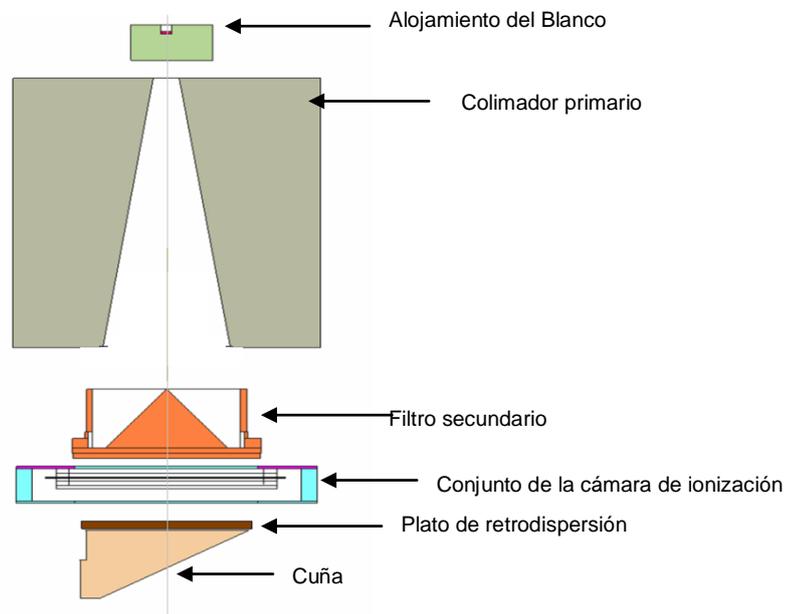


Figura 6.3. Vista esquemática de la geometría modelizada con MCNP5 del cabezal del acelerador lineal médico *Elekta Precise* para un haz de fotones de 6 MeV.

Se describen a continuación todos los detalles de la simulación.

6.2.1.1. Espectro de emisión.

El espectro energético de un haz de fotones generados por *Bremsstrahlung* no es monoenergético. A pesar de que los haces de electrones generados en un acelerador lineal son prácticamente monoenergéticos, el haz de fotones generado presenta un espectro continuo cuya energía máxima es igual a la energía de los electrones incidentes. La energía media del haz de fotones resultante es aproximadamente un tercio de la energía máxima.

Los haces de fotones externos se caracterizan según sus parámetros físicos y se clasifican de acuerdo a su origen, medio de producción y energía. En el caso de un acelerador lineal médico, el origen de los haces de fotones son los rayos X producidos por el bombardeo de un blanco de tungsteno con electrones. Los rayos X provenientes del blanco irradiado consisten en fotones *Bremsstrahlung* y fotones característicos.

Una de las principales dificultades para simular un haz de tratamiento es el desconocimiento del espectro de electrones que es generado en la ventana de vacío del sistema de la guía de ondas del acelerador lineal. La energía de los electrones deriva de la potencia nominal seleccionada en la unidad de radioterapia, sin embargo, no puede suponerse que todos los electrones emergentes tienen exactamente una energía de 6 MeV cuando el *Linac* se define para producir un haz nominal de 6 MV de fotones [Keall et al., 2003].

La distribución inicial de electrones, $\Psi(E, x, y, \theta, \phi)$ justo antes del blanco y conocida su posición z es una función 5-dimensional, que puede ser descrita por las variables E , la energía cinética; x e y , las posiciones laterales (z es fijo), θ el ángulo polar y ϕ , el ángulo acimutal. La densidad de corriente del haz de electrones antes del blanco tiene un pico centrado con colas de distribución gaussiana [Jaffray et al., 1993].

La estrategia adoptada, por lo general, para estimar el espectro de electrones es deducir, mediante un proceso de ensayo y error, el valor de la energía del electrón que da el mejor acuerdo entre las curvas de dosis en profundidad en una cuba de agua obtenidas por simulación y las medidas experimentales.

Para ello, se configura una distribución de intensidad de los electrones incidentes y se simula su choque con el blanco. Utilizando el espectro resultante se recoge por simulación la curva de dosis en profundidad en el eje central y se compara con las curvas experimentales. Se trata de un proceso iterativo en el que se ajusta progresivamente la distribución de intensidad de los electrones para producir el mejor acuerdo entre las curvas de dosis en profundidad medidas y simuladas.

Este proceso se puede perfeccionar mediante un estudio de incertidumbre y sensibilidad en el que se definen dos variables de distribución uniforme (la media y la dispersión de la distribución de los electrones incidentes en el blanco), las cuales se varían de manera aleatoria dentro de unos rangos definidos para preparar una batería de casos. La simulación de todos estos casos y el análisis de sus resultados permiten determinar cuál de las curvas de dosis en profundidad generadas con cada caso es la que mejor se aproxima a la curva de dosis experimental, [SUSA], [Juste, 2011b].

Karzmark [Karzmark et al., 1993] estudió el ángulo inicial en el transporte de un haz típico de electrones y se fija el valor de aceptación en 0.06–0.3 grados. Este ángulo es muy cercano a 0, con lo que en la simulación se asume que el haz es monodireccional.

El valor proporcionado por el fabricante *Elekta* para la distribución energética de los electrones es una distribución gaussiana de media 6.3 MeV y dispersión la anchura a mitad de la altura máxima (FWHM, de sus siglas en inglés *Full Width at Half Maximum*) 0.11 MeV.

Se ha simulado el choque de un haz monoenergético de electrones provenientes de la guía de ondas con la distribución energética mencionada que incide con este blanco de tungsteno localizado en el "target block" y se ha recogido el espectro *Bremsstrahlung* después de éste.

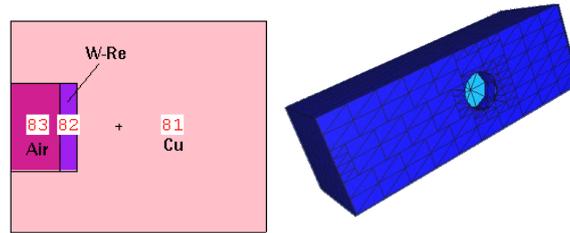


Figura 6.4. Modelo geométrico del bloque del alojamiento del blanco.

Los cálculos de Monte Carlo para una fuente puntual de electrones monodireccional sobre el blanco han determinado que el espectro de fotones obtenido coincide en gran medida con el espectro calculado para una misma máquina por *Sheik-Bagheri y Rogers* [*Sheik-Bagheri y Rogers, 2002*], tal y como muestra la figura (Figura 6.5), donde el resultado de la simulación en la que los electrones inciden sobre el blanco de tungsteno se ha comparado con el espectro de fotones ofrecido por *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Estos autores realizaron el estudio de los espectros para diferentes energías de diversos aceleradores.

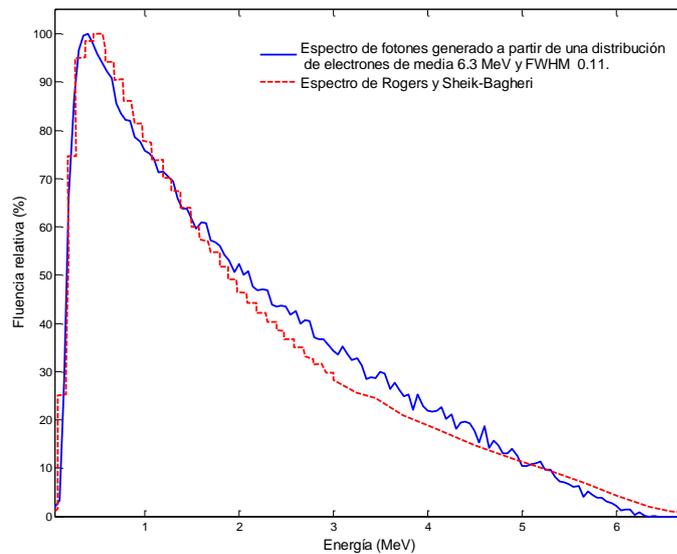


Figura 6.5. Espectro de energía de fotones de 6 MV.

El espectro de fotones de 6 MeV de energía utilizado en las simulaciones de la primera parte de la tesis, en las que el objetivo principal es la validación del modelo *MCNP5* del cabezal, es el espectro calculado por *Sheik-Bagheri y Rogers*, cuya distribución se muestra en la figura (Figura 6.5), y ha sido validado.

Una de las pocas herramientas disponibles hoy en día para evaluar la precisión de un espectro reconstruido es comparar las curvas de dosis en profundidad en cuba de agua utilizando un modelo Monte Carlo que incluya el espectro calculado con las curvas experimentales obtenidas para ese

mismo haz. Esto requiere un conocimiento preciso de la geometría del cabezal y los materiales de los componentes. En este trabajo, esta información se obtuvo en parte del manual del acelerador, pero en su mayoría de correspondencia directa con el fabricante.

Debido a que los fabricantes de aceleradores lineales se muestran normalmente muy reticentes a dar datos sobre los espectros de las máquinas que diseñan, y la breve información que suministran está sujeta a severas condiciones de confidencialidad, y dado que el espectro del haz de fotones emitido es algo propio de cada acelerador y del ajuste final realizado durante la instalación, la correcta simulación del acelerador *Elekta Precise* del Hospital Clínic Universitari de València requiere un cálculo independiente del espectro con el fin de verificar si la utilización del espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers* es una solución fiable. Es por esta razón que la segunda parte de la tesis se centra en reconstruir el espectro emitido por un *Linac*.

6.2.1.2. Sistema de colimación.

La figura siguiente (Figura 6.7) presenta la geometría del cabezal modelizado. Este apartado detalla la modelización desarrollada de todos los componentes que conforman la colimación del cabezal de irradiación. Tal y como se ha mencionado, el modelo del acelerador lineal médico *Elekta Precise* se ha definido de acuerdo a las especificaciones dimensionales y composiciones químicas de los materiales proporcionadas por el fabricante.

El modelo detallado incluye el bloque del alojamiento del objetivo o blanco (*target*), el blanco, el colimador primario, el filtro aplanador, la cámara de ionización, la cuña, el plato retrodispersor, y las mordazas.

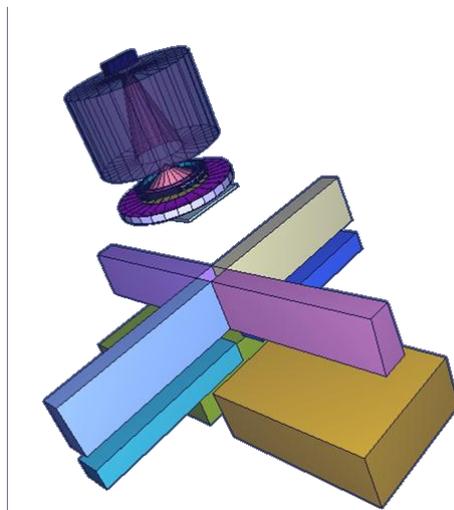


Figura 6.6. Renderizado tridimensional de la geometría del cabezal modelizada con MCNP5, [Vised].

El modelo del *Linac* de uso clínico desarrollado en esta tesis, presenta un sistema de colimación del haz de fotones constituido por diferentes dispositivos:

- **Colimador primario:** Este colimador determina el máximo tamaño de campo (circular) posible mediante una colimación cónica ubicada dentro de un bloque blindado con tungsteno, con los lados de la apertura cónica alineada con el filtro aplanador, de un lado, y con el blanco, por el otro. El espesor del blindaje de tungsteno está determinado de modo que se consiga atenuar la intensidad del haz primario (canal de energía efectiva) al 0.1%. La figura

inferior (Figura 6.7) presenta la estructura modelizada del colimador primario del *Elekta Precise*.



Figura 6.7. Colimador primario.

- Filtro aplanador:** El filtro aplanador sirve para homogeneizar en la dirección transversal el haz resultante del proceso de *Bremsstrahlung*. Atenúa el haz fundamentalmente por el centro, debido a su forma aproximadamente cónica. Debido a que los aceleradores lineales producen electrones con energías en el rango de los MeV, el haz de fotones que se origina está dirigido hacia adelante en forma de lóbulo. Para que este haz sea uniforme a través del campo de tratamiento, se inserta un filtro aplanador de acero (densidad 7.9 g/cm^3). Así, los perfiles de dosis son uniformes y prácticamente planos, y de esta manera se mejora la distribución de dosis en el paciente homogeneizando la radiación que emerge del blanco, tal y como se detalla en la siguiente figura (Figura 6.8).

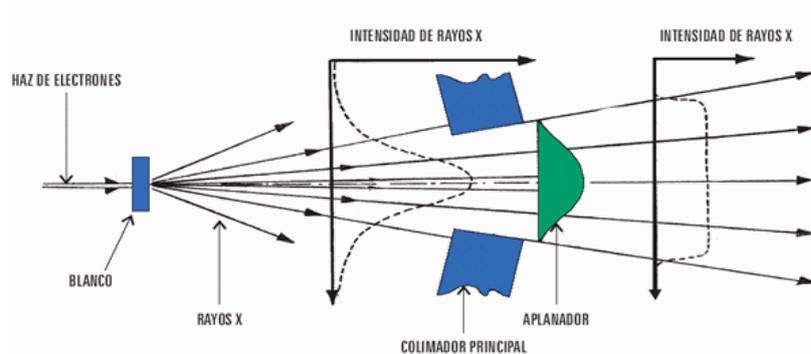


Figura 6.8. Perfil de dosis con filtro aplanador.

En la figura siguiente (Figura 6.9) se observa el modelo geométrico del filtro utilizado en las simulaciones MCNP.

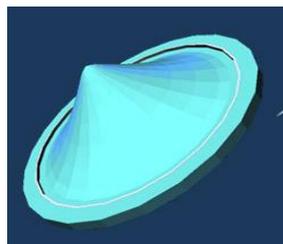


Figura 6.9. Filtro aplanador.

- **Cámara de ionización:** Se ha modelizado la cámara de ionización sobre la cual incide el haz de fotones plano. En la práctica clínica habitual, esta cámara tiene la función de monitorizar la tasa de dosis, la dosis integrada y la simetría del campo. Se ha incluido en el modelo con el fin de generar una simulación más realista teniendo en cuenta la posible influencia que esta cámara pudiera tener en la configuración del haz.

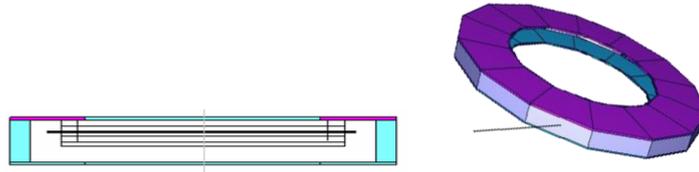


Figura 6.10. Cámara de ionización para monitorización del haz.

- **Colimador de múltiples láminas (MLC *multileaf collimator*).** Permite un control computarizado que facilita la implementación y consigue producir haces modulados según cada paciente. Esta tecnología está siendo aprovechada para la implementación de técnicas de radioterapia por intensidad modulada (IMRT). El *Elekta Precise* modelizado cuenta con 40 láminas a cada lado, es decir, 80 en total, cubriendo tamaños de campo hasta los 40 cm x 40 cm a 100 cm de la fuente [Juste, 2010c].

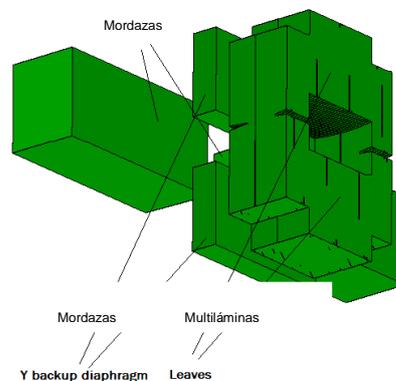


Figura 6.11. Vista inferior del colimador multiláminas.

En las simulaciones realizadas, las láminas configuran haces cuadrados para campos de diferentes tamaños de campo cuadrados. Las láminas son de una aleación de metal duro compuesta por tungsteno mayoritariamente, con níquel y hierro y su geometría se ha modelizado se acuerdo a las especificaciones del fabricante, según la figura (Figura 6.12).

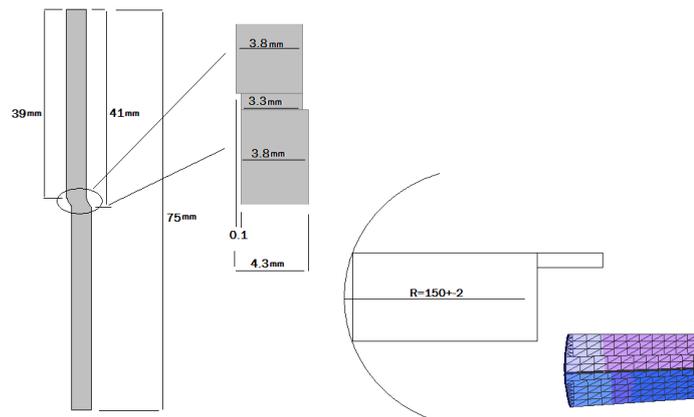


Figura 6.12. Geometría modelizada de las láminas.

- Colimadores secundarios móviles (mordazas):** Estos colimadores, también llamados diafragmas, determinan el tamaño del campo de radiación emergente. Este sistema consiste en cuatro bloques de tungsteno, dos formando la colimación superior, y dos formando la colimación inferior, de tipo “mordazas”. El sistema de colimación secundario proporciona tamaños de campo rectangulares en el isocentro del *Linac* con dimensiones que van desde algunos milímetros hasta unos 40 cm de lado. El espesor de las mordazas superiores es de 3 cm, mientras que las inferiores tienen un espesor de 7.8 cm. Las simulaciones que se analizan en esta tesis incorporan estos colimadores configurando unos tamaños de campo de 5 cm x 5 cm, 10 cm x 10 cm, 15 cm x 15 cm, 20 cm x 20 cm, 30 cm x 30 cm, y 40 cm x 40 cm.

6.2.2. Simulación de la cuba de agua.

La modelización de la cuba de agua irradiada por el cabezal del *Elekta* que se ha realizado permite comparar los datos experimentales de dosis medidos en hospital con los calculados mediante la simulación, y de esta manera validar el modelo.

La descripción computacional de la cuba de agua se basa en las dimensiones reales de ésta [Scanditronix Wellhofer], 50 cm x 50 cm x 50 cm.

Se ha estudiado la fiabilidad del modelo utilizando la cuba llena de agua (condiciones de homogeneidad) e incluyendo en el interior de la cuba una pieza de plástico para conocer la eficacia de la tecnología Monte Carlo en zonas de interfase. La caracterización de la absorción de dosis en un tejido de baja densidad se ha realizado introduciendo en la cuba una pieza de poliestireno extruido (97% aire y 3% poliestireno) con una densidad de 0.0311 g/cm³ y con dimensiones 30 cm x 10 cm x 8 cm.

La superficie de la cuba de agua ya sea en condiciones de homogeneidad o heterogeneidad (cuando incluye la pieza de poliestireno) se sitúa a 100 cm de la fuente.

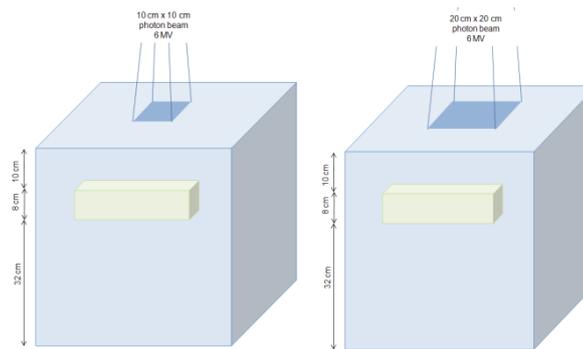


Figura 6.13. Cuba de agua.

6.2.3. Registros.

La estimación de la variación de la dosis relativa con respecto a la profundidad de la cuba y en sentido transversal se ha obtenido a partir de los resultados de los *tallys*. El registro de la energía depositada desde la superficie de la cuba hasta el fondo de ésta nos permite obtener el mapa de la distribución tridimensional de dosis.

Por un lado se ha utilizado el *tally* *F8, obteniendo los resultados de deposición de energía en unidades de MeV por *voxel* y posteriormente es convertido a dosis relativa. En el código MCNP este *tally* es el de distribución pulso-altura en el detector modificado a unidades de energía (designado como *F8:P,E).

La obtención de resultados de distribución de dosis tridimensional en el interior de la cuba con este *tally* requiere la voxelización de la cuba en numerosas celdas pequeñas. Los puntos de registro se han situado en el interior de cada *voxel*. Concretamente, se ha dividido en *voxels* de 1 cm³, exceptuando los 2 cm más superficiales de la cuba de agua, donde la profundidad de los *voxels* se ha reducido a 1 mm con objeto de poder reproducir con mayor fidelidad la zona del *Build up*.

Por otro lado, se ha empleado además el *tally* FMESH (*tally* 4). La tarjeta FMESH permite definir una malla de *tallies* F4 sobre la geometría de la cuba de agua y obtener la distribución de dosis promediado en su interior. La conversión de los resultados del fichero de salida a Gy requiere la aplicación de las tarjetas DE y DF, la primera para definir los intervalos de energía y la segunda el factor de conversión de flujo a dosis correspondiente a cada uno de los intervalos [NIST].

6.2.4. Física de la simulación.

El transporte de la radiación ha tenido en cuenta la contribución de los electrones y fotones que atraviesan la unidad. Además, se ha considerado un tratamiento detallado de la física, incluyendo efecto fotoeléctrico con la producción de la fluorescencia, dispersión incoherente y coherente y la producción de pares en el rango de energía entre 0.001 y 7 MeV.

El corte de energía para el seguimiento de los fotones es de 0.001 MeV (el valor fijado por defecto en el MCNP5). Sin embargo, puesto que simular las trayectorias de los electrones requiere un largo tiempo computacional, con objeto de reducirlo, se ha seleccionado un corte de energía para el transporte de electrones de 0.01 MeV. El recorrido libre medio en agua de los electrones de esta energía es inferior al tamaño de *voxel* fijado en la simulación (de 1 a 10 mm).

En el código MCNP la energía umbral de producción de electrones secundarios y la energía de corte de transporte son iguales y denotan por *electron cutoff*. Se puede acelerar la velocidad de la

simulación mediante el aumento del *cutoff* porque se producen menos electrones secundarios y también porque los electrones necesitan, en promedio, menos pasos hasta su absorción local. El rango de corte de la energía de los electrones debe ser pequeña en comparación con el tamaño de voxel.

6.2.5. Otros parámetros de la simulación.

La simulación ha incluido un espacio de las fases para reducir el tiempo de cálculo. Este método, hoy muy extendido [Libby et al., 1999], [Mazurier, 1999], [Van der Zee y Welleweerd, 1999], [Siebers et al., 1999], [Bramoullé, 2000], [Sempau et al., 2002], [Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002], [Tzedakis et al., 2004], [Serrano, 2006], consiste en dividir la simulación del transporte de las partículas en dos etapas: una primera etapa común a todas las simulaciones con un mismo tamaño de campo y una segunda etapa variable según el objeto final de irradiación. En la primera etapa las partículas son seguidas a través del cabezal de irradiación del acelerador y quedan registradas aquellas que cruzan el plano de registro colocado a la salida del colimador secundario.

Este plano de espacio de fases se utiliza, posteriormente, como fuente de irradiación secundaria y se siguen entonces las partículas, en el objeto irradiado, para el cálculo de las distribuciones de dosis. Este método permite una ganancia de tiempo de cálculo total considerable, sin compromiso en términos de precisión. Las partículas almacenadas, ya sean fotones, electrones, que llegan a dicho plano en un fichero informático que se conoce como el fichero del espacio de fase (*phase-space file*). La información recopilada incluye el tipo de partícula, su energía, posición y dirección de movimiento.

La geometría modelizada del *Elekta* ha sido simulada en dos etapas para ahorrar coste computacional. En una primera etapa se ha simulado la incidencia de $2 \cdot 10^{11}$ fotones para generar un archivo de espacio de fase justo a la salida del colimador. En la segunda etapa se realiza la simulación del transporte de todas las partículas almacenadas en el archivo de espacio de fase hasta la cuba de agua incluyendo el transporte a través de ésta. Las partículas almacenadas se utilizan hasta 100 veces en la segunda etapa de la simulación, mediante un resamdeo de números aleatorios a partir de las partículas almacenadas en el archivo de espacio de fase.

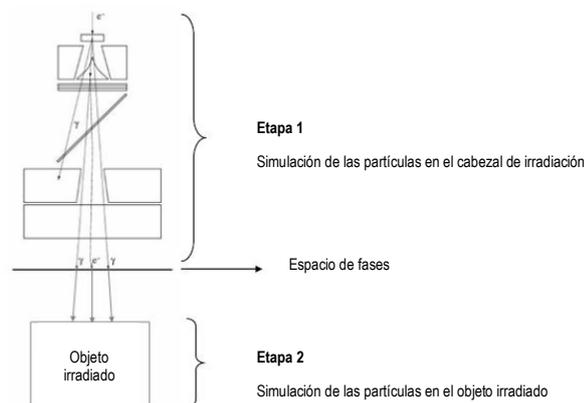


Figura 6.14. Simulación del transporte de radiación en dos etapas.

6.2.6. Datos experimentales.

Las curvas experimentales de dosis relativa en profundidad en el eje central del campo y las curvas de perfil en la cuba de agua irradiada se han obtenido seleccionando un haz de fotones de 6 MeV y utilizando unos tamaños de campo de 5 cm x 5 cm, 10 cm x 10 cm, 15 cm x 15 cm, 20 cm x 20 cm, 30 cm x 30 cm y 40 cm x 40 cm, localizándose la superficie del agua de la cuba a 100 cm de distancia del blanco.

En la fotografía situada a continuación (Figura 6.15) se observa la instalación del *Elekta Precise* y la cuba de agua utilizada en la parte experimental de este proyecto.



Figura 6.15. Cabezal del acelerador lineal *Elekta* y la cuba de agua del Hospital Clínic Universitari de València.

La cuba de agua motorizada empleada en la toma de medidas es el modelo *RFA-300 Water Phantom* de *Scanditronix Wellhofer* [Scanditronix Wellhofer]. Tiene unas dimensiones de 50 cm x 50 cm x 50 cm y consiste en una robusta construcción de acero inoxidable, la cual cuenta con un sistema de posicionamiento preciso de los detectores en su interior. Para ello, la cuba cuenta con una guía motorizada en la que se sitúa una cámara de ionización y se desplaza realizando barridos a gran velocidad a lo largo y ancho de la cuba, permitiendo obtener de esta manera las curvas de dosis en profundidad y perfil respectivamente.



Figura 6.16. Guía y cámara de ionización.

La cámara de ionización utilizada para adquirir los datos, (Figura 6.16) es capaz de registrar la carga eléctrica generada por los fotones y electrones que llegan a ella al interactuar con el gas que hay en

su interior. En concreto, la cámara cilíndrica utilizada en los barridos realizados por el interior de la cuba de agua para la adquisición de dosis relativa se trata de la cámara de ionización FC65-P *Scanditronix-Wellhofer RK*, con un volumen activo de 0.12 cm^3 [*Scanditronix-Wellhofer*].

Todo el sistema de adquisición y tratamiento de datos está controlado por el software *Omnipro Accept*® [*Omnipro Accept*].

Las medidas de dosis en la cuba de agua en condiciones de heterogeneidad se han realizado con una pieza de poliestireno extruido con dimensiones $30 \text{ cm} \times 10 \text{ cm} \times 8 \text{ cm}$.

En la figura siguiente (Figura 6.17) se observa una imagen de la cuba de agua *RFA-300* utilizada en el proyecto con la pieza de poliestireno extruido situada en su interior. Esta pieza se ha colocado a 10 cm de profundidad según la dirección de entrada del haz en la cuba.

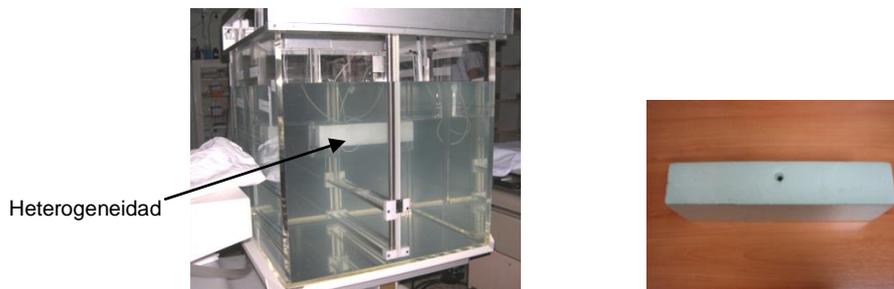


Figura 6.17. RFA-300, cuba de agua con heterogeneidad utilizada en el proyecto.

6.2.6.1. Curvas relativas de dosis en el interior de la cuba.

Se presentan a continuación las curvas de dosis en profundidad medidas en el eje central de la cuba de agua homogénea y el perfil a 25, 50 y 300 mm de la superficie para un haz de fotones de 6 MeV.

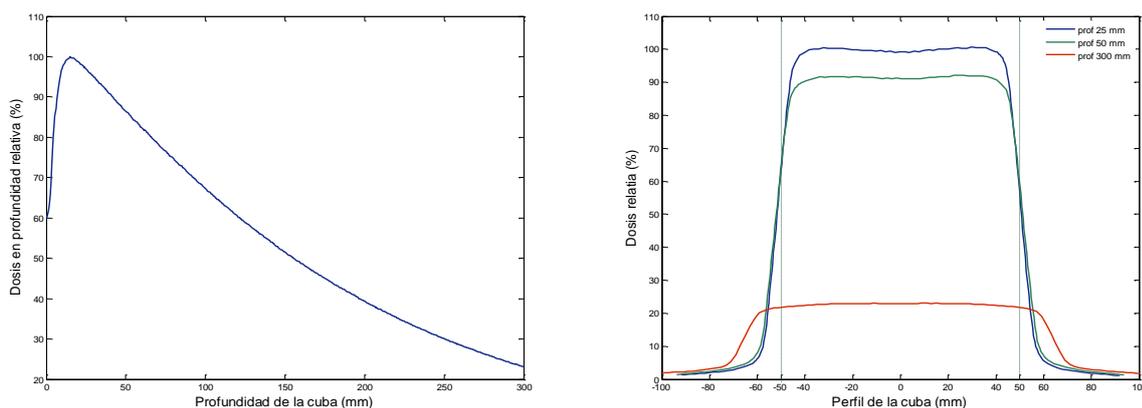


Figura 6.18. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua para un tamaño de campo de irradiación $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$ y un haz de fotones de 6 MeV.

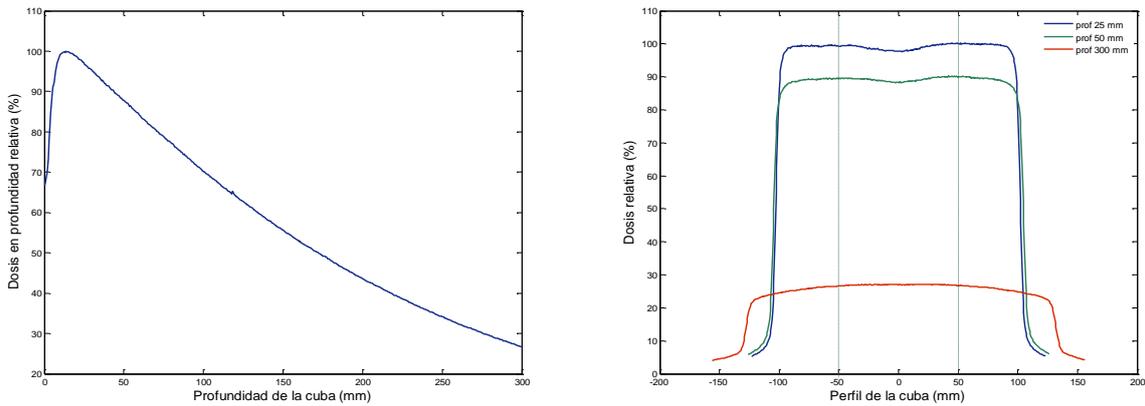


Figura 6.19. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua para un tamaño de campo de irradiación 20 cm x 20 cm y un haz de fotones de 6 MeV.

Se presentan a continuación las curvas de dosis en profundidad medidas en el eje central de una cuba de agua heterogénea (incluye pieza de poliestireno extruido) y el perfil a 25, 50 y 300 mm de la superficie para un haz de fotones de 6 MeV. Las bandas verdes que incluyen las imágenes de las curvas de dosis en profundidad así como la zona punteada de las curvas en perfil, indican la posición de la heterogeneidad en la cuba de agua.

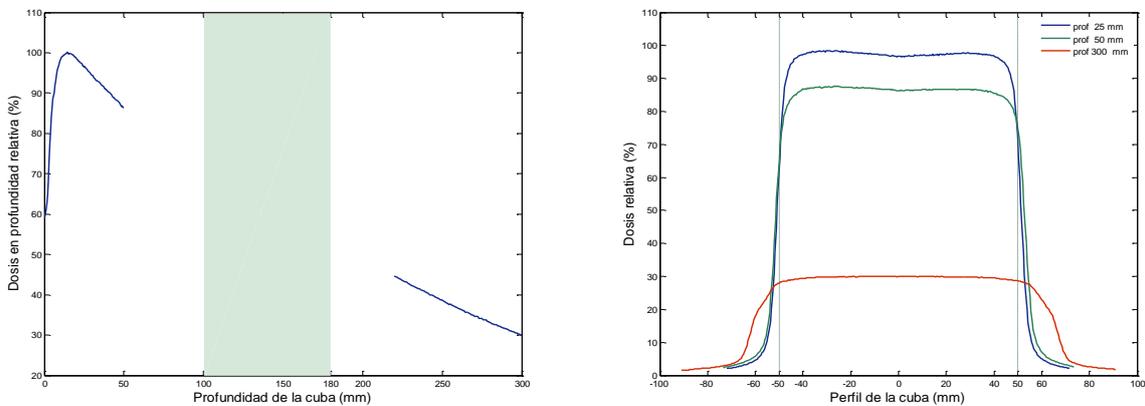


Figura 6.20. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua heterogénea para un tamaño de campo de irradiación 10 cm x 10 cm y un haz de fotones de 6 MeV.

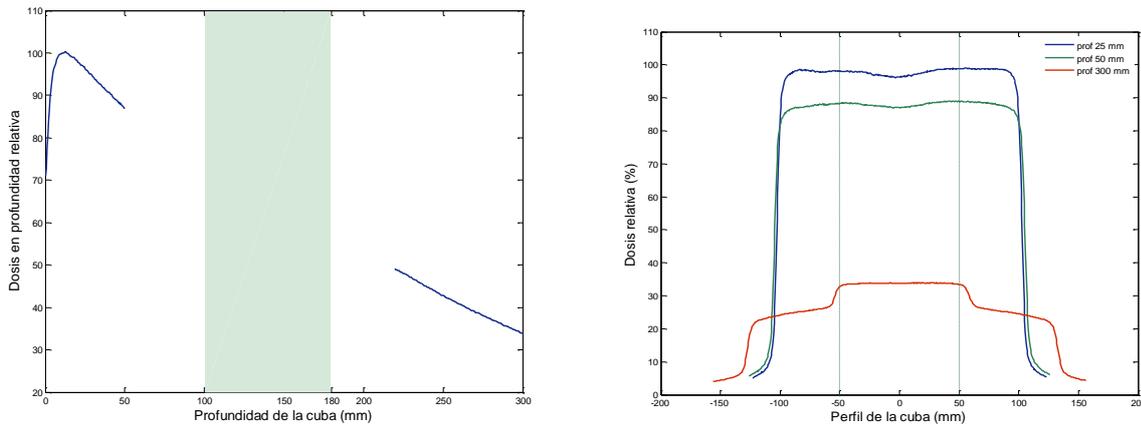


Figura 6.21. Curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua heterogénea para un tamaño de campo de irradiación 20 cm x 20 cm y un haz de fotones de 6 MeV.

6.2.6.2. Valores absolutos de dosis en el interior de la heterogeneidad.

Puesto que en el interior de la heterogeneidad no puede realizarse un barrido con el detector situado en la guía tal y como se realiza en la zona de agua de la cuba, se ha situado la cámara en el interior de diversos agujeros practicados a la heterogeneidad y se han tomado medidas absolutas utilizando la cámara de ionización *Farmer Type Chamber FC65-P (IC 69) Scanditronix Wellhoffer* de 0.65 cm³ [Scanditronix]. Utilizando diferentes piezas de poliestireno, tal y como indica la figura (Figura 6.22), podemos obtener cinco medidas de dosis en el interior de la heterogeneidad.



Figura 6.22. Piezas de poliestireno utilizadas en las medidas absolutas.

La dosis absorbida en cada uno de los agujeros practicados en las heterogeneidades fue obtenida a partir de la media de tres medidas realizadas, con el fin de obtener un valor representativo de carga registrada en la cámara de ionización. Se tomaron además medidas absolutas en algunos puntos del eje central en profundidad de la cuba, con el fin de tener referencias con las cuales normalizar las curvas de valores absolutos obtenidas.

Para calcular la dosis a partir de las medidas de ionización se ha seguido el protocolo de dosimetría *IAEA TRS-398* [IAEA TRS-398] descrito en el apartado 4.10. Este protocolo, que incluye un código práctico de referencia para dosimetría en un acelerador lineal, se basa en factores de calibración en términos de dosis absorbida en agua para la mencionada cámara de ionización para un haz de 6 MeV.

Según los datos facilitados por los radiofísicos del Hospital Clínic Universitari de València, y de acuerdo al certificado de calibración del Laboratorio de Metrología de Radiaciones Ionizantes y del Laboratorio de Patrones Nacionales para Radiaciones Ionizantes, el coeficiente de calibración de dosis para el acelerador lineal es $N_{Dw}=4.761$ cGy/nC, siendo φ es el factor de corrección por presión y temperatura, el cual corrige las lecturas por presión y temperatura con respecto a las condiciones climáticas de referencia T_0 y P_0 .

Tabla 6.1. Coeficiente de calibración de dosis para el acelerador lineal Elekta Precise del Hospital Clínic Universitari de València.

Presión $\rho=994/997$ mbar	$\varphi=1.035$ Factor de corrección por presión y temperatura	$N_{Dw}=4.761$ cGy/nC Coeficiente de calibración de dosis para el acelerador lineal
Temperatura $T=25^\circ\text{C}$		

La dosis se calcula como: $Dosis(\text{cGy}) = M_u \cdot \varphi \cdot N_{Dw}$, donde M_u es la lectura directa del electrómetro en nanoCulombios.

Puesto que los protocolos de dosimetría proporcionan un conjunto de factores de corrección para convertir ionización en dosis sólo para medios acuosos, las medidas de dosis tomadas con la cámara de ionización en la región de la heterogeneidad necesitan un factor de corrección. Para obtener este factor, se ha aplicado la teoría de la cavidad de *Bragg-Gray* [Mayles *et al.*, 2007], [Frank, 1986] donde la dosis absorbida en el medio se relaciona con la absorbida en agua mediante:

$$D_{agua} = D_{het} \cdot S_{agua,hct} \quad (6.1)$$

$S_{agua,hct}$ es la relación de poder de frenado agua-medio promediado en el espectro de energía de los electrones primarios.

El valor de $S_{agua,hct}$ se calcula:

$$S_{agua,hct} = \frac{\int_0^{E_{max}} (\Phi_E)_m \left(\frac{S}{\rho}\right)_{agua} dE}{\int_0^{E_{max}} (\Phi_E)_m \left(\frac{S}{\rho}\right)_{het} dE} \quad (6.2)$$

donde Φ_E es la fluencia de fotones, y $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{agua}$ y $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{het}$ es los poder de frenado para el agua y el poliestireno respectivamente.

La descripción de la teoría de la cavidad de *Bragg-Gray* y el protocolo de dosimetría aplicado en las medidas experimentales se encuentra explicada más detalladamente en los apartados 4.8 y 4.9.

La curva siguiente (Figura 6.23) presenta la representación de las medidas experimentales absolutas realizadas en el agua de la cuba y en la heterogeneidad normalizadas el valor máximo del *Build up*.

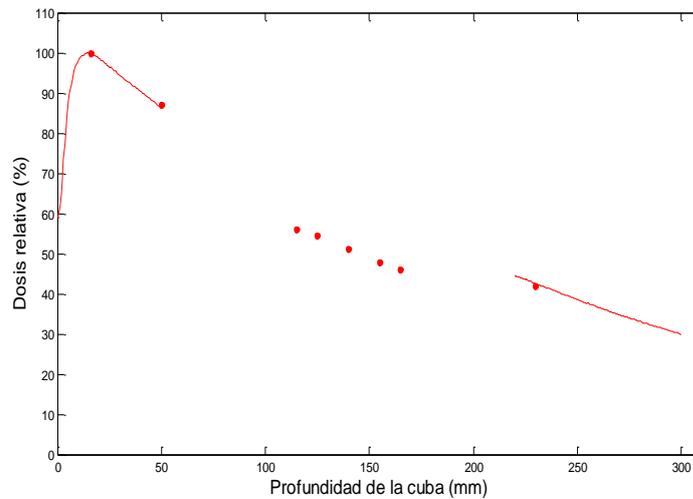


Figura 6.23. Medidas experimentales absolutas realizadas en el interior de la heterogeneidad de la cuba de agua. Tamaño de campo de irradiación 10 cm x 10 cm y haz de fotones de 6 MeV.

6.2.7. Curvas extraídas del Planificador.

El cuerpo humano está compuesto de huesos y tejidos de densidades distintas y por lo tanto, diferente comportamiento ante la absorción de radiación. Además, el tejido sano y los tumores responden de manera diferente a la radiación y la radiosensibilidad del tejido sano a menudo limita la dosis que se puede administrar al volumen a irradiar.

Los sistemas de tratamiento de radioterapia externa requieren optimizar la dosis en la zona de tratamiento y reducirla al mínimo en los tejidos sanos circundantes. Pese a que recientemente los sistemas comerciales de planificación de tratamiento en radioterapia han mejorado de manera importante, todavía presentan ciertas limitaciones en la estimación de las distribuciones de dosis en medios heterogéneos.

Debido a la complejidad del cálculo que implica la dispersión de fotones, especialmente en medios heterogéneos, los algoritmos de uso clínico suelen emplear ciertas aproximaciones. Hoy en día, las metodologías más utilizadas para calcular distribuciones de dosis son los métodos semiempíricos basados en la medida directa de un número reducido de funciones tales como *TAR* (*Tissue to Air Ratio*), *TPR* (*Tissue Phantom Ratio*), *PDD* (*Percent Dose Depth*) y *OF* (*Output Factor*), que se relacionan mediante algoritmos definidos para poder calcular la dosis en diversas condiciones de la medida.

Probada su validez y sobre todo gracias a su reducido coste computacional, estos métodos se han situado, actualmente, como los más utilizados.

Una limitación fundamental de estas aproximaciones es que no se tiene en cuenta la pérdida del equilibrio electrónico cerca de las interfases de los medios heterogéneos. Por lo tanto, cuando se encuentran presentes materiales de densidades diversas, especialmente en regiones de baja densidad (donde la contribución de electrones secundarios es mayor que en el agua) la diferencia en dosis calculada es debida a la incapacidad de estos algoritmos de considerar el desequilibrio electrónico lateral.

Esta estimación puede alterar la dosis aplicada durante el tratamiento. El informe 24 de ICRU [ICRU 24] sugiere que la estimación de la dosis recibida por el tumor debe encontrarse dentro de un margen

de error de $\pm 5\%$. Con el fin de verificar si las distribuciones estimadas por el planificador cumplen esta normativa, se ha utilizado la simulación Monte Carlo y medidas experimentales.

En este trabajo se ha utilizado un software comercial de planificación extensamente usado en las clínicas españolas para la planificación de tratamiento en radioterapia, PCRT 3D [Técnicas radiofísicas]. La geometría de la cuba fue modelizada usando el software del sistema de planificación de tratamiento bajo las mismas condiciones de irradiación que las utilizadas para tomar los datos experimentales.

La validación del sistema de planificación de tratamiento se ha realizado comparando las estimaciones de las curvas de dosis en profundidad con los resultados de Monte Carlo. Las curvas siguientes (Figura 6.24) muestra la dosis relativa en profundidad en el eje central de la cuba de agua extraída del software comercial de planificación comercial de tratamiento PCRT 3D.

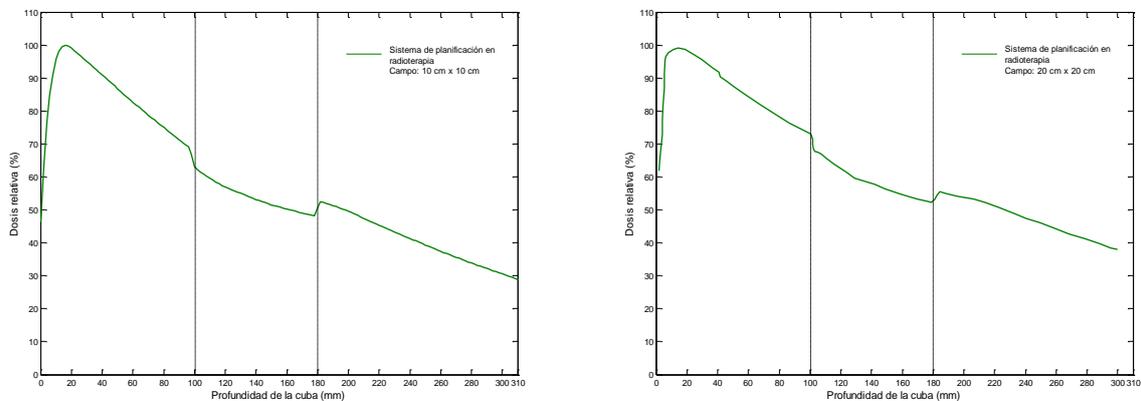


Figura 6.24. Dosis relativa en profundidad calculada a partir del planificador.

6.3. Cálculo del espectro por análisis de la dispersión.

La necesidad de un método práctico y sencillo para la determinación del espectro de energía de un haz de fotones emitido por un acelerador lineal médico se ha estudiado por diferentes autores [Baker et al., 1995], [Nisbet et al., 1998], [Partridge, 2000], [Piermattei et al., 1990]. Un método de estas características proporcionaría los medios necesarios para una mejor precisión dosimétrica en el tratamiento, una verificación de la calidad periódica del haz y la optimización de los dispositivos electrónicos de imagen portal.

Una amplia gama de técnicas (véase por ejemplo [Nisbet et al., 1993] y [Desobry y Boyer, 1991]) se han propuesto para determinar el espectro *Bremsstrahlung* emitido por un Linac: técnicas que van desde la modelización analítica utilizando el modelo de Schiff [Desobry et al., 1991] hasta la elaboración de simulaciones Monte Carlo [Rogers et al., 2002]. Otras técnicas de reconstrucción del espectro han utilizado datos empíricos de radiación medidos por espectrometría (por ejemplo, [Faddegon et al., 1990] o [Landry y Anderson, 1991]). La reconstrucción a partir de medidas experimentales o bien a partir de cálculos dosimétricos, por lo general a partir de curvas de dosis en profundidad [Bloch et al., 1998], [Archer et al., 1985], [Nisbet et al., 1998], son otras metodologías conocidas.

Los sistemas de planificación de tratamiento tridimensional que se comercializan usan potentes algoritmos de convolución o de Monte Carlo que requieren un conocimiento preciso del espectro del haz para llevar a cabo adecuadamente los sofisticados cálculos de dosis que implican heterogeneidades, pérdida del equilibrio de partículas cargadas y posibilidad de modificación de las características del haz [Baker et al., 1995], [Piermattei et al., 1990].

El método Monte Carlo tradicionalmente se ha utilizado para modelizar la geometría del cabezal de los *Linac*, además de para simular el gran número de electrones que golpean el blanco de la fuente, generando un espectro de fotones *Bremsstrahlung*. El uso generalizado de este método se ha visto fomentado por el rápido aumento de la velocidad computacional. Lamentablemente, los detalles exactos de la geometría del cabezal para un determinado *Linac* son difíciles de obtener, y el método no es capaz de detectar cambios en el espectro de salida debido a sutiles modificaciones en el haz por parámetros electromecánicos o la compleja geometría del cabezal. Sin embargo, los espectros de haces de fotones reconstruidos de esta manera constituyen una de las muy pocas referencias disponibles con la cual otros espectros obtenidos a través de otros métodos de reconstrucción pueden ser validados [Partridge, 2000], [Faddegon et al., 1990], [Kumar et al., 2002].

Este apartado detalla el desarrollo preliminar de un método de reconstrucción espectral alternativo que se puede realizar para diferentes configuraciones del haz y requiere pocas mediciones. La metodología de cálculo que se presenta se centra en la reconstrucción de espectros por medio del análisis de la dispersión del espectro de fotones del haz primario de un acelerador lineal.

Esta metodología implica medir la dosis en una cámara de ionización, después de que el haz incida en un bloque dispersor de plástico. Concretamente, se analiza la dispersión recogida en diferentes posiciones alrededor del plástico y que cuentan con distintos ángulos de dispersión.

La reconstrucción del espectro en este trabajo se ha estudiado en un *Linac Elekta Precise* fijando un haz de fotones de 6 MeV [Juste, 2008].

Puesto que la interacción predominante en los rangos de energía habitual de radioterapia es la dispersión *Compton*, se puede afirmar que el análisis de la dispersión se centrará principalmente en el número de interacciones de dispersión de fotones *Compton* en diferentes intervalos de energía que el espectro primario genera en un ángulo específico cuando el haz entran en contacto con el bloque dispersor.

La medida de la dispersión depositada por los fotones y electrones en los diferentes puntos de medida, se realiza, por un lado, experimentalmente, tomando la medida de la dispersión en cada

posición con una cámara de ionización *Farmer Scanditronix* de 0.6 cm^3 de volumen y por otro lado, la reconstrucción del espectro requiere también la simulación del transporte de las partículas de sucesivos haces monoenergéticos utilizando el código Monte Carlo MCNP5, con objeto de registrar la medida de la dispersión en los diferentes intervalos de energía.

El análisis matemático de los datos experimentales junto con los resultados de la simulación permite reconstruir el espectro original de fotones del acelerador como la suma de la contribución en cada intervalo de energía utilizando el modelo *Bremsstrahlung de Schiff*.

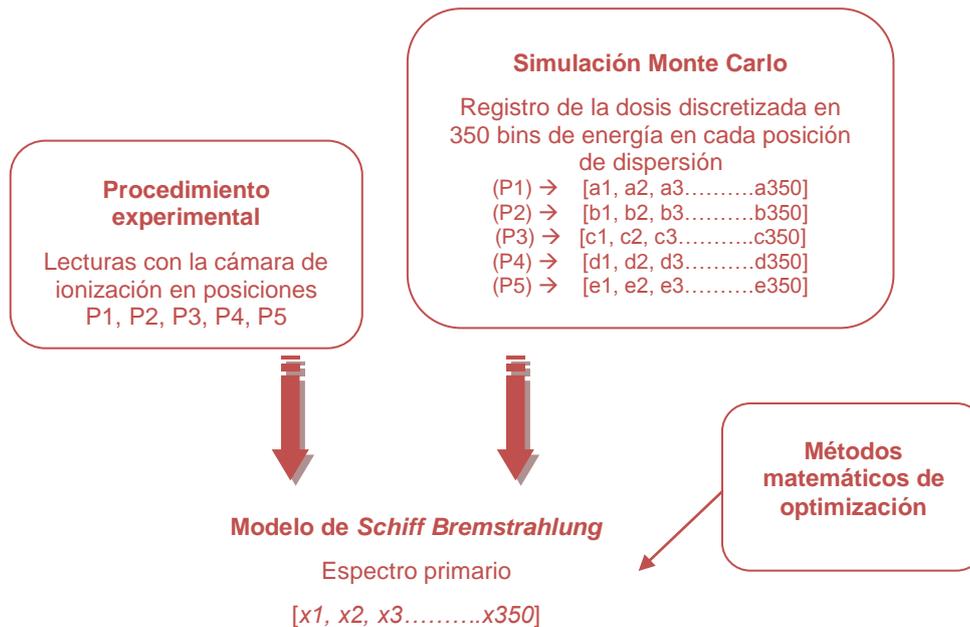


Figura 6.25. Esquema de procedimiento de reconstrucción del espectro por análisis de la dispersión.

6.3.1. Metodología de análisis de la dispersión.

Estrictamente hablando, el problema de la reconstrucción espectral mediante el análisis de la dispersión está matemáticamente descrito como un problema mal condicionado porque su solución se reduce a la ecuación integral de primer orden [Wing, 1991]. El método se centra en estudiar las diferencias que existen en la cantidad de transmisión de fotones en diferentes intervalos de energía tras el choque del haz principal con un bloque de plástico. Por lo tanto, es conveniente utilizar un material para el bloque dispersor con un coeficiente de atenuación total que varíe de manera importante con la energía del fotón, con el fin de diferenciar mejor entre sucesivos intervalos de energía.

Con el fin de satisfacer la condición de trabajar con una curva de atenuación total de estas características [Huang et al., 1982], [Baker, 1993], el análisis de la dispersión se realiza normalmente con materiales de bajo número atómico Z (tales como agua, aluminio y plástico).

En el análisis de la dispersión, se analiza el haz de dispersión en una configuración geométrica donde las interacciones *Compton* son la contribución dominante. Por lo tanto, esta metodología estudia las diferencias existentes en el número de interacciones *Compton* en diferentes intervalos de energía que produce el espectro principal al incidir en un bloque disperso.

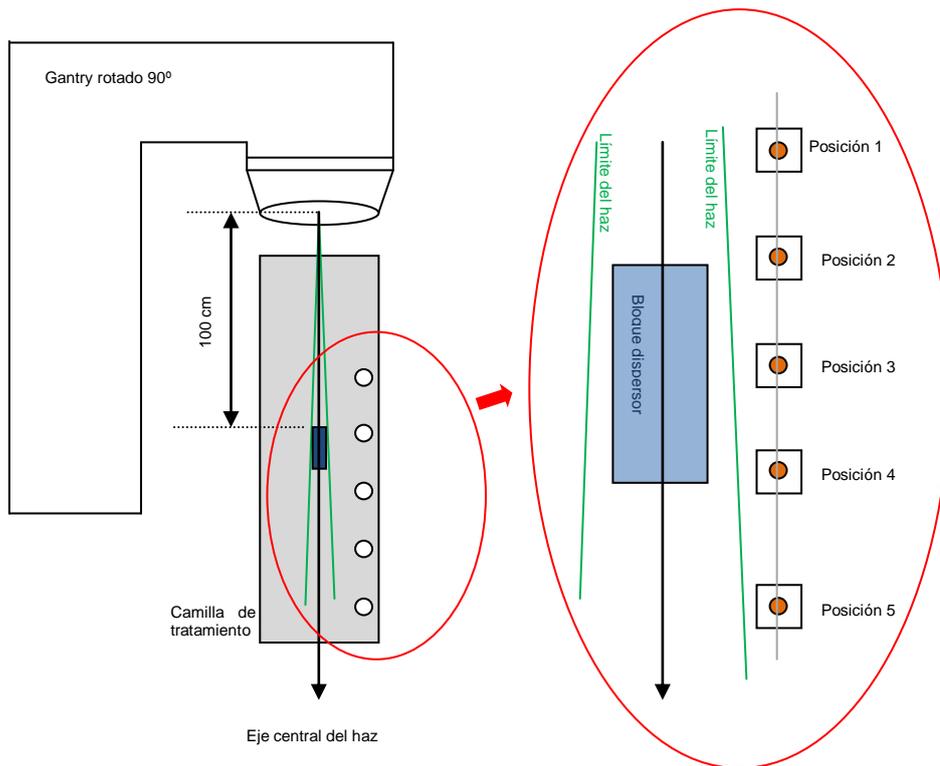


Figura 6.26. Vista superior del montaje para medir la señal de la dispersión en función del ángulo (no está a escala).

El esquema superior (Figura 6.26) representa una sala de tratamiento estándar con un acelerador lineal, produciendo un haz de fotones convencional que incide en un bloque de dispersión colocado a 100 cm de la fuente. Una cámara de ionización con *Build up* se coloca en diferentes posiciones específicas fuera del haz principal con la intención de medir sólo los fotones secundarios producidos por el dispersor en una dirección determinada. La idea es medir esta señal en diferentes ángulos de dispersión nominal sobre la pieza dispersora y utilizar estos datos para la reconstrucción espectral.

Una medición de señal de dispersión se obtiene tomando dos lecturas para la misma cantidad de unidades de monitor del acelerador y restando una a la otra. La primera lectura se toma en ausencia del objeto dispersor en el haz. Se mide así la señal de fondo producida por la transmisión de las mordazas, dispersión por las paredes de la habitación y radiación de fuga del cabezal del acelerador. Para la segunda lectura, el detector se mantiene en la misma posición pero el bloque dispersor se coloca ahora en el haz y se utiliza la misma cantidad de unidades de monitor. Restando la primera lectura a la segunda, se obtiene la contribución de los fotones secundarios producidos por el dispersor.

La señal de fondo de la primera lectura producida principalmente por la radiación de fuga de las mordazas que alcanza el detector directamente: esta parte generalmente equivale al 5% de la dosis en el isocentro y es independiente de la presencia/ausencia del bloque dispersor en el haz.

Otra parte de la señal de fondo es debida a los fotones primarios dispersados hacia las paredes y que vuelven al detector. Este porcentaje si depende de la presencia/ausencia del bloque dispersor y disminuirá cuando el bloque dispersor se coloque en el haz debido a la atenuación de la radiación primaria al atravesarlo. Esta contribución de señal de fondo puede ser estimada en aproximadamente menos del 0,01% de la dosis en el isocentro [NCRP 1976].

En el resto de este apartado, el término señal de la dispersión hará referencia a la cantidad de ionización en la cámara debido exclusivamente a los fotones secundarios producidos por el bloque dispersor, una cantidad física que se mide por la técnica de sustracción descrita anteriormente. Por lo tanto, es importante tener en cuenta que una medición de señal de dispersión es en realidad el resultado de la resta de dos mediciones.

La representación siguiente (Figura 6.27) muestra como una señal de dispersión es generada principalmente por fotones *Compton* dispersos.

La curva punteada que separa la región 1 de la región 2 representa el límite en el que las secciones eficaces para absorción fotoeléctrica y efecto *Compton* son iguales. La curva sólida que separa la región 2 de la región 3 representa el límite en el que las secciones eficaces para efecto *Compton* y producción de pares son iguales. Por lo tanto, en la región 1 el efecto fotoeléctrico es predominante, en la región 2 el efecto *Compton* es el predominante, mientras que en la región 3 la interacción más probable es la producción de pares.

Utilizando un dispersor de bajo *Z* como el plástico o agua (número atómico efectivo entre 5 y 10), la región en la figura (Figura 6.27), que corresponde al análisis de dispersión a energías de radioterapia (hasta de 30 MeV) está representada por el rectángulo horizontal estrecho de la parte inferior. Esta área cae en gran medida en la región *Compton* y la interacción que contribuye más a la señal de dispersión será, pues, la dispersión *Compton* con un coeficiente de atenuación másico correspondiente que varía escarpadamente (inversamente proporcional a la energía).

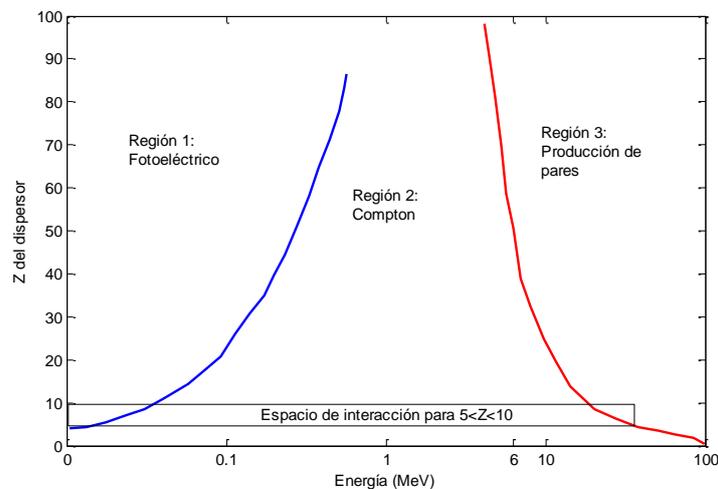


Figura 6.27. Zona preferencial de interacción.

6.3.1.1. El modelo de radiación de frenado de *Schiff*.

Una manera de estabilizar la solución de una ecuación integral de primer orden (un proceso matemáticamente denominado como regularización [Wing, 1991]) es poner la incógnita (en este caso el espectro) en forma analítica, si se dispone de un modelo analítico.

Los haces de fotones son producidos por *Bremsstrahlung* tras el choque de los electrones en el blanco de tungsteno situado en el cabezal de acelerador lineal médico. La fluencia relativa de estos fotones a una determinada energía *k*, se puede expresar utilizando la versión paramétrica de la fórmula de *Schiff* [Baker, 1993], [Koch y Motz, 1959], [Desobry y Boyer, 1991]:

$$\Phi(k, T, t) = \left(\frac{1}{k}\right) \left[\left(1 - \frac{k}{T}\right) (\ln \eta - 1) + \left(\frac{k}{T}\right) (\ln \eta - 0.5) \right] e^{(-\mu_t(k) \cdot t)} \quad (6.3)$$

En esta ecuación (6.3), T hace referencia a la energía total de los electrones incidentes en el blanco (MeV), y t al espesor hipotético del material del blanco equivalente en atenuación al sistema de filtración completo. Por otro lado, $\mu_t(k)$ es el coeficiente lineal total de atenuación para el material del blanco a la energía k , extraído de la base de datos del NIST, [NIST].

$$\eta = \left[\left(\frac{0.511k}{2T(T-k)} \right)^2 + \left(\frac{Z^{1/3}}{111} \right) \right]^{-1/2} \quad (6.4)$$

En la ecuación (6.4), Z hace referencia al número atómico efectivo de todos los materiales atenuadores. En este trabajo se ha tomado el número atómico del blanco, una mezcla de tungsteno (90%) y renio (10%). Un haz de un *Linac* es normalmente atenuado por el blanco, el filtro aplanador y otros materiales a menudo todos de diferente número atómico. Sin embargo, la modelización Schiff con un material de número atómico efectivo Z ha dado resultados aceptables [Baker, 1993] y [Partridge, 2000]. El valor numérico, 111 es una constante calculada y establecida por Schiff. [Schiff, 1946].

Con objeto de determinar el espectro original, es necesario encontrar experimentalmente los valores de los parámetros T y t del modelo espectral paramétrico de la ecuación (6.3).

6.3.1.2. Método de reconstrucción del espectro.

Tal y como se ha detallado, esta metodología de reconstrucción de espectro conlleva la medida de dosis en una cámara de ionización después de que un haz de fotones atraviese un bloque que actúa como dispersor.

En el análisis se han utilizado cinco ángulos de dispersión diferentes con respecto al eje central (Tabla 6.1). El mayor, 149° (posición 1, $P1$), y el menor de los ángulos 30.96° (posición 5, $P5$). El espectro desconocido se ha dividido en 350 intervalos de energía (0.02 MeV, 0.04 MeV, ..., 7 MeV).

Las cinco localizaciones exactas de estas posiciones de la cámara de ionización se encuentran detalladas en la representación siguiente (Figura 6.28).

Tabla 6.2. Ángulos de dispersión de las posiciones de la cámara de ionización.

Posición	Ángulo de dispersión (°C)
P1	149.04
P2	129.81
P3	90.0
P4	50.19
P5	30.96

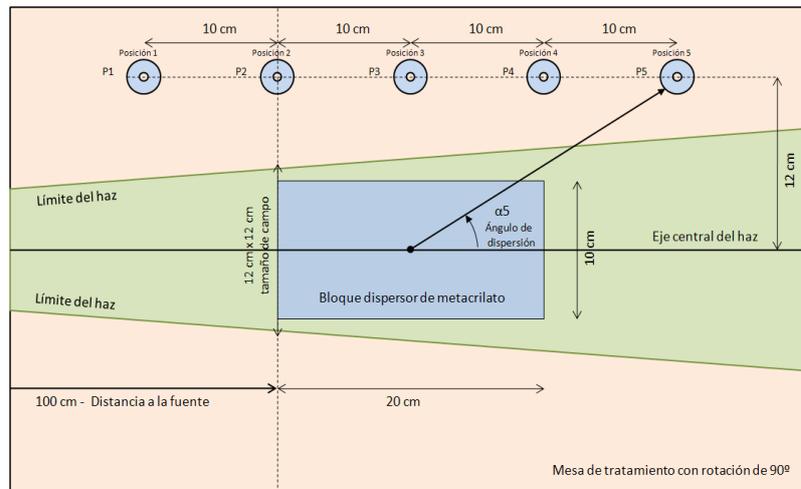


Figura. 6.28. Representación esquemática del dispositivo experimental.

El ángulo de dispersión nominal que se muestra en la figura anterior (Figura 6.28) no es un ángulo exacto sino un ángulo promedio representativo, ya que debido al tamaño del bloque dispersor y de la cámara de ionización, no todos los fotones que llegan a la cámara en la posición 1 se han dispersado con el mismo ángulo. Así, la cámara en posición 1 estará respondiendo efectivamente a una variedad de ángulos de dispersión.

Además, la dispersión en el cabezal (por el filtro aplanador, por ejemplo) que alcanza el bloque de plástico producirá dispersión hacia el detector en un ángulo diferente al que se muestra en la figura anterior (Figura 6.28). Pero estos últimos fotones tienen una contribución insignificante para el detector. [Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002] utilizaron simulaciones Monte Carlo para determinar las contribuciones a la fluencia de fotones en el isocentro en un campo de 10 cm x 10 cm para un haz de fotones de 6 MeV en un acelerador *Elekta/SL25* (que tiene una geometría de cabezal muy similar al *Elekta Precise* que se ha utilizado en este trabajo). Encontraron que de los fotones que alcanzan el campo de tratamiento, el 97% se originaron directamente en el blanco, el 2.1% directamente en el filtro aplanador, el 0.6% directamente en el colimador principal y el 0.3% en las mordazas de colimación (esto no significa que 97% de los fotones que se produjeron en el blanco atravesaron el filtro aplanador sin ser atenuados). Por lo tanto, la mayoría de los fotones dispersos detectados en la cámara de ionización que se utiliza en este trabajo serán originarias directamente del blanco, y el ángulo de dispersión nominal representado en el esquema (Figura 6.28) es un ángulo de dispersión promedio representativo válido. Estas consideraciones se tienen en cuenta en las simulaciones Monte Carlo posteriores, que no asumen sólo un ángulo de dispersión exacto, sino que se modela la geometría de dispersión, tal y como es en realidad, es decir, con un bloque dispersor finito, y una cámara y cabezal de dimensiones y geometría reales.

El código MCNP5 se ha utilizado para simular el transporte de haces monoenergéticos a través del modelo cuyo esquema geométrico se detalla en el esquema anterior (Figura 6.28).

El modelo que incluye la cámara de ionización localizada en $P1$ (posición 1), ofrece la estimación de a_1 , la magnitud relativa de la señal de dispersión por fotón saliendo del cabezal del acelerador para un haz monoenergético en el primer intervalo de energía (0 - 0.02 MeV). De la misma forma, a_2 es calculada para el segundo intervalo de energía (0.02 - 0.04 MeV), y así sucesivamente hasta obtener a_{350} para el último intervalo (6.98 - 7 MeV).

Se puede entonces afirmar que los valores calculados [a_1, a_2, \dots, a_{350}] son las señales monoenergéticas relativas a $P1$. Mientras que el vector [x_1, x_2, \dots, x_{350}] representa el número

desconocido de fotones en cada intervalo de energía del espectro a calcular, expresados paramétricamente en la ecuación (6.5).

Las señales de dispersión $P1$, $P2$, $P3$, $P4$ y $P5$ medidas en la posición 1, 2, 3, 4 y 5 respectivamente, equivalen a la suma de las señales dispersadas por cada intervalo individual:

$$\begin{aligned}
 P1 &= a_1 \cdot x_1 + a_2 \cdot x_2 + \dots + a_{350} \cdot x_{350} \\
 P2 &= b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + \dots + b_{350} \cdot x_{350} \\
 P3 &= c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_{350} \cdot x_{350} \\
 P4 &= d_1 \cdot x_1 + d_2 \cdot x_2 + \dots + d_{350} \cdot x_{350} \\
 P5 &= e_1 \cdot x_1 + e_2 \cdot x_2 + \dots + e_{350} \cdot x_{350}
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

Donde $[P1, P2, P3, P4, P5]$ son las medidas experimentales de señal de dispersión para las posiciones 1 a 5.

Sustituyendo $[x_1, x_2, \dots, x_{350}]$ por sus respectivas formas paramétricas dadas en la ecuación (6.3), donde las únicas incógnitas son T y t , el sistema (6.5) se puede resolver utilizando el método de optimización, minimización [*MatLab Minimization Toolbox*]. Una vez determinados estos parámetros, el espectro se calcula con la ecuación (6.6).

$$\begin{aligned}
 P1 &= a_1 \cdot \Phi(k_1, T, th) + a_2 \cdot \Phi(k_2, T, th) + \dots + a_{350} \cdot \Phi(k_{350}, T, th) \\
 P2 &= b_1 \cdot \Phi(k_1, T, th) + b_2 \cdot \Phi(k_2, T, th) + \dots + b_{350} \cdot \Phi(k_{350}, T, th) \\
 P3 &= c_1 \cdot \Phi(k_1, T, th) + c_2 \cdot \Phi(k_2, T, th) + \dots + c_{350} \cdot \Phi(k_{350}, T, th) \\
 P4 &= d_1 \cdot \Phi(k_1, T, th) + d_2 \cdot \Phi(k_2, T, th) + \dots + d_{350} \cdot \Phi(k_{350}, T, th) \\
 P5 &= e_1 \cdot \Phi(k_1, T, th) + e_2 \cdot \Phi(k_2, T, th) + \dots + e_{350} \cdot \Phi(k_{350}, T, th)
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

6.3.1.3. Método de optimización.

En matemáticas, la optimización o programación matemática intenta dar respuesta a un tipo general de problemas donde se desea elegir el mejor entre un conjunto de elementos. En su forma más simple, el problema equivale a resolver una ecuación de este tipo:

$$\begin{aligned}
 \max (\min) f(x) \\
 x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

Donde $x = (x_1, \dots, x_n)$ es un vector y representa variables de decisión, $f(x)$ es llamada función objetivo y representa o mide la calidad de las decisiones (usualmente números enteros o reales) y Ω es el conjunto de decisiones factibles o restricciones del problema.

Algunas veces es posible expresar el conjunto de restricciones Ω como solución de un sistema de igualdades o desigualdades.

$$\begin{aligned}g(x_1, \dots, x_n) &\leq 0; \\h(x_1, \dots, x_n) &= 0\end{aligned}\tag{6.8}$$

Un problema de optimización trata entonces de tomar una decisión óptima para minimizar un criterio determinado (costes, tiempo, riesgo, error, etc). Las restricciones significan que no cualquier decisión es posible. Los problemas de optimización pueden realizar muchas iteraciones hasta converger y pueden ser sensibles a problemas numéricos como error de truncamiento y redondeo en el cálculo de los degradados de diferencia finita. La mayoría de problemas de optimización se benefician de buenas conjeturas de partida. Esto mejora la eficacia de la ejecución y puede ayudar a localizar el mínimo global en lugar de un mínimo local.

El *Toolbox de Optimización de MatLab* es una colección de funciones que amplía la capacidad de computación numérica del programa *MatLab*. Este conjunto de funciones logran minimizar o maximizar funciones no lineales generales. Es decir, al usar la palabra 'optimización' en *MatLab* se refiere al proceso de búsqueda del mínimo o máximo de una función, denominada comúnmente 'función objetivo' en las funciones de optimización que incluye el *Toolbox* de Optimización de *MatLab*.

La función de optimización desarrollada en *MatLab* que mejor se adapta a las características del problema a resolver en el presente apartado es la función de minimización del *Toolbox* de Optimización *fmincon*. El propósito de esta función es encontrar el mínimo del valor escalar que devuelve una función de varias variables no lineal y sujeta a una serie de restricciones. Normalmente se conoce este tipo de problemas como optimización no lineal con restricciones.

Esta función puede utilizar el método SQP (Programación Cuadrática Secuencial) para resolver el problema, o puede utilizar métodos de punto interior (en concreto, funciones de penalización de tipo logarítmico). El método que se utiliza por defecto es el método SQP.

La herramienta de optimización requiere que tanto la función objetivo y las restricciones sean escritas por separado, para luego ser llamadas por el programa.

El método de Programación Cuadrática Secuencial SQP es denominado así, ya que se resuelve un subproblema de programación cuadrática QP en cada iteración sucesiva. El método también es conocido como Programación Cuadrática Iterativa, Programación Cuadrática Recursiva o Métodos de la Métrica Variable Restringidos. El método permite imitar estrechamente al método de Newton para optimización restringida justo como se hace para optimización no restringida. En cada iteración precedente, se hace una aproximación del Hessiano de la función Lagrangiana usando un método de actualización quasi-Newton. Este es usado para generar un subproblema QP cuya solución es usada para formar una dirección de búsqueda por un procedimiento de búsqueda lineal.

La implementación SQP se hace en tres etapas principales, las cuales consisten en:

- 1) actualización de la matriz Hessiana y del Lagrangiano,
- 2) solución de la programación cuadrática y
- 3) búsqueda.

6.3.1.3.1. Rutina *fmincon* de *Matlab*.

Tal y como se ha mencionado en el apartado anterior, en términos generales un problema de optimización consiste en determinar un conjunto de valores $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ que puede ser definido desde algún punto de vista como óptimo, por ejemplo que el conjunto valores minimice el valor de alguna función escalar. La estructura general de dicho problema puede ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& \min_{\{x\} \in R^n} f(\{x\}) \\
& g_i(\{x\}) = 0 \quad i = 1 \dots m_e \\
& g_i(\{x\}) \leq 0 \quad i = m_e + 1 \dots m \\
& \{x\} \leq \{x_u\} \\
& \{x\} \geq \{x_l\}
\end{aligned} \tag{6.10}$$

donde $\{x\}$ es el vector de las variables de diseño, $f(\{x\})$ es la función objetivo escalar y $\{g(\{x\})\}$ es el vector de restricciones que entrega los valores para las igualdades o desigualdades en términos de $\{x\}$. Los vectores $\{x_u\}$ y $\{x_l\}$ representan las cotas superiores e inferiores, respectivamente, para los valores de las componentes del vector $\{x\}$.

En la optimización de problemas con restricciones la idea general es transformar el problema original en un subproblema más sencillo que pueda ser usado como base para un proceso iterativo.

Los algoritmos más simples para optimización de problemas con restricciones transforman el problema restringido en uno sin restricciones mediante el empleo de una función de castigo para las restricciones. Con dicha metodología, el problema es resuelto a través de una serie de problemas sin restricciones que en el límite convergen al problema original.

En la actualidad los métodos que emplean una función de castigo son considerados ineficientes y han sido reemplazados por métodos relacionados con la solución de las ecuaciones de *Kuhn-Tucker* (KT). Las KT representan una condición necesaria para la optimalidad de un problema de optimización restringido. Si el problema es convexo, es decir, la función objetivo $f(\{x\})$ y las restricciones $g_i(\{x\}), i = 1 \dots m$ son funciones convexas, las KT son condiciones necesarias y suficientes para el óptimo global:

$$\begin{aligned}
f(\{x^*\}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \cdot \nabla g_i(\{x^*\}) &= 0 \\
\nabla g_i(\{x^*\}) &= 0 \quad i = 1 \dots m_e \\
\lambda_i^* &\geq 0 \quad i = m_e + 1 \dots m
\end{aligned} \tag{6.11}$$

La primera ecuación de (6.11) muestra que los gradientes de las restricciones activas y la función objetivo se anulan. Para que se cancelen los gradientes, los multiplicadores de Lagrange λ_i deben ser capaces de balancear la función objetivo y los gradientes. Debido a que sólo participan las restricciones activas, los multiplicadores de Lagrange para las restricciones no activas deben ser nulos.

La resolución de las ecuaciones de KT son la base para la formulación de muchos algoritmos no lineales de optimización. La mayoría de ellos intentan calcular directamente los valores de los λ_i . Los métodos basados en algoritmos tipo quasi-Newton garantizan la convergencia mediante la acumulación de información de segundo orden en atención a las ecuaciones de KT empleando un método de actualización de tipo quasi-Newton. Estos métodos son conocidos como de Programación Cuadrática Secuencial (SQP) debido a que en cada iteración global se resuelve un problema de programación cuadrática (QP) [Singiresu].

6.3.1.3.2. Descripción General del Método SQP.

La idea básica es formular un sub-problema cuadrático basado en una aproximación cuadrática del Lagrangiano:

$$L(\{x\}, \lambda) = f(\{x\}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\{x\}) \quad (6.12)$$

El problema original se simplifica expresando las cotas de las variables como restricciones de desigualdad. El sub-problema QP se obtiene linealizando las restricciones no lineales:

$$\begin{aligned} & \min_{\{d\} \in \mathbb{R}^n} \\ & \frac{1}{2} d^t [H_k] \{d\} + \{\nabla f(\{x_k\})\}^t \{d\} \\ & \text{sujeto a} \\ & \{\nabla g_i(\{x_k\})\}^t \{d\} + g_i(\{x_k\}) = 0 \quad i = 1 \dots m_e \\ & \{\nabla g_i(\{x_k\})\}^t \{d\} + g_i(\{x_k\}) \leq 0 \quad i = m_e + 1 \dots m \end{aligned} \quad (6.13)$$

La solución es empleada para una nueva iteración:

$$\{x_{k+1}\} = \{x_k\} + \alpha_k \{d_k\} \quad (6.14)$$

donde el parámetro α_k es determinado mediante una búsqueda lineal apropiada. La matriz $[H_k]$ es una aproximación definida positiva de la matriz Hessiana del Lagrangiano. El valor de $[H_k]$ puede ser actualizado mediante cualquier método quasi-Newton.

6.3.1.3.3. Implementación del Método SQP.

Como se mencionó en la sección anterior, la resolución del problema de optimización restringida mediante programación cuadrática secuencial consta de las siguientes etapas:

1. Actualización de la matriz Hessiana y del Lagrangiano.
2. Resolución del sub-problema de programación cuadrática.
3. Búsqueda lineal de α_k .

Actualización de la matriz Hessiana

En cada iteración global se calcula una aproximación definida positiva de la matriz Hessiana y del Lagrangiano. Se calcula la matriz Hessiana $[H]$ donde $\lambda_i, i = 1 \dots m$ es una estimación de los multiplicadores de Lagrange:

$$[H_{k+1}] = [H_k] + \frac{\{q_k\}\{q_k\}^t}{\{q_k\}^t \{s_k\}} - \frac{[H_k]^t [H_k]}{\{s_k\}^t [H_k] \{s_k\}} \quad (6.15)$$

donde

$$\begin{aligned} \{s_k\} &= \{x_{k+1}\} - \{x_k\} \\ \{q_k\} &= \nabla f(\{x_{k+1}\}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\{x_{k+1}\}) - \left(\nabla f(\{x_k\}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\{x_k\}) \right) \end{aligned} \quad (6.16)$$

Se recomienda mantener la matriz Hessiana definida positiva a pesar que pueda ser positiva indefinida en el óptimo. El algoritmo garantiza que la matriz Hessiana sea definida positiva manteniendo $\{q_k\}\{q_k\}^t$ positivo en cada iteración y si $[H]$ se inicializa con una matriz definida positiva. Cuando $\{q_k\}\{q_k\}^t$ es no positivo, $\{q_k\}$ es modificado elemento a elemento de forma que $\{q_k\}^t\{s_k\} > 0$. El objetivo de este procedimiento es distorsionar lo menos posible los elementos de $\{q_k\}$ que contribuyen a que la actualización sea definida positiva. El procedimiento continua hasta que $\{q_k\}^t\{s_k\} \geq 10^{-5}$. Si después de dicho procedimiento $\{q_k\}\{s_k\}$ no es positivo, se modifica $\{q_k\}$ agregando un vector $\{v\}$ por una constante escalar w :

$$\{q_k\} = \{q_k\} + w\{v\} \quad (6.17)$$

Donde

$$v_i = \begin{cases} \nabla g_i(\{x_{k+1}\})g_i(\{x_{k+1}\}) - \nabla g_i(\{x_k\})g_i(\{x_k\}) & \text{si } q_{k_i} < 0 \text{ y } q_{k_i}s_{k_i} < 0 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (6.18)$$

El escalar w se aumenta sistemáticamente hasta que $\{q_k\}^t\{s_k\}$ sea positivo.

En cada iteración global del método SQP se resuelve un problema QP:

$$\begin{aligned} \min_{\{d\} \in R^n} q(\{d\}) &= \frac{1}{2} d^t [H] \{d\} + \{c\}^t \{d\} \\ [A_i] \{d\} &= 0 \quad i = 1 \dots m_e \\ [A_i] \{d\} &\leq 0 \quad i = m_e + 1 \dots m \end{aligned} \quad (6.19)$$

donde $[A_i]$ se refiere a la fila i de la matriz $[A]$ de $m \times n$ componentes.

6.3.1.3.4. Empleo de la rutina *fmincon*.

La estructura general del problema de optimización que resuelve la rutina *fmincon* de la Toolbox de Optimización de *MatLab* corresponde a calcular el mínimo de $f(x)$ sujeta a las restricciones:

$$\begin{aligned} c(x) &\leq 0 \\ c_{\text{eq}}(x) &= 0 \\ A \cdot x &\leq b \\ A_{\text{eq}} \cdot x &= b_{\text{eq}} \\ \text{lb} &\leq x \leq \text{ub} \end{aligned} \quad (6.20)$$

donde A , A_{eq} , son matrices, x , b , b_{eq} , l_b y l_u son vectores y $c(x)$ y $c_{eq}(x)$ son funciones que devuelven vectores y la función $f(x)$ es una función multivariable que devuelve un escalar. Las funciones $f(x)$, $c(x)$ y $c_{eq}(x)$ pueden ser funciones no lineales.

6.3.1.4. Procedimiento experimental.

Las medidas se han realizado en el acelerador lineal *Elekta Precise* del Hospital Clínic Universitari de València utilizando un haz de fotones de 6 MV. La validación del espectro obtenido mediante esta técnica se ha realizado comparando las curvas relativas de dosis en profundidad y perfiles en una cuba de agua tomadas experimentalmente con las obtenidas mediante simulación Monte Carlo incluyendo en el modelo el nuevo espectro reconstruido.

El desarrollo del procedimiento experimental se puede observar en las fotografías situadas a continuación (Figura 6.29). Estas fotografías muestran la configuración experimental desarrollada para medir la ionización en diferentes ángulos de dispersión alrededor del plástico dispersor. Estos datos son necesarios para la reconstrucción del haz primario.

Las medidas se han tomado con el Gantry rotado 90°. El plástico dispersor se ha situado a una distancia de 100 cm de la fuente y el isocentro del haz horizontal coincide con el isocentro de la superficie del plástico. Una cámara cilíndrica de ionización Scanditronix Farmer [Scanditronix] FC65-P con un volumen activo de 0.65 cm³ y con *Build up* se sitúa progresivamente en las cinco diferentes posiciones mencionadas (*P1*, *P2*, *P3*, *P4* y *P5*) fuera del haz primario, con el objetivo de medir la carga producida en esos puntos teniendo en cuenta sólo la contribución de los fotones secundarios producidos por el dispersor.

El plástico atenuador consiste en un prisma rectangular de metacrilato (bajo número atómico, Z) de 20 cm de largo 10 cm x 10 cm.

Estas cámaras de ionización utilizan como *Build up*, generalmente, un fino capuchón de Perspex. En este trabajo, el capuchón de perspex se ha sustituido por un bloque cilíndrico alternativo cuyas dimensiones son 4 cm de diámetro y 8 cm de largo. La cámara de ionización se insertó verticalmente en este capuchón cilíndrico de metacrilato para mantener las medidas bajo una situación de equilibrio electrónico.

Se ha elegido para las medidas experimentales un tamaño de campo de 12 cm x 12 cm en el isocentro con objeto de cubrir completamente el bloque dispersor.

Tal y como se ha detallado, para obtener la ionización debida a fotones secundarios en la cámara es necesario obtener dos medidas con la misma cantidad de unidades de monitor emitidas por el acelerador lineal en cada posición. La primera medida se toma en ausencia del bloque dispersor con el fin de tomar la señal del fondo (teniendo en cuenta la transmisión de las mordazas y colimadores, dispersión en las paredes y suelo de la sala). En la segunda medida, la cámara de ionización permanece en la misma posición, situando el dispersor de plástico en el eje del isocentro del haz.

La contribución de los fotones secundarios producidos por el dispersor se calcula restando a la primera medida la segunda.

$$P1 = P1_{\substack{\text{ionización} \\ \text{sin_dispersor}}} - P1_{\substack{\text{ionización} \\ \text{con_dispersor}}} \quad (6.21)$$

Las fotografías tomadas durante la toma de las medidas (Figura 6.29) muestran la sala de tratamiento de radioterapia del Hospital Clínic Universitari de València en la que se encuentra el acelerador lineal *Elekta Precise* y donde se han realizando estas medidas.

Las lecturas experimentales de la cámara para un haz de 6 MV se presentan en la tabla siguiente (Tabla 6.3).

Tabla 6.3. Lecturas experimentales en nC de la cámara de ionización para un haz de fotones de 6 MeV.

Posición de la cámara de ionización	1	2	3	4	5
Señal de dispersión con plástico dispersor 400 UM	0.5303 nC	0.782 nC	0.3603 nC	0.7787 nC	0.768 nC
Señal de dispersión sin plástico dispersor 400 UM	0.4188 nC	0.5177 nC	0.6059 nC	0.6767 nC	0.7542 nC
Señal dispersada 400 UM	0.1115 nC	0.264 nC	0.7544 nC	0.102 nC	0.0138 nC

Las fotografías situadas a continuación fueron tomadas durante el procedimiento experimental de toma de medidas en el hospital.

Se aprecia como el gantry está rotado 90° con objeto de incidir en el bloque de metacrilato. También se aprecia la ubicación del plástico y el detector.

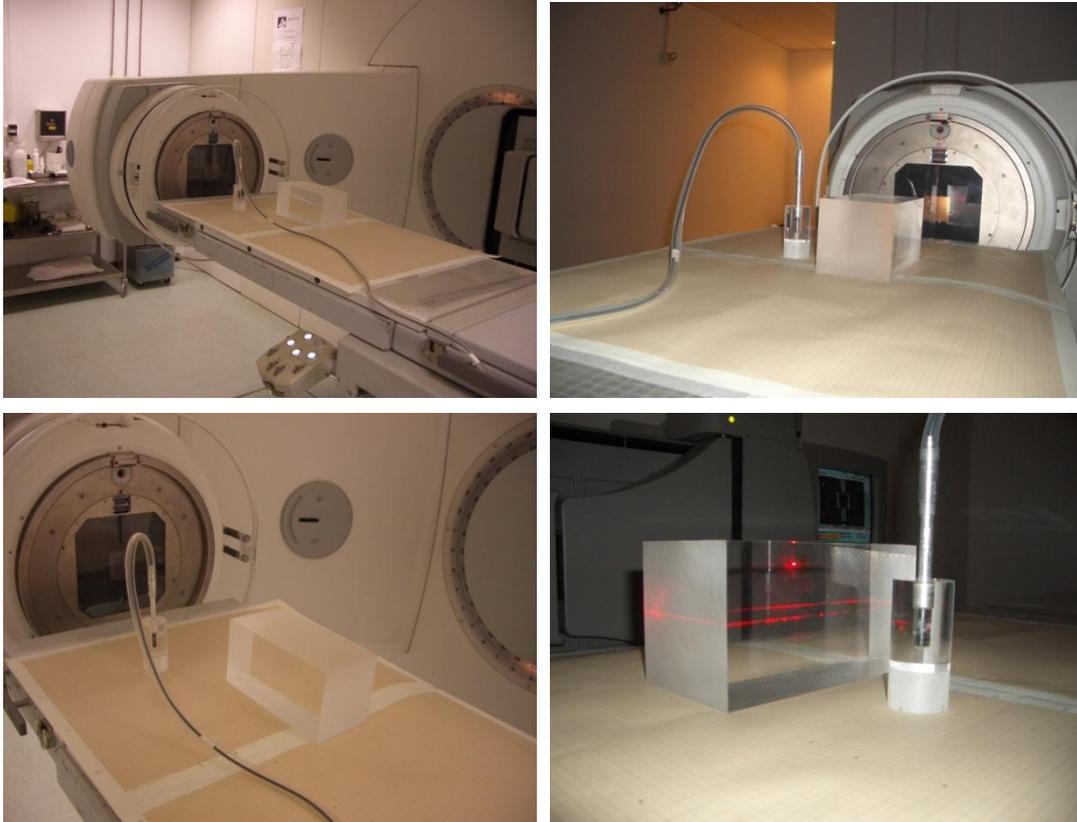


Figura 6.29. Fotografías tomadas durante la toma de medidas.

6.3.1.5. Simulación Monte Carlo de haces de fotones monoenergéticos.

La simulación Monte Carlo [Juste, 2008] permite registrar la carga detectada en una determinada posición de la cámara de ionización cuando se emite un haz monoenergético de fotones con una energía concreta.

Hemos utilizado el código de simulación Monte Carlo MCNP, versión 5 [MCNP5] para registrar la carga en cada intervalo de energía según la geometría representada en la figura siguiente (Figura 6.28).

Para obtener estos datos, no se ha modelizado el cabezal del *Elekta* completo. La simulación del cabezal en detalle no es necesario en este caso donde lo interesante es calcular la dispersión en un determinado ángulo. Además de esta manera se ahorra considerablemente el tiempo de cálculo. Por lo tanto, sólo se ha modelizado una fuente puntual irradiando el dispersor de plástico con un tamaño de campo de 12 cm x 12 cm, con tal de cubrir toda la superficie lateral del objeto dispersor y una cámara de ionización situada en diferentes posiciones tal y como indica la figura siguiente (Figura 6.30).

El tally utilizado para estimar la señal del detector ha sido el *F8:P,E. Este tally ofrece la distribución pulso altura modificada a unidades de energía.

Cada simulación sigue la trayectoria de 100 millones de partículas, con objeto de alcanzar un error estadístico siempre por debajo del 5%.

La figura siguiente (Figura 6.30) representa la simulación del choque del haz monoenergético con el plástico dispersor.

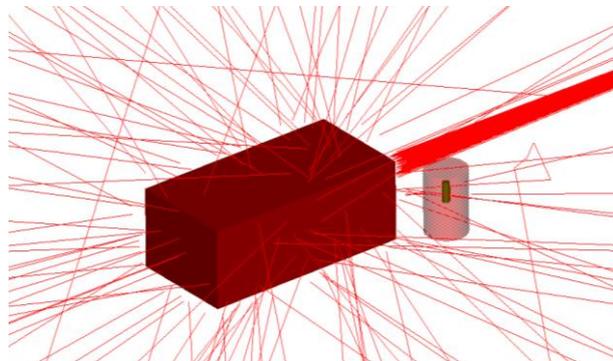


Figura 6.30. Simulación de la dispersión de partículas al incidir sobre el bloque dispersor [Sabrina].

Las curvas representadas a continuación (Figura 6.31) presentan los resultados obtenidos mediante la simulación para cada intervalo de energía en cada una de las cinco posiciones de la cámara de ionización.

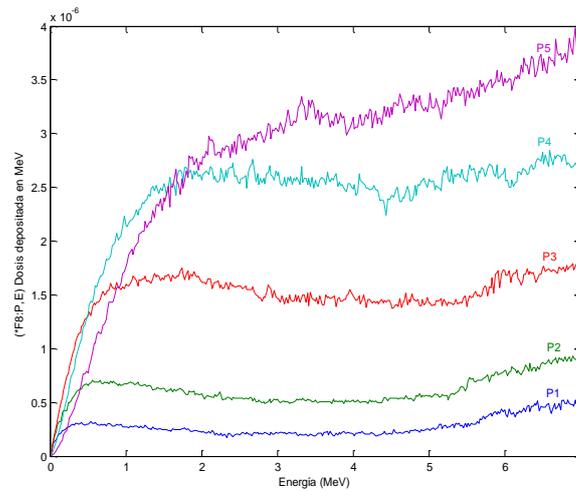


Figura 6.31. Valores de la dispersión obtenidos en cada intervalo de energía para las posiciones *P1*, *P2*, *P3*, *P4* y *P5*.

6.3.1.6. Validación del espectro reconstruido.

La parte final de este apartado, en la cual se debe validar el espectro reconstruido, requiere la simulación de la geometría completa del cabezal de la unidad de radioterapia.

Para simular el transporte de fotones y electrones que se desplazan a lo largo de la unidad, desde la fuente hasta el detector situado en la cuba de agua, se ha modelizado con gran realismo la geometría de todos los componentes de la unidad de radioterapia [Apartado 6.2].

El cabezal del acelerador lineal *Elekta Precise* se ha representado con gran detalle por cada uno de sus componentes: el disco del blanco, los colimadores primarios, el filtro aplanador, el conjunto de la cámara de ionización, la caña y el disco de retrodispersión.

La figura siguiente (Figura 6.32) representa el diagrama esquemático de la geometría del cabezal modelizado mediante el MCNP5, para un haz de fotones de baja energía.

Este modelo incluyendo el espectro reconstruido como fuente permite comparar las curvas de dosis en profundidad obtenidas mediante simulación con las medidas en una cuba de agua en el Hospital Clínic Universitari de València.

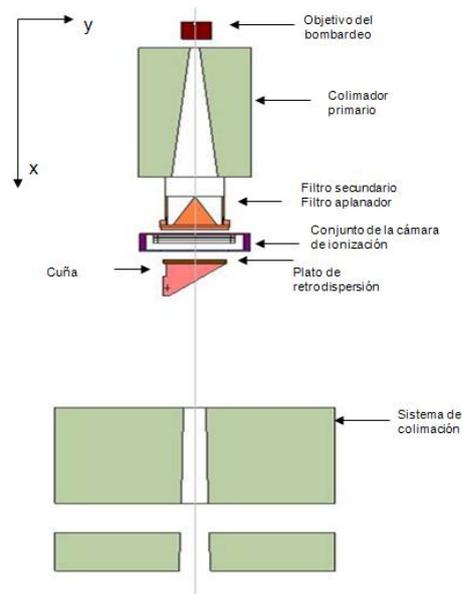


Figura 6.32. Vista esquemática de la geometría del modelo del cabezal del acelerador lineal *Elekta* para un haz de fotones de 6 MeV.

Estas simulaciones han utilizado el espectro reconstruido de fotones de 6 MeV calculado mediante el análisis de la dispersión de *Schiff Bremsstrahlung* en la primera parte del trabajo, fijando un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm.

La fuente se ha situado a una distancia de 100 cm de la superficie de la cuba de agua cuyo volumen es de 50 cm x 50 cm x 50 cm.

Para el registro de la distribución de dosis en el interior de la cuba de agua, se ha utilizado, el *tally* FMESH4, asociado con sus respectivos factores de conversión de flujo a dosis [NIST].

La figura inferior (Figura 6.33) muestra la trayectoria de las partículas durante la simulación de su transporte a través del cabezal lineal *Elekta* para un haz de fotones de 6 MeV.

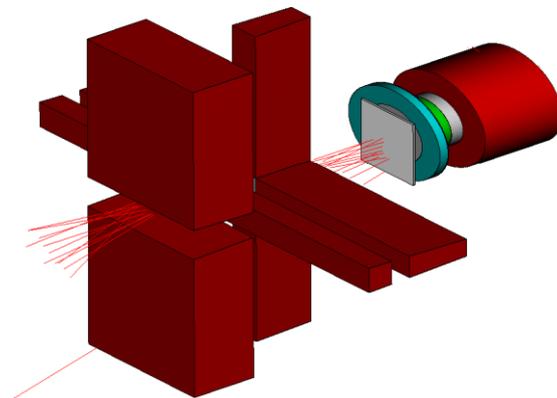


Figura 6.33. Simulación del transporte de partículas a través del cabezal lineal *Elekta* para un haz de fotones de 6 MeV.

6.4. Reconstrucción del espectro a partir de curvas de dosis en profundidad.

El espectro de energía es la mejor función descriptiva para caracterizar la calidad de un haz de fotones propio de un acelerador lineal médico. Las propiedades dosimétricas de un haz de radiación están directamente vinculadas a esta función. Una amplia gama de técnicas se han propuesto para determinar el espectro *Bremsstrahlung* emitido por un *Linac*, tal y como se describió en apartados anteriores. La reconstrucción a partir de medidas experimentales o bien a partir de cálculos dosimétricos, por lo general a partir de curvas de dosis en profundidad [Bloch et al., 1998], [Archer et al., 1985], [Nisbet et al., 1998], son metodologías reconocidas. La reconstrucción a partir de los datos de las curvas de dosis en profundidad es el método en el que se centra este punto.

La ecuación de *Fredholm* de primer orden permite relacionar las medidas de una curva de dosis en profundidad en el eje central de una cuba de agua con el espectro *Bremsstrahlung* que la originó. Esta ecuación será referida como DP (Dosis en Profundidad) en este trabajo y el problema inverso se basa en reconstruir un espectro dada esta curva de dosis en profundidad. Es bien sabido que este problema inverso está mal condicionado y presenta soluciones altamente inestables debido a la inevitable presencia de ruido en la entrada de los datos experimentales así como en el cálculo numérico. El enfoque escogido para resolver este problema inverso se basa en una diagonalización en el espacio de *Hilbert* de la ecuación de *Fredholm*. En este contexto, se pretende aplicar una técnica de regularización para superar las dificultades del mal condicionamiento sin recurrir a imponer condiciones externas sobre el problema inverso.

Resulta claro que la causa del mal condicionamiento del problema inverso para obtener el espectro de *Bremsstrahlung* es el espaciado de los valores singulares en la ecuación *Fredholm* que relaciona la curva de dosis en profundidad y el espectro [Arnbruster et al., 2004].

En este trabajo se pretende mejorar el proceso de reconstrucción del espectro a partir de las curvas de dosis en profundidad. Para ello, la técnica que se presenta analiza la relación del espectro incidente con las curvas de dosis en profundidad (DP) por un lado, y por otro, con de los gradientes de las curvas de dosis en profundidad (GDP) mediante una simple derivada espacial de la ecuación estándar de *Fredholm*.

En situaciones realistas donde el ruido es un factor importante, la ecuación de los gradientes de la dosis en profundidad (GDP) conduce a un problema inverso que está significativamente mejor condicionado que el problema inverso para el espectro basado en la ecuación tradicional (DP). Debido a esta mejora del mal condicionamiento, se puede mejorar significativamente la resolución del espectro *Bremsstrahlung* reconstruido.

Esta mejora queda demostrada en dos simulaciones Monte Carlo donde los espectros incidentes utilizados son los obtenidos tras la reconstrucción vía DP y GDP y en las cuales se compara la distribución de dosis obtenida en una cuba de agua con los valores experimentales.

6.4.1. Reconstrucción del espectro como un problema lineal.

Teóricamente, existe una estrecha relación entre la curva de dosis relativa en profundidad en el eje central de una cuba de agua, (designado en adelante como $d(x)$), y el haz de fotones de alta energía emitido por un acelerador médico lineal que la generó.

Esta relación está basada en la teoría de que la curva de dosis en profundidad puede expresarse como la superposición lineal de las contribuciones de haces de fotones monoenergéticos consecutivos, cada uno ponderado por la fluencia de fotones en la correspondiente energía E del haz emitido por el acelerador con espectro $\rho(E)$.

De esta manera, la curva de dosis en profundidad, $d(x)$, donde x es la distancia en profundidad de la caba, se puede expresar como una convolución del espectro de energía incidente, $\rho(E)$ y una matriz respuesta, $d_E(x)$, que contiene la información relativa a las curvas de dosis en profundidad para diferentes energías monoenergéticas:

$$d(x) = \int_0^{E_{max}} d_E(x)\rho(E)dE \quad (6.22)$$

En principio, esta ecuación lineal es invertible, con lo que sería factible obtener el espectro de una máquina que produce una curva de dosis en profundidad determinada. Ahora bien, el ruido asociado a las medidas experimentales de la curva de dosis en profundidad y la naturaleza propia del problema conduce a que este problema inverso esté mal condicionado.

Este problema (ecuación 6.22) es equivalente a buscar la solución discreta de ecuaciones integrales de *Fredholm* de primer orden [Hansen, 1992], [Press, 2002], para las cuales, de la misma forma que para otros tipos de problemas mal condicionados, no existe una solución discreta directa bajo condiciones generales.

En este caso se tiene una función $\rho(E)$ que se desea encontrar a partir de una función conocida $d(x)$, generalmente obtenida experimentalmente, y de una función núcleo o kernel $d_E(x)$ relacionada con las variables independientes y obtenida por simulación.

La aplicación del núcleo a la función de entrada $\rho(E)$ es una operación suavizante, por lo que la solución, la cual requiere de la inversión de esta operación, será extremadamente sensible a pequeños cambios o errores en la entrada.

El problema principal es que la suavización es una operación que en términos generales causa pérdida de información, la cual no puede recuperarse al realizar la inversa. Sin embargo, lo interesante de los problemas discretos mal condicionados es que se puede aproximar una solución significativa de estos problemas, conocidos como problemas inversos. Existen diversas técnicas de regularización para la obtención de soluciones suaves, las cuales intentan integrar al problema información sobre su naturaleza con el fin de substituir la que se perdió.

En este caso, para resolver el problema, $d(x)$ puede discretizarse en M intervalos, correspondientes a las diferentes posiciones de profundidad a analizar. La dosis en la posición i -ésima se denota por d_i y se puede expresar como:

$$d_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} d(x)dx, \quad i = 1, \dots, M \quad (6.23)$$

De la misma manera, esto se puede aplicar al espectro $\rho(E)$, obteniendo el espectro de energía promedio para cada intervalo de energía:

$$\rho_j = \int_{E_{j-1}}^{E_j} \rho(E)dE, \quad j = 1, \dots, N \quad (6.24)$$

donde ρ_j es el espectro de fotones con energía entre E_{j-1} y E_j .

De esta manera, $d_E(x)$ puede aproximarse a una matriz $M \times N$, A , cuyos elementos son:

$$A_{ij} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{E_{j-1}}^{E_j} d_E(x) dE dx \quad (6.24)$$

Se establece que A_{ij} es la dosis depositada en una posición i , para un espectro dado de energía j .

Por lo tanto, la ecuación (6.22) puede aproximarse a:

$$d_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} \rho_j, \quad i = 1, \dots, M \quad (6.26)$$

Esta ecuación (6.26) se puede expresar como la relación matricial:

$$\vec{d} = A \cdot \vec{\rho} \quad (6.27)$$

donde $\vec{\rho} = (\rho_1, \dots, \rho_N)^T$ es el espectro original desconocido y $\vec{d} = (d_1, \dots, d_M)^T$ es la curva de dosis en profundidad.

La matriz de respuesta $A_{M \times N}$ se ha obtenido simulando las diferentes curvas de dosis en profundidad en una cuba de agua para diferentes haces primarios monoenergéticos incidentes de energías E_i para $i = 1, \dots, N$.

Según se ha dicho previamente, la ecuación (6.27) puede escribirse como un conjunto de ecuaciones lineales donde las incógnitas a determinar son los valores del espectro correspondientes a cada rango energético, mientras que los coeficientes del sistema de ecuaciones dependen del sistema físico en estudio y de las especificaciones técnicas de la simulación utilizada.

Por otro lado, la medida experimental de la dosis en profundidad, debidamente corregida (calibración adecuada), constituye el término independiente del sistema de ecuaciones.

6.4.2. Problema lineal inverso.

Tal como se ha dicho anteriormente nos interesa analizar el problema inverso para obtener el espectro de un acelerador lineal que produce una curva de dosis en profundidad determinada.

En teoría este sistema de ecuaciones es invertible, pero en la práctica, el ruido en las medidas de las curvas de dosis en profundidad y los errores debido a las limitaciones del cálculo numérico, así como la naturaleza del problema, conducen a que este problema inverso esté mal condicionado. En consecuencia, la inversión de la ecuación (6.28) da lugar a un espectro que es inestable con respecto al ruido en el cálculo y no es en ningún caso de uso práctico. En este apartado, se describe la diagonalización de (6.27), que formalmente se reduce al problema inverso de un problema aritmético.

La ecuación (6.22) tiene la propiedad de la linealidad y por lo tanto corresponde a una clase de problemas matemáticos bien conocidos [Cochran, 1972]. Además, puesto que el núcleo $d_E(x)$ tiene una norma cuadrática finita ya que:

$$\int_0^{E_{max}} dE \int_0^{\infty} dx d_E(x)^2 < \infty \quad (6.28)$$

teóricamente $d_E(x)$ puede considerarse como una matriz rectangular infinita que puede definirse de manera diagonal:

$$d_E(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \phi_n(x) \cdot \lambda_n \cdot \chi_n(E) \quad (6.29)$$

Aquí, ϕ_n y χ_n representan conjuntos completos de funciones singulares ortonormales a izquierda y derecha de $d_E(x)$, donde λ_n son los valores singulares de este núcleo. Estas cantidades se definen mediante las siguientes ecuaciones:

$$\int_0^{\infty} \phi_n(x) \phi_m(x) dx = \delta_{m,n} \quad (6.30)$$

$$\int_0^{E_{max}} \chi_n(E) \chi_m(E) dE = \delta_{m,n} \quad (6.31)$$

$$\lambda_n \phi_n(x) = \int_0^{E_{max}} \chi_n(E) d_E(x) dE \quad (6.32)$$

$$\lambda_n \chi_n(E) = \int_0^{\infty} d_E(x) \phi_n(x) dx \quad (6.33)$$

Lo que hacen estos conjuntos ortogonales de funciones es descomponer las funciones continuas en listas de números discretos. En este caso las funciones de los espacios vectoriales para cada x y E son espacios de *Hilbert* de dimensión infinita donde los vectores más convenientes vienen dados por las funciones singulares $\phi_n(x)$ y $\chi_n(E)$.

Cualquier medida experimental de la curva de dosis en profundidad $d(x)$ y cualquier espectro de energía emitido por una máquina $\rho(E)$ se puede expresar como una combinación lineal de funciones singulares:

$$d(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \quad (6.34)$$

$$\rho(E) = \sum_{m=1}^{\infty} b_m \chi_m(E) \quad (6.35)$$

Ahora bien, el conjunto de coeficientes discretos $\{a_n\}$ y $\{b_m\}$ llevan toda la información de las funciones originales sin aproximaciones.

Usando las relaciones de ortogonalidad (6.30) y (6.31), encontramos que la ecuación original (6.22) es equivalente a una simple relación entre los coeficientes de a_n y b_n :

$$a_n = \lambda_n \cdot b_n \quad (6.36)$$

Esto significa que si se conocen con exactitud cada uno de los coeficientes de una curva de dosis en profundidad y cada uno de los valores singulares λ_n , se puede definir el espectro exacto de fotones que producen la curva de dosis por la ecuación:

$$b_n = \frac{a_n}{\lambda_n} \quad (6.37)$$

Sin embargo, esta situación no suele cumplirse en la práctica. La curva de dosis en profundidad y los coeficientes a_n asociados siempre vienen con algún error intrínseco y los valores singulares se calculan numéricamente a partir de los datos obtenidos mediante simulaciones Monte Carlo.

En el caso que la curva de dosis en profundidad simulada o medida experimentalmente sea ruidosa, este ruido tiene un efecto diferente en cada componente debido a la estructura del núcleo integral. Para encontrar la solución óptima del problema inverso en este caso, es necesario truncar el conjunto de los coeficientes b_n para que el ruido no obstaculice la solución del espectro.

Hay que destacar que el problema inverso para el cálculo del espectro basado en (6.22) está mal condicionado por su naturaleza y ningún proceso de solución puede evitar este hecho. Esto es debido al hecho de que la integral al cuadrado (6.28) requiere que el conjunto de valores singulares $\{\lambda_n\}$ sea una secuencia de valores rápidamente decrecientes.

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_n \quad (6.38)$$

$$\int_0^{E_{max}} dE \int_0^\infty d_E(x)^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 < \infty \quad (6.39)$$

Dado que la curva de dosis en profundidad experimental es una función positiva suave y sin fluctuaciones de alta frecuencia se puede traducir en una lista truncada de coeficientes a_1, a_2, \dots, a_N para proporcionar una aproximación excelente de la curva de dosis en profundidad para algún valor finito de N . En consecuencia, la ecuación original (6.22) puede ser reemplazada por una serie finita:

$$d(x) \approx \sum_{i=1}^N \phi_n(x) \cdot \lambda_n \cdot \int_0^{E_{max}} \chi_n(E) \rho(E) dE = \sum_{n=1}^N \lambda_n \cdot b_n \cdot \phi_n(x) \quad (6.40)$$

de donde se puede resolver para los primeros N coeficientes b_n y reconstruir el espectro mediante:

$$\rho_{DP}(E) \approx \sum_{n=1}^M \frac{\int_0^{\infty} d(x) \cdot \phi_n(x) dx}{\lambda_n} \chi_n(E) \quad (6.41)$$

6.4.2.1. Soluciones del problema lineal inverso.

En lo sucesivo la relación matricial (6.27) se expresará como:

$$A \cdot x = b \quad (6.42)$$

siendo x la incógnita de la ecuación que hace referencia al espectro $\rho(E)$, b el término independiente de la relación matricial que hace referencia a la curva de dosis en profundidad $d(x)$, y por último, la matriz A representa la matriz respuesta $d_E(x)$.

Para un sistema $A \cdot x = b$ donde A es de dimensión $M \times N$, x es de dimensión $N \times 1$ y b de $M \times 1$, definimos la solución mínima del sistema del siguiente modo:

- Si el sistema es consistente y tiene solución única x , la solución mínima es x .
- Si el sistema es consistente y tiene un conjunto de soluciones, la solución mínima es el elemento que tiene la menor norma euclidiana.
- Si el sistema es inconsistente y tiene solución única x en mínimos cuadrados, la solución mínima es x .
- Si el sistema es inconsistente y tiene un conjunto de soluciones en mínimos cuadrados, la solución mínima es el elemento que tiene la menor norma euclidiana.

Una definición equivalente es la siguiente:

Sea $\rho = \min (\|Ax - b\|_2) : x \in \mathbb{R}^n (n = 1)$ entonces la solución mínima de la ecuación $A \cdot x = b$ es el elemento del conjunto $K = \{x : \|Ax - b\|_2\} = \rho$ que tiene la menor norma.

Con $\rho = 0$ se tienen los casos a) y b).

Con $\rho > 0$ se tienen los casos c) y d).

6.4.2.2. Sistema mal condicionado e inestabilidad numérica.

El problema específico en el que se centra el trabajo es el problema lineal inverso.

Un problema se dice que está bien condicionado si se cumplen todas las propiedades siguientes:

- Existe una solución.
- La solución es única.
- La solución depende de forma continua de los datos.

Los dos primeros requisitos pueden cumplirse fácilmente reformulando el problema, por ejemplo agregando requisitos adicionales. Esto podría hacerse añadiendo una restricción al problema o formularlo como un problema de minimización por mínimos cuadrados. Por otra parte, el último requisito, es un poco más complicado, ya que un pequeño error en los datos puede provocar errores mucho más grandes en la solución del problema.

Una medida de cómo de mal condicionado está el problema inverso puede definirse utilizando una analogía con el mal condicionamiento en un problema de matriz inversa basada en una matriz hermitica (una matriz cuadrada de elementos complejos que tiene la característica de ser igual a su propia traspuesta conjugada) [Forsythe y Moler, 1967]. En ese caso, la relación de los autovalores más grandes y los más pequeños proporciona el número de condición.

Para resolver un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales, el número de ecuaciones debe ser como mínimo igual al número de incógnitas. En el caso que nos ocupa, el número de ecuaciones es grande, y generalmente mucho mayor que el número de incógnitas. En estos casos, las dificultades principales que aparecen en el proceso de resolución del problema numérico están asociadas al mal condicionamiento del sistema. Esto implica que conjuntos muy diferentes de soluciones pueden satisfacer el sistema de ecuaciones con un mismo grado de aproximación, y en ese caso, la precisión limitada del método informático usado en los cálculos puede hacer que el método numérico falle. Este problema es conocido como comportamiento cuasi-singular del sistema.

Además, la colinealidad introduce problemas numéricos porque cambios pequeños en los datos de entrada conducen a grandes cambios en los resultados (problema de la inestabilidad numérica).

En cualquier caso, los errores en el término independiente (propios del detector utilizado en las medidas experimentales) pueden introducir perturbaciones muy grandes en el vector solución, si el número de condición de la matriz de los coeficientes es demasiado grande. Por tanto, la naturaleza mal condicionada del problema físico origina soluciones extremadamente sensibles a las perturbaciones.

Todos estos errores de entrada pueden conducir a una solución falsa, especialmente si el número de incógnitas es elevado. Cuanto más cercano se encuentre el problema a un comportamiento singular, mayor probabilidad existe que esto ocurra, pues mayor será la probabilidad de que se produzcan cancelaciones durante el proceso de resolución. Si los distintos errores comentados son demasiado grandes, pueden dominar cualquier determinación del espectro desconocido, y el algoritmo no sería satisfactorio en absoluto.

En el proceso de resolución del sistema lineal de ecuaciones algebraicas, un primer paso es identificar el comportamiento mal condicionado del sistema. Una forma práctica de conseguirlo es representar la magnitud de los valores singulares. Cuando el comportamiento es tal que los valores singulares cambian suavemente en magnitud, decreciendo monótonamente a un valor cercano a cero, ello indica que el sistema está mal condicionado, o que tiene un comportamiento cuasi-singular (el rango numérico de la matriz A está mal determinado).

6.4.3. Discretización del problema.

La discretización del problema permite que el sistema algebraico de ecuaciones lineales se pueda escribir en forma matricial como:

$$A \cdot x = b \tag{6.43}$$

$$A = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T \quad (6.47)$$

donde los vectores singulares son ortonormales $u_i^T u_j = v_i^T v_j = \delta_{ij}$ para $i, j = 1, \dots, n$ y los valores singulares σ_i son cantidades no negativas y aparecen en orden decreciente $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$.

En forma matricial, podemos escribir esta misma descomposición de la siguiente manera:

$$A = U \Sigma V^T \quad (6.48)$$

donde Σ es una matriz diagonal con los valores singulares σ_i en la diagonal y ceros en el resto de lugares, mientras que U y V son las matrices de los vectores singulares por la izquierda y por la derecha respectivamente, tal y como se ilustra aquí.

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix}, V_{N \times N} = [v_1, v_2, \dots, v_n] \text{ y } U_{M \times N} = [u_1, u_2, \dots, u_m] \quad (6.49)$$

Donde U es una matriz $M \times N$ cuyas columnas, u_j para $j = 1, \dots, N$, son los vectores singulares por la izquierda y son vectores ortonormales. Σ es una matriz diagonal $N \times N$ cuyos elementos σ_j son los valores singulares de A y $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. V es una matriz ortogonal $N \times N$ cuyas columnas v_j , para $j = 1, \dots, N$, son los vectores singulares por la derecha. Los vectores singulares son ortonormales $Rv_j = \sigma_j u_j$ y $R^T u_j = \sigma_j v_j$.

El *Método de Descomposición en Valores Singulares* es especialmente útil por su capacidad de manejar de forma inteligente el problema del rango matricial, es decir, su capacidad de aislar de forma conveniente la información importante de la información redundante y contaminada.

Este método permite escribir la ecuación $A \cdot x = b$:

$$x = A^{-1}b = V \Sigma^{-1} U^T b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (6.50)$$

El concepto de rango es crucial cuando el problema numérico tiene datos ruidosos y con errores de redondeo. Una medida de lo buena o mala condición de un sistema lineal de ecuaciones es el estudio del llamado **Número de Condición del Sistema**, que no es más que el cociente entre el primer valor singular que aparece en la descomposición descrita y el último valor singular no nulo.

El principal interés en estos cálculos es el tratamiento apropiado de la deficiencia de rango del problema numérico derivado de nuestro problema físico. Por esta razón, para garantizar que la solución calculada no sea demasiado sensible a perturbaciones en A y b (perturbaciones arbitrariamente pequeñas en el término independiente pueden conducir a perturbaciones

arbitrariamente grandes en la solución) es necesario incorporar alguna información adicional al proceso de resolución.

Este procedimiento es conocido como **Procedimiento de Regularización**. Se han propuesto varios métodos diferentes de regularización. Todos ellos filtran la influencia de la discretización en las medidas y los errores de redondeo para poder calcular una solución útil.

La dificultad subyacente en los problemas mal condicionados reside en la inestabilidad, en el sentido de que la solución está dominada por contribuciones correspondientes a los valores singulares más pequeños, y estas contribuciones consisten principalmente en errores. Para calcular una solución única, debemos por tanto imponer estabilidad especificando alguna información adicional que proporcione una solución cercana a la solución exacta buscada.

Una forma razonable de calcular una solución suave con significado en este problema físico es eliminar las componentes de alta frecuencia asociadas con los valores singulares menores. La consideración de los valores singulares más pequeños incrementa las oscilaciones sin significado en la solución; este incremento en la oscilación no va acompañado de un decrecimiento significativo en los residuos. La solución no debe mostrar el típico comportamiento oscilatorio obtenido cuando no se impone ninguna regularización al problema. Por ello, la solución:

$$\min (\|A \cdot x = b\|_2) \quad (6.51)$$

debe estar acompañada de otra condición (de regularización de la solución), $\min (\|x\|_2)$, para evitar estas oscilaciones sin significado físico.

Existen diferentes formas de combinar estas dos ligaduras. Una forma sencilla es la aproximación clásica propuesta originalmente por *Tikhonov*:

$$\min (\|A \cdot x - b\|_2^2 + \lambda^2 \|Lx\|_2^2) \quad (6.52)$$

donde la cantidad λ sería el **Parámetro de Regularización** que controla el peso dado a la minimización (norma de los residuos y norma de la solución).

Otro método de regularización bien conocido consiste simplemente en truncar la expansión en valores singulares haciendo cero los valores singulares más pequeños (el llamado **Método de Descomposición en Valores Singulares Truncada**).

De esta forma sustituimos el problema mal condicionado (el valor del Número de Condición es elevado), por otro sistema cercano al anterior, pero mejor condicionado (al eliminar los valores singulares más pequeños, el número condición del nuevo sistema será menor).

Estos dos métodos producen soluciones suavizadas muy similares, y ambas aproximan la solución de mínimos cuadrados no perturbada, si se cumple la **Condición de Picard Discreta** [*Hansen, 1990*].

6.4.4.1. Condición de Picard Discreta.

Tal y como se ha visto en el apartado 6.4.4 la integral de la ecuación (6.22) tiene un efecto suavizante en la incógnita x equivalente al espectro desconocido $\rho(E)$. La operación opuesta, es decir, la de resolver la integral de *Fredholm* de primer orden para $\rho(E)$, por lo tanto, tiende a amplificar las oscilaciones en el término independiente b , es decir, la curva de dosis experimental $d(x)$.

Por lo tanto, si se requiere que la solución x sea una solución al cuadrado integrable con norma-2 finita, no todas las funciones son válidas para el término independiente b .

De hecho, b debe ser suficientemente suave para “sobrevivir” la inversión a x . La formulación matemática de este criterio de suavidad se llama la **Condición de Picard**.

La condición de Picard Discreta parte de la representación de los valores $|u_i^T b|$ promediados, donde $u_i^T b$ son los coeficientes de Fourier del término independiente respecto a la descomposición en valores singulares.

Normalmente, el valor de $|u_i^T b|$ decae también para valores pequeños de i . Si los coeficientes $|u_i^T b|$ alcanzan una meseta cuando i aumenta, dicha meseta es una estimación del nivel de error en el término independiente. Lo que es importante en esta representación de Picard es el comportamiento comparativo de los valores singulares y el valor absoluto de los coeficientes de Fourier. Si los coeficientes $|u_i^T b|$ en promedio decaen más deprisa que los valores singulares σ_i , entonces podemos suponer que la **Condición de Picard** se satisface. Si la Condición Discreta de Picard se satisface, la solución regularizada que se puede calcular se aproximará a la solución exacta (desconocida).

Si el valor absoluto de los coeficientes de Fourier decae más lentamente que los valores singulares, entonces la **Condición de Picard** no se satisface, y por tanto, no podemos calcular una solución fiable.

Para problemas discretos mal condicionados no existe, estrictamente hablando, ninguna condición de Picard porque la norma de la solución siempre está limitada. Sin embargo, tiene sentido introducir una condición de Picard discreta como se indica a continuación. En una aplicación del mundo real, la b del término independiente siempre está contaminada por diversos tipos de errores, como errores de medición, los errores de aproximación y errores de redondeo. Por lo tanto, b puede escribirse como:

$$b = \bar{b} + e \quad (6.53)$$

donde e son los errores, y \bar{b} es el término independiente imperturbable. Ambas, \bar{b} y la correspondiente solución imperturbable \bar{x} representan el problema. Ahora, si queremos calcular una solución regularizada x_{reg} a partir de \bar{b} tal que x_{reg} se aproxima a la solución exacta \bar{x} , entonces se demuestra que el término independiente \bar{b} exacto correspondiente debe satisfacer un criterio muy similar a la condición de Picard.

El término independiente \bar{b} imperturbable en un problema mal condicionado con matriz de regularización L satisface la condición discreta de Picard si los coeficientes de Fourier promediados $|u_i^T \bar{b}|$ decaen más rápidamente que los valores singulares generalizados σ_i .

La condición de Picard discreta no es tan artificial como puede parecer en primer lugar: se puede demostrar que si la ecuación integral subyacente (6.22) satisface la condición de Picard, el problema discreto mal condicionado obtenido por la discretización de la ecuación integral satisface la condición de Picard discreta.

La principal dificultad con los problemas discretos mal condicionados es causada por los errores e del término independiente b (6.53), porque este tipo de errores, por lo general, tienden a tener componentes a lo largo de todo el vector singular izquierdo u_i . Por ejemplo, si $\|e\|_2 = \epsilon$ y si los elementos de e no están correlacionados, entonces, el valor esperado de los coeficientes de Fourier de e satisfacen:

$$\varepsilon(|u_i^T b|) = m^{-\frac{1}{2}}\epsilon, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.54)$$

Como consecuencia, los coeficientes de Fourier $|u_i^T b|$ de la parte derecha perturbable se estabilizan aproximadamente en $m^{-\frac{1}{2}}\epsilon$ incluso si \bar{b} satisface la condición de Picard discreta, porque estos coeficientes de Fourier están dominados por $|u_i^T e|$ para valores grandes de i .

Se examina ahora el sistema lineal (6.34) y el problema de mínimos cuadrados (6.35) y se asume, por razones de simplicidad, que A no tiene valores singulares exactos a cero. Utilizando el proceso de SVD, es fácil demostrar que las soluciones para ambos sistemas son dadas por la misma ecuación:

$$x_{SMC} = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (6.55)$$

Esta relación ilustra claramente las dificultades con la solución estándar de (6.34) y (6.35). Puesto que los coeficientes de Fourier $|u_i^T b|$ correspondientes a los valores singulares σ_i más pequeños no decaen tan rápido como los valores singulares, sino que tienden a estabilizarse, la solución por mínimos cuadrados (SMC) x_{SMC} está dominada por los términos de la suma correspondiente a los valores singulares σ_i más pequeños. Resultado de ello, es que la solución x_{SMC} tiene muchos cambios de signo y, por tanto, parece completamente aleatoria.

Con este análisis, se puede ver que el propósito de un método de regularización es amortiguar o filtrar las contribuciones a la solución correspondiente a los pequeños valores singulares generalizados. Por lo tanto, se necesita un método de regularización produzca una solución regularizada x_{reg} que pueda escribirse como sigue:

$$x_{reg} = \sum_{i=1}^n f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad \text{si } L = I_n \quad (6.56)$$

$$x_{reg} = \sum_{i=1}^p f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} x_i + \sum_{i=p+1}^n (u_i^T b) x_i \quad \text{si } L \neq I_n \quad (6.57)$$

Aquí, los números f_i son los factores de filtro para el método particular de regularización. Los factores de filtro deben tener la propiedad importante que a medida que σ_i disminuyen, los f_i correspondientes tienden a cero de tal manera que las contribuciones $\left(\frac{u_i^T b}{\sigma_i}\right) x_i$ a la solución de los σ_i más pequeños son efectivamente filtrados. La diferencia entre los diversos métodos de regularización se encuentra esencialmente en la forma en que estos factores de filtro f_i son definidos.

Por lo tanto, los factores de filtro desempeñan un papel importante en relación con la teoría de la regularización, y merece la pena caracterizar los factores de filtro para los diversos métodos de regularización que se presentan a continuación.

6.4.4.2. La Curva L .

Una de las herramientas gráficas más convenientes para el análisis de los problemas mal condicionados es la llamada curva L que es una representación (para todos los parámetros de

regularización válidos) de la seminorma $\|Lx_{reg}\|_2$ de la solución regularizada frente a la correspondiente norma residual $\|Ax_{reg} - b\|_2$. De esta manera, la curva L muestra claramente el compromiso entre la minimización de estas dos cantidades, que es la clave de cualquier método de regularización.

La Curva L de los problemas discretos mal condicionados, cuando se traza en escala de $\log\text{-}\log$, tienen casi siempre una aparente forma en L (de ahí su nombre) con una esquina característica que separa la parte vertical de la parte horizontal de la curva. Para entender esto, hay que considerar a \bar{x} como la solución exacta, sin regularizar, correspondiente al vector derecho \bar{b} en la ecuación (6.53), entonces el error $x_{reg} - \bar{x}$ en la solución regularizada consta de dos componentes, un error de perturbación del error e en el vector b y un error de regularización debido a la regularización de la componente libre de errores, \bar{b} .

La parte vertical de la curva L corresponde a soluciones donde $\|Lx_{reg}\|_2$ es muy sensible a los cambios en el parámetro de regularización porque el error perturbacional e domina x_{reg} y porque e no satisface la condición de Picard discreta. La parte horizontal de la curva L corresponde a soluciones donde es la norma residual $\|Ax_{reg} - b\|_2$ la que es más sensible al parámetro de regularización porque x_{reg} está dominada por el error de regularización siempre y cuando b satisfaga la condición de Picard discreta.

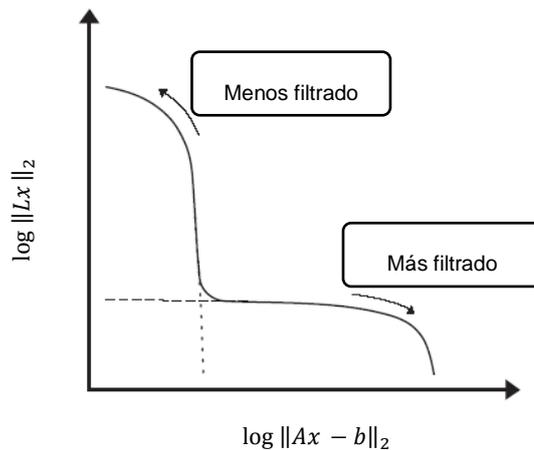


Figure 6.34. Forma genérica de la Curva L .

Se puede corroborar esto por medio de las relaciones para la solución regularizada x_{reg} en términos de los factores de filtro. Para la forma general de regularización ($L \neq I_n$) la ecuación (6.58) se obtiene la siguiente expresión para el error en x_{reg} :

$$x_{reg} - \bar{x} = \left(\sum_{i=1}^p f_i \frac{u_i^T e}{\sigma_i} x_i + \sum_{i=p+1}^n (u_i^T e) x_i \right) + \sum_{i=1}^p (f_i - 1) \frac{u_i^T \bar{b}}{\sigma_i} x_i \quad (6.58)$$

Aquí, el término en paréntesis es el error de perturbación debido a la perturbación de e y el segundo término es el error de regularización a causa de la regularización del componente no perturbado \bar{b} .

Cuando se introduce una regularización muy ligera, la mayor parte de los factores de filtro f_i son aproximadamente la unidad y el error $x_{reg} - \bar{x}$ está dominado por el error de perturbación.

Por otra parte, con una regularización mayor, la mayoría de los factores de filtro son pequeños $f_i \ll 1$ y $x_{reg} - \bar{x}$ está dominado por el error de regularización.

La ecuación (6.57) se ha utilizado para analizar la relación entre el error en x_{reg} y el comportamiento de la curva L . El resultado es que \bar{b} satisface la condición discreta de Picard, entonces la parte horizontal de la curva corresponde a soluciones donde domina el error de regularización, y donde tanto se introduce tanto filtrado que la solución resulta muy suave y por lo tanto en $\|Lx_{reg}\|_2$ sólo se produce un cambio muy ligero con el parámetro de regularización. En contraste, la parte vertical de la curva L corresponde a soluciones que están dominadas por el error de perturbación, y debido a la división por σ_i pequeños, es evidente que $\|Lx_{reg}\|_2$ varía drásticamente con el parámetro de regularización mientras que, simultáneamente, la norma residual no cambia mucho. Además, se muestra que la escala *log-log* enfatiza las diferentes apariencias de las partes vertical y horizontal.

Tomamos nota de paso que la curva L es una curva continua cuando el parámetro de regularización es continuo como en la regularización de *Tikhonov*. Para los métodos de regularización con parámetros de regularización discretos, tales como SVD truncada, el trazado de la curva L es un conjunto finito de puntos.

Para un determinado término independiente fijo $b = \bar{b} + e$, existe obviamente un parámetro de regularización óptimo que equilibre el error de perturbación y el error de regularización en x_{reg} . Una característica esencial de la curva L es que este parámetro de regularización no se encuentra muy lejos del parámetro de regularización que corresponde a la esquina de la curva L . En otras palabras, situándose en la esquina de la curva L se puede calcular una aproximación para el parámetro óptimo de la regularización y por lo tanto, a su vez, calcular una solución regularizada con un buen equilibrio entre los tipos de error.

6.4.5. Procedimiento de regularización.

La principal dificultad con los problemas discretos mal condicionados (6.45) y (6.46) es que son esencialmente indereterminados debido al cúmulo de pequeños valores singulares de A . Por lo tanto, es necesario incorporar más información acerca de la solución deseada con el fin de estabilizar el problema y obtener una solución útil y estable. Este es el propósito de regularización. Aunque son posibles muchos tipos de información adicional acerca de la solución x , el enfoque dominante para la regularización de problemas discretos mal condicionados es exigir que la norma-2 de la solución sea pequeña.

6.4.5.1. Método de Descomposición en Valores Singulares Truncada (TSVD).

Uno de los métodos seguidos en el algoritmo desarrollado para los cálculos de este trabajo es el *Método de Descomposición en Valores Singulares Truncada* (TSVD, por sus siglas en inglés *Truncated Singular Value Decomposition*) propuesto originalmente por *Hanson* [*Hanson, 1974*], y más tarde investigado por *Hansen* [*Hansen, 1990*], [*Hansen, 1992*], [*Hansen, 1993*].

Este método desprecia la información correspondiente a la peor relación señal/ruido, en sentido matemático.

El procedimiento de cálculo en estos casos selecciona los valores más pequeños que aparecen en la descomposición en valores singulares de la matriz A igualándolos a cero. Estos valores no añaden

información útil al proceso de resolución a expensas de introducir ruido y problemas de colinealidad (el número de valores singulares hechos cero juega el papel de parámetro de regularización).

Una solución óptima se puede obtener generando una nueva matriz de respuesta eliminando la parte de la solución correspondiente a los valores singulares más pequeños. El método TSVD se puede usar para obtener la nueva matriz A_k :

$$A_k = \sum_{j=1}^K u_j \sigma_j v_j^T \quad (6.59)$$

Donde k es el número de valores singulares no nulos de la matriz A .

Como ya se ha mencionado, el Método de Descomposición en Valores Singulares Truncada (TSVD) hace cero los valores singulares más pequeños de la descomposición. Para que el método sea efectivamente aplicable, se requiere una elección adecuada del número de valores singulares que se han de despreciar; es necesario por ello establecer algún criterio que permita determinar el grado de regularización que hay que aplicar al problema, para que la solución sea la óptima entre las posibles. Se ha probado que los diferentes métodos de seleccionar un valor para el parámetro de regularización apropiado están relacionados entre sí, y todos ellos están asociados a la localización de un vértice característico, el punto que minimiza conjuntamente la norma del vector solución $\|x\|_2$, y la norma del vector de los residuos $\|Ax - b\|_2$ en la llamada curva L de la regularización.

Siendo:

$$A = U \Sigma V^T \quad (6.60)$$

donde:

$$x = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (6.61)$$

Teniendo en cuenta que la condición de Picard no se satisface,

$$x = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad 1 \leq k \leq n \quad (6.62)$$

el valor de $\|Ax - b\|_2$ obtenido para un número dado de valores singulares despreciados se representa frente al valor de $\|x\|_2$ correspondiente al mismo número de valores singulares despreciados en una gráfica *log-log*; a continuación, el número de valores singulares a despreciar y el valor adecuado del parámetro de regularización se selecciona entre los puntos en la curva L (apartado 6.4.4.2) donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente.

La prueba final sobre la bondad de la solución obtenida en nuestra aplicación reside en la comparación entre el espectro experimental [Sheik-Bagheri y Rogers, 2002] y el espectro calculado a partir de la solución obtenida por el algoritmo utilizado.

6.4.5.1.1. Elección del parámetro para la regularización de TSVD.

A partir de la representación de *Picard*, puede verse que el parámetro k puede elegirse de las abscisas. Aquí es posible ver cuántos valores singulares son dignos de confianza, y donde la condición discreta de *Picard* ya no se satisface.

La solución mejora hasta que no se cumple la condición discreta de *Picard*. A partir de ahí, aumenta el error entre las soluciones. Una buena elección de k es por lo tanto, el número de valores singulares que permiten que la condición de *Picard* se satisfaga. Debido a que para problemas a gran escala la representación de *Picard* no siempre es factible, es necesario encontrar algún método para definir este punto óptimo.

Hansen ha desarrollado varios algoritmos para un cálculo adecuado de dicho vértice en la curva L [*Hansen*, 1992] (minimizando la distancia al origen de referencia, o calculando el punto de curvatura máxima).

La existencia de dicho vértice en esta curva L se justifica debido al comportamiento relativo de la norma del vector de la solución y de la norma del vector que contiene los residuos (errores) en el cálculo del espectro, ya que ambas funciones, al representarse como función del número de valores singulares hechos cero, tienen comportamiento monótono de signo opuesto.

El algoritmo hace cero las componentes del vector solución que resulten negativas al resolver el sistema de ecuaciones; dichas componentes obviamente carecen de sentido físico. Si el cálculo de la norma del vector solución es previo al momento en que el algoritmo hace cero las soluciones negativas, entonces se obtiene una curva L con forma típica en representación *log-log*, con una parte escarpada por encima del vértice. Si el cálculo de la norma del vector solución es posterior al momento en que el algoritmo hace cero las soluciones negativas, ello da lugar a más sentido físico, ya que debido a la naturaleza del problema físico no pueden existir soluciones negativas, entonces la forma de la curva L obtenida se aleja de la apariencia usual en forma de L , tal y como se mostrará más adelante.

6.4.5.2. Descomposición en valores singulares truncada modificada (MTSVD).

En MTSVD, la norma-2 euclídea $\|x\|_2$, se sustituye por la seminorma $\|L_p x\|_2$, donde L_p es una aproximación discreta del operador derivativo p .

Con este método se pueden producir soluciones con una planicidad máxima para $p=1$, o mínima rugosidad para $p=2$, suprimiendo componentes de alta frecuencia, donde L_p se puede tomar como:

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & \ddots & -1 & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & & 1 & -1 \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad L_2 = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & -1 & \\ & & & \ddots & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

La solución de MTSVD viene dada por:

$$x_{L,k} = x_k - V_k (L_p \cdot V_k)^+ L_p \cdot x_k \quad (6.63)$$

donde $(L_p \cdot V_k)^+$ es la pseudoinversa de $L_p \cdot V_k$.

6.4.5.2.1. Elección del parámetro para la regularización de MTSVD.

La curva L nos permite establecer el número de valores singulares a despreciar y el valor adecuado del parámetro de regularización. Este punto se sitúa en la curva donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente, en este caso, se busca el valor que hace $\min \{ \|L_p x\|_2 \}$ sujeto a $\min \{ \|A_k x - b\|_2 \}$.

6.4.5.3. Procedimiento de Regularización de *Tikhonov*.

Sin duda, una de las técnicas de regularización más común y conocida es la regularización de *Tikhonov* [*Tikhonov*, 1963]. La idea central en este método es la definición de la solución regularizada x_λ como aquella que minimiza la combinación ponderada (mediante λ) de la norma residual del sistema lineal de ecuaciones que se desea resolver y a la del requerimiento de que la norma de la solución sea pequeña. En forma general la solución regularizada x_λ , se define mediante:

$$x_\lambda = \arg \lambda \min (\|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|Lx\|_2^2) \quad (6.64)$$

donde L es una matriz general con rango de columnas completo, y que normalmente está relacionado con algún operador de derivación [*Hansen*, 1992].

Es fácil observar que x_λ es una solución única si los espacios nulos de A y L interseccionan trivialmente, (como suelen hacer en la práctica).

Aquí λ es el parámetro de regularización o el parámetro de regularización de *Tikhonov* y debe ser no negativo. L puede elegirse como una matriz de ponderación o como un operador derivativo discreto, añadiendo información adicional al problema.

Un problema de regularización se dice que se encuentra en su forma estándar si la matriz L es la matriz de identidad. En muchas aplicaciones, la regularización de la forma estándar no es la mejor opción, es decir, se debe utilizar $L \neq I_n$. La elección adecuada de la matriz L depende de la aplicación en particular, pero a menudo una aproximación al primer o al segundo operador derivativo da buenos resultados.

En este trabajo nos centraremos en L igual que la matriz de identidad, $L = I_n$.

El algoritmo más eficiente para el tratamiento numérico del método de *Tikhonov* para una matriz de regularización general L consta de tres pasos:

En primer lugar, el problema se transforma en una forma estándar mediante la factorización QR de L^T . En álgebra lineal, la descomposición o factorización QR de una matriz es una descomposición de la misma como producto de una matriz ortogonal por una triangular superior. La descomposición QR es la base del algoritmo QR utilizado para el cálculo de los vectores y valores propios de una matriz.

$$L^T = K R = (K_p K_0) \begin{pmatrix} R_p \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.65)$$

Se observa que mientras L tiene un rango máximo, su pseudoinversa es más simple: $L^T = K_p R_p^{-T}$. Además, las columnas de K_o son una ortonormal para el espacio nulo de L . Se computa la factorización QR de AK_o :

$$AK_o = HT = (H_o H_q) \begin{pmatrix} T_o \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.66)$$

Entonces, las cantidades transformadas \bar{A} y \bar{b} se dan por las siguientes identidades:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= H_q^T A L = H_q^T A K_p R_p^{-T} \\ \bar{b} &= H_q^T b \end{aligned} \quad (6.67)$$

($\bar{A} = A$ si $L = I_n$), entonces la matriz \bar{A} se transforma en una matriz bidiagonal superior $\rho \times \rho$ \bar{B} con transformaciones ortogonales a derechas e izquierdas.

$$\bar{A} = \bar{U} \bar{B} \bar{V}^T \quad (6.68)$$

y finalmente el resultado disperso del problema con \bar{B} se resuelve para $\bar{V}^T \bar{x}_\lambda$ y la solución se transforma de nuevo a la manera original mediante:

$$x = L \bar{x} + K_o T_o^{-1} H_o^T (b - A L \bar{x}) \quad (6.69)$$

De acuerdo a la ecuación (6.64), se establece que λ es un balance entre los dos términos. Los dos términos pueden expresarse como:

- $\|Ax - b\|_2^2$, que es una medida de lo bien que x se ajusta a la medición b
- $\|x\|_2^2$, que es un término de regularización.

Vemos que si $\lambda = 0$, tenemos un problema de Mínimos Cuadrados. Además, cuando $\lambda \rightarrow \infty$ la solución $x_\lambda \rightarrow 0$, y filtrará todos los componentes.

Escribiendo la regularización de *Tikhonov* en ecuaciones normales y usando el SVD para escribir la solución:

$$\begin{aligned} x_\lambda &= (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T b \\ &= (V \Sigma^T U^T U \Sigma V^T + \lambda^2 I)^{-1} A^T V \Sigma U^T b \\ &= V (\Sigma^2 + \lambda^2 I)^{-1} \Sigma U^T b \end{aligned} \quad (6.70)$$

Se escribe:

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^k f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (6.71)$$

siendo f_1, \dots, f_n los factores de filtro de la regularización de *Tikhonov*, dados por

$$f_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \approx \begin{cases} 1, & \text{si } \sigma_i \gg \lambda \\ \sigma_i^2/\lambda^2, & \text{si } \sigma_i \ll \lambda. \end{cases} \quad (6.72)$$

Estos factores de filtro minimizan las contribuciones de la mayoría de los valores singulares cuando λ es grande, mientras que si λ es pequeño, la mayoría de los componentes SVD son usados. Es fácil de ver, que si se establece $f_i = 1, \forall i$, la solución regulariza de *Tikhonov* es de hecho la solución de mínimos cuadrados.

Si se sustituye por:

$$f_i = \begin{cases} 1, & \text{si } \sigma_i \geq \sigma_k \\ 0, & \text{si } \sigma_i < \sigma_k \end{cases} \quad (6.73)$$

se trata de TSVD.

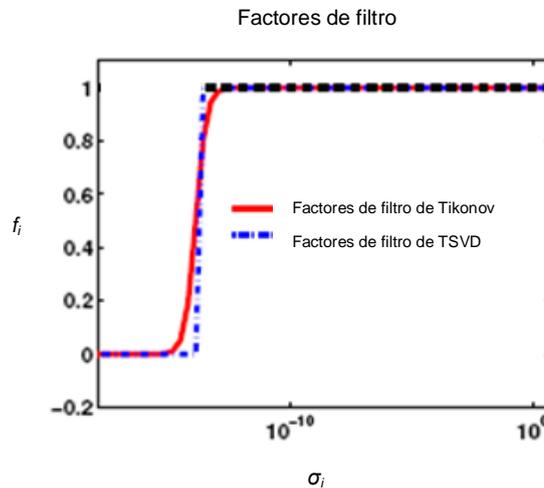


Figura 6.35. Comparación del factor de filtro para TSVD y *Tikhonov*.

En general, se observa que al igual que en el método TSVD, la regularización por *Tikhonov* ignora los valores singulares más pequeños, y por lo tanto las contribuciones de los componentes están dominadas por el ruido. Sin embargo, el filtro se hace más suave.

En el método TSVD se filtran todos los componentes con $\sigma_i < \sigma_k$ y además el parámetro de regularización, k es discreto. Si se busca un filtro más suave, se puede utilizar la regularización de

Tikhonov. Esta regularización ofrece un parámetro de regularización continuo. No sólo intenta ajustar la solución a la solución exacta, sino que también penaliza las normas de gran tamaño. Con ello la solución será un balance entre los datos de b y la adquisición de una solución fiable.

La elección de λ es realmente muy importante y puede tener una influencia drástica sobre la calidad de la solución regularizada.

Los parámetros de regularización por *Tikhonov* determinan si la solución regularizada se ajustará a los datos o si eliminarán la mayor parte del ruido. Cuando λ es muy grande, se añade demasiada regularización y el término $\|Ax - b\|_2$, será grande, y la solución no se ajustará a los datos de b . Por otro lado, si λ es pequeño y se aplica muy poca regularización (*undersmoothing*), la solución estará dominada por el ruido, tal y como lo estaba la solución inicial. Por lo tanto, es necesario encontrar un buen método para establecer un valor aceptable para λ .

6.4.5.3.1. Elección del parámetro para la regularización de *Tikhonov*.

Con objeto de encontrar el valor óptimo de λ para la regularización de *Tikhonov*, se necesita estudiar dos parámetros. Estos son la solución de la norma, $\|x_\lambda\|_2$, y la norma residual, $\|Ax - b\|_2$ que satisfacen:

$$x_\lambda = \sum_{i=1}^n f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (6.74)$$

$$\|x_\lambda\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(f_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} \right)^2, \quad (6.75)$$

y

$$b - Ax_\lambda = \sum_{i=1}^n (1 - f_i) u_i^T b u_i \quad (6.76)$$

$$\|Ax_\lambda - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^n ((1 - f_i) u_i^T b)^2 + \sum_{i=n+1}^m ((u_i^T b) u_i)^2 \quad (6.77)$$

Cuando se minimizan cada una de las dos normas, se observa que:

- $\|Ax_\lambda - b\|_2^2$ es pequeño cuando f_i se escoge cercano a 1.
- $\|x_\lambda\|_2^2$ es pequeño cuando f_i se escoge cercano a 0.

Para lograr una solución de norma pequeña, λ debe ser grande, y para lograr una norma residual pequeña, λ debe ser pequeña.

A fin de encontrar un buen compromiso entre las normas y, por lo tanto, el mínimo de la regularización de *Tikhonov*, se puede utilizar una figura. Esa figura es una curva de equilibrio, que ilustran el efecto sobre ambos parámetros cuando λ varía. Dibujando la norma de solución junto con la norma residual en escala logarítmica se mostrará el efecto sobre las normas y es útil para encontrar la mejor λ . Para comprender cómo se comporta una curva tal, tenemos en cuenta el comportamiento de las dos normas.

La forma de esta curva es similar a una letra mayúscula *L*. De esta forma obtiene su nombre, la curva *L*. Describe el equilibrio entre la solución de la norma $\|x_\lambda\|_2$ y la norma residual $\|Ax - b\|_2$.

6.5. Metodología del gradiente de la curva de dosis en profundidad (GDP).

Volviendo a la terminología inicial de acuerdo al apartado 6.4.1, siendo $\rho(E)$ el espectro incógnita de la ecuación, $d(x)$ el término independiente de la relación matricial que hace referencia a la curva de dosis en profundidad, y por último, $d_E(x)$ la matriz respuesta.

Tal y como se mencionó en el apartado 6.3, los valores singulares de la integral $d_E(x)$ de la ecuación:

$$d(x) = \int_0^{E_{max}} d_E(x) \rho(E) dE \quad (6.78)$$

están muy espaciados y esto acentúa el mal condicionamiento del problema inverso. En particular, el gran tamaño relativo del primer valor singular es particularmente problemático. Esto es debido a que la escala del problema inverso viene definida por el primer valor singular, como puede verse en los criterios para trincar la diagonalización utilizados para trincar la matriz respuesta.

Si fuera posible reducir la magnitud del primer valor singular con respecto a los posteriores, el problema inverso estaría mejor condicionado. Se puede intentar hacer esto tomando la derivada espacial de la ecuación (6.22). Heurísticamente, esto debería aumentar las contribuciones de los componentes altamente oscilatorios mientras que atenuaría las de los componentes con menos fluctuaciones.

Se muestra a continuación que esto es cierto. Realizando la derivada de (6.22) se obtiene otra ecuación lineal en que basar un problema inverso para el cálculo del espectro ρ (referido como el método GDP).

$$d'(x) = \int_0^{E_{max}} \frac{\partial d_E(x)}{\partial x} \rho(E) dE \quad (6.79)$$

En situaciones reales donde el ruido es un factor importante, la ecuación de los gradientes de la dosis en profundidad (GDP) conduce a un problema inverso que está significativamente mejor condicionado que el problema inverso para el espectro basado en los valores directos de la dosis en profundidad (DP).

Debido a esta mejora del mal condicionamiento, se puede mejorar significativamente la resolución del espectro *Bremsstrahlung* reconstruido.

Puede comprobarse que la derivada de $d_E(x)$, al igual que en el caso del método DP tiene una norma cuadrática finita ya que:

$$\int_0^{E_{max}} dE \int_0^{\infty} dx d_E(x)^2 < \infty \quad (6.80)$$

Esto permite una diagonalización que tiene diferentes valores y funciones singulares que el método DP:

$$\frac{\partial d_E(x)}{\partial x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^M \psi_n(x) \cdot \lambda_m \cdot \xi_m(E) \quad (6.81)$$

Al igual que con el método anterior (DP), se puede resolver el problema inverso basado en los gradientes de las curvas de dosis en profundidad para obtener una estimación de la distribución espectral:

$$\rho_{GDP}(E) \approx \sum_{n=1}^M \frac{\int_0^{\infty} d'(x) \psi_n(x) dx}{\mu_n} \xi_n(E) \quad (6.82)$$

Para realizar la derivada de las curvas de dosis en profundidad, los cálculos requieren que cada curva de dosis generada a partir de la simulación de sucesivos haces monoenergéticos por Monte Carlo sea ajustada a una función analítica para poder realizar la derivada sobre esta. Se han obtenido buenos resultados utilizando polinomios de grado 10.

Capítulo 7

Resultados

Los resultados que se presentan en este capítulo se separan en dos estudios diferentes. Por un lado se presentan los resultados que validan la simulación de la unidad de radioterapia. Por otro lado se presentan los resultados obtenidos en la reconstrucción de espectros con las diferentes metodologías descritas en el capítulo 6.

7.1. Validación del modelo de simulación de la unidad de radioterapia.

7.1.1. Presentación de los resultados.

En este apartado se presentan las diferentes curvas de dosis calculadas a partir del modelo del cabezal de irradiación simulado con el MCNP5 tal y como se definió en el apartado 6.2. Estas curvas se han calculado con diferentes tamaños de campo, y en cuba de agua homogénea o en presencia de una heterogeneidad en el interior de la cuba.

La validación de los resultados dosimétricos obtenidos tras la simulación se ha realizado comparando las curvas de dosis relativa en profundidad y perfil con las medidas experimentales realizadas en la unidad de radioterapia *Elekta Precise* en el Hospital Clínic Universitari de València.

Concretamente, se han utilizado seis tamaños de campo diferentes. Para cada tamaño de irradiación, se ha calculado el rendimiento en profundidad, y los perfiles a distintas profundidades en una cuba de agua homogénea y heterogénea.

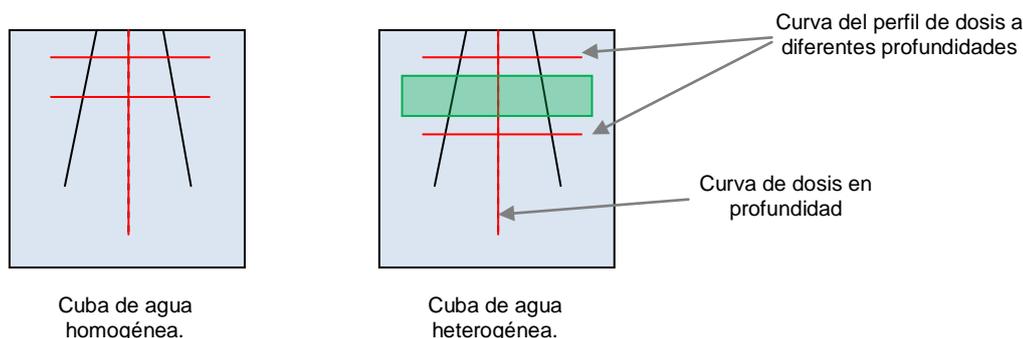


Figura 7.1. Esquema de las curvas en profundidad y perfil calculadas por simulación Monte Carlo y validadas con datos experimentales.

Los criterios de aceptabilidad requeridos para comprobar la exactitud de los cálculos de las distribuciones de dosis proporcionadas por un sistema de planificación en radioterapia han sido objeto

de numerosos estudios y controversias. No es simple enunciar tales criterios puesto que la exactitud de los cálculos de dosis depende a la vez de los algoritmos de cálculo utilizados, de las zonas geométricas del haz (penumbra, *Build up*...) y de los materiales atravesados por el haz (heterogeneidades). No obstante, el error máximo de la dosis entregada, en todo el volumen irradiado, debe ser inferior al 5% (1σ). Se admite también generalmente un 2.5% de incertidumbre sobre el ajuste del haz (simetría, homogeneidad...), del 3 al 4% sobre el cálculo de la dosis relativa por el sistema de planificación, y finalmente del 3 al 4% de incertidumbre global en la entrega del tratamiento (localización del paciente, movimientos internos y externos) [Cunningham et al., 1984], [ICRU 29].

Aunque numerosos artículos tratan sobre los distintos aspectos del control de calidad de los sistemas de planificación en radioterapia, muy poco de ellos, abordan el problema de la definición y la justificación de los criterios de aceptabilidad que permitirían cuantificar las divergencias de dosis entre las distribuciones de dosis de referencia (medidas, cálculos Montecarlo) y las distribuciones de dosis calculadas por el sistema de planificación. Se pueden citar, en referencia, los trabajos de [Brahme et al., 1988], [McCullough et al., 1980], [ICRU 42], [Van Dyk et al., 1993], [AAPM 1998] y [Venselaar et al., 2001]. Todos estos autores introducen el concepto de "separación del medio irradiado" (regiones con escaso y fuerte gradiente de dosis) para definir sus criterios de aceptabilidad.

Para eso, el haz de irradiación se segmenta en varias zonas geométricas (Figura 7.2):

- los puntos situados dentro de los límites geométricos del haz (región central con escaso gradiente de dosis),
- los puntos situados en la penumbra (región de fuerte gradiente de dosis que se define a 0,5 cm a una y otra parte los límites del haz),
- los puntos situados fuera de los límites geométricos del haz, más allá de la zona de penumbra (región con escaso gradiente de dosis),
- los puntos situados en el *Build up* (región de fuerte gradiente de dosis que se extiende desde la superficie de entrada a la dosis máxima),
- los puntos situados a lo largo del eje de incidencia del haz (región con escaso gradiente de dosis).

Se asigna un criterio de aceptabilidad, específicamente, a cada una de estas zonas.

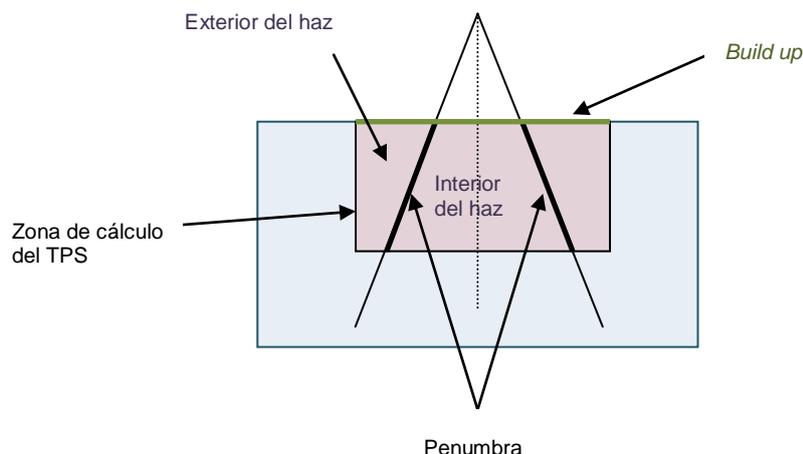


Figura 7.2. Definición de las zonas geométricas del haz (ESTRO, 2004).

Entre los autores anteriormente citados, sólo *Van Dyk et al.*, el AAPM (1998) y *Venselaar et al.*, proponen criterios de aceptabilidad adaptados a la complejidad de las aplicaciones clínicas (heterogeneidades, asimetría de los campos de irradiación...). No obstante, los valores de estos criterios de aceptabilidad dependen del concepto de normalización utilizado para las distribuciones de dosis que deben compararse:

- o con relación a una dosis medida o calculada en condiciones de referencia [*Van Dyk et al., 1999*], [AAPM 1998],
- o con relación a una dosis medida localmente [*Venselaar et al., 1991*].

En los trabajos de [*Van de Dyk et al. 1993*], recogidos por el AAPM (1998), las distribuciones de dosis calculadas y medidas en una configuración en concreto se normalizan con relación a la dosis calculada o medida a la profundidad en condiciones de referencia (campo de irradiación de 10 cm × 10 cm definido en el isocentro). La profundidad de referencia elegida, por el AAPM (1998) es la profundidad de máxima dosis.

La diferencia de dosis que resulta de la comparación de las distribuciones de dosis responde a la ecuación (7.1). Esta elección de normalización tiende a subestimar las divergencias de dosis en las regiones de dosis escasas (inferior a un 10% de la dosis máxima) ya que estas dosis bajas se anulan por las fuertes dosis obtenidas en las condiciones de referencia. Ahora bien, las escasas dosis requieren también un buen nivel de precisión ya que corresponden a las dosis recibidas por los órganos de riesgo.

$$Error = 100 \cdot \left[\left(\frac{D_{cal}}{D_{cal,ref}} \right) - \left(\frac{D_{med}}{D_{med,ref}} \right) \right] \quad (7.1)$$

donde, $D_{cal,ref}$ es la dosis calculada en el punto de normalización (profundidad de máxima dosis), $D_{med,ref}$ es la dosis medida en el punto de normalización (profundidad de máxima dosis), D_{cal} es la dosis calculada en el punto de interés y D_{med} es la dosis medida en el punto de interés.

Las distribuciones de dosis calculadas por el código MCNP, se han normalizado con relación a la dosis calculada en una en una cuba de agua de dimensiones 50 cm x 50 cm x 50 cm, en el punto de máxima dosis definido en el isocentro.

Se trata de las condiciones de referencia utilizadas para la calibración de las Unidades de Monitor del acelerador lineal [AAPM].

La tabla inferior (Tabla 7.1) presenta los criterios de aceptabilidad sugeridos por el AAPM para el control calidad de los sistemas de planificación (TPS). El IAEA reanudó estos criterios en 2004 en el protocolo TRS 430 [IAEA TRS-430].

Tabla 7.1. Criterios de aceptabilidad para cálculos de dosis para haces externos en campos cuadrados.

	Eje del haz	Interior del haz	Exterior del haz	Penumbra	Build up
Test	<i>a</i> (%)	<i>b</i> (%)	<i>c</i> (%)	<i>d</i> (mm)	<i>e</i> (%)
Campos cuadrados	1	1.5	2	2	20

La ilustración siguiente (Figura 7.3) permite ilustrar las regiones del rendimiento en profundidad y perfil de dosis que se hacen referencia en los criterios de aceptabilidad definidos en la tabla anterior (Tabla 7.1). En las regiones de poco gradiente de dosis, los criterios de aceptabilidad se expresan en porcentaje de dosis (se evalúa una divergencia de dosis), y en las regiones con fuerte gradiente de dosis, se expresan los criterios de aceptabilidad en milímetros (se evalúa una divergencia de distancia).

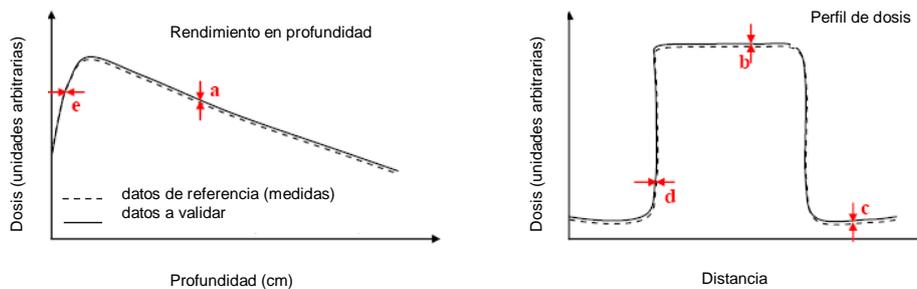


Figura 7.3. Ilustración de las diferentes regiones donde se aplican los criterios de aceptabilidad a-e.

Los resultados presentados en este apartado corresponden a estas situaciones simples y representan cubos de 50 cm x 50 cm x 50 cm. Las distribuciones de dosis extraídas del cálculo 3D serán: los rendimientos en profundidad y los perfiles de dosis calculados a las profundidades 5 cm, 10 cm y 20 cm.

7.1.2. Validación de los resultados del modelo del equipo de radioterapia.

7.1.2.1. Cuba de agua homogénea.

Las curvas siguientes (Figuras 7.4 y 7.5) muestran la comparación de los valores de dosis experimentales con los calculados por medio de la simulación, en el primer caso utilizando el *tally* *F8 y en el segundo el *tally* FMESH. Se presentan aquí los resultados obtenidos de las simulaciones utilizando una cuba homogénea con un tamaño de campo de irradiación de 10 cm x 10 cm. El número de partículas seguidas fue de $1 \cdot 10^9$ en la primera parte de la simulación. Con este número de partículas, después de atravesar todo el colimador, quedaron registradas en la superficie de espacio de fases (SSW, *Surface Source Write*) un número determinado de partículas que fueron utilizadas en la segunda parte de la simulación a modo de fuente (SSR, *Surface Source Read*), (apartado 6.2.5).

La representación de las curvas de rendimiento en profundidad obtenidas incluye en este caso la barra de error 2σ asociada a la incertidumbre del código.

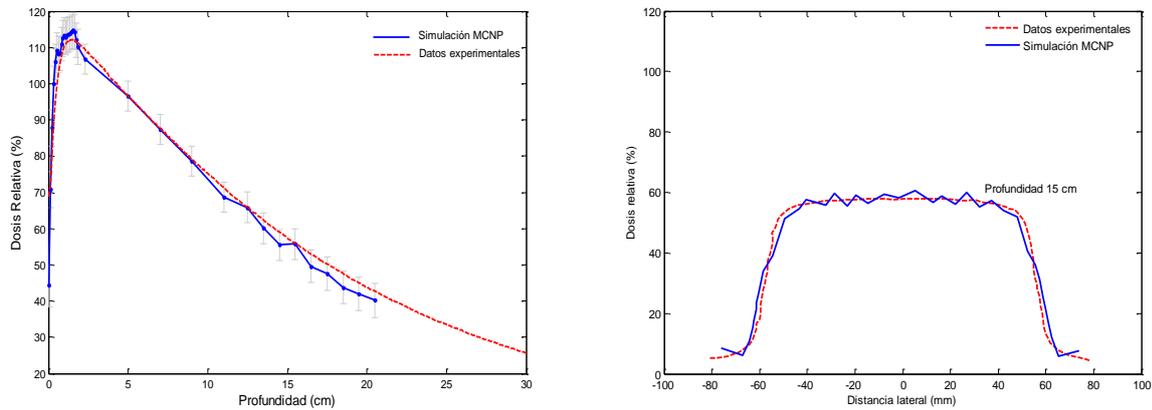


Figura 7.4. Curvas de dosis en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV. Cálculos recogidos con el tally *F8.

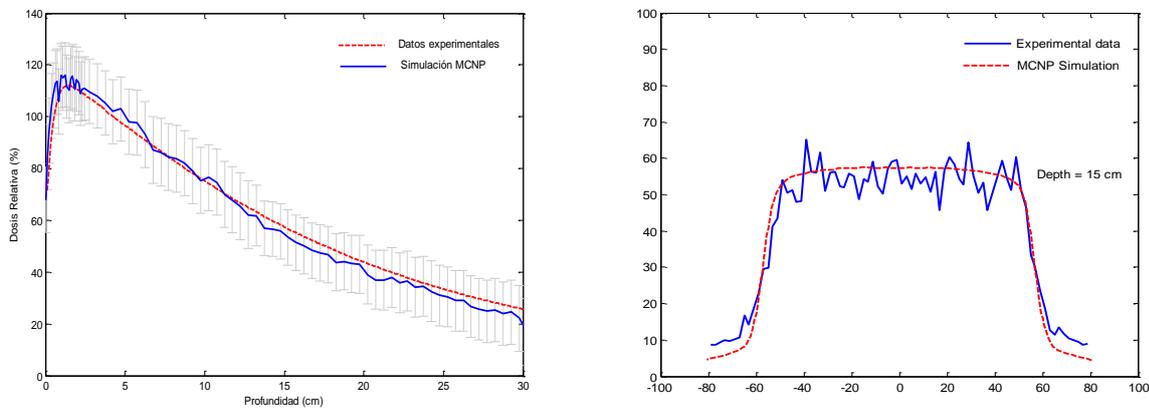


Figura 7.5. Curvas de dosis en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV. Cálculos recogidos con el tally FMESH.

Estas primeras simulaciones han utilizado como primera hipótesis del espectro de 6 MeV modelizado, el espectro de *Sheikh-Bagheri* y *Rogers* extraído de la literatura [*Sheikh-Bagheri* y *Rogers*, 2002]. Las diferencias encontradas entre las curvas de dosis en profundidad experimentales y simuladas pueden deberse en parte a que este espectro no es exactamente el mismo que el emitido por la unidad de radioterapia del Hospital Clínic Universitari de *València* objeto de este estudio. De ahí la necesidad de reconstruir el espectro mediante una metodología alternativa, objetivo que se aborda en el siguiente apartado.

En la comparación de las curvas de dosis en profundidad con los datos experimentales se observa que los resultados de la simulación presentan en ambos casos (*F8, FMESH) una estimación inferior de la dosis, efecto que se acentúa conforme aumenta la profundidad.

Por otro lado, es remarcable las oscilaciones encontradas en la zona interior del campo de la curva de perfil de dosis en el caso de las simulaciones ejecutadas con el registro de dosis FMESH en comparación con aquellas que hacen uso del registro *F8. La principal causa de esta diferencia en las oscilación de los resultados es el tamaño de la celda de registro empleados para voxelizar la cuba de agua. El modelo con FMESH ha utilizado un mallado general de la cuba de 2 mm x 2 mm x 2 mm, excepto la zona superficial del agua, donde el mallado se ha reducido a 1 mm³ para reproducir mejor la zona de variación de dosis del *Build up*.

En cambio, las celdas voxelizadas mediante volúmenes independientes en el modelo con el registro *F8 tienen un tamaño de 5 mm x 5 mm x 5 mm, excepto la zona de entrada del haz a la cuba de agua donde el mallado, al igual que en el caso anterior, se ha reducido a 1 mm³. Las celdas de registro de la curva de perfil de dosis son de mayor tamaño y permiten por tanto que una mayor cantidad de partículas queden registradas y con ello la incertidumbre asociada a los resultados mejora de manera importante.

En la figura siguiente (Figura 7.6) se puede observar la distribución tridimensional del perfil de dosis relativa a una profundidad de 10 cm de la cuba. Es apreciable en este caso (modelo con mallado FMESH de 1 mm³) que las oscilaciones en la zona de registro son abundantes, debido precisamente a la poca cantidad de partículas que es capaz de registrarse en un volumen tan pequeño y por tanto la elevada incertidumbre asociada que presentan estos valores.

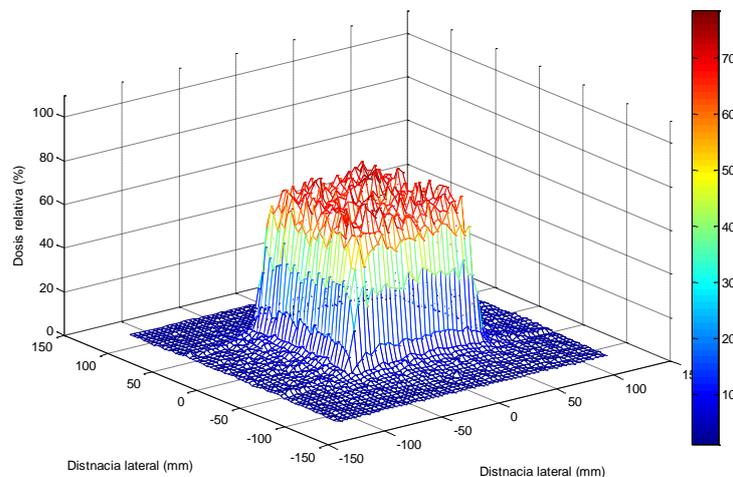


Figura 7.6. Distribución de dosis tridimensional a 10 cm de la superficie de la cuba de agua para un haz de 6 MeV. Cálculos recogidos con el *tally* FMESH.

Es importante por tanto buscar un tamaño de voxel lo suficientemente grande para que la incertidumbre de los resultados se encuentre dentro de límites aceptables, pero lo suficientemente pequeño para que se pueda definir con precisión la zona de penumbra (con un alto gradiente de dosis).

Estos primeros resultados han permitido estudiar además la diferencia de velocidad computacional que implica utilizar el *tally* FMESH en lugar del *F8, ambos explicados en detalle en el capítulo 5. En cuanto al tiempo de cálculo, la simulación completa que incluye el *tally* FMESH es 15 veces más rápida que la que utiliza el *F8 [Juste, 2010b].

Tabla 7.2. Tiempos de computación.

TALLY		Tiempo CPU (16 CPU's)	
voxelización	F8	Modo PE	7381.37 minutos
FMESH	FMESH4	Modo PE	491.53 minutos

En ambos casos, las diferencias relativas entre las medidas experimentales y las curvas de dosis relativa en profundidad simuladas han sido inferiores al 5% en todos los puntos evaluados.

Sin embargo, tal y como se ha explicado, la curva del perfil de dosis queda mejor definida con el *tally* *F8, debido al mayor tamaño de las celdas de registro utilizadas en este caso.

De acuerdo a estos datos obtenidos, queda de manifiesto la conveniencia aumentar el número de partículas utilizadas para mejorar la incertidumbre de las curvas del perfil de dosis, así como aumentar el tamaño de las celdas en el caso del modelo con el *tally* FMESH para el cálculo de las restantes curvas de dosis para diferentes tamaños de campo.

Aumentando el número de partículas simuladas al doble, es decir, $2 \cdot 10^9$, se incrementan las partículas registradas en la superficie de espacio de fases (SSW). Además, los errores asociados a la simulación se reducen considerablemente. Las figuras siguientes (Figura 7.6, 7.7, 7.8, 7.9 y 7.10) representan los nuevos resultados obtenidos utilizando el *tally* FMESH con un mallado lateral que permite el registro de dosis por cada centímetro en la parte interior del haz (zona donde el perfil de dosis no varía) y de 3 mm en la zona lateral para reproducir de mejor manera la zona de penumbra. En cuanto al mallado en el eje central de profundidad, se ha optado por celdas de 1 cm^2 de superficie perpendicular a la entrada del haz y 1 mm de profundidad. Estos tamaños de celdas ofrecen resultados satisfactorios en cuanto a oscilaciones debidas a la incertidumbre asociada a la simulación se refiere.

Con esta nueva configuración se han ejecutado diferentes simulaciones en una cuba homogénea irradiada con un haz de fotones de 6 MeV y diferentes tamaños de campo de irradiación de 5 cm x 5 cm, 10 cm x 10 cm, 15 cm x 15 cm, 20 cm x 20 cm y 30 cm x 30 cm.

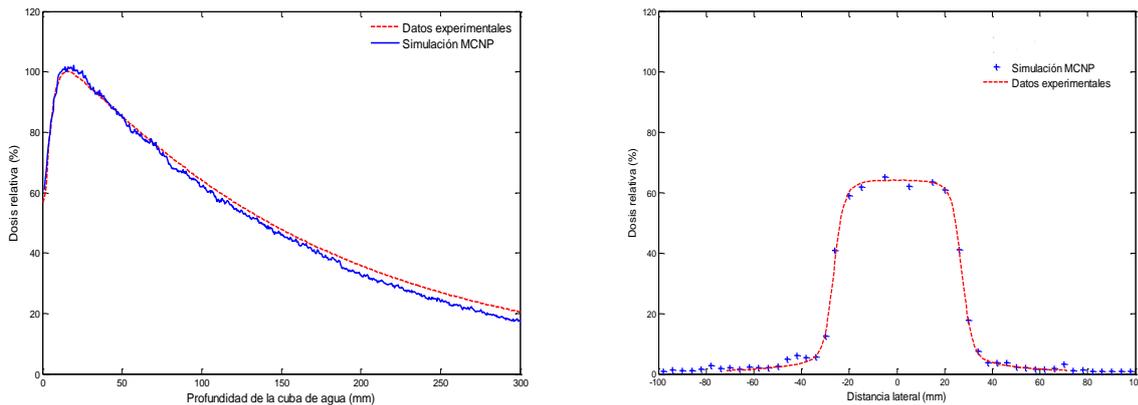


Figura 7.7. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 5 cm x 5 cm.

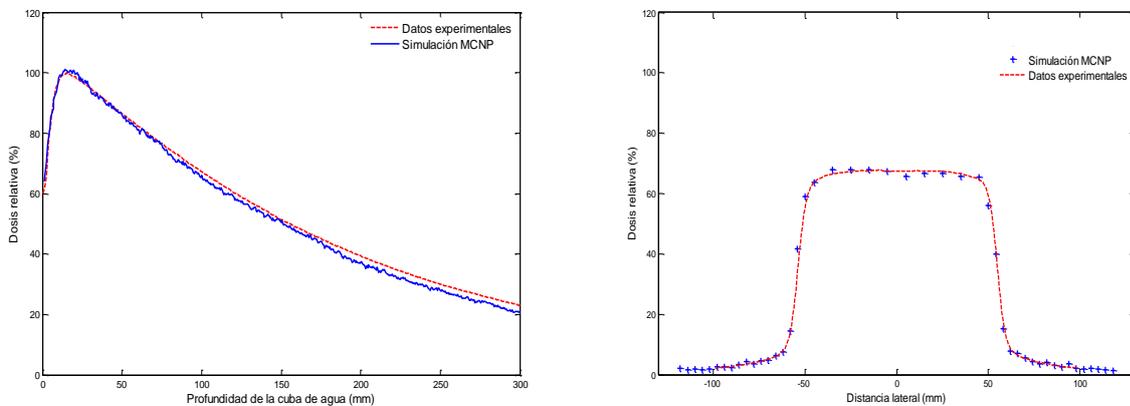


Figura 7.8. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 10 cm x 10 cm.

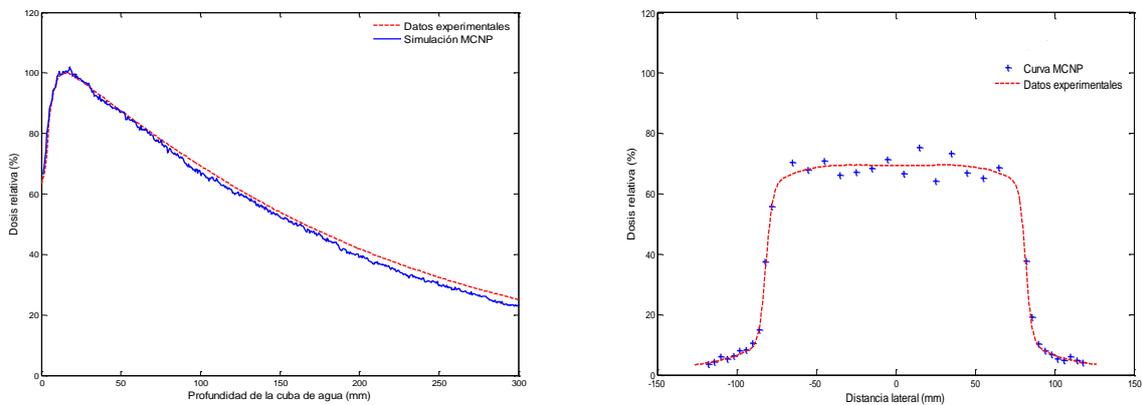


Figura 7.9. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 15 cm x 15 cm.

Se presentan a continuación (Figura 7.10) las curvas de dosis en profundidad relativas obtenidas por simulación para tamaños de campo de 20 cm x 20 cm y 30 cm x 30 cm.

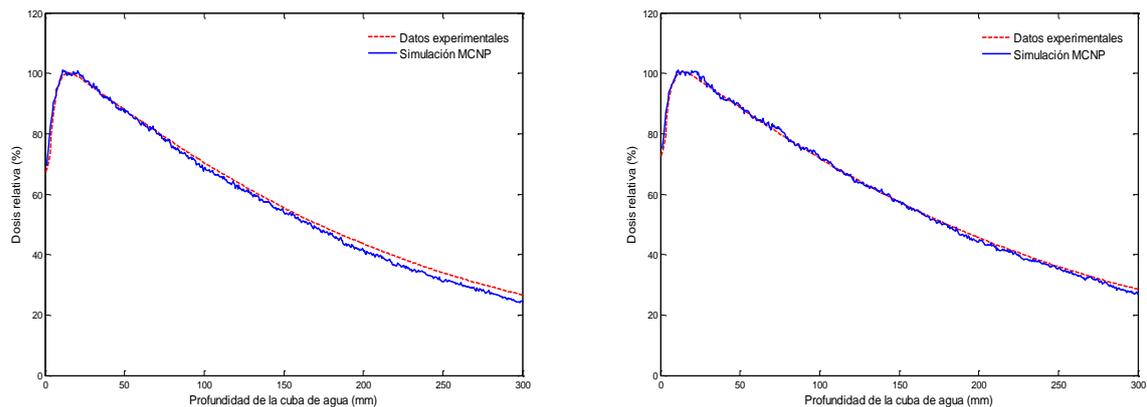


Figura 7.10. Curva de dosis relativa en profundidad para un haz de 6 MeV. Tamaño de campo 20 cm x 20 cm y 30 cm x 30 cm.

Estos nuevos resultados, en cuyas simulaciones se ha aumentado el número de partículas, así como el tamaño del mallado de registro en la zona interior del perfil de dosis, presentan un error asociado inferior. Se puede comprobar en las figuras como las oscilaciones han disminuido de manera considerable y las curvas se ajustan de manera más precisa a las medidas experimentales.

Aún así, la curva de dosis en profundidad simulada se encuentra por debajo de la experimental, sobretodo a profundidades mayores. La razón de esto, tal y como se ha explicado, se debe al espectro fotónico de 6 MeV utilizado [Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002], el cual no coincide con el emitido por la unidad de radioterapia del Hospital Clínic Universitari de València. Los apartados 7.3 y 7.4 centran su estudio en la reconstrucción del espectro correspondiente a la unidad de radioterapia estudiada, *Elekta Precise*.

Tabla 7.3. Errores de las simulaciones.

Test	Eje del haz	Interior del haz	Exterior del haz	Penumbra	Buil-up
	<i>a</i> (%)	<i>b</i> (%)	<i>c</i> (%)	<i>d</i> (mm)	<i>e</i> (%)
Campo cuadrado 5x5	3	3	1	0.05	1
Campo cuadrado 10x10	2	2	1	0.05	1
Campo cuadrado 15x15	2	5	1	0.05	1
Campo cuadrado 20x20	2	-	1	0.05	1
Campo cuadrado 30x30	0.05	-	0.05	0.05	1

De acuerdo a estos resultados, se puede afirmar que el código MCNP5 es capaz de simular el funcionamiento del cabezal de un acelerador clínico y por lo tanto, predecir con la deposición tridimensional de dosis empleando para ello un corto tiempo de cálculo (Tabla 7.3). Esto confirma la fiabilidad del modelo computacional, demostrando la eficiencia de este método para considerar su aplicación en planificación en tratamientos de radioterapia.

La tabla siguiente (Tabla 7.4) presenta los tiempos de cálculo necesarios para simular cada uno de los modelos con diferentes tamaños de campo, así como el número de partículas registradas en la superficie de fase a la salida del colimador.

Tabla 7.4. Tiempo de cálculo con 16 CPU's.

Test	Numero de partículas registradas en la superficie de espacio de fases	Número de partículas simuladas en la primera etapa	Tiempo de cálculo (min)
Campo cuadrado 5x5	15854541	$2 \cdot 10^9$	8027.71
Campo cuadrado 10x10	26194412	$5 \cdot 10^9$	17045.30
Campo cuadrado 15x15	17848235	$2 \cdot 10^9$	8042.60
Campo cuadrado 20x20	19302636	$2 \cdot 10^9$	8036.23
Campo cuadrado 30x30	21210148	$2 \cdot 10^9$	8006.82
Campo cuadrado 40x40	24210279	$2 \cdot 10^9$	8009.57

7.1.2.2. Cuba de agua heterogénea.

En este apartado se presentan los resultados calculados en la cuba de agua que incluye en su interior una heterogeneidad que consiste en una pieza de material plástico, tal y como se detalló en el apartado 6.2.6.1.

Se ha estudiado la fiabilidad del modelo en zonas de interfase. La caracterización de la absorción de dosis en un tejido de baja densidad se ha realizado introduciendo en la cuba una pieza de poliestireno extruido (97% aire y 3% poliestireno) con una densidad de 0.0311 g/cm^3 y con dimensiones $30 \text{ cm} \times 10 \text{ cm} \times 8 \text{ cm}$. La superficie de la cuba de agua ya sea en condiciones de homogeneidad o heterogeneidad (cuando incluye la pieza de poliestireno) se sitúa a 100 cm de la fuente.

Las curvas situadas a continuación (Figuras 7.11 y 7.12) muestran la comparación de los valores de dosis experimentales con los calculados por medio de la simulación utilizando el *tally* *F8. Las simulaciones ha utilizado un tamaño campo de irradiación de $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$ y se han seguido $1 \cdot 10^9$ partículas [Juste, 2010a].

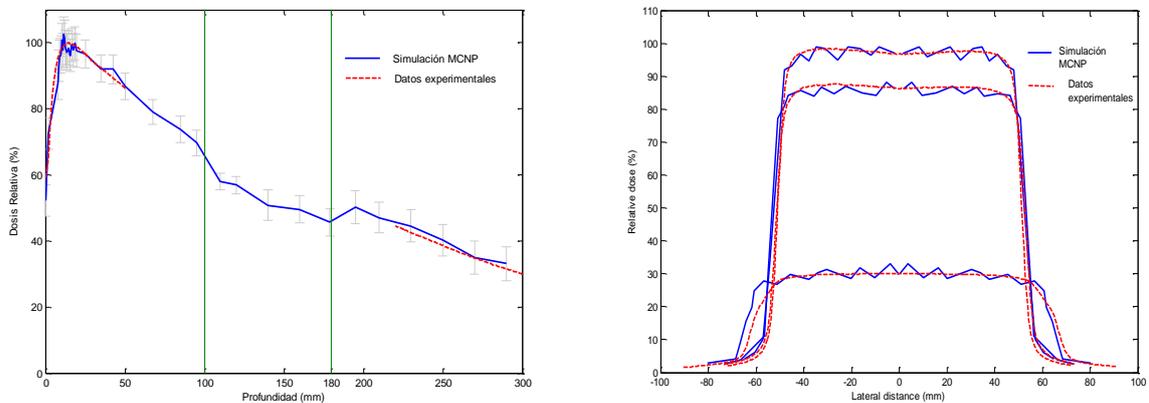


Figura 7.11. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV y tamaño de campo de $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$. Cálculos recogidos con el *tally* *F8.

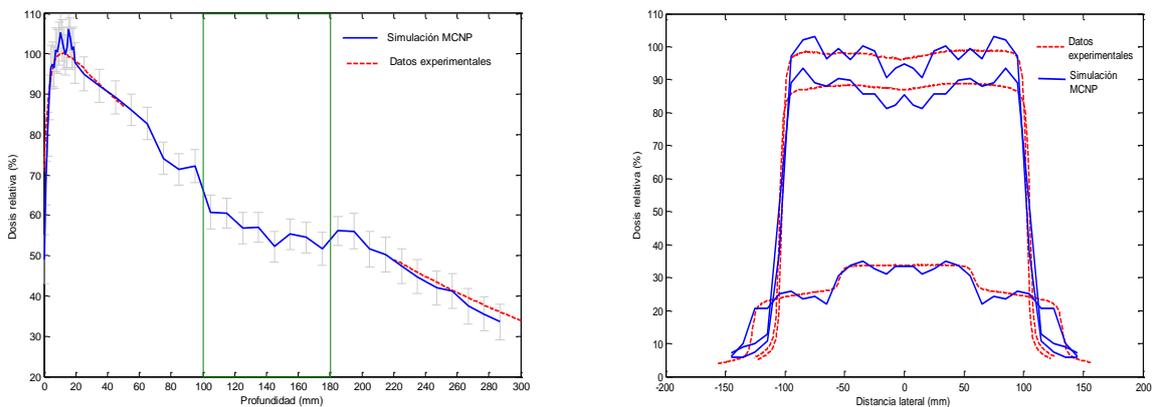


Figura 7.12. Curvas de dosis relativa en profundidad y perfil para un haz de 6 MeV y tamaño de campo de $20 \text{ cm} \times 20 \text{ cm}$. Cálculos recogidos con el *tally* *F8.

Estas figuras presentan los resultados obtenidos de las simulaciones utilizando una cuba heterogénea con un tamaño de campo de irradiación de 10 cm x 10 cm y 20 cm x 20 cm. El número de partículas seguidas fue de $1 \cdot 10^9$ en la primera parte de la simulación. Con este número de partículas, después de atravesar todo el colimador, quedaron registradas en la superficie de espacio de fases (SSW, *Surface Source Write*) un número determinado de partículas que fueron utilizadas en la segunda parte de la simulación a modo de fuente (SSR, *Surface Source Read*), (apartado 6.2.5).

La representación de las curvas de rendimiento en profundidad obtenidas incluye en este caso la barra de error 2σ asociada a la incertidumbre del código. Las bandas verdes que incluyen las imágenes de las curvas de dosis en profundidad indican la posición de la heterogeneidad en la cuba de agua.

Tal y como puede comprobarse, existe un buen ajuste entre los datos experimentales y los resultados calculados en las simulaciones; encontrándose la máxima diferencia porcentual entre dosis relativa medida y calculada siempre por debajo del 5% en todos los puntos evaluados.

7.1.2.3. Interior de la heterogeneidad.

El modelo implementado con el código MCNP también se ha comparado con el sistema de planificación en radioterapia utilizado en el Hospital Clínic Universitari de València. La dosis asignada en la práctica con este tipo de planes puede resultar problemático, especialmente cuando se está irradiando un medio heterogéneo, como es el caso de un cuerpo humano. De acuerdo con esto, la dosis calculada mediante el código de simulación Monte Carlo, MCNP5, se ha comparado con las distribuciones extraídas de un sistema comercial de tratamiento en radioterapia estándar, el PCRT 3D.

El estudio está centrado principalmente en analizar la precisión de este sistema de planificación mediante la comparación de las curvas de dosis relativa en una cuba de agua heterogénea con aquellas calculadas mediante simulación Monte Carlo.

Además, las medidas experimentales se han utilizado como referencia para comparar la validez entre el código Monte Carlo MCNP5 y el sistema de planificación en cuanto a su aplicación a la evaluación de dosis terapéuticas (Figura 7.13).

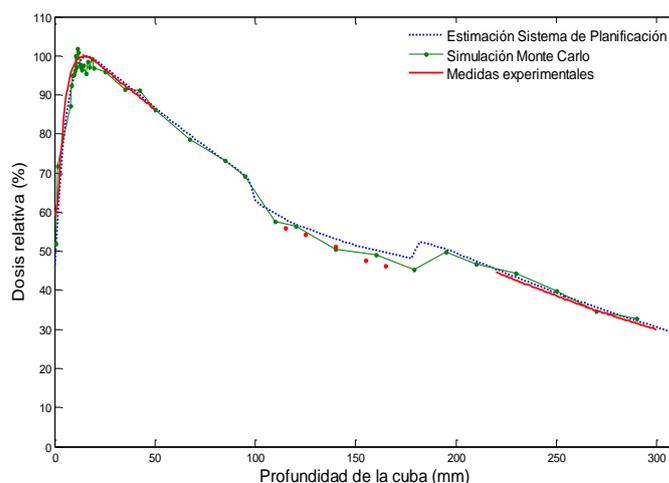


Figura 7.13. Curvas de dosis relativa en profundidad para un haz de 6 MeV y un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm.

La figura superior (Figura 7.13) compara por un lado la curva extraída del planificador comercial (curva punteada azul), por otro lado, la curva resultante de la simulación Monte Carlo (curva verde), y por último, los valores experimentales (en rojo) medidos en la cuba de agua con la heterogeneidad. Se puede apreciar tal y como se ha detallado en el apartado 6.2.6.2, los cinco puntos de los valores absolutos de dosis relativizados al máximo en el *Build up*, medidos en el interior de la pieza de poliestireno expandido de 8 cm de espesor (medio heterogéneo). Estos resultados ponen de manifiesto que con respecto a las medidas experimentales ambos sistemas sobreestiman entre un 3 y un 4 % la dosis en la zona de la heterogeneidad.

Se puede afirmar por tanto que el código MCNP es capaz de reproducir la distribución de dosis tanto en medios heterogéneos como homogéneos.

Los sistemas de planificación de tratamiento tridimensional que se comercializan usan potentes algoritmos de convolución o de Monte Carlo que requieren un conocimiento preciso del espectro del haz para llevar a cabo adecuadamente los sofisticados cálculos de dosis que implican heterogeneidades, pérdida del equilibrio de partículas cargadas y posibilidad de modificación de las características del haz. Es necesario pues determinar un método práctico y sencillo para la determinación del espectro de energía del haz de fotones emitido por este acelerador lineal médico para proporcionar una mejor precisión dosimétrica en el tratamiento.

Los apartados siguientes se centran precisamente en la reconstrucción del espectro de fotones de 6 MeV emitido por la unidad de radioterapia *Elekta Precise*, unidad con la que se han tomado todas las medidas experimentales presentadas en esta tesis.

7.2. Validación del espectro reconstruido por Schiff.

Actualmente, con objeto de mejorar la planificación de los tratamientos en radioterapia, se requiere un conocimiento más preciso de los espectros de haces fotónicos emitidos por los aceleradores lineales médicos. En este apartado se presentan los resultados de la reconstrucción de un espectro de fotones de un haz de 6 MeV mediante el desarrollo de una metodología de análisis de la dispersión.

Una vez resuelto el sistema de ecuaciones (6.6) utilizando algoritmos matemáticos de optimización, el valor obtenido para la incógnita asociada a la energía cinética del electrón inicial (T) ha sido de 6.711 MeV y el obtenido para el espesor hipotético del material del blanco (t) ha sido de 0.089 cm [Juste, 2009].

Estos valores permiten obtener el espectro de fotones utilizando la ecuación de la fluencia relativa de a una determinada energía k , es decir, la versión paramétrica de la fórmula de Schiff (6.3). Sirva de recuerdo esta ecuación, donde T hace referencia a la energía total de los electrones incidentes en el blanco (MeV), y t al espesor hipotético del material del blanco equivalente en atenuación al sistema de filtración completo. Por otro lado, $\mu_t(k)$ es el coeficiente lineal total de atenuación para el material del blanco a la energía k , extraído de la base de datos del NIST.

$$\Phi(k, T, t) = \left(\frac{1}{k}\right) \left[\left(1 - \frac{k}{T}\right) (\ln \eta - 1) + \left(\frac{k}{T}\right) (\ln \eta - 0.5) \right] e^{(-\mu_t(k) \cdot t)} \quad (6.3)$$

$$\eta = \left[\left(\frac{0.511k}{2T(T-k)}\right)^2 + \left(\frac{Z^{1/3}}{111}\right) \right]^{-1/2}$$

Para validar este espectro reconstruido, se han aplicado dos metodologías. Una de ellas consiste en comparar el espectro de 6 MeV con otro espectro ofrecido por *Sheikh-Bagheri y Rogers* [*Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002*], tal y como se presenta en la figura siguiente (Figura 7.14). La diferencia porcentual en área entre ambos espectros es menor del 6.3%.

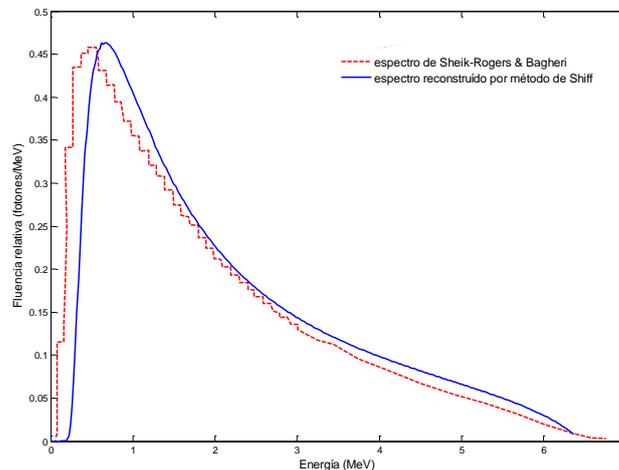


Figura 7.14. Comparación del espectro de fotones de 6 MeV reconstruido con el ofrecido por Sheikh-Bagheri y Rogers.

7.2.1. Diferencia espectral.

Con el fin de comparar objetivamente los dos espectros de fotones diferentes, el de *Sheikh-Bagheri y Rogers* y el reconstruido mediante el método de *Schiff*, y normalizados del mismo modo (tienen un área unitaria bajo sus curvas espectrales), se ha cuantificado el nivel de coincidencia en su forma espectral mediante un parámetro denominado '*diferencia espectral*'.

Esta cantidad se obtiene como sigue: en primer lugar, se calcula el valor absoluto (módulo) de las diferencias de fluencia de energía entre los respectivos intervalos energéticos individuales de ambos espectros, se suman estas diferencias individuales y se divide la suma por la cantidad total de fluencia de energía que presentan el espectro calculado por *Schiff*. En el caso de intervalos energéticos de anchura pequeña, la interpretación geométrica de la '*diferencia espectral*' así definida, sería la suma total de todas las áreas que no se encuentran bajo ambas curvas espectrales (área rallada de la figura) (Figura 7.15), dividido por el área total bajo el espectro de *Sheikh-Bagheri y Rogers* o el reconstruido mediante el método de *Schiff*. La diferencia espectral calculada de este modo es de 6.3%.

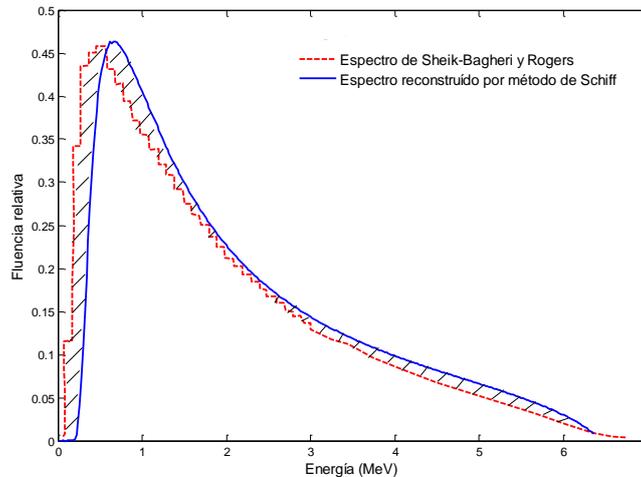


Figura 7.15. 'Diferencia espectral' es la relación de la suma del área rallada y el área total bajo el espectro de Schiff, ambos normalizados a un área bajo la curva espectral de 1.

Conviene destacar que esta diferencia no es una medida del error del espectro reconstruido, sino solo una cuantificación porcentual de la diferencia con respecto al espectro que se ha tomado como hipótesis inicial en las simulaciones, el espectro de *Sheikh-Bagheri y Rogers*.

7.2.2. Dosis en profundidad.

La validación del espectro calculado se ha completado mediante el cálculo de la dosis relativa en profundidad en el interior de una cuba de agua mediante simulación Monte Carlo.

Como otros autores han hecho [Catalá *et al.*, 1995], [Baker y Peck, 1997], hemos utilizado la simulación Monte Carlo para calcular los valores de dosis en profundidad en tamaño de campo de 10 cm x 10 cm con el espectro reconstruido mediante el análisis de la dispersión previamente descrito.

Para validar el método de reconstrucción, estos valores de dosis relativa en profundidad se comparan, a continuación, con los valores medidos experimentalmente en una cuba de agua. Asumiendo que los cálculos de Monte Carlo de valores de la dosis de profundidad para el espectro reconstruido son precisos, un eventual desacuerdo entre los valores de dosis de profundidad medidos y calculados reflejaría una falta de precisión en el método de reconstrucción empleado. Lo opuesto, sin embargo, no es cierto; un ajuste estrecho entre los valores de dosis en profundidad medidos y calculados no garantiza necesariamente un acuerdo perfecto entre espectro reconstruido y real: Partridge [Partridge, 2000] informó sobre dos espectros muy diferentes que presentaron curvas de dosis casi iguales (2%).

El procedimiento experimental junto con los resultados obtenidos de la simulación Monte Carlo ha permitido calcular un espectro de fotones cuya curva de dosis relativa en profundidad en una cuba de agua ajusta de manera precisa con las medidas tomadas experimentalmente. La curva siguiente (Figura 7.16) presenta la curva de dosis en profundidad obtenida en el eje central de una cuba de agua utilizando el espectro reconstruido de 6 MeV a partir del método de análisis de la dispersión de Schiff.

Tal y como puede comprobarse en la figura (Figura 7.16), la dosis relativa en profundidad calculada utilizando el espectro reconstruido como fuente en el modelo, coincide con los valores experimentales manteniendo un error medio por debajo del 5%.

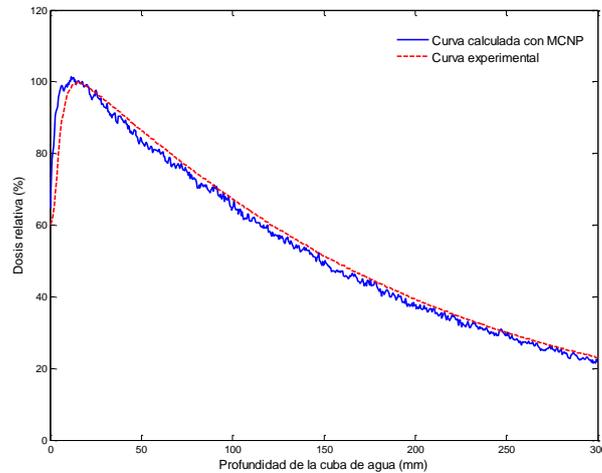


Figura 7.16. Curva de dosis en profundidad obtenida en el eje central de una cuba de agua utilizando el espectro reconstruido de 6 MeV a partir del método de análisis de la dispersión de Schiff.

Esta comparación pone de manifiesto el ajuste no del todo preciso entre las curvas de dosis medidas experimentalmente en la cuba de agua y calculadas mediante simulación Monte Carlo. Se puede observar en la figura superior (Figura 7.16) como la curva simulada queda un 2% por debajo de la experimental.

Este análisis de dispersión se ha demostrado que tiene un gran potencial como método de reconstrucción espectral ya que requiere pocas mediciones y es viable en cualquier departamento de radioterapia mediante un bloque de plástico y una cámara Farmer. Sin embargo, aunque los resultados obtenidos son alentadores, el método necesita más desarrollo para mejorar la precisión de los resultados. La reconstrucción con curvas de dispersión a partir de más puntos 10 ó 15 podría proporcionar una estabilidad mejorada para el cálculo de espectros fotónicos emitidos por aceleradores lineales.

7.3. Validación del espectro reconstruido por deconvolución.

El estudio de la reconstrucción del espectro ha discretizado el rango de energía del espectro analizado en 350 intervalos energéticos, desde 0 hasta 7 MeV. Por otro lado, la curva de dosis en profundidad se ha discretizado en 300 intervalos, uno por cada milímetro de profundidad en el interior de la cuba de agua. Tal y como se ha descrito en capítulos anteriores, se ha simulado con el código MCNP5 los 350 casos correspondientes a cada rango de energía. La simulación del transporte de estos haces monoenergéticos correspondientes a los rangos de energía mencionados (0, 0.02,..., 7 MeV) ha permitido obtener las correspondientes curvas de dosis en profundidad en la cuba de agua.

El apartado 7.3.1 aborda el problema considerando la contribución de fotones y electrones a las curvas de dosis y se analiza diversas técnicas de reconstrucción que relacionan el espectro incidente con las curvas de dosis en profundidad en una cuba de agua. Esta metodología es considerada como un enfoque tradicional de la tecnología de reconstrucción. En el apartado 7.3.2, se analizan los

resultados obtenidos de la reconstrucción del espectro utilizando la matriz de gradientes de estas curvas de dosis, mediante una simple derivada espacial de la ecuación *Fredholm* estándar.

7.3.1. Cálculo del espectro a partir de las curvas de dosis en profundidad.

7.3.1.1. Características físicas del problema.

Para el rango de energía de 6 MeV que se ha estudiado, las curvas de dosis en profundidad obtenidas a partir de los espectros monoenergéticos se han calculado mediante simulaciones Monte Carlo MCNP5.

La figura inferior (Figura 7.17) muestra la matriz respuesta $A_{M \times N}$ obtenida a partir de las simulaciones MCNP5 utilizando el registro tanto de fotones como de electrones en la curva de dosis en profundidad en la cuba de agua.

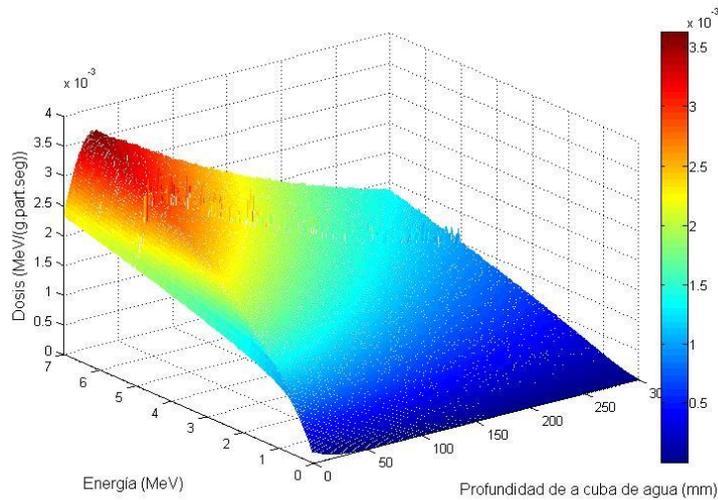


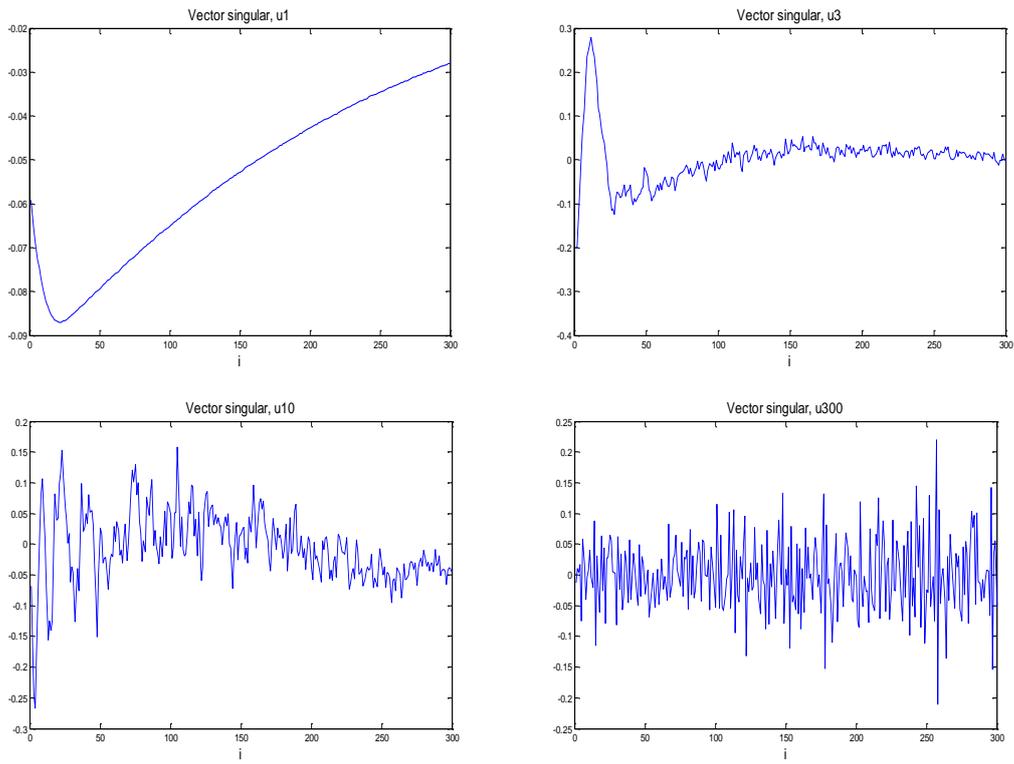
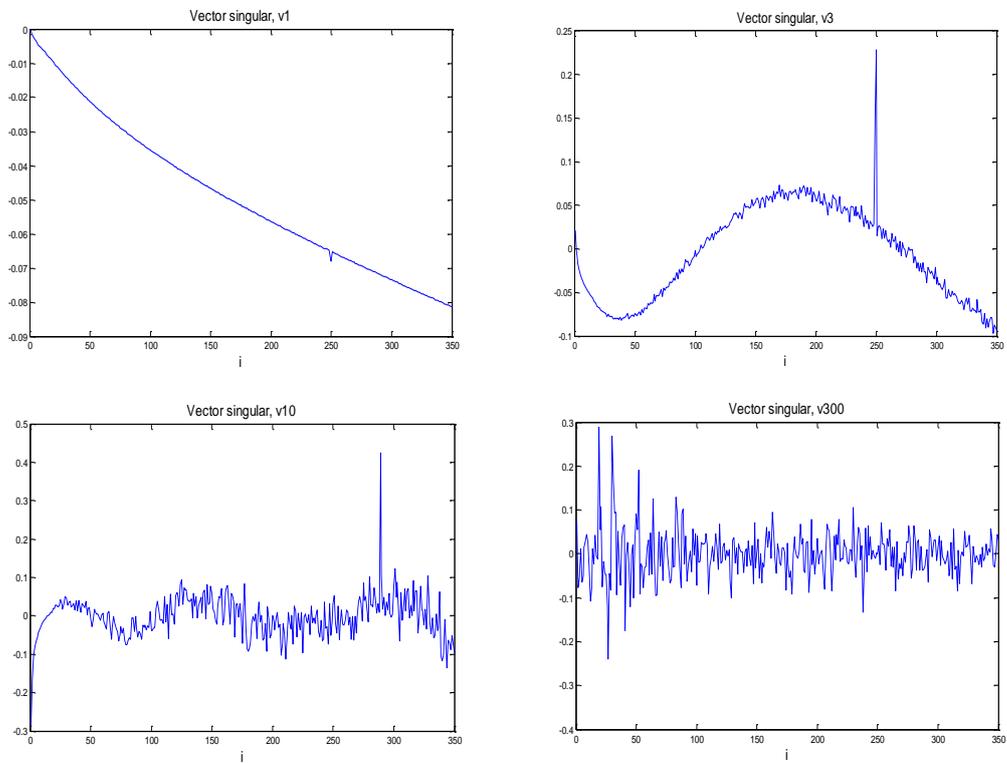
Figura 7.17. Matriz respuesta $A_{M \times N}$, registro de la dosis por fotones y electrones.

La matriz respuesta $A_{M \times N}$ contiene la información de la dosis a diferentes profundidades (M) en una cuba de agua para diferentes haces monoenergéticos (N).

Aplicando la descomposición en valores singulares, ecuación (7.2), a esta matriz obtenemos los vectores singulares u_i y v_i .

$$A = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T \quad (7.2)$$

Las curvas siguientes (Figuras 7.18 y 7.19) muestran la evolución de distintos vectores singulares. Tal y como se puede observar, y era de esperar, los vectores singulares, u_i y v_i son cada vez más oscilantes a medida que i crece. Este comportamiento pone de manifiesto la inestabilidad del sistema.

Figura 7.18. Evolución de los vectores singulares u_i .Figura 7.19. Evolución de los vectores singulares v_i .

En la figura siguiente (Figura 7.20) se han representado los valores singulares, σ_i , para cada valor de i . Se puede observar cómo los valores singulares decaen rápidamente a 0, esto es, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r \approx \sigma_{r+1} \approx \sigma_N = 0$, lo que supone un comportamiento típico de los valores singulares de la matriz A , y que denotan la inestabilidad del sistema.

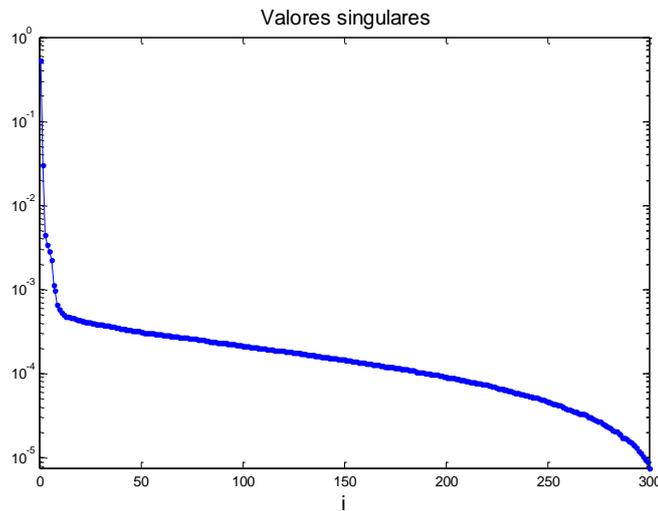


Figura 7.20. Valores singulares σ_i .

Además de estos indicios, una medida del buen o mal condicionamiento de un sistema lineal de ecuaciones es el estudio del llamado número condición del sistema, que no es más que el cociente entre el primer valor singular que aparece en la descomposición descrita y el último valor singular no nulo. El número de condición de la matriz respuesta es el siguiente:

$$\text{Número de Condición } (A) = 69931$$

El valor elevado del número de condición de la matriz nos indica que el problema no está bien condicionado, lo que implica que es muy difícil obtener A^{-1} con un procedimiento de inversión estándar.

Si se aplica la pseudoinversa para obtener directamente el espectro, se obtiene el siguiente resultado (Figura 7.21). Una representación característica de este comportamiento mal condicionado.

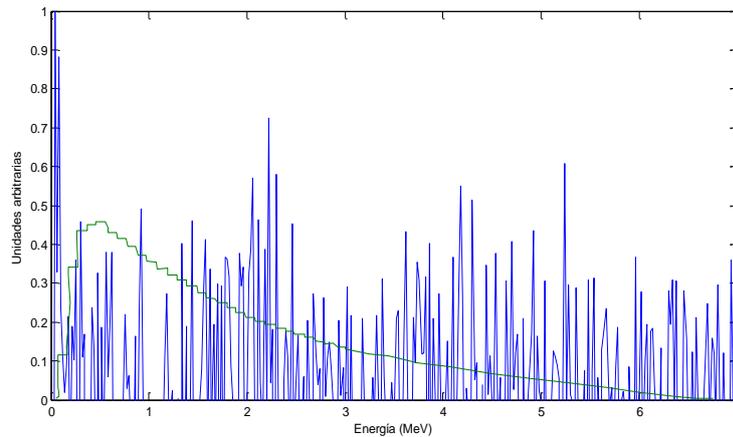


Figura 7.21. Comparación del espectro de *Rogers-Bagheri* con el espectro obtenido directamente utilizando la pseudoinversa de la matriz A .

Esto indica claramente que para reconstruir el espectro adecuadamente, se necesita un método de inversión de matriz más sofisticado.

7.3.1.2. Condición de Picard Discreta.

La condición discreta de *Picard* se representa en la figura (Figura 7.22). En esta misma figura se muestran los valores $|u_i^T b|$ promediados, donde $u_i^T b$, como se explicó en apartados anteriores (apartado 6.4.4.1), son los coeficientes de Fourier del término independiente respecto a la descomposición en valores singulares. En promedio, el valor de $|u_i^T b|$ decae también para valores pequeños de i .

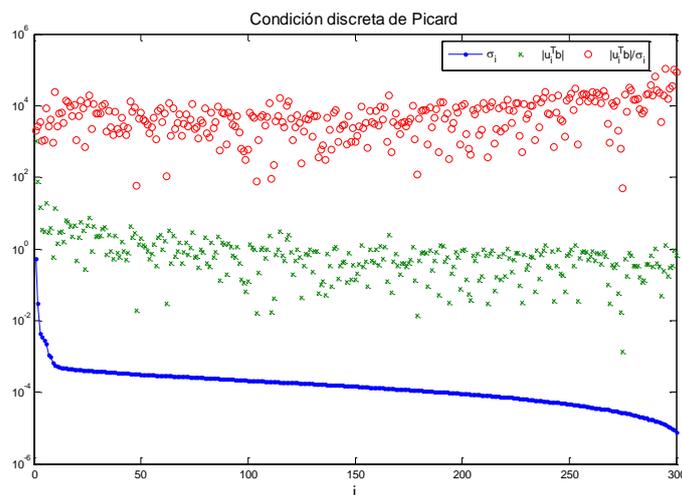


Figura 7.22. Condición discreta de Picard.

Los coeficientes $|u_i^T b|$ alcanzan una meseta cuando i aumenta, dicha meseta es una estimación del nivel de error en el término independiente. Lo que es importante en esta gráfica es el comportamiento comparativo de los valores singulares y el valor absoluto de los coeficientes de Fourier.

Los coeficientes $|u_i^T b|$ decaen más severamente que los valores singulares σ_i , entonces podemos suponer que la Condición de *Picard* se satisface. Y si esta Condición Discreta de *Picard* se satisface, la solución regularizada que se puede calcular se aproximará a la solución exacta (desconocida).

En la representación (Figura 7.22) se puede ver que los valores absolutos promediados de los coeficientes de Fourier $|u_i^T b|$ decaen algo más rápidamente que los valores singulares σ_i hasta un cierto índice i , a partir del cual los coeficientes $|u_i^T b|$ se estabilizan. Por tanto, el rango donde la Condición de *Picard* se satisface es limitado. Ello implica que el parámetro de truncamiento o de corte elegido debe corresponder a un valor menor que i . Esta Condición Discreta de *Picard* permite pues determinar si el problema tiene solución numérica, o si por el contrario, no es posible encontrar una solución numérica con significado. Permite además determinar el rango de valores singulares que tienen una información útil, frente a los valores singulares que sólo tienen ruido, y que por tanto tendrán que despreciarse.

En este caso, puesto que la condición de *Picard* se satisface, se puede obtener una solución óptima generando una nueva matriz de respuesta eliminando la parte de la solución correspondiente a los valores singulares más pequeños. Además, de esta representación se concluye que existen 8 valores singulares que tienen una información útil, frente a los valores singulares que sólo tienen ruido.

7.3.1.3. El método TSVD.

El método TSVD se puede usar para obtener una nueva matriz A_k , donde sólo se considera la información de aquellos parámetros útiles y se desprecian todos aquellos que solo aportan ruido.

Partiendo de:

$$A_k = \sum_{i=1}^K u_i \sigma_i v_i^T \quad (7.3)$$

Siendo

$$A = U \Sigma V^T \quad (7.4)$$

donde

$$x = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad (7.5)$$

Teniendo en cuenta que la condición de *Picard* se satisface:

$$x = \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i \quad 1 \leq k \leq n \quad (7.6)$$

el valor de $\|Ax - b\|_2$ obtenido para un número dado de valores singulares despreciados se representa frente al valor de $\|x\|_2$ correspondiente al mismo número de valores singulares despreciados en una gráfica *log-log*, (Figura 7.23). En esta figura se puede determinar el número de valores singulares a despreciar, es decir, el valor adecuado del parámetro de regularización, el cual se

selecciona entre los puntos en la curva L donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente.

La curva L es una herramienta conveniente para mostrar la relación entre el tamaño de una solución regularizada y su ajuste a los datos dados, a medida que varía el parámetro de regularización, dando así una idea clara de las propiedades del método de regularización empleado, y proporcionando ayuda en la selección del parámetro. Intuitivamente, el mejor parámetro de regularización es el que corresponde al punto en que la curva posee mayor curvatura (el vértice formado por los tramos vertical y horizontal de la curva), pues en los puntos que se hallan a la derecha de éste, la norma residual se incrementa rápidamente y la norma de la solución decrece lentamente, mientras que en los puntos que se hallan a la izquierda, la norma de la solución se incrementa rápidamente sin una disminución apreciable de la norma residual. Por lo tanto es de esperar que un valor del parámetro correspondiente a un punto cercano al vértice de la curva, equilibre los errores debidos a las perturbaciones y los debidos a la regularización.

La figura (Figura 7.23) muestra la curva L para el método TSVD. Se puede observar que para este método, el parámetro de truncamiento k , es decir, el punto de máxima inflexión de la curva está próximo a 2. Este valor de truncamiento k es el número de valores singulares no nulos de la matriz A a considerar. Este vértice en la curva L se encuentra marcado en la gráfica en rojo.

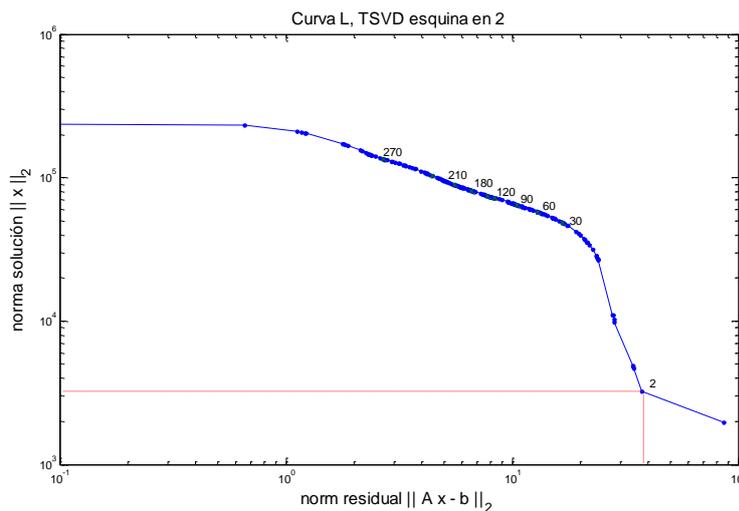


Figura 7.23. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.

Un parámetro de truncamiento $k = 2$ es un valor excesivamente bajo para poder obtener una reconstrucción del espectro fiable.

7.3.1.3.1. Cálculo del espectro.

La figura siguiente (Figura 7.24) presenta la comparación del espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers* con el espectro obtenido a partir de la reconstrucción utilizando el método de deconvolución TSVD con un parámetro de truncamiento $k = 2$:

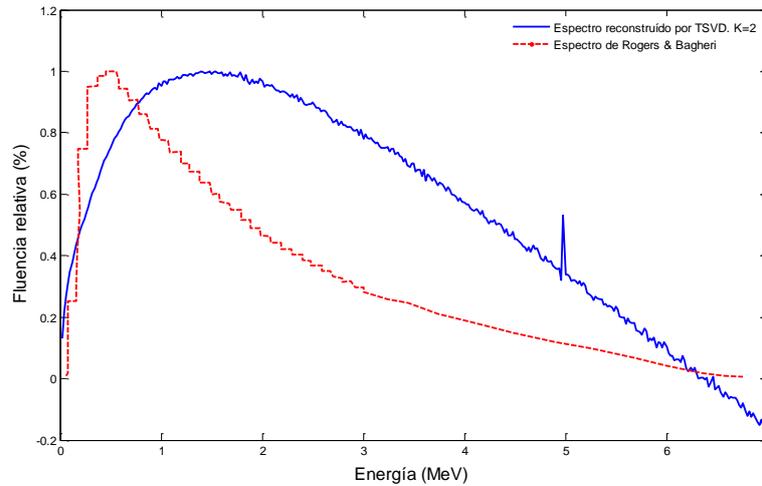


Figura 7.24. Reconstrucción del espectro por TSVD.

Se puede observar en esta figura como la metodología TSVD no permite obtener el espectro deseado en este caso.

La reconstrucción del espectro por TSVD también se ha realizado utilizando otros parámetros de truncamiento superiores, sin embargo, los resultados obtenidos se alejan todavía más de la respuesta esperada.

7.3.1.4. El método MTSVD.

En el método MTSVD (Descomposición en Valores Singulares Truncada Modificada), la norma-2 euclídea $\|x\|_2$, se sustituye por la seminorma $\|L_p x\|_2$, donde L_p es una aproximación discreta del operador derivativo p .

Con este método se pueden producir soluciones con una planicidad máxima para $p = 1$, o mínima rugosidad para $p = 2$, suprimiendo los componentes de alta frecuencia donde L_p se puede tomar como:

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & \ddots & -1 & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & & 1 & -1 \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad L_2 = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & -1 & \\ & & & \ddots & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

La solución de MTSVD es:

$$x_{L,k} = x_k - V_k (L_p \cdot V_k)^+ L_p \cdot x_k \quad (7.7)$$

donde $(L_p \cdot V_k)^+$ es la pseudo inversa de $L_p \cdot V_k$.

La curva L nos permite establecer el número de valores singulares a despreciar y el valor adecuado del parámetro de regularización. Este punto se sitúa en la curva donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente, en este caso, se busca el valor que hace $\min \{ \|L_p x\|_2 \}$ sujeto a $\min \{ \|A_k x - b\|_2 \}$. Las curvas inferiores (Figuras 7.25 y 7.26) muestran la curva L para el método de MTSVD. Se podrá afirmar (de acuerdo a los resultados obtenidos del algoritmo de *Matlab*) que para este método, el orden de truncamiento, es decir, el punto de máxima inflexión de la curva está próximo a 193 utilizando la matriz derivación L_1 y cercano a 125 utilizando la matriz derivación L_2 .

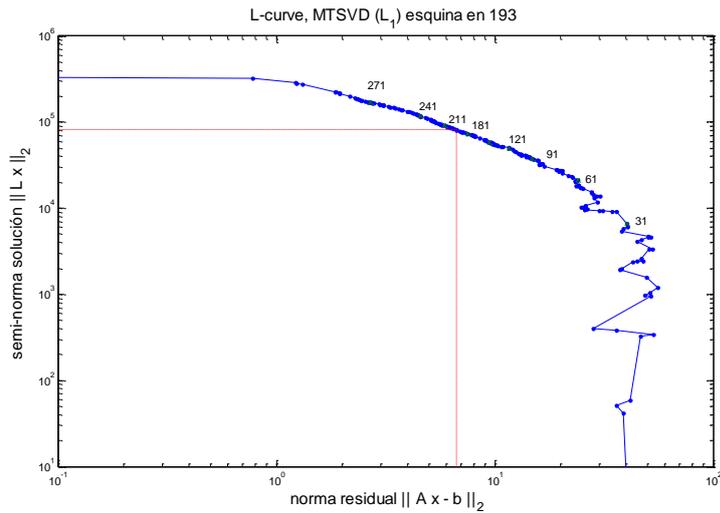


Figura 7.25. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de MTSVD (L_1).

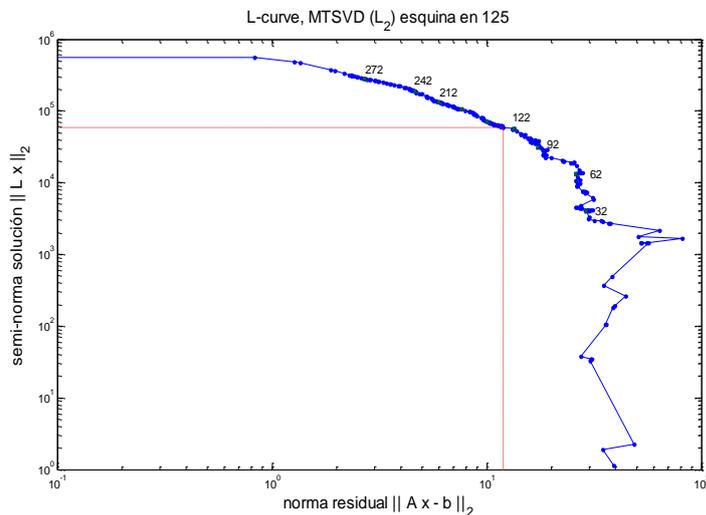


Figura 7.26. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de MTSVD (L_2).

7.3.1.4.1. Cálculo del espectro.

El espectro calculado utilizando el método de pseudo inversa MTSVD con el parámetro de truncamiento obtenido mediante las curvas L , el $k = 193$ cuando se hace uso de la matriz derivación L_1 , dista mucho de los resultados esperados (Figura 7.27).

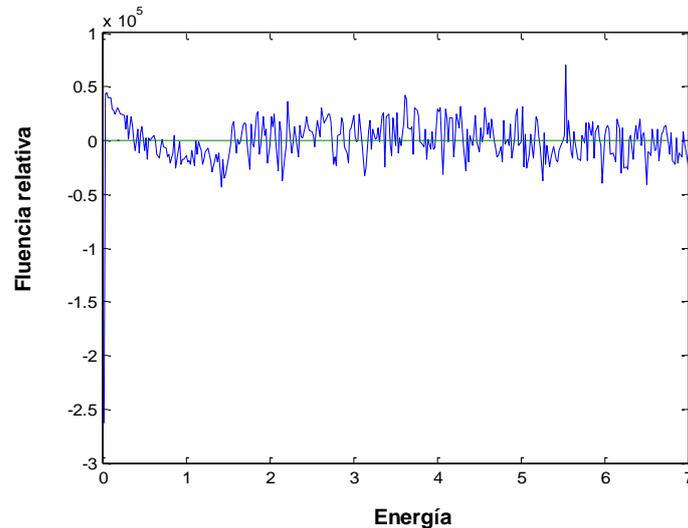


Figura 7.27. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L_1) utilizando el parámetro de truncamiento $k = 193$.

Se ha reducido el número de truncamiento para observar los efectos. Las figuras siguientes (Figuras 7.28 y 7.29) presentan la comparación del espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* con los espectros obtenidos a partir de la reconstrucción del espectro utilizando el método de pseudo inversa MTSVD con un parámetro de truncamiento $k_1 = 3$ y $k_2 = 5$ utilizando las matrices derivativas L_1 y L_2 respectivamente.

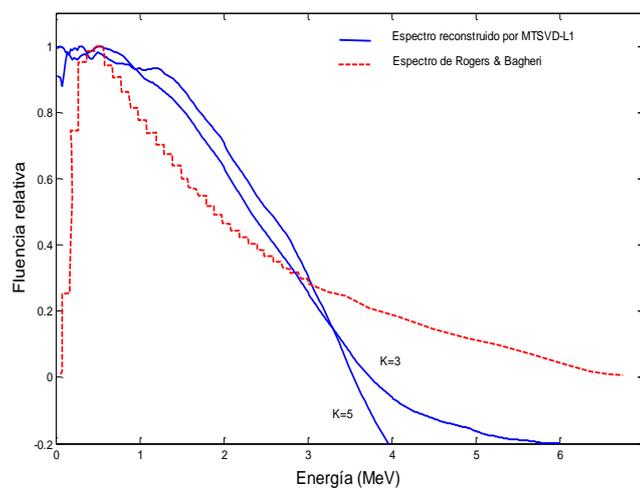


Figura 7.28. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L_1).

La figura (Figura 7.29) muestra la reconstrucción del espectro utilizando el método de pseudo inversa MTSVD con un parámetro de truncamiento $k_1 = 3$ y $k_2 = 5$ utilizando la matriz de derivación L_2 .

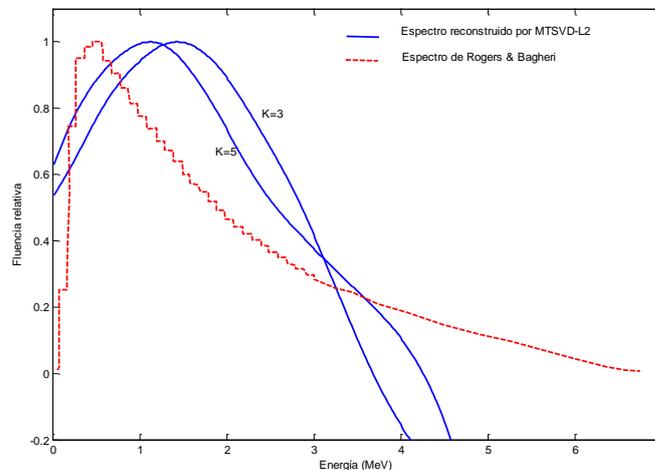


Figura 7.29. Reconstrucción del espectro por MTSVD (L_2).

Se puede observar en estas figuras como la metodología MTSVD tampoco permite obtener el espectro deseado en este caso.

7.3.1.5. Procedimiento de Regularización de *Tikhonov*.

Se ha analizado la regularización del sistema mediante el método de *Tikhonov*. Este algoritmo numérico, de la misma manera que la metodología TSVD, permite una solución óptima, x , mediante la generación de una nueva matriz respuesta, eliminando las partes de la solución correspondiente a los valores singulares más pequeños. La regularización de *Tikhonov* es una de las formas más comunes y conocidas de estabilización numérica.

Esta metodología pretende mejorar la condición del sistema normal de mínimos cuadrados $A^T A x = A^T b$. La idea es definir la solución general de regularización x_λ como la mínima de la combinación ponderada siguiente de las normas residuales y la restricción:

$$x_\lambda = \min (\|A \cdot x - b'\|_2^2 + \lambda^2 \|L(x - x^*)\|_2^2) \quad (7.8)$$

donde L es el operador discreto derivativo y x^* es la solución residual. La forma estándar clásica de regularización de *Tikhonov* considera que L es la matriz de identidad, por lo que la solución es:

$$x_\lambda = \min (\|A \cdot x - b'\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2) \quad (7.9)$$

donde L es una matriz general con rango de columnas completo, y que normalmente está relacionado con algún operador de derivación [Hansen, 1992].

Por lo tanto, la ecuación (7.14) es equivalente a resolver el sistema lineal:

$$(A^T A + \lambda^2 I)x_\lambda = A^T b \quad (7.10)$$

donde el parámetro de regularización λ controla el peso concedido a la minimización de la restricción de la parte relativa a la minimización de la norma residual. Claramente, un λ elevado (equivalente a una gran cantidad de regularización) favorece una pequeña solución de seminorma y una norma residual grande, mientras que un pequeño λ (es decir, una pequeña cantidad de regularización) tiene el efecto contrario. De este modo, el parámetro de regularización es un parámetro importante que controla las propiedades de la solución regularizada y por lo tanto, debe seleccionarse con cuidado.

Una forma de determinar el parámetro de la regularización óptimo, λ , es trazar la curva L , que en un entorno ideal tiene un segmento relativamente vertical y una línea relativamente horizontal. Para esta curva, se traza la norma-2 del vector de solución, $\|x\|_2$, frente a la norma-2 del vector residual, $\|A \cdot x - b\|_2$ para diferentes valores de λ . Tal y como se ha explicado, se recomienda situar el parámetro de truncamiento λ , en el valor más cercano al punto de máxima curvatura de esta curva, es decir, seleccionando el valor correspondiente a la esquina que conforme la L .

La elección de λ es realmente muy importante y puede tener una influencia drástica sobre la calidad de la solución regularizada.

La figura inferior (Figura 7.30) muestra la curva L para el método de *Tikhonov*. Se puede observar que para este método, el orden de truncamiento, es decir, el punto de inflexión máximo de la curva pertenece al valor singular 0.010182.

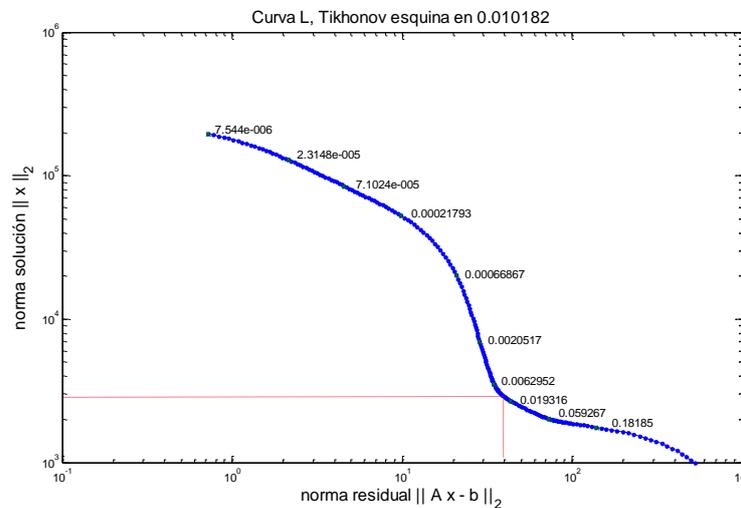


Figura 7.30. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de *Tikhonov*.

7.3.1.5.1. Cálculo del espectro.

La curva (Figura 7.31) presenta la comparación del espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* con el espectro obtenido de la reconstrucción utilizando el método de *Tikhonov* con valor singular 0.010182.

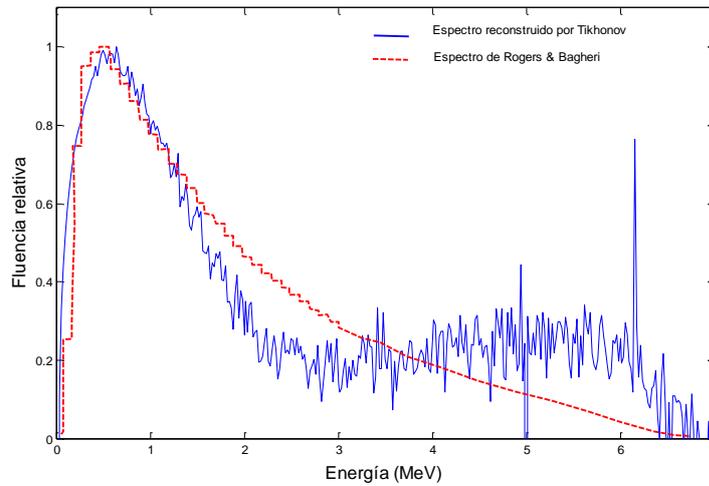


Figura 7.31. Reconstrucción del espectro por *Tikhonov*.

Se puede observar en esta figura que los resultados del espectro de 6 MeV a partir de la metodología de *Tikhonov*, aunque se acerca más a la reconstrucción esperada, no es adecuada para obtener el espectro deseado en este caso.

7.3.1.6. Estudio inverso.

Partiendo de la ecuación,

$$A \cdot x = b \quad (7.11)$$

donde $A \in R_{M \times N}$ y $b \in R_N$, la multiplicación de la matriz respuesta A directamente por el espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers* x_{RB} , permitirá obtener la curva de dosis en profundidad (definida como b_{RB}):

$$b_{RB} = A \cdot x_{RB} \quad (7.12)$$

En la curva (Figura 7.32) se comparan las curvas de dosis en profundidad experimental con la obtenida (b_{RB}) a partir de la multiplicación de la matriz respuesta por el espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers*.

Se puede observar que aunque la curva de dosis obtenida de esta manera representa el *Build up* inicial de la curva y refleja adecuadamente la pendiente de la curva en profundidad, difiere ligeramente del trazado real de la curva experimental. Esta diferencia es la debida a la incertidumbre de los cálculos Monte Carlo, así como a la del propio espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers*.

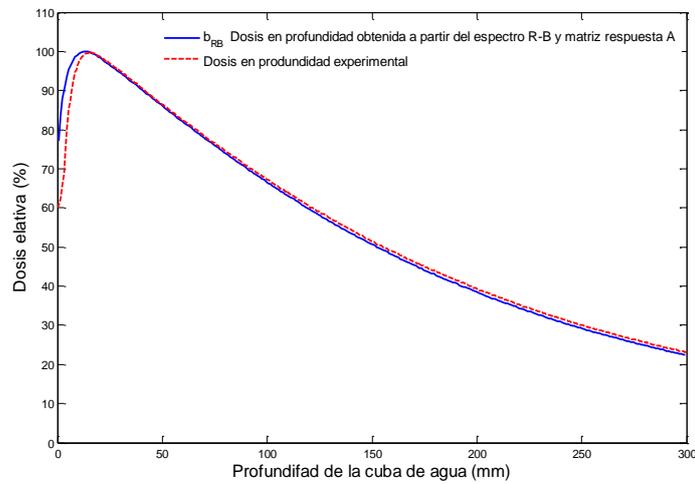


Figura 7.32. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro teórico de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Si se aplican los métodos anteriormente expuestos a la reconstrucción del espectro utilizando la curva de dosis en profundidad teórica obtenidas mediante la ecuación (7.4), es decir, utilizando la matriz respuesta A y la curva de dosis en profundidad teórica obtenida, b_{RB} , y aplicando el método de regularización de *Tikhonov* se obtiene el siguiente espectro de 6 MeV, el cual se ajusta perfectamente al de *Sheik-Bagheri y Rogers*, encontrándose la diferencia porcentual media entre ambas curvas por debajo del 1%, (Figura 7.33).

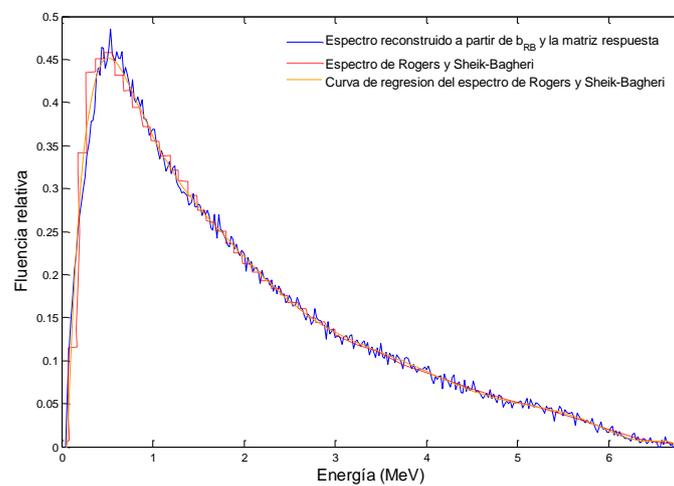


Figura 7.33. Comparación del espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* con el espectro reconstruido a partir de la curva de dosis en profundidad b_{RB} y la matriz respuesta.

La figura (Figura 7.33) muestra el espectro reconstruido de 6 MeV obtenido a partir de la curva de dosis en profundidad teórica b_{RB} y la matriz respuesta A junto con el espectro de 6 MeV original de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Esto demuestra que pese al mal condicionamiento de la matriz, si que se puede aplicar técnicas de deconvolución para encontrar el espectro real.

De igual manera, utilizando un haz de fotones monoenergético, se puede obtener la curva de dosis en profundidad, b_{E_i} , para una energía concreta E_i :

$$b_{E_i} = A \cdot x_{\text{monoenergético}, E_i} \quad (7.13)$$

siendo $x_{\text{monoenergético}, E_i}$ el espectro monoenergético teórico correspondiente a la energía E_i , definido como:

$$x_{\text{monoenergético}, E_i} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.14)$$

donde el valor 1 se asigna al intervalo energético i correspondiente a la energía E_i .

Utilizando el ejemplo de $E_i = 4 \text{ MeV}$:

$$b_{4 \text{ MeV}} = A \cdot x_{\text{monoenergético}, 4 \text{ MeV}} \quad (7.15)$$

para un espectro monoenergético de 4 MeV, la curva de dosis en profundidad teórica obtenida a partir de la matriz respuesta A se muestra en la figura (Figura 7.34).

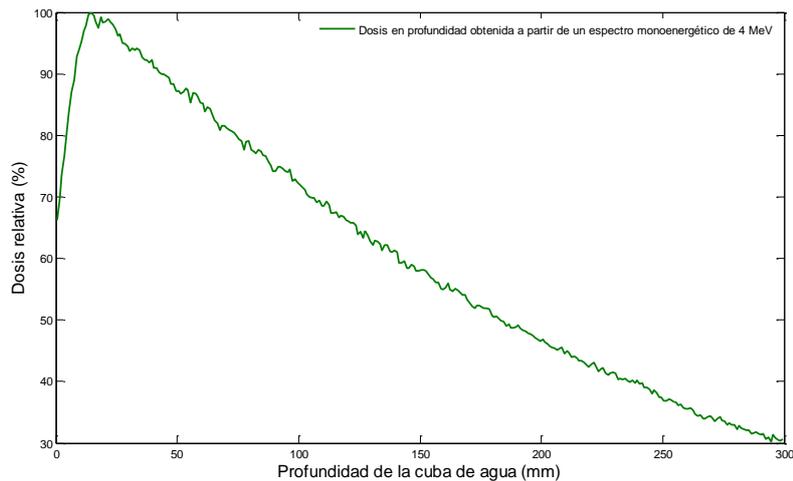


Figura 7.34. Curva de dosis en profundidad obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro teórico monoenergético de 4 MeV.

Utilizando la matriz respuesta A y la curva de dosis en profundidad obtenida, $b_{4\text{ MeV}}$, y aplicando el método de regularización de *Tikhonov* se ha obtenido el siguiente espectro monoenergético de 4 MeV, el cual se ajusta perfectamente al teórico, figura (Figura 7.35).

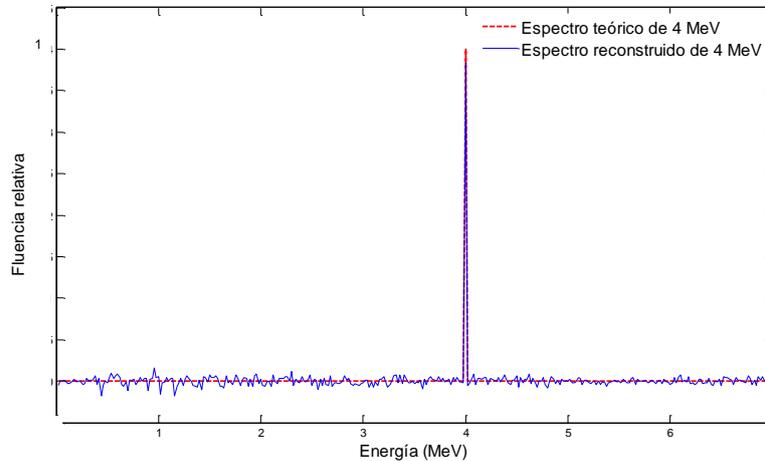


Figura 7.35. Comparación del espectro monoenergético teórico de 4 MeV con el espectro reconstruido a partir de la curva de dosis en profundidad b_{E_i} y la matriz respuesta.

El pico en la reconstrucción se sitúa en la ubicación del espectro monoenergético.

7.3.1.7. Estudio considerando la contribución en la matriz respuesta de sólo los fotones.

Se ha realizado un estudio paralelo en el que se ha considerado sólo la contribución de los fotones a la dosis en el interior de la cuba de agua, con el fin de estudiar la importancia de los electrones en la reconstrucción del espectro fotónico. Para ello, se ha realizado el mismo análisis a una matriz respuesta en la que solo se ha registrado la contribución de fotones (Figura 7.36), donde al igual que en el caso anterior la matriz respuesta es $A \in R_{M \times N}$ y la curva de dosis experimental medida en la cuba de agua es $b \in R_N$.

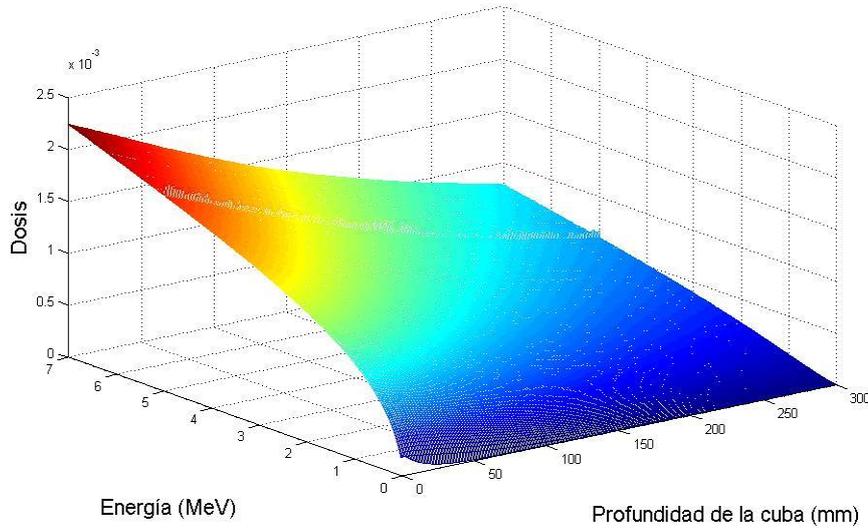


Figura 7.36. Matriz respuesta $A_{M \times N}$ registrando solo fotones.

Al igual que en el apartado 7.3.1.6, multiplicando esta matriz respuesta A por el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*, x_{RB} , la curva de dosis en profundidad obtenida viene dada por:

$$b_{RB} = A \cdot x_{RB} \quad (7.16)$$

Tal y como puede observarse en la figura (Figura 7.37), la curva de dosis en profundidad obtenida, b_{RB} , no representa adecuadamente el *Build up* inicial de la curva de dosis experimental medida en la cuba de agua, siendo además ligeramente inferior en valores relativos (2.5%) pese a que mantiene la misma pendiente que la curva experimental.

En la figura siguiente (Figura 7.37) se comparan las curvas de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta considerando sólo fotones, A .

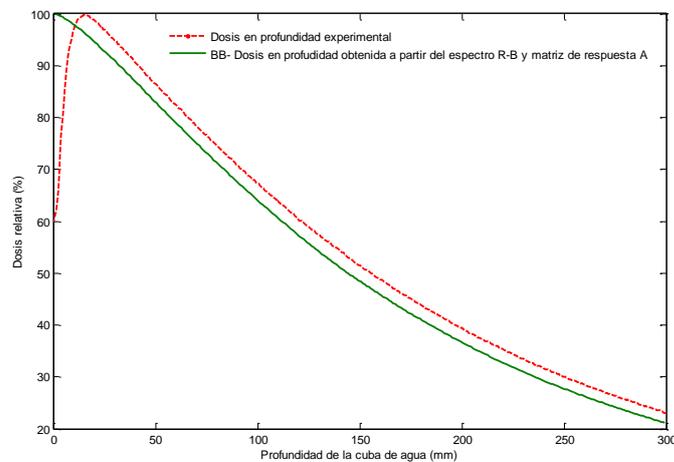


Figura 7.37. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta considerando sólo fotones y el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Estos resultados son determinantes para establecer la necesidad de incluir en la matriz respuesta la contribución de los fotones y los electrones. De hecho, si se aplica el procedimiento de deconvolución mediante TSVD descrito previamente a la matriz de sólo fotones, los resultados obtenidos (Figura 7.38) presentan un espectro reconstruido con menos ruido, pero bastante alejado del espectro fotónico de 6 MeV de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

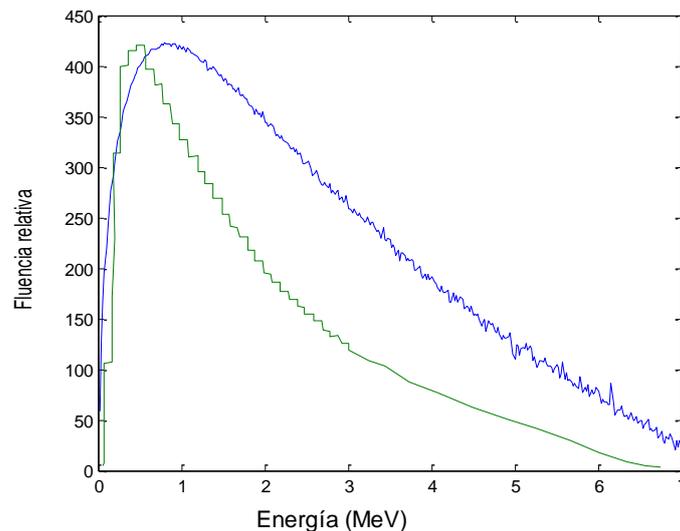


Figura 7.38. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta considerando sólo fotones y el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

7.3.2. Método del gradiente: Derivada de la matriz respuesta.

Se hace uso en este apartado de la terminología inicial de acuerdo al apartado 6.4.1, siendo $\rho(E)$ el espectro incógnita de la ecuación, $d(x)$ el término independiente de la relación matricial que hace referencia a la curva de dosis en profundidad, y por último, $d_E(x)$ la matriz respuesta.

En situaciones reales donde el ruido es un factor importante, la ecuación de los gradientes de la dosis en profundidad (GDP) conduce a un problema inverso que está significativamente mejor condicionado que el problema inverso para el espectro basado en los valores directos de la dosis en profundidad (DP).

Debido a esta mejora del mal condicionamiento, se puede mejorar significativamente la resolución del espectro *Bremsstrahlung* reconstruido.

Tal y como se mencionó en el apartado 6.3, los valores singulares de la integral $d_E(x)$ de la ecuación:

$$d(x) = \int_0^{E_{max}} d_E(x)\rho(E)dE \quad (7.17)$$

están muy espaciados y esto acentúa el mal condicionamiento del problema inverso. En particular, el gran tamaño relativo del primer valor singular es particularmente problemático. Esto es debido a que

la escala del problema inverso viene definida por el primer valor singular, como puede verse en los criterios para trincar la diagonalización utilizados para trincar la matriz respuesta.

Si fuera posible reducir la magnitud del primer valor singular con respecto a los posteriores, el problema inverso estaría mejor condicionado. Se puede intentar hacer esto tomando la derivada espacial de la ecuación (7.9). Heurísticamente, esto debería aumentar las contribuciones de los componentes altamente oscilatorios mientras que atenuaría las de los componentes con menos fluctuaciones.

Se muestra a continuación que esto es cierto. Realizando la derivada de (7.9) se obtiene otra ecuación lineal en que basar un problema inverso para el cálculo del espectro ρ (referido como el método GDP).

$$d'(x) = \int_0^{E_{max}} \frac{\partial d_E(x)}{\partial x} \rho(E) dE \quad (7.18)$$

Puede comprobarse que la derivada de $d_E(x)$, al igual que en el caso del método DP tiene una norma cuadrática finita ya que:

$$\int_0^{E_{max}} dE \int_0^{\infty} dx d_E(x)^2 < \infty \quad (7.19)$$

Esto permite una diagonalización que tiene diferentes valores y funciones singulares que el método DP:

$$\frac{\partial d_E(x)}{\partial x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^M \psi_n(x) \cdot \lambda_m \cdot \xi_m(E) \quad (7.20)$$

Al igual que con el método anterior (DP), se puede resolver el problema inverso basado en los gradientes de las curvas de dosis en profundidad para obtener una estimación de la distribución espectral:

$$\rho_{GDP}(E) \approx \sum_{n=1}^M \frac{\int_0^{\infty} d'(x) \psi_n(x) dx}{\mu_n} \xi_n(E) \quad (7.21)$$

Para realizar la derivada de las curvas de dosis en profundidad, los cálculos requieren que cada curva de dosis generada a partir de la simulación de sucesivos haces monoenergéticos por Monte Carlo sea ajustada a una función analítica para poder realizar la derivada sobre esta. Se han obtenido buenos resultados utilizando polinomios de grado 10.

La figura inferior (Figura 7.39) muestra la derivada de la matriz respuesta $A_{M \times N}$ obtenida a partir de las simulaciones MCNP5 utilizando el registro tanto de fotones como de electrones en las curvas de dosis en profundidad en la cuba de agua. A esta matriz de gradientes se le denomina en lo sucesivo A' .

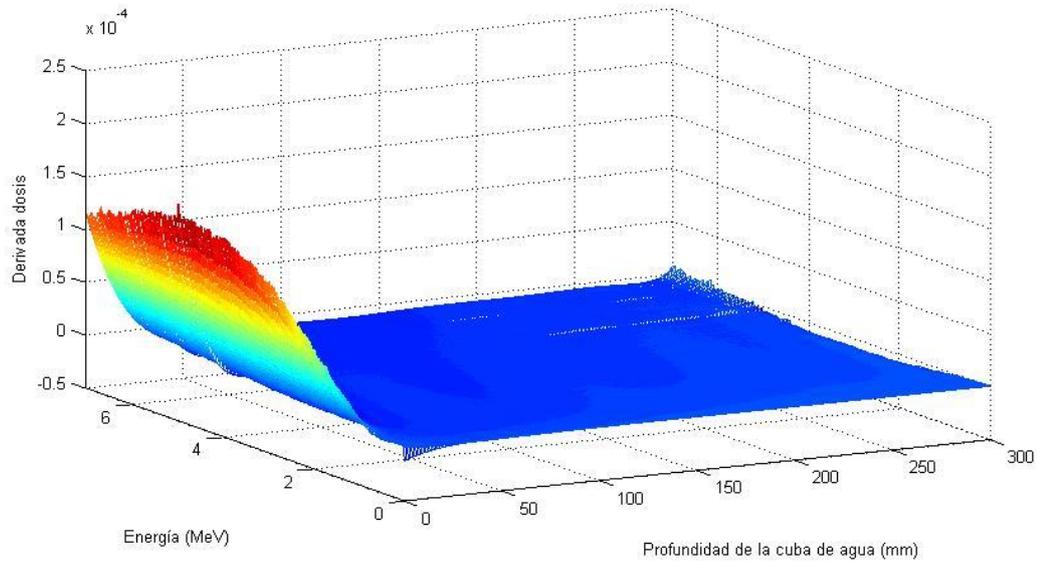


Figura 7.39. Derivada de la matriz respuesta $A'_{M \times N}$.

7.3.2.1. Comportamiento físico del sistema.

Aplicando la descomposición en valores singulares a esta matriz A' , obtenemos los vectores singulares u_i y v_i . La figura siguiente (Figura 7.40) muestra la evolución de distintos vectores singulares. Tal y como se puede observar, los vectores singulares, u_i son cada vez más oscilantes a medida que i crece, lo que denota el mal condicionamiento de la matriz.

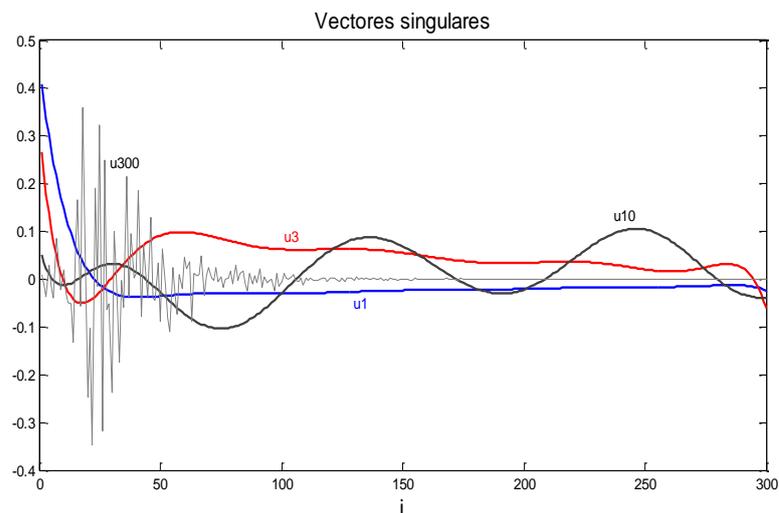


Figura 7.40. Evolución de los vectores singulares u_i .

Además de estos indicios, una medida de lo buena o mala condición de un sistema lineal de ecuaciones es el estudio del llamado número condición del sistema, que no es más que el cociente

entre el primer valor singular que aparece en la descomposición descrita y el último valor singular no nulo. El número de condición de la matriz respuesta es el siguiente:

$$\text{Número de Condición } (A') = 1.1900e + 017$$

El elevado valor del número de condición de la matriz nos indica que el problema no está bien condicionado, lo que implica que es muy difícil obtener A'^{-1} con un procedimiento de inversión estándar.

En la representación siguiente (Figura 7.41) se han representado los valores singulares, σ_i para cada valor de i tanto de la matriz respuesta como de su matriz de gradientes. Se puede ver como en ambas los valores singulares decaen rápidamente a 0, esto es, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r \approx \sigma_{r+1} \approx \sigma_N = 0$, lo que denota la inestabilidad del sistema.

Sin embargo, se puede observar como los valores singulares obtenidos en la matriz de gradientes separan de mejor manera cuáles tienen una información útil, frente a los valores singulares que sólo tienen ruido y deben ser despreciados. Además, se ha reducido la magnitud del primer valor singular con respecto a los posteriores, luego el problema inverso está, dentro de lo que cabe, mejor condicionado.

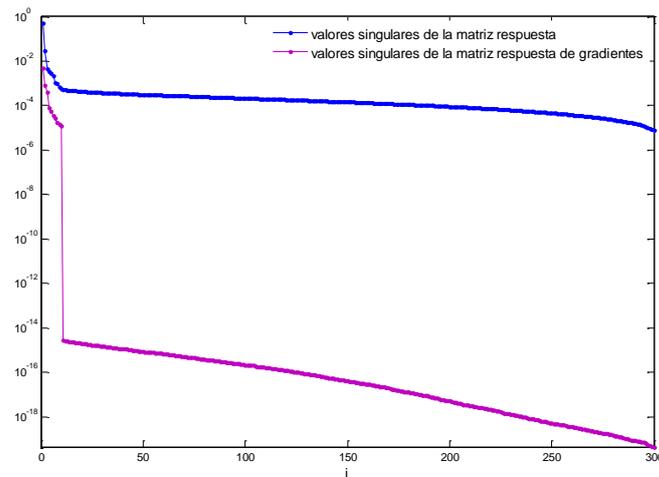


Figura 7.41. Valores singulares σ_i .

La condición discreta de *Picard* de la matriz de gradientes se representa en la figura (Figura 7.42). Se puede ver que los valores absolutos promediados de los coeficientes de Fourier $|u_i^T b|$ decaen rápidamente hasta un cierto índice i , a partir del cual los coeficientes $|u_i^T b|$ se estabilizan. Por tanto, el rango donde la Condición de *Picard* se satisface es limitado. Ello implica que el parámetro de truncamiento o de corte elegido debe corresponder a un valor menor que i , que en este caso es 11. Esta **Condición Discreta de Picard** permite concluir que el problema si tiene una solución numérica, y además permite determinar que existen 11 valores singulares que tienen una información útil, frente al resto de los valores singulares que sólo aportan ruido.

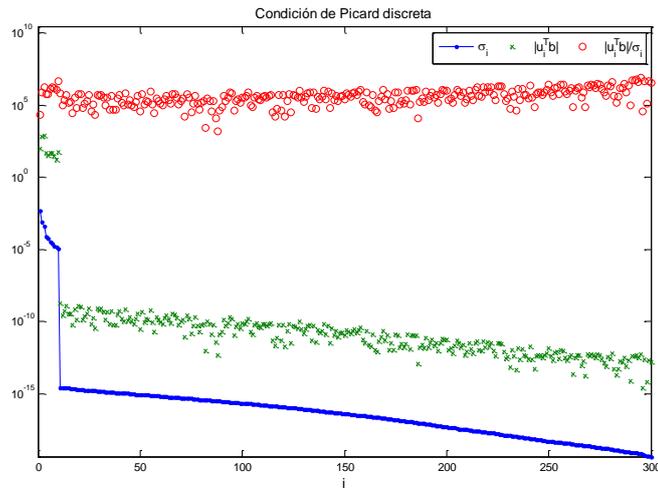


Figura 7.42. Representación de la condición de Picard discreta de la matriz de gradientes.

La tabla situada a continuación (Tabla 7.5) presenta las diferencias encontradas en cuanto al comportamiento físico de la matriz respuesta según el enfoque tradicional y de la matriz de gradientes. Se puede observar que la magnitud del primer valor singular es inferior en el caso del método GDP, incluyendo además un parámetro de corte superior.

Tabla 7.5. Comparación del comportamiento de la matriz respuesta y la matriz de gradientes.

	Método DP	Método GDP
Número de condición	6.9931e+004	1.1900e+017
Parámetro de corte	6	11
Primer valor singular	0.527562	0.004738

Al estimar el error presente en cada problema inverso, encontramos que la directriz de truncamiento GDP admite once términos ($k = 11$), en comparación con sólo seis términos ($k = 6$) para el método DP en las expansiones de valores singulares. El mejor nivel de truncamiento muestra que los errores en las dosis derivadas que aparecen en el método GDP están bajo control y permiten un aumento significativo en la resolución del problema inverso para el espectro.

7.3.2.2. El método TSVD.

Al igual que se describió en el apartado 7.3.1.4., la curva L nos permite establecer el número de valores singulares a despreciar y el valor adecuado del parámetro de regularización. Tal y como ya se ha mencionado, este punto se sitúa en la curva donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente, es decir, el punto de curvatura es máximo el cual se encuentra marcado en la gráfica en rojo.

La figura siguiente (Figura 7.43) muestra la curva L para el método de TSVD. Se puede observar que para este método, el orden de truncamiento, es decir, el punto de máxima inflexión de la curva corresponde al valor 10.

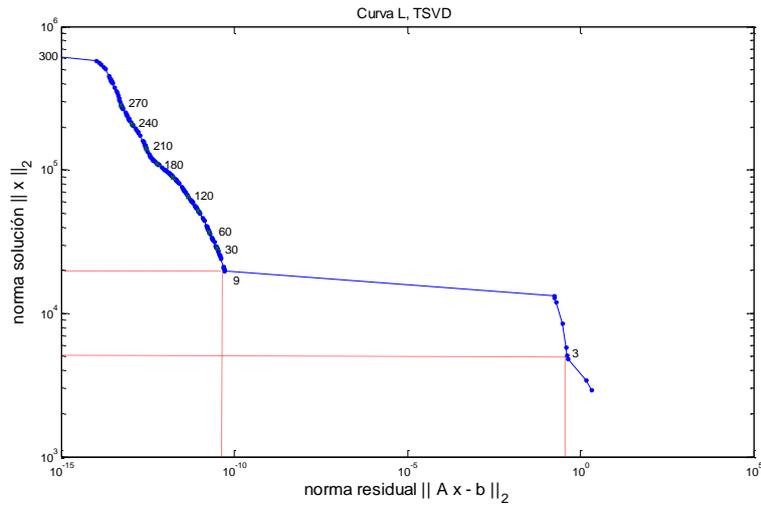


Figura 7.43. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.

7.3.2.2.1. Cálculo del espectro.

La figura siguiente (Figura 7.44) presenta la comparación del espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers* con el espectro obtenido a partir de la reconstrucción utilizando el método de deconvolución TSVD a la matriz de gradientes con un parámetro de truncamiento $k = 10$ [Juste, 2011c].

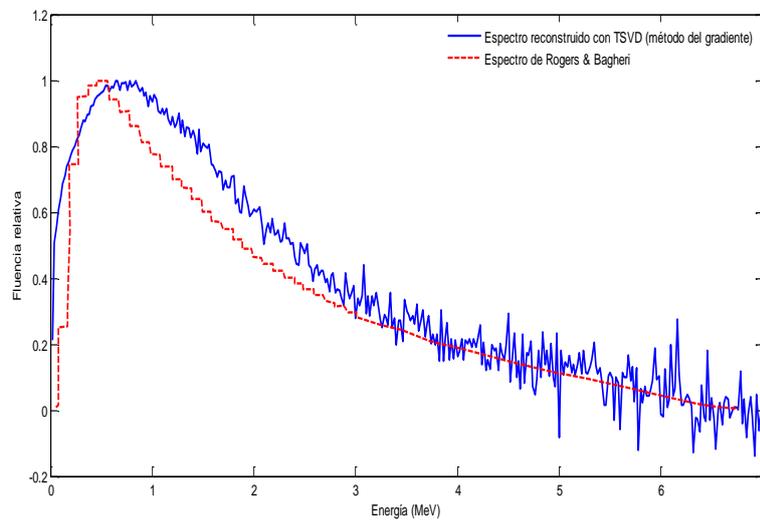


Figura 7.44. Reconstrucción del espectro por TSVD, con parámetro de truncamiento $k=10$.

7.3.2.3. El método de *Tikhonov*.

Al igual que en el método DP, se ha analizado la fiabilidad de la técnica de la regularización de *Tikhonov* con la matriz de gradientes. Con este algoritmo numérico, puede obtenerse una solución óptima, x , mediante la generación de una nueva matriz respuesta, eliminando las partes de la solución correspondiente a los valores singulares más pequeños. Esta metodología pretende mejorar la condición del sistema normal de mínimos cuadrados $A'^T A' x = A'^T b'$. La idea es definir la solución general de regularización x_λ como la mínima de la combinación ponderada siguiente de las normas residuales y la restricción:

$$x_\lambda = \min (\|A'x - b'\|_2^2 + \lambda^2 \|L(x - x^*)\|_2^2) \quad (7.22)$$

donde L es el operador discreto derivativo y x^* es la solución residual. La forma estándar clásica de regularización de *Tikhonov* considera que L es la matriz de identidad, por lo que la solución es:

$$x_\lambda = \min (\|A'x - b'\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2) \quad (7.23)$$

Por lo tanto, la ecuación (7.23) es equivalente a resolver el sistema lineal:

$$(A'^T A' + \lambda^2 I)x_\lambda = A'^T b' \quad (7.24)$$

donde el parámetro de regularización λ controla el peso concedido a la minimización de la restricción de la parte relativa a la minimización de la norma residual. Claramente, un λ elevado (equivalente a una gran cantidad de regularización) favorece una pequeña solución de seminorma y una norma residual grande, mientras que un pequeño λ (es decir, una pequeña cantidad de regularización) tiene el efecto contrario. De este modo, el parámetro de regularización es un parámetro importante que controla las propiedades de la solución regularizada y por lo tanto, debe elegirse con cuidado.

Como ya se ha explicado, una forma de determinar el parámetro de la regularización óptimo, λ , es trazar la curva L . Para esta curva, se traza la norma-2 del vector de solución, $\|x\|_2$, frente a la norma-2 del vector residual, $\|A' \cdot x - b'\|_2$ para diferentes valores de λ . Se ha situado el parámetro de truncamiento λ , en el valor más cercano al punto de máxima curvatura de esta curva, es decir, en el valor correspondiente a la esquina que conforma la L .

La figura siguiente (Figura 7.45) muestra la curva L para el método de *Tikhonov*. Se puede observar que para este método, el orden de truncamiento, es decir, el punto de inflexión máximo de la curva pertenece al valor singular $3.826 \cdot 10^{-13}$.

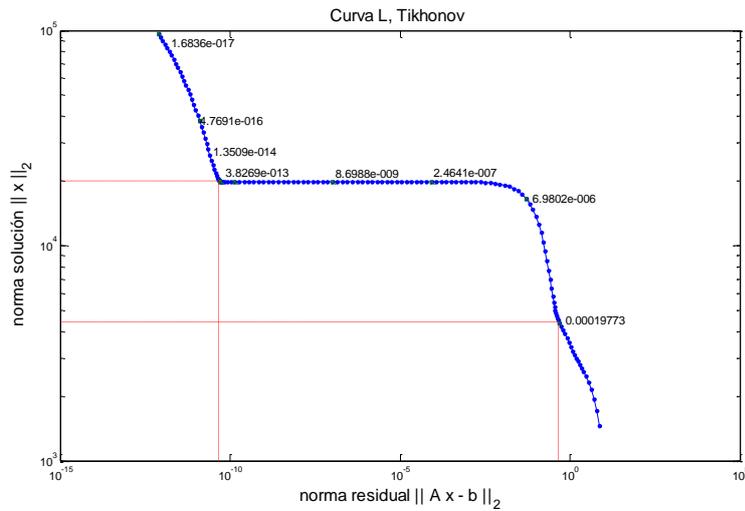


Figura 7.45. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de *Tikhonov*.

7.3.2.3.1. Cálculo del espectro.

La figura (Figura 7.46) presenta la comparación del espectro que se ha utilizado como hipótesis inicial en las simulaciones de *Sheik-Bagheri* y *Rogers* con el espectro obtenido a partir de la reconstrucción utilizando el método de deconvolución de *Tikhonov*.

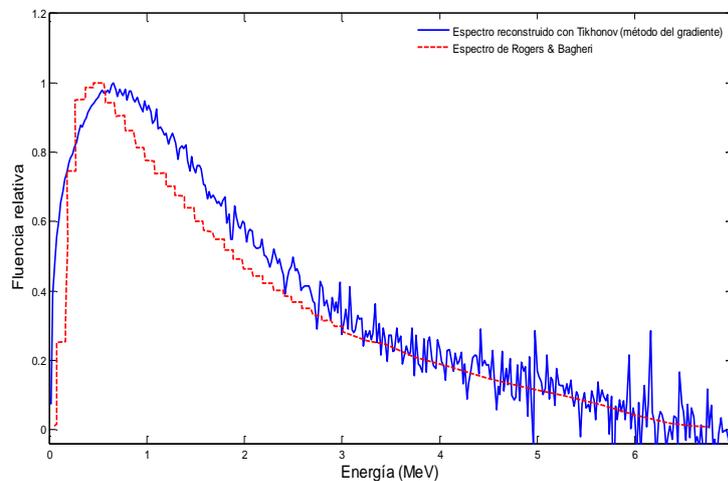


Figura 7.46. Reconstrucción del espectro por *Tikhonov*.

El método de *Tikhonov* aplicado a la matriz respuesta GDP permite una estimación mejor del espectro, en comparación con la estimación DP. Da una mejor representación del pico del espectro y se acerca más al espectro de *Sheik-Bagheri* y *Rogers*, especialmente a energías superiores.

Además se ha calculado la diferencia espectral de cada reconstrucción con respecto a la de *Sheik-Bagheri* y *Rogers*. Los resultados de cada reconstrucción se muestran en la tabla (Tabla 7.6).

Tabla 7.6. Diferencia espectral de los espectros obtenidos por deconvolución con respecto al espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Método de reconstrucción		Diferencia espectral
GDP	TSVD	3.7%
	<i>Tikhonov</i>	3.5%

Estos resultados indican que el método de reconstrucción de espectros TSVD y *Tikhonov* ofrecen resultados muy similares, y que mantienen una diferencia espectral con el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* de 3.5-3.7 %. Conviene destacar que esta diferencia no es una medida del error del espectro reconstruido, sino solo una cuantificación porcentual de la diferencia con respecto al espectro que se ha tomado como hipótesis inicial en las simulaciones.

A pesar de que los espectros de 6 MeV reconstruidos a partir de los métodos de deconvolución TSVD y *Tikhonov* de la matriz de gradientes difieren en un porcentaje inferior a un 1%, se ha optado por analizar en detalle la precisión de los resultados del espectro obtenido con la metodología de *Tikhonov* GDP, por acercarse más al espectro extraído de la literatura (*Sheik-Bagheri y Rogers*) para una misma unidad de radioterapia.

En este apartado, los resultados obtenidos con la matriz de gradientes de dosis en profundidad han sido comparados con los obtenidos utilizando la metodología de dosis en profundidad tradicional, a fin de estudiar la mejora significativa lograda. Las curvas inferiores (Figura 7.47) muestran la típica curva *L* obtenida al aplicar el método de *Tikhonov* para las matrices estudiadas *A* y *A'*. Es decir, estas curvas muestran la curva *L* obtenida con el enfoque tradicional y la obtenida con la metodología de gradientes estudiada. Puede observarse que la esquina de la curva está mejor definida en el enfoque de gradientes.

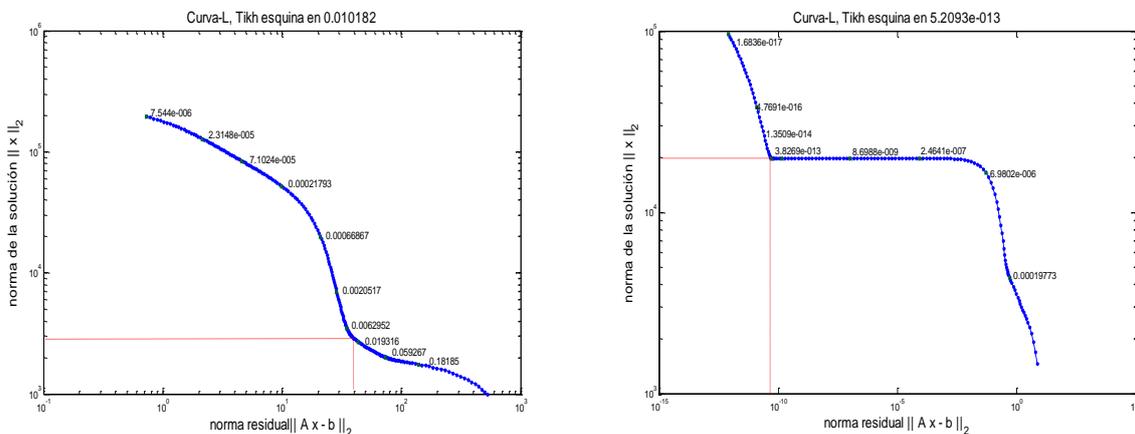


Figura 7.47. Comparación de la Curva *L* en la metodología de *Tikhonov* para DP y GDP.

A partir de los resultados previos, las figuras siguientes (Figura 7.48) muestran los espectros fotónicos de 6 MeV reconstruidos obtenidos mediante la metodología de dosis en profundidad tradicional y la técnica de gradientes de dosis respectivamente, comparadas con el espectro de 6 MeV de *Sheik-Bagheri y Rogers*. Ambos se han calculado utilizando el método de deconvolución de *Tikhonov*.

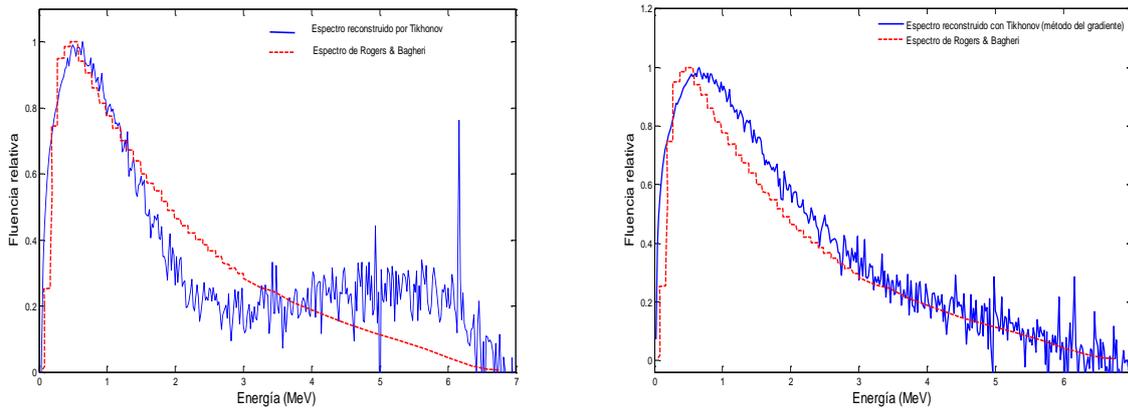


Figura 7.48. Comparación de los espectros obtenidos con la metodología de *Tikhonov* para DP y GDP.

El espectro de reconstrucción a partir del enfoque tradicional de dosis en profundidad (Figura 7.48) ofrece una representación de baja precisión con respecto al espectro real. Por otra parte, como se esperaba, la técnica de gradientes da una mejor representación de la forma espectral y reproduce con mejor precisión la distribución de fluencia, especialmente para altas energías. Los ejemplos que se han mostrado demuestran la ventaja del uso del método del gradiente de la curva de dosis en profundidad (GDP) para resolver el problema de la inversa de espectros de *Bremsstrahlung*.

La validación final de los espectros reconstruidos requiere la simulación del transporte de partículas en una unidad de radioterapia *Elekta Precise* utilizando estos espectros y el cálculo de las curvas de dosis en profundidad en cuba de agua.

7.3.3. Validación del espectro.

Partiendo de la ecuación,

$$A \cdot x = b \quad (7.25)$$

donde $A \in R_{M \times N}$ y $b \in R_N$, la multiplicación de la matriz respuesta A por el espectro reconstruido por *Tikhonov* x_{Tikh} , permite obtener la curva de dosis en profundidad (definida aquí como b_{Tikh}):

$$b_{Tikh} = A \cdot x_{Tikh} \quad (7.26)$$

En la figura inferior (Figura 7.49) se compara la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida (b_{Tikh}) a partir de la matriz respuesta de fotones y electrones, A , y el espectro reconstruido utilizando el método de *Tikhonov*.

Se puede observar que la curva de dosis obtenida de esta manera representa perfectamente el *Build up* inicial de la curva y refleja adecuadamente la pendiente de la curva en profundidad, encontrándose la máxima diferencia porcentual entre ambas curvas por debajo del 1%.

Esto refleja la consistencia del espectro obtenido y sirve de primera validación del proceso de deconvolución utilizado para solucionar el sistema de ecuaciones.

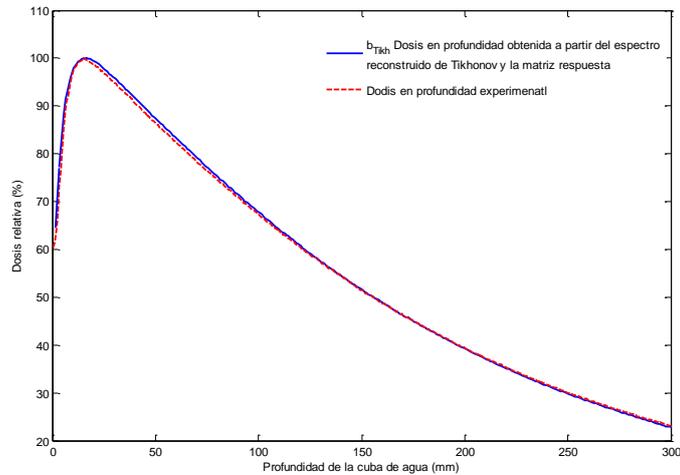


Figura 7.49. Comparación de la curva de dosis en profundidad experimental con la obtenida a partir de la matriz respuesta y el espectro obtenido por *Tikhonov*.

7.3.4. Filtrado del espectro obtenido.

El espectro obtenido por *Tikhonov* se ha filtrado con la herramienta *Wavelet Packet 1D* de *MatLab* [*Wavelet Toolbox*].

Tras el análisis de múltiples filtros, se ha llegado a la conclusión que una aproximación de *Haar* de nivel 4 reproduce de manera suficientemente precisa el espectro buscado.

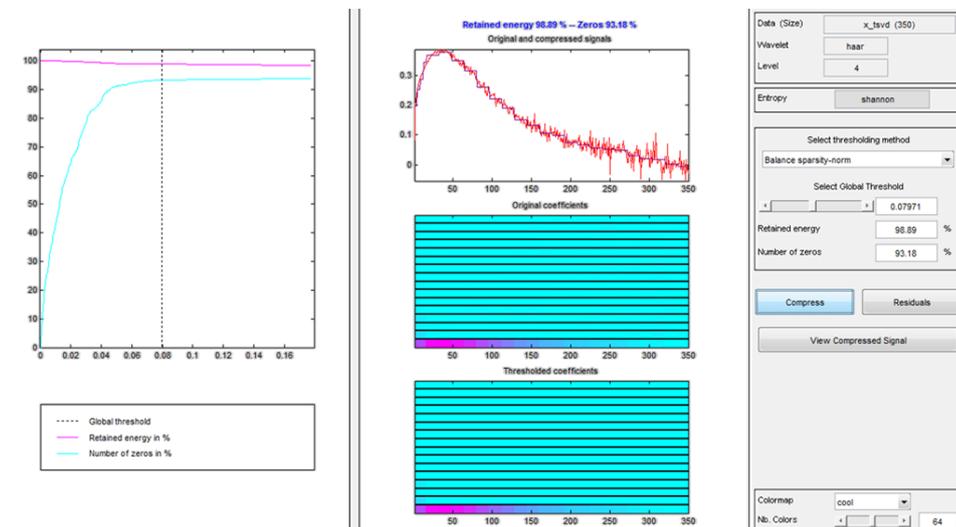


Figura 7.50. Aplicación del filtro de *haar* al espectro reconstruido por *Tikhonov*.

La transformada *Wavelet* es un tipo especial de transformada de Fourier que representa una señal en términos de versiones trasladadas y dilatadas de una onda finita (denominada onda madre).

La teoría de *Wavelet* está relacionada con campos muy variados. Todas las transformaciones de *wavelet* pueden ser consideradas formas de representación en tiempo-frecuencia y, por tanto, están relacionadas con el análisis armónico. Las transformadas de *wavelet* son un caso particular de filtro de respuesta finita al impulso.

El *Wavelet* de *Haar* es una cierta secuencia de funciones, reconocido por ser el primer *Wavelet* desarrollado. Esta secuencia fue propuesta en 1909 por *Alfred Haar*. *Haar* usó estas funciones para dar un ejemplo de un sistema ortonormal contable para el espacio de las funciones de cuadrado integrable en la recta real. El estudio de los *Wavelets*, e incluso el término "*Wavelet*", no vinieron hasta mucho después. El *Wavelet* de *Haar* es también el *Wavelet* más simple posible.

La figura siguiente (Figura 7.51) presenta conjuntamente el espectro obtenido directamente tras la reconstrucción por *Tikhonov* y el espectro filtrado utilizando la herramienta *Wavelet*.

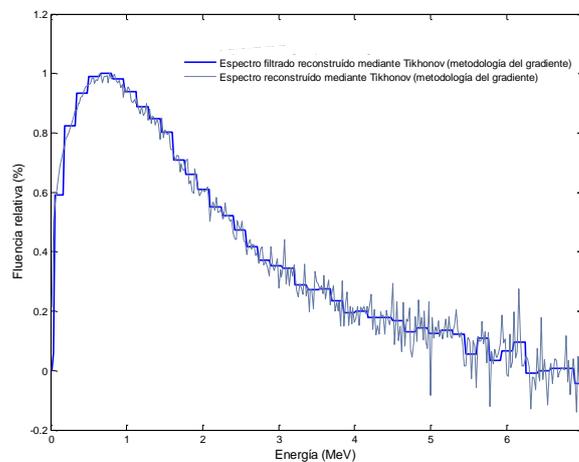


Figura 7.51. Filtrado del espectro por *Wavelet*.

Por otro lado, también se ha utilizado la interpolación polinómica para reducir el ruido del espectro. La figura siguiente (Figura 7.52) presenta conjuntamente el espectro obtenido directamente tras la reconstrucción por *Tikhonov* y el espectro interpolado con un polinomio de grado 7.

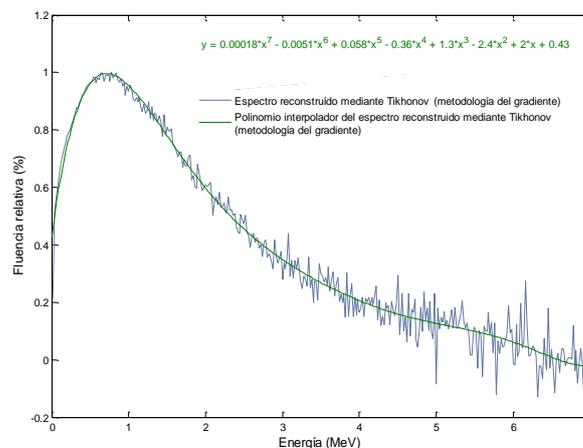


Figura 7.52. Filtrado del espectro por interpolación polinómica.

Utilizando el espectro filtrado por ambos métodos se ha calculado la curva de dosis en profundidad en una cuba de agua con el modelo validado del cabezal del *Elekta Precise*. La figura (Figura 7.53) compara la curva medida experimentalmente en la cuba de agua con la curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y ajustado mediante un polinomio.

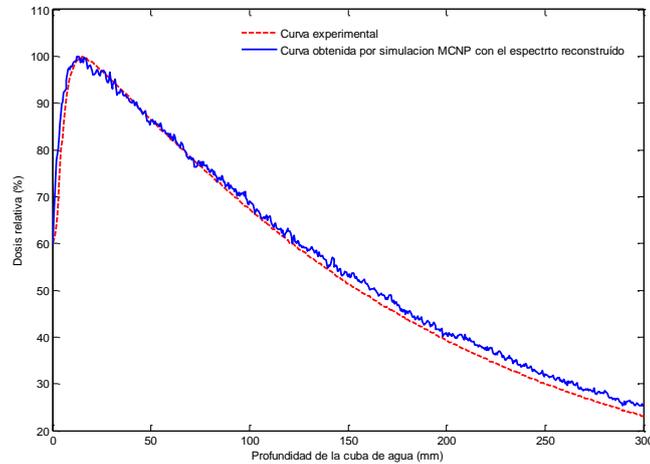


Figura 7.53. Curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y ajustado por polinomio.

La figura inferior (Figura 7.54) compara la curva medida experimentalmente en la cuba de agua con la curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y ajustado por *Wavelet*.

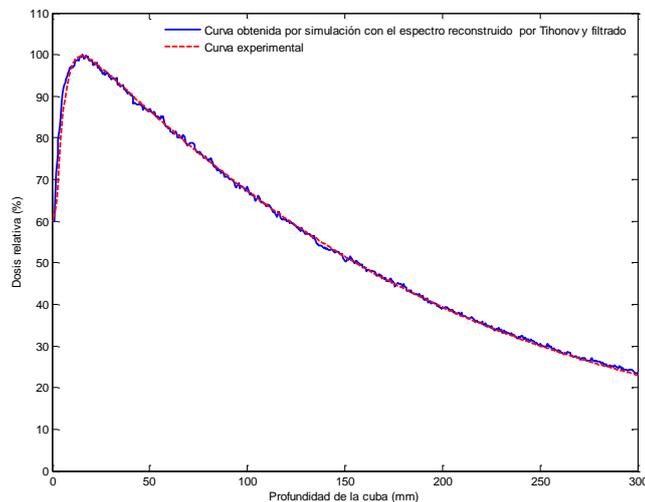


Figura 7.54. Curva de dosis en profundidad a partir del espectro reconstruido mediante *Tikhonov* y filtrado por *Wavelet*.

De acuerdo a estas dos figuras (Figuras 7.53 y 7.54) es fácil observar que el filtrado de *haar* del espectro reconstruido reproduce la curva de dosis en profundidad perfectamente.

7.4. Comparación de las diferentes técnicas de reconstrucción de espectros.

A lo largo de esta tesis se ha analizado tres diferentes metodologías para la obtención de espectros fotónicos emitidos por aceleradores lineales médicos: la simulación de la aceleración de electrones hacia el blanco, el análisis de la dispersión mediante *Schiff-Bremsstrahlung*, y la reconstrucción a partir de la deconvolución de los valores de dosis en profundidad en una cuba de agua.

La primera de las metodologías mencionadas, solo es factible cuando la empresa fabricante del *Linac* conoce y facilita los valores de la distribución de electrones primarios que inciden en el blanco de la máquina, lo cual no es frecuente.

La curva verde de la figura inferior (Figura 7.55) demuestra que los valores utilizados en la distribución del espectro de electrones inicial que inciden en el blanco (6.3 MeV de energía media y 0.11 de FWHM) no son del todo exactos puesto que la curva de dosis en profundidad resultante se aleja de los datos experimentales. Este proceso podría perfeccionarse mediante un estudio de incertidumbre y sensibilidad en el que se definan dos variables de distribución uniforme (la media y la dispersión de la distribución de los electrones incidentes en el blanco), las cuales variándose de manera aleatoria dentro de unos rangos definidos, puedan generar una batería de casos. La simulación de todos estos casos y el análisis de sus resultados permiten determinar cuál de las curvas de dosis en profundidad generadas con cada caso es la que mejor se aproxima a la curva de dosis experimental.

Por otro lado, el espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers* fue utilizado como hipótesis inicial para comenzar las simulaciones. Las curvas de dosis en profundidad obtenidas con este espectro, curva azul clara en la figura siguiente (Figura 7.55) fueron presentadas en el apartado 7.1.2 en las que se puede observar como la curva de dosis resultante es inferior a la experimental.

Se ha comprobado que el método más fiable de reconstrucción de espectros es la deconvolución de la matriz de gradientes, cuya curva de dosis correspondiente se puede observar en azul oscuro en la figura siguiente (Figura 7.55). De las curvas presentadas en esta figura, se puede comprobar cómo es esta última la que más se aproxima a las medidas experimentales, sin embargo, la aproximación mediante un polinomio de este espectro no es la opción más adecuada, puesto que la desviación con respecto a las medidas experimentales está por encima del 3%.

La figura situada a continuación (Figura 7.55) compara los resultados de la curva de dosis en profundidad experimental (curva roja) con aquellas obtenidas tras la utilización de los espectros generados por aceleración de electrones contra el blanco (curva verde), reconstrucción vía *Tikhonov - GDP* y filtrado por polinomios (curva azul oscuro) y el espectro propuesto por *Sheik-Bagheri y Rogers* (curva azul claro).

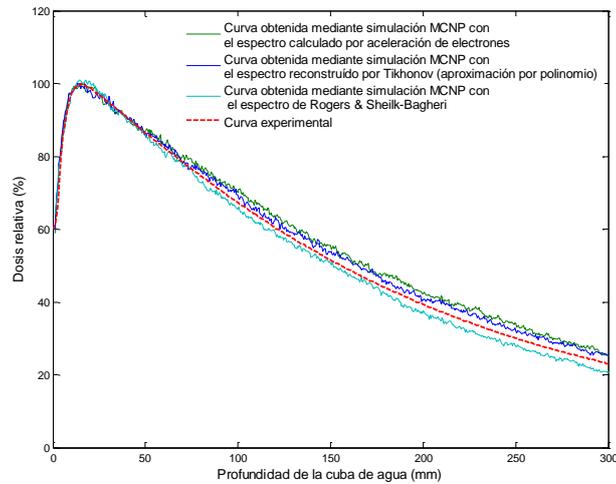
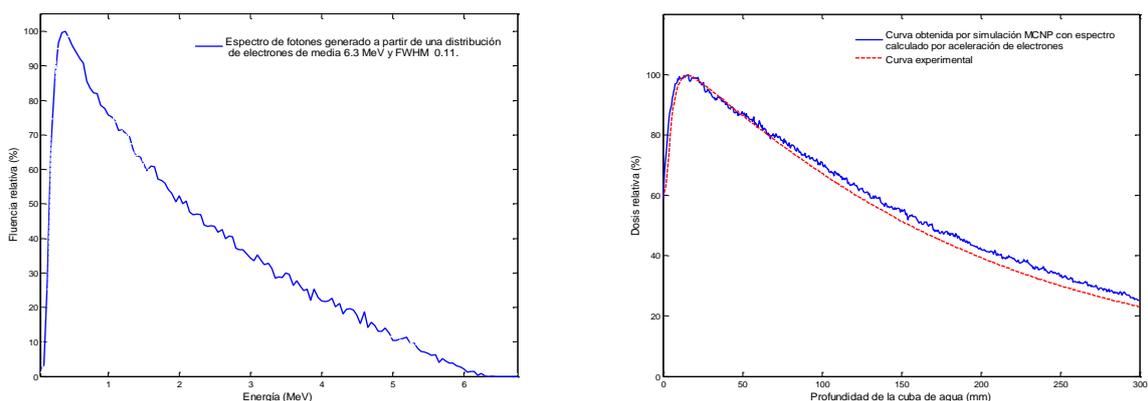


Figura 7.55. Comparación de las curvas en profundidad para los diferentes espectros calculados.

De las cuatro curvas presentadas en la figura anterior (Figura 7.55), la que más se acerca a la medida experimental es la curva obtenida por *Tikhonov*. Sin embargo, con el filtrado de este espectro mediante *Wavelets* se obtiene una curva que ajusta perfectamente con la experimental tal y como se puede observar en las figuras siguientes (Figura 7.56).

Un estudio más detallado queda reflejado en la página siguiente mediante cuatro simulaciones Monte Carlo donde los espectros incidentes utilizados son los obtenidos tras la simulación de la aceleración de electrones contra el blanco, vía *Schiff-Bremstrahlung* y el espectro correspondiente obtenido tras la reconstrucción vía GDP (con filtrado polinomial y *Wavelet*), y en las cuales se compara la distribución de dosis obtenida en una cuba de agua con los valores experimentales.



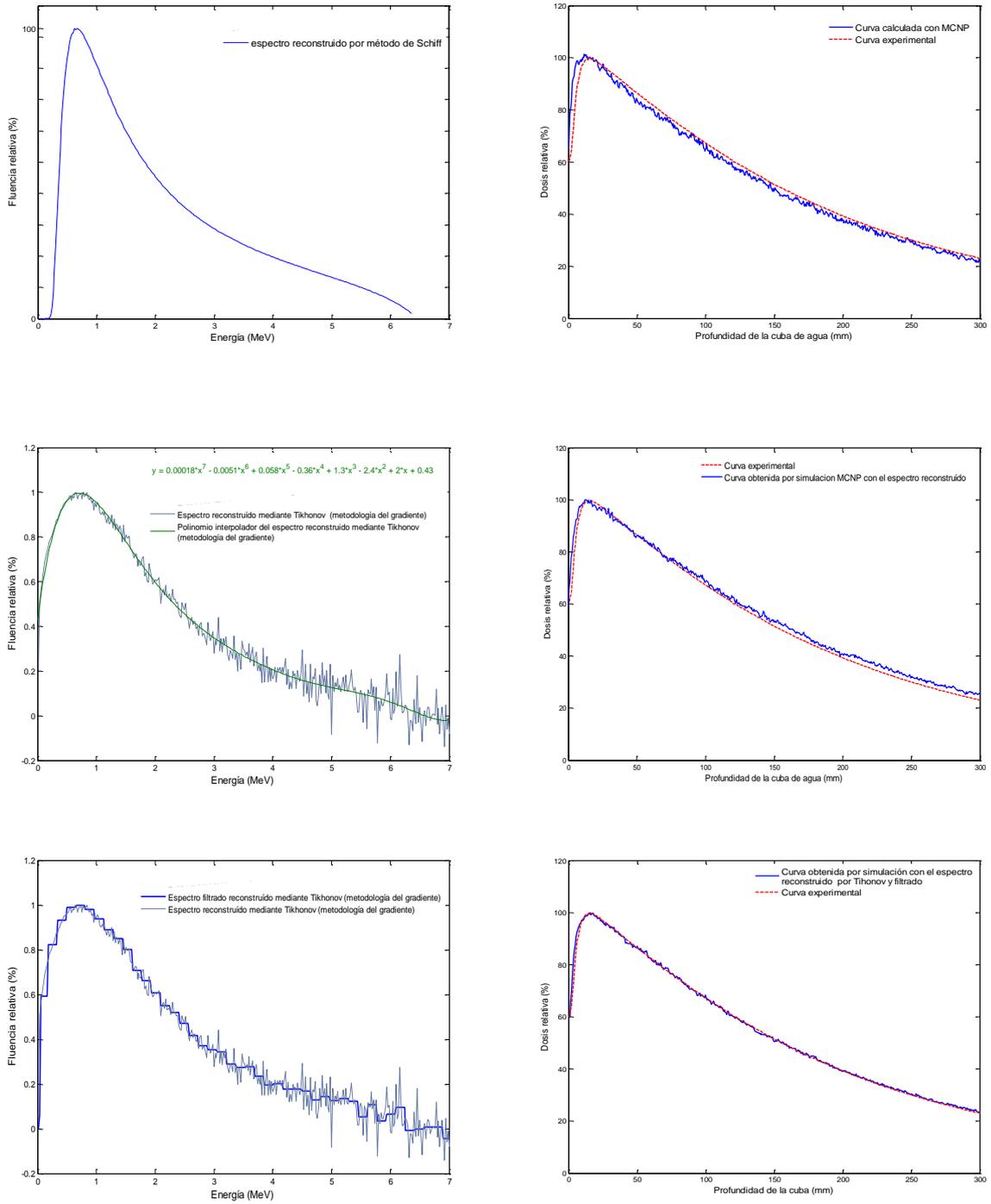


Figura 7.56. Comparación de los espectros calculados y sus correspondientes curvas de dosis en profundidad.

Con el fin de comparar objetivamente las curvas de dosis en profundidad experimentales y las obtenidas por simulación, ambas normalizadas del mismo modo (normalizadas al máximo en el *Build up*), se ha cuantificado el nivel de coincidencia mediante dos parámetros: la máxima diferencia porcentual y la media de las diferencias porcentuales (ó media cuadrática) entre ambas curvas. Los valores se detallan en la tabla situada a continuación (Tabla 7.7).

La media cuadrática, o RMS (del inglés *Root Mean Square*) es una medida estadística que puede calcularse para una serie de valores discretos. El nombre deriva del hecho de que es la raíz cuadrada de la media aritmética de los cuadrados de los valores. En la diferencia entre ambas curvas, a veces la variable toma valores positivos y negativos. Para obtener un promedio que no recoja los efectos del signo, se utiliza la denominada media cuadrática. Consiste en elevar al cuadrado todas las diferencias (así los signos negativos desaparecen) y en obtener después su media aritmética para extraer, finalmente, la raíz cuadrada de dicha media para volver a la unidad de medida original.

La media cuadrática para una colección de N valores $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ viene dada por la fórmula:

$$x_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2} \quad (7.27)$$

Tabla 7.7. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para los diferentes espectros calculados.

Metodología de cálculo del espectro fotónico del Linac	Máxima diferencia entre la curva experimental y la simulada (%)	Diferencia media cuadrática entre la curva experimental y la simulada (%)
Aceleración de electrones	5.8	4.6
Metodología de análisis de la dispersión por <i>Schiff-Bremstrahlung</i>	5.2	3.6
Reconstrucción de la matriz de gradientes por <i>Tikhonov</i> (aproximación polinomial)	4.7	2.3
Reconstrucción de la matriz de gradientes por <i>Tikhonov</i> (filtrado por Wavelet)	1.6	0.9

A partir de los resultados de esta tabla, se puede asumir que la tecnología descrita de reconstrucción de espectros a partir de la derivada de la matriz respuesta (GDP) es una metodología fiable y precisa para el cálculo de espectros fotónicos emitidos por aceleradores lineales. Además, esta metodología, también aplicable a la reconstrucción de espectros de rayos X, ofrece mejores resultados en el caso de espectros emitidos por *Linac*, ya que estos últimos no presentan picos característicos en su espectro energético.

Como última validación, se ha utilizado el espectro reconstruido para el cálculo de las curvas de dosis en profundidad generadas con diferentes tamaños de campo. Concretamente, se han calculado las curvas para los tamaños de 5 cm x 5 cm y 15 cm x 15 cm. Los resultados pueden observarse en las curvas situadas a continuación (Figura 7.57). En estas figuras se presentan las curvas de dosis

experimentales junto con las curvas calculadas por simulación utilizando el espectro reconstruido mediante la metodología descrita *Tikhonov* -GDP y filtrado *haar* por Wavelets.

El resultado obtenido para estos dos tamaños de campo presenta un elevado grado de precisión, con una diferencia media cuadrática entre ambas curvas inferior al 2%.

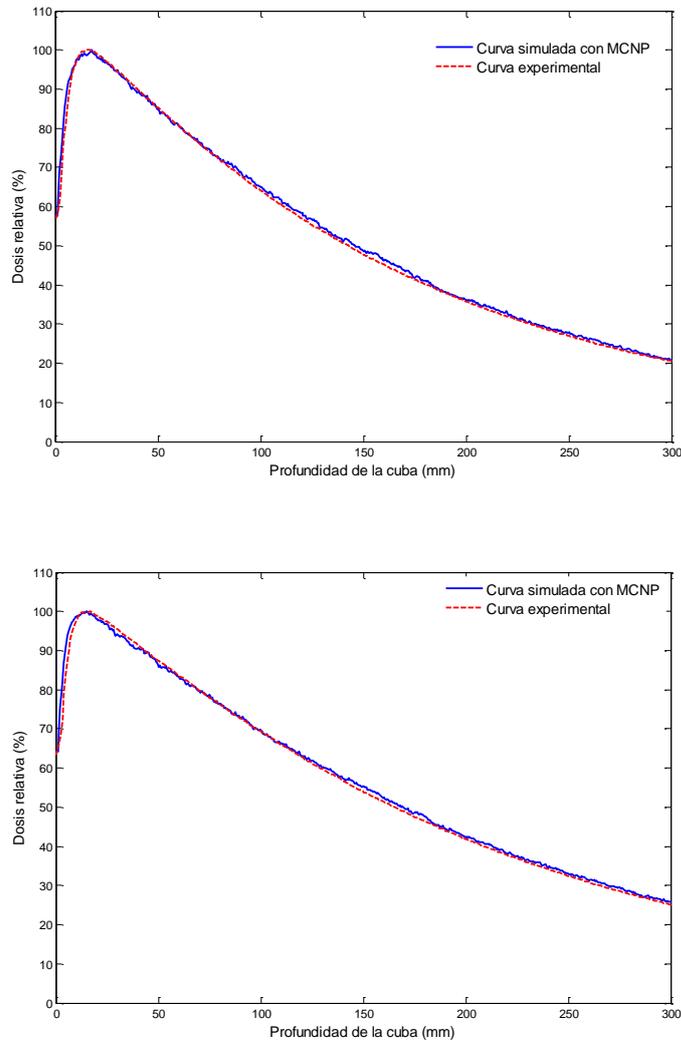


Figura 7.57. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para diferentes tamaños de campos (5 cm x 5 cm y 15 cm x 15 cm) con el espectro reconstruido por Tikhonov y filtrado.

Por último, las figuras siguientes (Figura 7.58) junto con la tabla situada a continuación (Tabla 7.8) presentan un análisis en detalle de la precisión de la curva simulada de dosis relativa en profundidad y en perfil para una profundidad de 10 cm fijando un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm, de acuerdo a los criterios establecidos en el TRS 430 del AAPM (apartado 7.1.1).

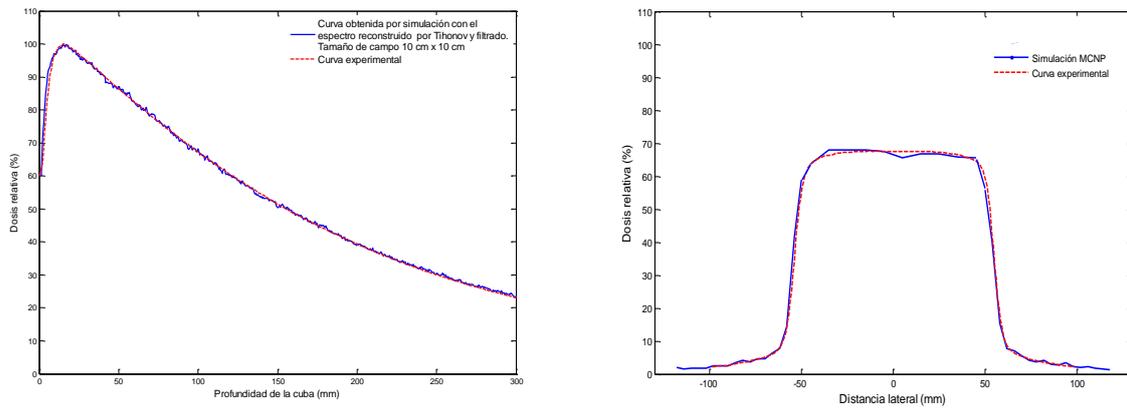


Figura 7.58. Comparación de las curvas simuladas de dosis en profundidad y perfil a 10 cm de profundidad para un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm generadas con el espectro reconstruido por *Tikhonov* y filtrado y las curvas medidas experimentalmente.

Tabla 7.8. Precisión de las simulaciones.

Test	Eje del haz	Interior del haz	Exterior del haz	Penumbra	<i>Build up</i>
	<i>a</i> (%)	<i>b</i> (%)	<i>c</i> (%)	<i>d</i> (mm)	<i>e</i> (%)
Campo 10x10					
Cálculos Monte Carlo	0.9	2.5	1	0.05	1
Campos cuadrados TRS 430	1	1.5	2	2	20

De acuerdo a estos resultados, se puede afirmar que el código MCNP5 es capaz de simular el funcionamiento del cabezal de un acelerador clínico y por lo tanto, predecir con precisión la deposición tridimensional de dosis. La máxima diferencia se encuentra en el interior del haz debido (tal y como se comentó en el apartado 7.1.2) al tamaño de las celdas de registro en estas zonas. Esto confirma la fiabilidad del modelo computacional desarrollado en la tesis, tanto geoméricamente como en lo que al espectro utilizado se refiere.

7.5. Cálculo del espectro de 15 MeV.

El equipo con que cuenta el Hospital Clínic Universitari de València y que ha sido objeto de estudio en esta tesis, el *Elekta Precise*, puede proveer dos espectros de fotones distintos, de 6 y 15 MeV (apartado 6.2).

El trabajo presentado en esta tesis se ha centrado principalmente en la reconstrucción del espectro de 6 MeV y la simulación del transporte de partículas de un haz con este espectro a través del cabezal hasta el paciente o maniquí. Concretamente, en el apartado anterior (7.4) se ha realizado una comparativa y un estudio en detalle para averiguar la manera más precisa para calcular el espectro fotónico emitido por un acelerador lineal médico. Tal y como se ha descrito, se ha llegado a la conclusión de que el procedimiento de reconstrucción del espectro mediante la deconvolución de la

matriz de gradientes de dosis en una cuba de agua utilizando el método de Tikhonov o TSVD, es una forma precisa de calcular el espectro emitido por la unidad de radioterapia [Juste, 2011a].

Basándose en la fiabilidad de los resultados obtenidos en la reconstrucción del espectro de 6 MeV emitido por el *Elekta*, se ha procedido de igual manera para calcular el espectro fotónico de 15 MeV emitido por la misma unidad de radioterapia, y de esta manera verificar que la metodología de gradientes descrita es aplicable a cualquier espectro de energía emitido por un Linac.

Para el rango de energía de 15 MeV que se ha estudiado, el espectro desconocido se ha dividido esta vez en 375 intervalos de energía (0.04 MeV, 0.08 MeV, ..., 15 MeV). Se ha ampliado el rango de energía de cada intervalo al doble, debido al elevado número de simulaciones que supone dejarlo en 0.02 MeV, como en el caso anterior. Las curvas de dosis en profundidad en la cuna de agua se han obtenido a partir de simulaciones simplificadas de espectros monoenergéticos utilizando el código Monte Carlo MCNP5.

La figura inferior (Figura 7.59) muestra la matriz respuesta $A_{M \times N}$ obtenida a partir de las simulaciones MCNP5 registrando las curvas de dosis en profundidad en la cuba de agua para cada haz monoenergético.

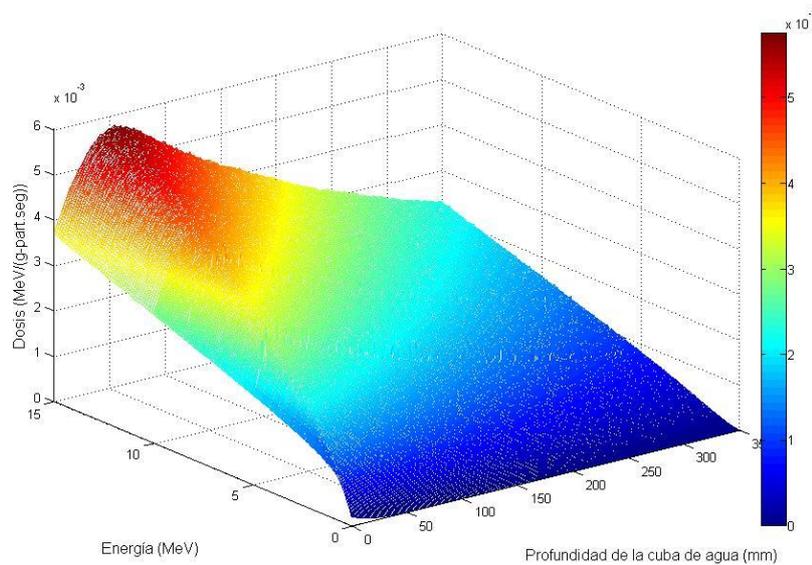


Figura 7.59. Matriz respuesta $A_{M \times N}$, registro de las curvas de dosis en profundidad para cada haz monoenergético.

La matriz respuesta $A_{M \times N}$ contiene la información de la dosis a diferentes profundidades ($M = 350$) en una cuba de agua para diferentes haces monoenergéticos ($N = 375$). Las curvas de dosis en profundidad, al igual que con el espectro de 6 MeV, constan de los valores de dosis relativa en cada milímetro de profundidad de la cuba de agua hasta los 350 mm. Por otro lado, en este caso se ha ampliado el rango de discretización de la energía a 0.04 MeV.

La figura inferior (Figura 7.60) muestra la derivada con respecto a la profundidad de la matriz respuesta anterior $A_{M \times N}$. A esta matriz de gradientes de idénticas dimensiones se le denomina A' .

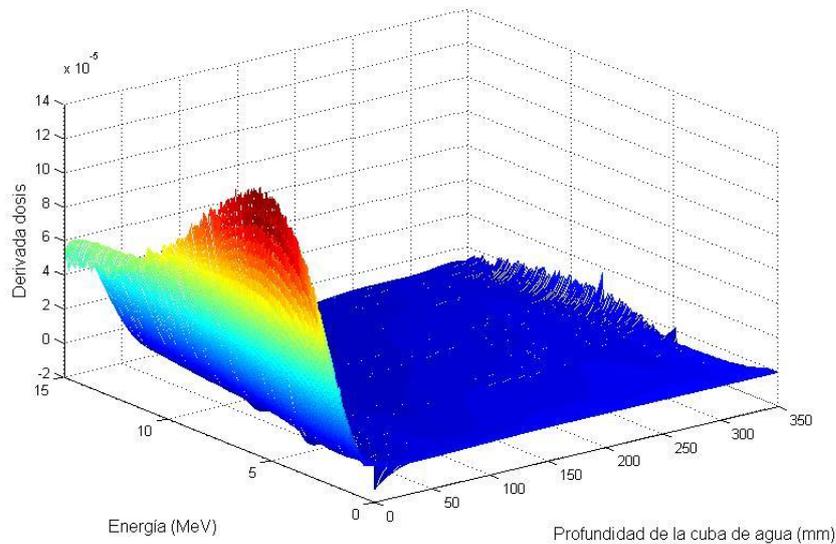


Figura 7.60. Derivada de la matriz respuesta, $A'_{M \times N}$.

Una medida inicial que da una idea de lo bien o mal condicionado que está un sistema lineal de ecuaciones es el estudio del número condición del sistema. El número de condición de la matriz respuesta de gradientes es el siguiente:

$$\text{Número de Condición } (A') = 1.6510e + 017$$

Tal y como se esperaba, el elevado valor del número de condición de la matriz nos indica que el problema no está bien condicionado, lo que implica que es muy difícil obtener A'^{-1} con un procedimiento de inversión estándar.

Además, la representación siguiente (Figura 7.61) representa los valores singulares, σ_i para cada valor de i tanto de la matriz respuesta como de su correspondiente matriz de gradientes. Se puede observar como en ambas, los valores singulares decaen rápidamente a 0, es decir, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r \approx \sigma_{r+1} \approx \sigma_N = 0$, lo que supone un comportamiento típico de los valores singulares en condiciones de inestabilidad del sistema.

Sin embargo, al igual que en el caso del espectro de 6 MeV, se puede observar como los valores singulares obtenidos en la matriz de gradientes separan de mejor manera cuáles tienen una información útil, frente a los valores singulares que sólo aportan ruido y deben ser despreciados.

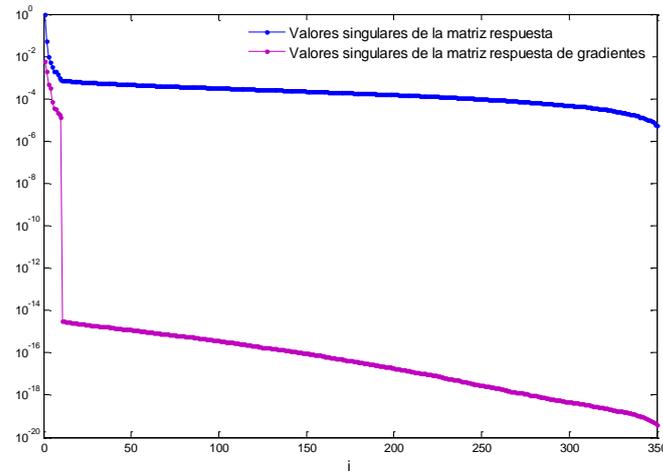


Figura 7.61. Valores singulares σ_i .

La condición discreta de *Picard* de la matriz de gradientes sea representado en la figura siguiente (Figura 7.62). Se puede ver que los valores absolutos promediados de los coeficientes de Fourier $|u_i^T b|$ decaen rápidamente hasta un cierto índice i , a partir del cual los coeficientes $|u_i^T b|$ se estabilizan. Por tanto, el rango donde la Condición de *Picard* se satisface es limitado. Ello implica que el parámetro de truncamiento o de corte elegido debe corresponder a un valor menor que i , que en este caso es 10. Esta **Condición Discreta de Picard** permite concluir que el problema si tiene una solución numérica, y además permite determinar que existen 10 valores singulares que tienen una información útil, frente al resto de los valores singulares que sólo aportan ruido.

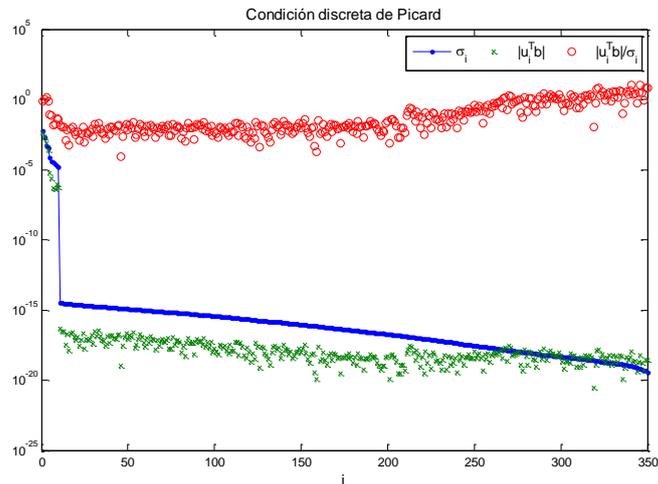


Figura 7.62. Representación de la condición de Picard discreta de la matriz de gradientes.

Para poder resolver el sistema se ha optado en esta ocasión por la metodología de regularización TSVD, descrita en el apartado 6.4.5.1.

Para ello, tal y como se desarrolló en el caso de la reconstrucción del espectro de 6 MeV, la curva L nos permite confirmar el número de valores singulares a despreciar y el valor adecuado del parámetro

de regularización. Tal y como ya se mencionó, este punto se sitúa en la curva donde la norma del vector solución y la norma del vector de los residuos se minimizan simultáneamente, es decir, en el punto de curvatura máximo, el cual se encuentra marcado en la gráfica (Figura 7.63) en rojo.

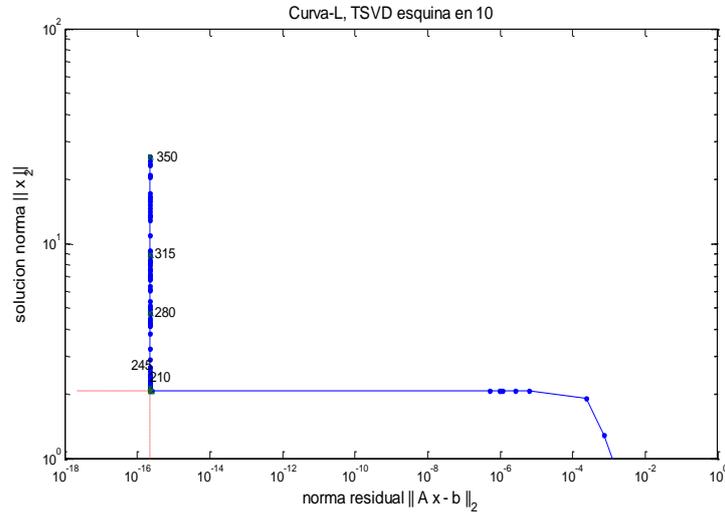


Figura 7.63. Curva L para determinar el parámetro de truncamiento con el método de TSVD.

A partir de la curva L para el método de TSVD, se puede observar que para este método, el orden de truncamiento, es decir, el punto de máxima inflexión de la curva corresponde al valor 10.

Se presenta en la figura siguiente (Figura 7.64) el espectro obtenido a partir de la reconstrucción utilizando el método TSVD a la matriz de gradientes con un parámetro de truncamiento $k = 10$.

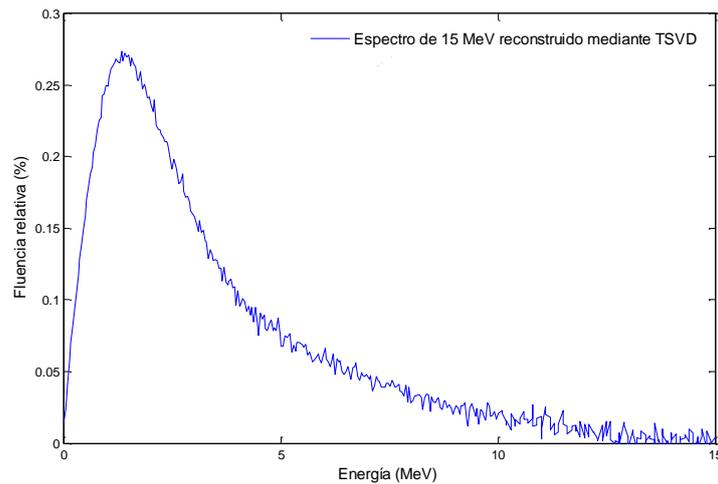


Figura 7.64. Reconstrucción del espectro por TSVD, con parámetro de truncamiento $k=10$.

El espectro obtenido se somete entonces a un proceso de filtrado con ayuda del *Toolkit de Wavelets de MatLab*. Se ha escogido un filtro de haar de nivel 3.

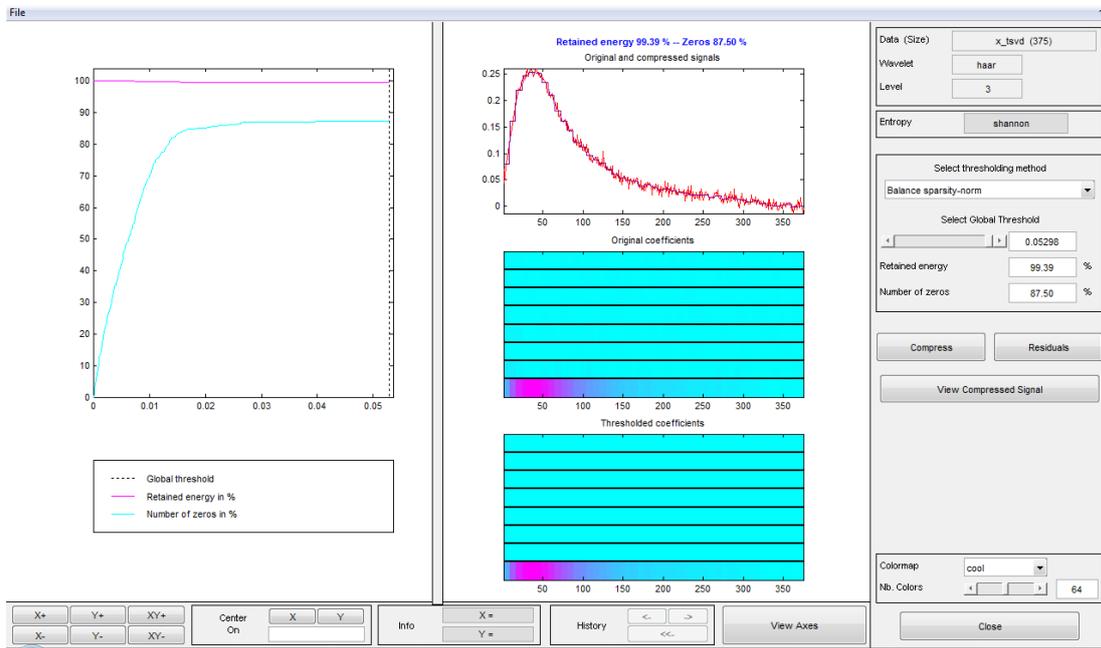


Figura 7.65. Aplicación del filtro de haar al espectro de 15 MeV reconstruido por *Tikhonov*.

La figura siguiente (Figura 7.66) presenta el espectro obtenido directamente de la regularización por TSVD y el filtrado.

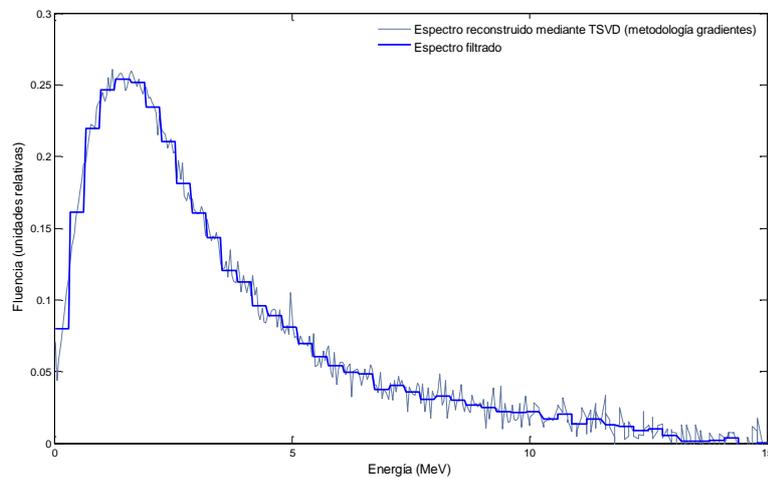


Figura 7.66. Filtrado del espectro de 15 MeV.

La validación del espectro de 15 MeV obtenido se ha realizado utilizando una simulación completa del transporte de partículas desde el blanco del *Linac* hasta la cuba de agua haciendo uso de este espectro de 15 MeV. El modelo geométrico de esta simulación varía ligeramente con respecto a la geometría del cabezal de la unidad de radioterapia para un espectro de 6 MeV, y es que en el caso de los haces de alta energía es necesario la incorporación a la salida del colimador un filtro (Figura 7.67).

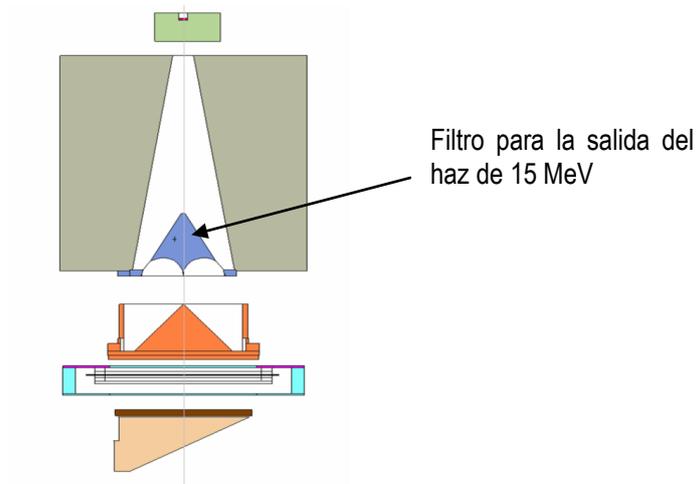


Figura 7.67. Vista esquemática de la geometría modelizada con MCNP5 del cabezal del acelerador lineal médico *Electra Precise* para un haz de fotones de 15 MeV.

La curva de dosis en profundidad obtenida a partir de dicha simulación se ha comparado con los datos experimentales (Figura 6.68).

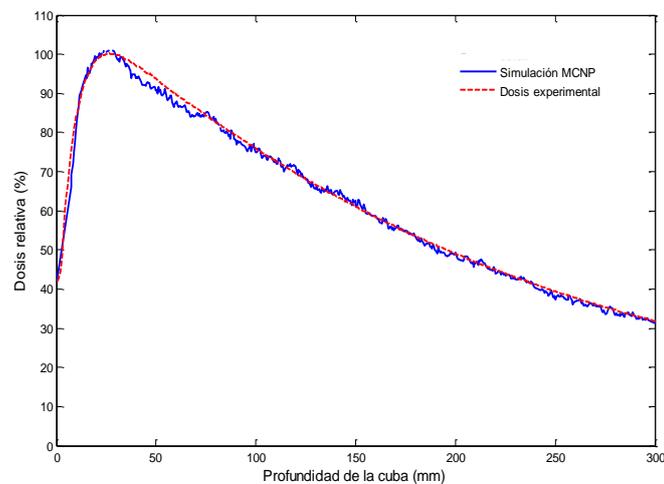


Figura 7.68. Comparación de las curvas de dosis en profundidad para un tamaño de campo de 10 cm x 10 cm con el espectro de 15 MeV reconstruido por TSVD y filtrado.

Puede observarse que ambas curvas ajustan con una alta precisión, estando los datos simulados y experimentales dentro de un margen medio de diferencia de 5 %. Las diferencias más importantes se sitúan en la zona posterior al *Build up*, tal y como se observa en la figura. Estudios posteriores tienen como objetivo ampliar el análisis de la reconstrucción del espectro de 15 MeV y perfeccionar los resultados obtenidos.

Capítulo 8

Conclusiones

8.1. Discusión de los resultados.

El trabajo desarrollado en esta tesis se enmarca dentro del campo de investigación de la planificación de tratamiento en radioterapia y de la simulación con métodos de Monte Carlo en transporte de radiación. El principal objetivo de la tesis ha sido el desarrollo de una metodología fiable para la estimación de la dosis en tratamientos de radioterapia en pacientes, así como establecer una metodología de reconstrucción de espectros aplicable a aceleradores lineales médicos.

8.1.1. Simulación de la unidad de radioterapia.

En esta parte de la tesis se ha presentado la simulación por métodos de Monte Carlo del cabezal de un acelerador lineal *Elekta Precise*, utilizado en el Hospital Clínic Universitari de València para la realización de tratamientos radioterapéuticos, usando la plataforma de simulación de código abierto MCNP5. En ella se incluye además el cálculo de la dosis depositada en una cuba de agua líquida situada a 100 cm de distancia de la fuente.

Se ha introducido la geometría íntegra del cabezal del acelerador, configurado para un tratamiento de radioterapia con fotones. En concreto, se ha simulado con el mayor nivel de detalle posible el blanco generador de fotones por radiación de frenado, el colimador primario junto con el filtro aplanador, la cámara de monitorización, las mordazas y los colimadores.

En cuanto a la cuba, ésta consiste en una cuba llena de agua de dimensiones 50 cm x 50 cm x 50 cm cuya superficie está situada a 100 cm de la fuente. Con el fin de realizar el cálculo de la curva de rendimiento en profundidad y de los perfiles laterales, la cuba ha sido mallada completamente en vóxeles de tamaño 1 mm³ mediante la herramienta FMESH.

Toda la geometría ha sido simulada en dos etapas para ahorrar coste computacional. En una primera etapa se ha simulado la incidencia de $2 \cdot 10^{11}$ fotones para generar un archivo de espacio de fase justo a la salida del colimador. En la segunda etapa se realiza la simulación del transporte de todas las partículas almacenadas en el archivo de espacio de fase hasta la cuba de agua incluyendo el transporte a través de ésta. Las partículas almacenadas se utilizan hasta 100 veces en la segunda etapa de la simulación, mediante un resamplio de números aleatorios a partir de las partículas almacenadas en el archivo de espacio de fase.

Los resultados mostrados se han obtenido considerando configuraciones de tamaño de campo desde 5 cm x 5 cm hasta 30 cm x 30 cm. Para todos los campos el tiempo de cálculo se situó en torno a las 7 horas utilizando el *cluster* (16 procesadores). La primera etapa tiene un coste computacional mayor, de unas 6 h aproximadamente. Los resultados presentados en la tesis presentan una concordancia bastante buena con los datos experimentales obtenidos durante la calibración del equipo.

La incertidumbre asociada a cada punto dentro del campo de radiación es aproximadamente del 2% (2σ), siendo la desviación absoluta con respecto a los datos experimentales de las curvas en profundidad inferior al 3% en todos los casos.

Estos resultados muestran que el MCNP5 es capaz de realizar simulaciones con exactitud en problemas de interés dentro del ámbito de la radioterapia mediante haces de fotones colimados. La simulación del transporte de neutrones a lo largo de la geometría no se ha considerado al no ser relevante a la energía nominal de 6 MeV. Para energías superiores la contaminación neutrónica es significativa, por lo que se hace necesario incluir los procesos físicos correspondientes, que MCNP5 proporciona, así como un modelado riguroso y exacto del blindaje del propio acelerador. Dicho trabajo se encuentra en fase de desarrollo.

8.1.2. Reconstrucción del espectro por el método de *Schiff*.

Actualmente, con objeto de mejorar la planificación de los tratamientos en radioterapia, se requiere un conocimiento más preciso de los espectros de haces fotónicos emitidos por los aceleradores lineales médicos. En este apartado se ha reconstruido el espectro de fotones de un haz de 6 MeV mediante el desarrollo de una metodología de análisis de la dispersión.

Se ha examinado un método alternativo para la reconstrucción espectral de haz de fotones basado en el análisis de dispersión para aceleradores lineales. El método consiste en irradiar un pequeño bloque de plástico colocado a 100 cm de la fuente y calcular el espectro principal de energía basándose en la medición con una cámara Farmer estándar la dispersión alrededor del plástico en varios ángulos de dispersión específicos. El código Monte Carlo se utiliza para simular el choque del haz con el bloque de plástico y predecir la magnitud relativa de las mediciones de dispersión para haces mono energéticos. Basándose en los datos de dispersión de estos haces mono energéticos, se calcula el espectro como la suma de cada energía individual de los haces mono energéticos utilizando el modelo de *Bremsstrahlung* de *Schiff*. El método se aplica a un haz de fotones del Elekta Precise 6 MeV.

El procedimiento experimental junto con los resultados obtenidos de la simulación Monte Carlo ha permitido calcular un espectro de fotones cuya curva de dosis relativa en profundidad en una cuba de agua ajusta de manera precisa con las medidas tomadas experimentalmente, sin embargo la forma espectral difiere considerablemente del espectro de *Sheik-Bagheri y Rogers*.

Los valores de dosis de profundidad calculados para el espectro reconstruido de acuerdo con los datos de dosis de profundidad experimentalmente medidos difieren un máximo de 5%.

Este análisis de dispersión se ha demostrado que tiene un gran potencial como método de reconstrucción espectral ya que requiere pocas mediciones y es viable en cualquier departamento de radioterapia mediante un bloque de plástico y una cámara Farmer.

Esta metodología, aunque los resultados presentados en esta parte de la tesis son alentadores, el método necesita más desarrollo para mejorar la precisión de las mediciones de fondo y de la dispersión y la estabilidad de los resultados. La reconstrucción con curvas de dispersión a partir de más puntos 10 ó 15 podría proporcionar una estabilidad mejorada.

Trabajos posteriores tienen previsto incluir la medida de la dispersión en más posiciones del detector con el fin de mejorar la fiabilidad de resultados obtenidos. Por otro lado, se plantea aplicar el método de reconstrucción utilizando un flat panel (matriz de dispersión de diodos) y así obtener una matriz de múltiples señales de dispersión.

8.1.3. Reconstrucción del espectro por análisis de deconvolución.

Con el modelo de simulación previamente validado, la última parte de la tesis se ha dedicado a desarrollar una metodología para reconstruir el espectro del haz primario. En esta parte de la tesis, la caracterización del espectro primario de fotones emitido por un *Linac*, se ha obtenido haciendo uso de medidas experimentales de dosis en profundidad en una cuba de agua, también ha sido necesario simulaciones Monte Carlo y el empleo de algoritmos matemáticos. Las simulaciones realizadas haciendo uso del programa MCNP5, permiten obtener una matriz de respuesta que contiene toda la información necesaria para realizar la deconvolución a partir de la curva de dosis de profundidad medida experimentalmente en una cuba de agua. Un problema importante en el proceso de desarrollo consiste en obtener la inversa de esta matriz respuesta, debido a su mal condicionamiento.

Realizando un proceso matemático de deconvolución a partir de la matriz de respuesta del sistema y la curva de dosis en profundidad, se obtiene el espectro primario. Sin embargo, esta operación es altamente ineficiente utilizando algoritmos tradicionales de inversión. Se ha realizado una revisión de los métodos de inversión matricial de mayor potencia como el método de descomposición en valores singulares (SVD), el método truncado de descomposición en valores singulares (TSVD) y el método de *Tikhonov*.

Los métodos de regularización planteados permiten, tal y como se ha mostrado, estabilizar la matriz respuesta del problema. En este sentido, los distintos métodos de regularización presentan ventajas e inconvenientes recomendándose, en general, la resolución con varios de ellos para considerarlos de forma comparada.

De las experiencias numéricas realizadas sobre el problema inverso lineal, se deduce que existe un intervalo relativamente pequeño del parámetro de regularización que proporciona soluciones razonables. En este intervalo, los efectos de los errores son adecuadamente compensados por la influencia de la información a priori. La Curva *L* se ha revelado como un instrumento muy útil para localizar este intervalo. No obstante, debe siempre tenerse en cuenta que el filtrado producido por el parámetro de regularización en la solución puede eliminar modelos útiles.

El espectro reconstruido se ha comparado con el espectro teórico facilitado por *Sheik-Bagheri* y *Rogers*. Además una segunda validación permite comparar las curvas de dosis en profundidad en cuba de agua generadas con los espectros reconstruidos con las medidas experimentalmente en el hospital.

Los resultados obtenidos apuntan a la utilización del gradiente de la matriz respuesta y a la utilización de *Tikhonov* como mejor opción para reconstruir el espectro.

Futuros trabajos incluirán en el estudio la reconstrucción de un espectro de 15 MeV, así como se tendrá en cuenta en el cálculo de la dosis los fotoneutrones generados por las interacciones con suelo, paredes y el propio paciente.

8.2. Conclusiones generales.

La determinación de la dosis absorbida (cantidad de energía depositada en la materia por unidad de masa en un volumen determinado) es muy relevante para determinar la eficacia de un tratamiento de radioterapia, y también para evaluar los efectos de la radiación en la materia.

Una forma de estimar la dosis es a través de un programa de cálculo. En particular, aquellos basados en el método de Monte Carlo se han convertido en una solución adecuada debido a su gran precisión y a su adaptabilidad a variados arreglos experimentales. En sus primeras etapas, estos programas se diseñaron con fines de investigación por parte de profesionales del ámbito de física médica. El interés de usar estos programas con fines prácticos provocó la necesidad de la reducción de los tiempos de

cálculo y esto llevó a la aparición de técnicas, muchas de ellas basadas en la disminución en la precisión de los resultados.

A raíz de los resultados globales de la tesis se puede concluir la viabilidad del método Monte Carlo para su utilización en numerosas aplicaciones clínicas, siendo sus restricciones prácticas en cuanto al tiempo de cálculo perfectamente abordable con medidas de reducción del tiempo global de cálculo basadas en técnicas de paralelización.

8.3. Líneas futuras.

La continuación de este trabajo tiene posibles líneas abiertas:

- La evaluación del modelo de simulación del *Elekta* con fantomas antropomórficos.
- La reconstrucción del espectro de 15 MeV emitido por el *Elekta*.

Para estas energías la contaminación neutrónica es significativa, por lo que se pretende incluir en la simulación los procesos físicos correspondientes y tener en cuenta en el cálculo de la dosis los fotoneutrones generados por las interacciones con suelo, paredes y el propio paciente.

- Estimación de la dosis terapéuticas en pacientes con la utilización del Flat panel. Además se plantea aplicar el método de reconstrucción utilizando el flat panel (matriz de dispersión de diodos) y así obtener una matriz de múltiples señales de dispersión
- Se tiene previsto incluir la medida de la dispersión en más posiciones del detector con el fin de mejorar la fiabilidad de resultados obtenidos mediante la reconstrucción de *Schiff-Bremsstrahlung*.

8.4. Publicaciones.

8.4.1. Publicaciones internacionales.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J.M., Campayo. *Bremsstrahlung spectrum reconstruction from gradient depth dose curves obtained in a water phantom*. Nuclear Technology. ISSN: 0029-5450, Julio, 2011.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Comparison of experimental dose curves in a heterogeneous phantom with results obtained by MCNP5 simulation and treatment planning tools*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 913-917, 2010.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Monte Carlo simulation of the iView GT portal imager dosimetry*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 922-925, 2010.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Radiotherapy treatment planning based on Monte Carlo techniques*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. ISSN: 0168-9002. Vol. 619, pp. 252-257, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *Monte Carlo model of the female RANDO phantom irradiation with an Elekta Precise linear accelerator*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. ISSN: 0168-9002. Vol. 619, pp. 230-233, 2010.

B. Juste, A. Hushyar, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *Experimental validation of an accurate multileaf collimation (MLC) Linac simulated by Monte Carlo*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 4, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *3D dose distribution calculation in a voxelized human phantom by means of Monte Carlo method*. Elsevier. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 709-713, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *MCNP5 simulation of the irradiation of a voxelized phantom with the photon beam generated in a Linear Accelerator with a multileaf collimator*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 4, 2010.

B. Juste; R. Miró; J.M. Campayo; G. Verdú. *Linear accelerator photon spectra reconstruction using a mixed experimental Monte Carlo method*. Nuclear Technology (ISSN 0029-5450) Vol. 168, pp. 637 - 642, 2009.

B. Juste; G. Verdú. *Algorithm to simulate increased noise in computed radiography*. Nuclear Technology (ISSN 0029-5450) Vol. 168, pp. 249 - 252, 2009.

B. Juste; R. Miro; G. Verdú. *Analysis of CR dose reduction in pediatric patients, based on computer-simulated noise addition*. IEEE Engineering in Medicine and Biology (ISSN 0739-5175) Vol. 1, no. 8, pp. 2697 - 2700, 2008.

B. Juste; R. Miro; G. Verdu. *Photon Spectra calculation for an Elekta linac beam using experimental scatter measurements and Monte Carlo techniques*. IEEE Engineering in Medicine and Biology (ISSN 0739-5175). Vol. 1, no. 8, pp. 3289 - 3292, 2008

B. Juste; R. Miró; J. M. Campayo; G. Verdú. *Photon Spectra calculation for an Elekta linac beam using experimental scatter measurements and Monte Carlo techniques*. American Nuclear Society. Transactions of the American Nuclear Society (ISSN 0003-018x). Vol. 99 pp. 1 - 2, 2008.

R. Miro; B. Juste; S. Gallardo; G. Verdú. *Cobalt Therapy Dosimetric Calculations over a Voxelized Heterogeneous Phantom. Validation of different Monte Carlo models and Methodologies against*

Experimental Data. IEEE Transactions on Nuclear Science (ISSN 0018-9499). Vol. 53 pp. 3808 - 3817, 2006.

8.4.2. Publicaciones nacionales.

B. Juste; R. Miró; J. M. Campayo; S. Díez; G. Verdú. *Reconstrucción del espectro Bremsstrahlung emitido por un acelerador lineal médico a partir del gradiente de las curvas de dosis en profundidad en una cuba de agua*. Nuclear España. Revista de la sociedad Nuclear Española (ISSN 1137- 2885) Vol. 1, no. 310, pp. 101 - 106, 2010.

B. Juste; R. Miró; J. M. Campayo; S. Díez; G. Verdú. *Estudio de las capacidades dosimétricas de un dispositivo electrónico de imagen portal*. Nuclear España. Revista de la sociedad Nuclear Española (ISSN 1137- 2885) Vol. 1, pp. 201 - 201, 2009.

B. Juste; R. Miró; G. Verdú. *Estudio de la evaluación de dosis en medios heterogéneos por diferentes sistemas de planificación en radioterapia*. Nuclear España. Revista de la sociedad Nuclear Española (ISSN 1137- 2885) Vol. 1, pp. 406 - 406, 2009.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Comparación de dos métodos distintos para describir la geometría en MCNP5 de un maniquí antropomórfico voxelizado para Tratamientos de Radioterapia*. SENDA EDITORIAL, S.A. Nuclear España. Revista de la sociedad Nuclear Española (ISSN 1137- 2885) Vol. 1, pp. 405 - 405, 2008.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Modelación en Monte Carlo del maniquí RANDOM y su irradiación con el acelerador lineal Elekta Precise*. Senda Editorial, S.A. Nuclear España. Revista de la sociedad Nuclear Española (ISSN 1137- 2885) Vol. 1, pp. 403 - 403, 2009.

B. Juste; R. Miró; S. Gallardo; A. Santos; G. Verdú. *Sistema de planificación en radioterapia basado en el método de Monte Carlo*. Radioprotección. (ISSN 1133-1717). Vol. XII pp. 305 - 308, 2005.

8.4.3. Comunicaciones internacionales.

B. Juste; R. Miró; G. Verdú; S. Díez; J.M.; Campayo. *Calculation of a 6 and 15 MeV linac Photon Spectrum by unfolding of a gradient depth dose response matrix calculated by MCNP Simulation*. 8th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications (IRRMA-8) Kansas City, Missouri, USA. 26 Junio–1 Julio 2011. Aceptado.

B. Juste; R. Miró; G. Verdú; S. Díez; J.M.; Campayo. *Sensitivity analysis of the influence of mean energy and FWHM initial electron fluence on linear accelerator Bremsstrahlung photon spectrum determination*. 8th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications (IRRMA-8) Kansas City, Missouri, USA. 26 Junio–1 Julio 2011. Aceptado.

B. Juste, D. Morera, R. Miró, G. Verdú. *Calculation of energetic dual-energy detector efficiency using MCNP and GEANT Monte Carlo codes*. ANIMMA 11. International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation, Measurement Methods and their Applications. Gante, Belgica, 6-9 Junio, 2011. Pendiente de aceptación.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *MCNP simulation of the photoneutron dose contribution in linac radiotherapy treatments with multileaf collimation systems*. CRETE 11, International Conference on Applications of Nuclear Techniques, Creta, Grecia. Junio 12-18, 2011. Pendiente de aceptación.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *Electron influence on the reconstruction of a linac 6 MeV photon spectra by unfolding methods*. Ponencia. EMBC 2010. 32st Annual International

Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. CD Proceedings. I.S.B.N: 978-1-4244-4124-2. pp:557. Buenos Aires, Argentina. 31 Agosto – 4 Septiembre 2010.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *Monte Carlo modeling of the MLC-Elekta Precise linac: influence of multileaf collimator on dose calculation*. Ponencia. Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2010. CD Proceedings. ISBN: 978-15-84887-95-9. (pp. 120-133) Tokio, Japón. 17-21 Octubre 2010.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *Calculation of a Linac Electron Fluence and its Derived Photon Spectra by Monte Carlo Simulation and by Reconstruction from Depth Dose Curves*. Ponencia. Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2010. CD Proceedings. ISBN: 978-15-84887-95-9. (pp. 106-110). Tokio, Japón. 17-21 Octubre 2010.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Implementation of Multileaf Collimator in a LinAc MCNP5 Simulation coupled with the radiation treatment planning system PLUNC*. Ponencia. Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2010. CD Proceedings. ISBN: 978-15-84887-95-9. (pp. 31-35). Tokio, Japón. 17-21 Octubre 2010.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Comparison of MCNP5 Dose calculations inside the RANDO Phantom Irradiated with a LinAc 5x5 Photon Beam against Treatment Planning System*. Ponencia. Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2010. CD Proceedings. ISBN: 978-15-84887-95-9. (pp. 20-25). Tokio, Japón. 17-21 Octubre 2010.

B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *6 MeV linac photon spectra reconstruction based on a mixed experimental-Monte Carlo scatter analysis technique*. Proceedings. I.S.B.N.: 978-92-95064-09-6. Ponencia. European Nuclear Conference 2010. Barcelona, España. 30 Mayo –3 Junio, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. Simulation of the dose given by an Elekta Precise linear accelerator on anthropomorphic human phantoms. Proceedings. I.S.B.N.: 978-92-95064-09-6. Ponencia. European Nuclear Conference 2010. Barcelona, España. 30 Mayo –3 Junio, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *MCNP5 simulation of the irradiation of a voxelized phantom with the photon beam generated in a Linear Accelerator with a multileaf collimator*. Ponencia. CHERNE 2010, 6th Workshop on European Collaboration for Higher Education and Research in Nuclear Engineering & Radiological Protection. Proceedings (pp.11-20). Coimbra, Portugal. Junio 7-9, 2010.

B. Juste, A. Hushyar, R. Miró, G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. *Experimental validation of an accurate multileaf collimation (MLC) Linac simulated by Monte Carlo*. Ponencia. CHERNE 2010, 6th Workshop on European Collaboration for Higher Education and Research in Nuclear Engineering & Radiological Protection. Proceedings(pp.1-10). Coimbra, Portugal. Junio 7-9, 2010. B. Juste, R. Miró,

G. Verdú, S. Díez, J. M. Campayo. Bremsstrahlung Spectrum Reconstruction from Gradient Depth Dose Curves Obtained in a Water Phantom. Radiation Protection and Shielding Division. Proceedings Ed: ANS (pp.70-75). 2010 Topical Meeting Las Vegas (USA). Abril 18-23, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. Electron and Photon Monte Carlo Calculations Coupled with Radiation Treatment Planning System PLUNC. Radiation Protection and Shielding Division. Proceedings Ed: ANS (pp.30-35). 2010 Topical Meeting Las Vegas (USA). Abril 18-23, 2010.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú Comparison Between Mesh Tally and Lattice Tally in MCNPX for Proton Therapy Simulation. Radiation Protection and Shielding Division. Proceedings Ed: ANS (pp.30-35). 2010 Topical Meeting Las Vegas (USA).

B. Juste, R. Miró, S. Díez, J. M. Campayo, G. Verdú. *Radiotherapy treatment planning based on Monte Carlo techniques*. Ponencia. ISRP-11. 11th International Symposium on Radiation Physics. Libro de actas. Melbourne, Australia. Septiembre 20-25, 2009.

V. Abella, R. Miro, B. Juste, G. Verdú. *Monte Carlo model of the female RANDO phantom irradiation with an Elekta Precise linear accelerator*. Ponencia. ISRP-11. 11th International Symposium on Radiation Physics. Libro de actas. Melbourne, Australia. Septiembre 20-25, 2009.

V. Abella, R. Miro, B. Juste, G. Verdú. *Comparison of Two different Methods for describing the geometry of a Voxelized Anthropomorphic Phantom in Radiotherapy Treatment Plans*. Ponencia. World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering. 11th International Congress of the IUPESM. CD Proceedings. ISI web of Knowledge. Múnich, Alemania. Septiembre 7-12, 2009.

B. Juste, R. Miró, S. Díez, J. M. Campayo, G. Verdú. *Dosimetric Capabilities of the Iview GT Portal Imager Using MCNP5 Monte Carlo Simulations*. Ponencia. EMBC 2009. 31st Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. CD Proceedings. Minneapolis, USA. Septiembre 2-6, 2009.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *Comparison between Voxelized, Volumized and Analytical Phantoms Applied to Radiotherapy Simulation with Monte Carlo*. Ponencia. EMBC 2009. 31st Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. CD Proceedings. Minneapolis, USA. Septiembre 2-6, 2009.

A. Querol; J. Ródenas; B. Juste. *Modelling an X-ray tube with MCNP for dosimetric purposes*. CHERNE. 5th Workshop on European Cooperation on Higher Education and Research in Nuclear Engineering and Radiological Protection (ISBN 978-38-22141-01-9). pp: 200 – 201. 2009.

J. Ródenas; A. Querol; J. Ortiz; B. Juste. *Indoor radon in the city of Valencia*. CHERNE. 5th Workshop on European Cooperation on Higher Education and Research in Nuclear Engineering and Radiological Protection (ISBN 978-38-22141-01-9) pp: 99 – 100. 2009.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *MCNP5 electron and photon MonteCarlo dose calculations coupled with Radiation Treatment Planning PLUNC software*. International Radiation Physics Society. 11th International Symposium on Radiation Physics (ISBN 9780849371653). pp: 98 – 99, 2009.

B. Juste; J.I. Villaescusa; G. Verdú. *Study of Pediatric CR Dose Reduction Using Noise Addition Simulations Tools*. Springer. World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering (2009) (ISBN 978-3-642-03897-6) 2009.

V. Abella; B. Juste; R. Miró; G. Verdú. *Comparison between voxelized, volumized and analytical phantoms applied to Radiotherapy simulation with Monte Carlo*. IEEE Press. 31th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. EMBC 2009 (ISBN 978-1-4244-3296-7). 2009.

B. Juste; R. Miró; J.M. Campayo; G. Verdu. *Dosimetric capabilities of the Iview GT portal imager using MCNP5 Monte Carlo simulations*. IEEE Press. 31th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. EMBC 2009 (ISBN 978-1-4244-3296-7). 2009.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *Computation of a voxelized antropomorphic phantom from CT slices and 3D dose distribution calculation with the MCNP5 code*. Ponencia. IRRMA-7th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Application. ISBN 978-80-01-04077-5. Prague, Czech Republic. 22-27 June 2008.

B. Juste, R. Miró, S. Díez, J.M. Campayo, G. Verdú. *Monte Carlo simulation of the iView GT portal imager dosimetry*. Ponencia. IRRMA-7th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Application. ISBN 978-80-01-04077-5. Prague, Czech Republic. 22-27 June 2008.

B. Juste, R. Miró, J.M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Comparison of experimental 3D dose curves in a heterogeneous phantom with results obtained by MCNP5 simulation and those extracted from a commercial treatment planning system*. Ponencia. IRRMA-7th International Topical Meeting on

Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Application. ISBN 978-80-01-04077-5. Prague, Czech Republic. 22-27 June 2008.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Linear accelerator photon spectra reconstruction using a mixed experimental-Monte Carlo method*. Ponencia. ICRS-11 - 11th International Conference on Radiation Shielding & RPSD-2008 - 15th ANS Radiation Protection & Shielding Topical Meeting. URL: <http://icrs11.me.gatech.edu/>. Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA. Abril 13-18, 2008.

B. Juste, R. Miró, J.M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Photon Spectra calculation for an Elekta linac beam using experimental scatter measurements and Monte Carlo techniques*. Poster. 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'08). CD Proceedings. Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2008;1:3289-92. Vancouver, British Columbia, Canadá. August 20-24, 2008.

B. Juste, J.I. Villaescusa, R. Tortosa, R. Miro, G. Verdu. *Analysis of CR dose reduction in pediatric patients, based on computer-simulated noise addition*. Poster. 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'08). Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2008;1:2697-700. Vancouver, British Columbia, Canadá. August 20-24, 2008.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, G. Verdú. *Comparison of dose distribution in a heterogeneous medium calculated by MCNP5 simulation and radiotherapy treatment planning system*. Ponencia. IRPA 12. 12th International Congress of the International Radiation Protection Association. CD-ROM Proceedings. Buenos Aires, Argentina. Octubre 19-24, 2008.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *3D dose distribution calculation in a voxelized human phantom by means of Monte Carlo Method*. Ponencia. IRPA 12. 12th International Congress of the International Radiation Protection Association. CD-ROM Proceedings. Buenos Aires, Argentina. Octubre 19-24, 2008.

B. Juste, R. Miró, S. Díez, J.M. Campayo, G. Verdú. *Monte Carlo simulation of the iView GT portal imager dosimetry*. Presentación oral. IRRMA-7th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Application. ISBN 978-80-01-04077-5. Prague, Czech Republic. 22-27 June 2008.

B. Juste, R. Miró, J.M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Comparison of experimental 3D dose curves in a heterogeneous phantom with results obtained by MCNP5 simulation and those extracted from a commercial treatment planning system*. Presentación oral. IRRMA-7th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Application. ISBN 978-80-01-04077-5. Prague, Czech Republic. 22-27 Junio 2008.

B. Juste, R. Miró, J.M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Photon Spectra calculation for an Elekta linac beam using experimental scatter measurements and Monte Carlo techniques*. Poster. 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'08). CD Proceedings. Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2008;1:3289-92. Vancouver, British Columbia, Canadá. Agosto 20-24, 2008.

B. Juste, JI Villaescusa, R Tortosa, R Miro, G.Verdu. *Analysis of CR dose reduction in pediatric patients, based on computer-simulated noise addition*. Poster. 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'08). Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2008;1:2697-700. Vancouver, British Columbia, Canadá. Agosto 20-24, 2008.

B. Juste; G. Verdu. *Computed Radiography dose optimization in pediatric patients*. Editorial: IRPA. IRPA 12 (ISBN 978-0-89448-061-8). 2008.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *3D dose distribution calculation in a voxelized human phantom by means of Monte Carlo Method*. IRPA. IRPA 12 (ISBN 978-0-89448-061-8). 2008.

B. Juste; G. Verdú; R. Miro. *Analysis of CR dose reduction in pediatric patients simulated noise addition*. IEEE Press. 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering In Medicine And Biology Society. EMBC 2008 (ISBN 9781424418152). 2008.

B. Juste, M.E. Mota, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú. *Monte Carlo modeling of the Elekta precise linear accelerator: validation of dose distribution in a heterogeneous water phantom*. Ponencia. Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2007. CD Proceedings. ISBN: 0-89448-059-6. Monterrey, California, USA. Abril 15-19, 2007.

B. Juste, R. Miró, N. Villaescusa, D. Granero, G. Verdú. *Improving pediatric radiation dose management using Agfa digital radiography DICOM header information*. Poster. 29th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'07). CD Proceedings (ISBN 1-4244-0788-5). Lyon. Agosto 23-26, 2007.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, A. Santos, G. Verdú. *Tally and geometry definition influence on the computing time in Radiotherapy Treatment Planning with MCNP Monte Carlo code*. Ponencia. 28th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'06) CD Proceedings (IEEE Catalog Number: 06CH37748C, ISBN:14244-0033-3, ISSN: 1557-170X) Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2006;1:5763-6. Nueva York, USA. Agosto 30- septiembre 3, 2006.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú. *Dose distribution calculation in a head model phantom using two geometry modelization techniques*. Ponencia. First European Workshop on Monte Carlo Treatment Planning of the European Workgroup on MCTP. Program and Abstract Book. Gante, Bélgica. Octubre 22-25, 2006.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, A. Santos, G. Verdú. *Considerations of MCNP Monte Carlo code to be used as a radiotherapy treatment planning tool*. Poster. 27th Annual International conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC '05). CD Proceedings (IEEE Catalog Number: 05CH37611C, ISBN: 0-7803-8741-4). Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2005; 3(1):2828-2831. Shanghai, China. 1-4 de Septiembre de 2005.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, A. Santos, G. Verdú. *Monte Carlo simulation for dosimetry studies of a heterogeneous water phantom*. Poster. International Topical Meeting on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications. M&C 2005. Proceedings (Actes). Páginas 501-511. American Nuclear Society. Avignon, Francia. 12-15 de Septiembre de 2005.

R. Miró, B. Juste, S. Gallardo, A. Santos, G. Verdú. *Cobaltotherapy Dosimetric Calculations over a Voxelized Water Phantom. Validation of different Monte Carlo models and Methodologies against Experimental Data*. Poster. IEEE NSS/MIC CONFERENCE. Nuclear Science Symposium & Medical Imaging Conference. IEEE Catalog Number: 05CH37692C, ISBN: 0-7803-9222-1. Puerto Rico. 23-29 de Octubre de 2005.

8.4.4. Comunicaciones nacionales.

B. Juste; D. Morera; R. Miró; G. Verdú. *Utilización del código MCNP y GEANT para el estudio de la respuesta energética de detectores de energía dual*. SEPR-SEFM 2011. Pendiente de aceptación.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Reconstrucción del espectro Bremsstrahlung emitido por un acelerador lineal médico a partir del gradiente de las curvas de dosis en profundidad en*

una cuba de agua. Ponencia. 36 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. CD-ROM Proceedings (ISSN: 1137-2885). Santiago de Compostela, España. Octubre 6-8, 2010.

B. Juste; R. Miró; G. Verdú. *Simulación MonteCarlo del dispositivo de imagen portal en radioterapia IVIEW GT*. Editorial: Sociedad Española de Física Médica. Congreso conjunto de la SEFM y la SEPR (ISBN 9780824796167). pp. 21 – 22, 2009.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Cálculo en MCNP5 de mapas 3d de dosis en un maniquí antropomórfico voxelizado a partir de imágenes de tomografía computerizada*. Editorial: Sociedad Española de Física Médica. Congreso conjunto de la SEFM y la SEPR (ISBN 9780824796167). pp. 64 – 64, 2009.

B. Juste; R. Miró; J.M. Campayo; G. Verdú. *Utilización del método Monte Carlo para la reconstrucción del espectro fotónico emitido por un Linac*. EDITORIAL: Sociedad Española de Física Médica. REF. Congreso conjunto de la SEFM y la SEPR (ISBN 9780824796167). pp. 172 – 172, 2009.

V. Abella; R. Miró; B. Juste; G. Verdú. *Comparación de los métodos de voxelizado y volumizado aplicados a la simulación de Monte Carlo*. Editorial: Sociedad Española de Física Médica. Congreso conjunto de la SEFM y la SEPR (ISBN 9780824796167). pp. 67 – 67, 2009.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Reconstrucción del espectro de un haz de fotones emitido por un acelerador lineal Elekta utilizando un método mixto Monte Carlo-Experimental*. Ponencia. 34 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. CD-ROM Proceedings (ISSN: 1137-2885). Murcia, España. Octubre 29-31, 2008.

B. Juste, R. Miró, J. M. Campayo, S. Díez, G. Verdú. *Comparación de la distribución de dosis en un medio heterogéneo obtenida mediante simulación Monte Carlo y por el sistema de planificación de radioterapia PCRT-3D*. Ponencia. 34 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. CD-ROM Proceedings (ISSN: 1137-2885). Murcia, España. Octubre 29-31, 2008.

V. Abella, R. Miró, B. Juste, G. Verdú. *Modelización de un maniquí antropomórfico voxelizado a partir de imágenes de Tomografía Computerizada y cálculo de distribución 3D de dosis utilizando el código MCNP*. Ponencia. 34 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. CD-ROM Proceedings (ISSN: 1137-2885). Murcia, España. Octubre 29-31, 2008.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú. *Cálculo de la distribución de dosis en un maniquí matemático de cabeza utilizando tres técnicas diferentes de modelización geométrica*. Poster. XI Congreso Nacional de la Sociedad Española de Protección Radiológica (SEPR11). CD-ROM Proceedings. ISSN: 1133-1747. Editorial: Senda. Tarragona, España. 18-21 de Septiembre de 2007.

B. Juste, R. Miró, E. Mota, S. Gallardo, G. Verdú. *Simulación Monte Carlo del acelerador lineal Elekta Precise: Validación de la distribución de dosis en una cuba de agua*. Poster. XI Congreso Nacional de la Sociedad Española de Protección Radiológica (SEPR11). CD-ROM Proceedings. ISSN: 1133-1747. Editorial: Senda. Tarragona, España. 18-21 de Septiembre de 2007.

B. Juste, R. Miró, M.E. Mota, S. Gallardo, J.M. Campayo, G. Verdú. *Modelización Monte Carlo del acelerador lineal Elekta precise: Validación de la distribución de dosis en una cuba de agua*. Ponencia. XXXIII Reunión Anual SNE. Actas (CD-ROM). Senda Editorial, S. A. Segovia. Septiembre 26-28, 2007.

B. Juste, R. Miró, M.E. Mota, S. Gallardo, J.M. Campayo, G. Verdú. *Modelización Monte Carlo del acelerador lineal Elekta precise: Validación de la distribución de dosis en una cuba de agua*. Presentación oral. XXXIII Reunión Anual SNE. Actas (CD-ROM). Senda Editorial, S. A. Segovia. Septiembre 26-28, 2007.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú, A. Santos. *Comparación de la distribución de dosis en un medio heterogéneo calculada con el código de Monte Carlo MCNP5 y por el sistema de planificación*

de radioterapia *PrecisePlan 2.03*. Poster. XVI Congreso Nacional de Física Médica. Revista de Física Médica 2007; 8(1). Comunicación 1007. Granada. Mayo 22-25, 2007.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú, A. Santos. *Influencia de la modelización geométrica y del "tally" en el tiempo de computación en un sistema de planificación de radioterapia mediante el código Monte Carlo MCNP*. Ponencia. XXXII Reunión Anual SNE. Actas (CD-ROM). Senda Editorial, S. A. Tarragona. Octubre 4-6, 2006.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, G. Verdú, A. Santos. *Estudios dosimétricos mediante simulación Monte Carlo en un fantoma de agua heterogéneo*. Poster. 31ª Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Logroño. Actes. Editorial: Senda Editorial, S. A. Logroño, España. 19-21 de Octubre de 2005.

B. Juste, R. Miró, S. Gallardo, A. Santos, G. Verdú. *Sistema de planificación en radioterapia basado en el método Monte Carlo*. Poster. X Congreso Nacional de la Sociedad Española de Protección Radiológica (SEPR10). CD-ROM Proceedings. ISSN: 1133-1747. Editorial: Senda. Páginas 305-308. Huelva, España. 20-23 de Septiembre de 2005.

BIBLIOGRAFÍA

[AAPM, 1991] American Association of Physicists in Medicine, *Clinical electron beam dosimetry*, Report of the American Association of Physicists in Medicine Radiation Therapy Committee Task Group No. 25 Med. Phys. 18 73-109.

[AAPM, 1994] American Association of Physicists in Medicine, *Comprehensive QA for radiation oncology*, Report of the American Association of Physicists in Medicine Radiation Therapy Committee Task Group No. 40 Med. Phys. 21 581-618.

[AAPM, 1995] American Association of Physicists in Medicine, *Radiation treatment planning dosimetry verification*, A test package prepared by the American Association of Physicists in Medicine Radiation Therapy Committee Task Group No. 23 (Woodbury NY: American Institute of Physics), 1995.

[AAPM, 1998] American Association of Physicists in Medicine, *Quality assurance for clinical radiotherapy treatment planning*, Report of the American Association of Physicists in Medicine Radiation Therapy Committee Task Group No. 53 Med. Phys. 25 1773-1829, 1998.

[AAPM, 2009] Task Group 142 report: *Quality assurance of medical accelerators*. Med. Phys. 36, 9. September 2009.

[AAPM] American Association of Physicists in Medicine: www.aapm.org

[AERO] La Asociación Española de Radioterapia y Oncología: www.aero.es

[Agostinelli et al., 2003] Agostinelli S et al. (GEANT 4 Collaboration) *GEANT4 – A Simulation Toolkit*. Nucl Instrum Meth A 506 250-303. 2003. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/>

[Alvarez, 2002] Álvarez V. M., Escobar J.M., Nelly F.E., Sanz D. E., Ossola G. *Introducción a un Nuevo Método de Cálculo Dosimétrico*. Revista de física médica. Vol. 3, no.2, 72-80. 2002.

[Archer et al., 1985] Archer B R., Almond P R. y Wagner L K., *Application of a Laplace transform pair model for high x-ray spectral reconstruction*. Med. Phys. Vol. 12 pp. 630–3; 1985.

[Armbruster et al., 2004] Armbruster B., Hamilton R J. y Kuehl A K., *Spectrum reconstruction from dose measurements as a linear inverse problem*. Phys. Med. Biol. Vol. 49 pp. 5087–99; 2004.

[Attix, 1986] Frank Herbert Attix. *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry*, 1986.

[Baker et al., 1995] Baker C R., Ama'ee B. y Spyrou N M., *Reconstruction of megavoltage photon spectra by attenuation analysis*. Phys. Med. Biol. Vol. 40 pp. 529–42, 1995.

[Baker et al., 1997] Baker C R. t Peck K., *Reconstruction of 6 MV photon spectra from measured transmission including maximum energy estimation*. Phys. Med. Biol. Vol. 42 pp. 2041–51, 1997.

[Baker, 1993] Baker C R., *Reconstruction of clinical bremsstrahlung spectra in the range 4 to 30 MeV*. PhD Thesis University of Surrey, UK, 1993.

[Baró et al., 1994] Baró J., Sempau J., Fernández-Varea JM. y Salvat F., *PENELOPE: an algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter*. Nucl Instrum Meth Vol. 84, pp. 465-483, 1994.

[Bell y Glasstone, 1970] Bell G. y Glasstone S., *Nuclear Reactor Theory* (Princeton: Van Nostrand-Reinhold); 1970.

[Berger, 1963] Berger MJ., *Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles*. In: Alder B, Fernbach S and Rotenberg M (Eds) *Methods in Computational Physics*. Academic Press, New York 1:135–215. 1963.

- [Bethe y Heitler, 1934] Bethe H. A. y Heitler W., Proc. Roy. Soc. (London) A146, 83, 1934.
- [Bethe, 1957] Bethe H. A. y Salpeter E. E., *Quantum Mechanics of One and Two-electrons Atoms*, pp. 166–169. Academic Press, 1957.
- [Bielajew, 1988] Bielajew AF., *Photon Monte Carlo simulation*. National Research Council of Canada; Report PIRS-0393. 1988.
- [Bielajew, 1993] Bielajew AF., *Running EGS4 on different architectures*. National Research Council of Canada; Report PIRS-0392. 1993.
- [Bielajew, 2001] Bielajew AF., *Fundamentals of Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*. University of Michigan. 2001.
- [Bliznakova, 2003] Bliznakova K., Kolitsi Z., Pallikarakis N., *A Monte Carlo based radiotherapy simulator*. 2003.
- [Bloch, 1998] Bloch P., Altschuler M D., Bjärngard B E., Kassae A. y McDonough J., *Determining clinical photon beam spectra from measured depth–dose curve with the Cimmino algorithm*, Phys. Med. Biol. Vol. 45 171–83, 2000.
- [Brahme 1988] Brahme A., Chavaudra J. y Landberg T., *Accuracy requirements and quality assurance of external beam therapy with photons and electrons*, Acta. Oncol., suppl. 1, 1-76. 1988.
- [Briesmaster, 2000] Briesmeister JF., *MCNPTM - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code - v.4c*. LA-13709-M (Manual) Los Alamos National Laboratory. MCNPX 2003 <http://mcnpx.lanl.gov/>, 2000.
- [Carrasco, 2004] Carrasco P., Jornet N., Duch M.A., et al., *Comparison of dose calculation algorithms in phantoms with lung equivalent heterogeneities under conditions of lateral electronic disequilibrium*. Medical Physics. Vol. 31, no.10, pp. 2899-2911. 2004.
- [Carter and Cashwell, 1975] Carter LL. y Cashwell ED., *Particle-Transport Simulation with the Monte Carlo Method*. Los Alamos Scientific Laboratory Los Alamos, NM TID-26607, 1975.
- [Cochran, 1972] Cochran J A., *The Analysis of Linear Integral Equations*, New York: McGraw-Hill, 1972.
- [Cullen et al., 1997] Cullen DE., Hubbell JH. y Kissel LD., *EPDL97: The Evaluated Photon Data Library*, Version UCRL-50400, vol. 6, rev. 5, Lawrence Livermore National Laboratory: [www-nds.iaea.org/epdl97](http://www.nds.iaea.org/epdl97), 1997.
- [Cunningham 1984] Cunningham J., *Quality assurance in dosimetry and treatment planning*, Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys., Vol. 10, pp.105-109. 1984.
- [Desobry et al., 1991] Desobry G E. y Boyer A L., *Bremsstrahlung review: an analysis of the Schiff spectrum*. Med. Phys. Vol.18 pp. 497–505; 1991.
- [Duderstadt, 1979] Duderstadt J. J. Martin W. R., *Transport Theory*. Wiley. New York. 1979.
- [EFOMP] European Federation of Organisation in Medical Physics www.efomp.org
- [Everhart, 1971] Everhart TE., Hoff PH., *Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials*. J Appl Phys. Vol.42, 5837. 1971.
- [Faddegon et al., 1990] Faddegon B A., Ross C K. y Rogers D W O., *Forward-directed bremsstrahlung of 10 to 30 MeV electrons incident on thick targets of Al and Pb*. Med. Phys. Vol. 17, pp. 773–85; 1990.
- [Fano, 1956] Fano U., *Differential inelastic scattering of relativistic charged particles*, Phys.Rev. 102, 385,387. 1956.

- [Forsythe y Moler, 1967] Forsythe C. y Moler C. B., *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*. Englewood Cliffs, N.J. Prentice-Hall, Inc. 1967.
- [Francois et al., 1997] Francois P., Coste F., Bonnet J. y Caselles O., *Validation of reconstructed bremsstrahlung spectra between 6MV and 25 MV from measured transmission data*. Med. Phys. Vol. 24, pp. 769–73; 1997.
- [Gerasimov, 1986] Gerasimov S. A. y Zhdanova E. I., *Inelastic scattering of charged particles by atoms using the Thomas-Fermi statistical method*, Russian Physics Journal Springer New York, Vol. 29, No. 9. Septiembre de 1986.
- [Golub, 1996] Golub G., Van L. C., *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press .(1996)
- [Halbleib et al., 1992] Halbleib J., Kensek R., Melhorn TA., Valdez GD., Seltzer SM. and Berger MJ., *ITS Version 3.0: The integrated TIGER Series of Coupled Electron/Photon Monte Carlo Transport Codes*. Sandia National Laboratories Report SAND91-1634 Albuquerque, NM, 1992.
- [Halbleib, 1988] Halbleib J., *Structure and Operation of the ITS Code System in Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, edited by Theodore M. Jenkins, Walter R. Nelson, and Alessandro Rindi, Plenum Press, New York, 1988.
- [Hansen, 1987] Hansen P. C., *The truncated SVD as a method for regularization*, BIT 27, 543, 553. 1987.
- [Hansen, 1990] Hansen P. C., *The discrete Picard condition for discrete ill-posed problems*, BIT 30, Numerical Mathematics, Vol. 30, No. 4. 1990.
- [Hansen, 1992] Hansen P.C., *Numerical Tools for Analysis and Solution of Fredholm Integral Equations of the First Kind*, Inverse Problems, n8 (849-872) 1992.
- [Hansen, 1992] Hansen P.C., *Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve*. SIAM Rev., Vol. 34, No. 4, pp. 561–580. 1992.
- [Hansen, 1993] Hansen P.C., *Regularization Tools, a Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems*. Report UNIC–92–03. 1993.
- [Hansen, 1993] Hansen P.C. and O’Leary D.P., *The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems*. SIAM J. Sci. Comput., Vol. 14, No. 6, pp. 487–1503;1993.
- [Hansen, 1997] Hansen P. C., *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems. Numerical Aspects of Linear Inversion*, SIAM, Philadelphia, 1997.
- [Hansen, 1999] Hansen P. C., *Regularization Tools Version 3.0 for Matlab 5.2*, Numer. Algo. 20 195, 196. 1999.
- [Hendricks, 1997] Hendricks JS., *MCNPTM - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code - v.4b*. (Manual) Los Alamos National Laboratory. 1997.
- [Huang et al., 1982] Huang P H., Kase K R. y Bjarngard B E., *Simulation studies of 4 MV x-ray spectral reconstruction by numerical analysis of transmission data*. Med. Phys. Vol. 9 pp.695–702, 1982.
- [Hubbell, 1979] Hubbel JH., *Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross sections*. J Phys Chem, Vol. 9:, pp.69-105. 1979.
- [IAEA 2000] International Atomic Energy Agency, *Absorbed dose determination in external beam radiotherapy: An international code of practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water*.
- [IAEA 2004] International Atomic Energy Agency, *Commissioning and quality assurance of computerized planning systems for radiation treatment of cancer*. Technical reports series no. 430 Vienna: IAEA.

[IAEA TRS-398] International Atomic Energy Agency, *Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy: An International Code of Practice for Dosimetry based on Standards of Absorbed Dose to Water*. IAEA TRS-398.

[IAEA TRS-430] International Atomic Energy Agency, *Commissioning and Quality Assurance of Computerized Planning Systems for Radiation Treatment of Cancer*, IAEA TRS-430, IAEA, Vienna (2004).

[IAEA] International Atomic Energy Agency: www.iaea.org

[ICRP] International Commission On Radiological Protection: www.icrp.org

[ICRU 50] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 50: *Prescribing, recording, and reporting photon beam therapy*.

[ICRU 24] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 24: *Determination of absorbed dose in a patient irradiated by beams of X or gamma rays in radiotherapy*, 1976.

[ICRU 29] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 29: *Dose specification for reporting external beam therapy with photons and electrons*, 1978.

[ICRU 33] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 33: *Radiation quantities and units*, Washington, 1980.

[ICRU 42] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 42: *Use of computers in external beam radiotherapy procedures with high-energy photons and electrons*, 1987.

[ICRU 60] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), ICRU Report No. 60: *Fundamental Quantities and Units for Ionising Radiation*.

[IOMP] International Organization for Medical Physics: www.iomp.org

[J van Dyk et al., 1993] J van Dyk et al. *Commissioning and QA of treatment planning computers*. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. 26: 261-273. 1993.

[J van Dyk et al., 1999] J van Dyk et al, *Computerised radiation treatment planning systems*. In: *Modern Technology of Radiation Oncology* (Ed.: J Van Dyk) Chapter 8. Medical Physics Publishing, Wisconsin, ISBN 0-944838-38-3, pp. 231-286. 1999.

[Jaffray, 1993] Jaffray D. A., Battista J. J., Fenster A., y Munro P., *X-ray sources of medical linear accelerators: focal and extra-focal radiation*, Med. Phys. Vol.20, pp. 1417–1427; 1993.

[Jenkins et al., 1988] Jenkins TM., Nelson WR., Rindi A., Nahum AE., Rogers DWO., *Monte Carlo transport of electrons and photons*. Plenum Press, 115-137. 1988.

[Jenkins, 1976] Jenkins R., *An Introduction to X Ray Spectrometry*, Heyden, New York, 1976.

[Johns y Cunningham, 1983] Johns H. E. y Cunningham J. R., *The Physics of Radiology*, Charles C. Thomas Publisher, Springfield, Illinois, Estados Unidos de América, 1983.

[Juste, 2011a] Juste B., Miró R., Verdú G., Díez S., Campayo J.M., *Calculation of a 6 and 15 MeV linac Photon Spectrum by unfolding of a gradient depth dose response matrix calculated by MCNP Simulation*. IRRMA-8. Kansas City, MO. Junio 26–Julio 1, 2011. Aceptado.

[Juste, 2011b] Juste B., Miró R., Verdú G., Díez S., Campayo J.M., *Sensitivity analysis of the influence of mean energy and FWHM initial electron fluence on linear accelerator Bremsstrahlung photon spectrum determination*. IRRMA-8. Kansas City, MO. Junio 26–Julio 1, 2011. Aceptado.

- [Juste, 2011c] Juste B., Miró R., Verdú G., Díez S., Campayo J.M., *Bremsstrahlung spectrum reconstruction from gradient depth dose curves obtained in a water phantom*. Nuclear Technology. ISSN: 0029-5450, Julio, 2011. Aceptado para publicación.
- [Juste, 2010a] Juste B., Miró R., Campayo J.M., *Comparison of experimental dose curves in a heterogeneous phantom with results obtained by MCNP5 simulation and treatment planning tools*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 913-917, 2010.
- [Juste, 2010b] Juste B., Miró R., Campayo J.M., Díez S., Verdú G., *Radiotherapy treatment planning based on Monte Carlo techniques*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. ISSN: 0168-9002. Vol. 619, pp. 252-257, 2010.
- [Juste, 2010c] Juste B., Hushyar A., Miró R., Verdú G., Díez S., Campayo J.M., *Experimental validation of an accurate multileaf collimation (MLC) Linac simulated by Monte Carlo*. Applied Radiation and Isotopes. ISSN: 0969-8043. Vol. 68, pp. 4, 2010.
- [Juste, 2009] Juste B., Miró R., Campayo J.M., Díez S., Verdú G., *Linear accelerator photon spectra reconstruction using a mixed experimental Monte Carlo method*. Nuclear Technology (ISSN 0029-5450) Vol. 168, pp. 637 - 642, 2009.
- [Juste, 2008] Juste B., Miró R., Campayo J.M., Verdú G., *Photon Spectra calculation for an Elekta linac beam using experimental scatter measurements and Monte Carlo techniques*. American Nuclear Society. Transactions of the American nuclear Society (ISSN 0003-018x). Vol. 99 pp. 1 - 2, 2008.
- [Juste, 2007] Juste B., Mota M.E., Miró R., Gallardo S., Verdú G., *Monte Carlo modeling of the Elekta precise linear accelerator: validation of dose distribution in a heterogeneous water phantom*. Joint international topical meeting on mathematics & computation and supercomputing in nuclear applications (M&C + SNA 2007). Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL .2007.
- [Juste, 2006] Miró R., Juste B., Gallardo S., Verdú G., *Cobalt Therapy Dosimetric Calculations over a Voxelized Heterogeneous Phantom. Validation of different Monte Carlo models and Methodologies against Experimental Data*. IEEE Transactions on Nuclear Science (ISSN 0018-9499). Vol. 53 pp. 3808 - 3817, 2006.
- [Karzmark et al., 1993] Karzmark C. J., Nunan C. S., y Tanabe E., *Medical Electron Accelerators*. McGraw-Hill, New York, 1993.
- [Kawrakow 2000] Kawrakow and Rogers, 2003 <http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/EGSnrc.html>
- [Keall et al, 2003] Paul J. Keall, Jeffrey V. Siebers, Bruce Libby, y Radhe Mohan, *Determining the incident electron fluence for Monte Carlo-based photon treatment planning using a standard measured data set*. Med. Phys. Vol.30, 574 ; 2003.
- [Kielkopf, 1967] Kielkopf. *Application of the truncated singular value decomposition method to the obtention of rovibrational population distributions from electronic spectra of diatomic molecules*. Computers & Chemistry. Vol. 19, Issue 4, pp 417-431; December 1995.
- [Kim, 2006] Kim H. K., Han S. J., Kim J. L., Kim B. H., Chang S. Y. y Lee J. K., *Monte Carlo simulation of the photon beam characteristics from medical linear accelerators*. Radiation Protection Dosimetry; 2006.
- [Klein y Nishina, 1929] Klein O., Nishina Y., *Zeits für Physik*. Vol. 52: 853 ;1929.
- [Kotera, 1981] Kotera M., Murata K., Nagami K., *Monte Carlo simulation of 1–10-KeV electron scattering in a gold target*. J Appl Phys; Vol. 52, no.2, pp.997-1003; 1981.

- [Krmr et al., 2002] Krmr M., Nikolic D., Krstonosic P., Cora S., Francescon P., Chiovati P. y Rudic A., *A simple method for Bremsstrahlung spectra reconstruction from transmission analysis*. Med. Phys. Vol.29 pp.932–8, 2002.
- [Landau, 1944] Landau L., *On the Energy Loss of Fast Particles by Ionization*. J Phys USSR 8 201; 1944.
- [Landry and Anderson, 1991] Landry D J., y Anderson D W., *Measurement of accelerator bremsstrahlung spectra with a high-efficiency Ge detector*. Med. Phys. Vol.18, pp. 527–32; 1991.
- [Lawson, 1974] Lawson C. L. y Hanson R. J., *Solving Least Squares Problems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974.
- [Lehmer, 1951] Lehmer D., *Mathematical methods in large-scale computing units*. Harv Univ Comput Ann. Vol. 26:141. 1951.
- [Lux and Koblinger, 1991] Lux I. y Koblinger L., *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*. CRC Press Boca Raton, FL; 1991.
- [Matlab Optimization Toolbox] A. Grace, *Optimization Toolbox User's Guide*, The MathWorks, Inc., 1990.
- [Matsukawa, 1974] Matsukawa T., Shimizu R., Harada K., Kato T., *Investigation of kilovolt electron energy dissipation in solids*. J. Appl. Phys. Vol. 45, 733. 1974.
- [Mayles et al., 2007] Mayles P., Nahum A. y Rosenwald J. C., *Handbook of Radiotherapy Physics*, Taylor and Francis, Boca Raton, Filadelfia, Estados Unidos de América, 2007.
- [McCullough, 1980] McCullough E.C. y Krueger A.M., *Performance evaluation of computerized treatment planning systems for radiotherapy: external photon beams*, Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys., 6, 1599-1605, 1980.
- [MCNP] Brown, F. B. y Nagaya, Y., *The MCNP5 random number generator*. Tech. rep. LA-UR-02-3782, Los Alamos National Laboratory. 2002.
- [MCNP5] X-5 MONTE CARLO TEAM, *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*, LA-UR-03-1987, Los Alamos Nacional Laboratory, April 2003.
- [Med. Phys.] Medical Physics: www.medicalphysics.org
- [Miró, 2006] Miró R., Juste B., Gallardo S., Santos A., Verdú G., *Cobalt Therapy Dosimetric Calculations Over a Voxelized Heterogeneous Phantom: Validation of Different Monte Carlo Models and Methodologies Against Experimental Data*, IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 53, no.6, pp. 3808-3817. 2006.
- [Nahum, 1988] Nahum A. E., *Overview of photon and electron Monte Carlo Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*. Ed. T M Jenkins, W R Nelson, A Rindi, A E Nahum and D W O Rogers (New York: Plenum) pp 3–20; 1988.
- [NCRP 1976] *NCRP 1976 Structural shielding design and evaluation for medical use of x rays and gamma rays of energies up to 10 MeV*. NCRP Report 49 (Washington, DC: National Council on Radiation Protection and Measurements) p 59, table B.2.
- [NEA] Nuclear Energy Agency (NEA) Data Bank. Data Bank Computer Program Services <http://www.nea.fr/dbprog/links.htm>
- [Nelson et al., 1985] Nelson WR., Hirayama H. y Rogers DWO., *The EGS4 code system*. SLAC-265 Stanford University, Standford, California 1985.
- [Nelson, 1978] Kenneth R., Kase y Walter R. Nelson. *Concepts of radiation dosimetry*.

- [Nisbet et al., 1998] Nisbet A., Weatherburn H., Fenwick J D. y McVey G., *Spectral reconstruction of clinical megavoltage photon beams and the implications of spectral determination on the dosimetry of such beams*. Phys. Med. Biol. Vol. 43 pp. 1507–21; 1998.
- [NIST] Berger M.J., Hubbell J.H., Seltzer S.M., Chang J., *XCOM: Photon Cross Sections Database*. NIST Standard Reference Database: <http://www.nist.gov/physlab/data/xcom/index.cfm>.
- [O'Leary, 2009] O'Leary D., *Scientific Computing with Case Studies*. SIAM Press. 2009.
- [O'Leary] O'Leary D., Image Deblurring. Website:
http://www.cs.umd.edu/users/oleary/SCCS/cs_deblur/index.html
- [OmniPro Accept] Bartlett TN., *OmniPro Accept-Version 6.1*, Scanditronix-Wellhofer.
- [OMS, 1988] OMS. *Quality assurance in radiotherapy*. Organización Mundial de la Salud, Ginebra, 1988.
- [Ortega, 1996] Ortega Aramburu X., Jorba Bisbal J., *Radiaciones ionizantes. Utilización y riesgos I*. Ediciones UPC. ISBN: 8483010887. 1996.
- [Paniak et al., 2005] Paniak LD., Charland PM., *Enhanced bremsstrahlung spectrum reconstruction from depth-dose gradients*. Phys Med Biol Vol.50, pp.3245–3261; 2005.
- [Partridge, 2000] Partridge M., *Reconstruction of megavoltage photon spectra from electronic portal imager derived transmission measurements*. Phys. Med. Biol. Vol. 45 pp.115–131; 2000.
- [Patel et al., 2005] Patel, I., Glendinning, A. G., y Kirby, M. C., *Dosimetric characteristics of the Elekta beam modulatore*, Phys. Med. Biol., Vol.50, pp. 5479–5492, 2005.
- [Piermattei et al., 1990] Piermattei A., Arcovito G., Azario L., Bacci C., Bianciardi L. y Giacco C., *A study of quality of Bremsstrahlung spectra reconstructed from transmission measurements*. Med. Phys. Vol.12 pp.227–33; 1990.
- [Pirota, 2005] Pirota M., Aquilina D., Bhikha T., Georg D., *Comparison of the ESTRO formalism for monitor unit calculation with a Clarkson based algorithm of a treatment planning system and a traditional "full-scatter" methodology*. Med Phys. Vol.15, no.4:235-46. 2005.
- [Plazas, 2005] Plazas, María Cristina. *Una mirada a la aplicación de la física médica en el tratamiento del cáncer*. Biomédica, vol.25, no.3, pp.289-292. ISSN 0120-4157. sep. 2005.
- [Podgorsak , 2006] Podgorsak EB., *Radiation Physics for Medical Physicists*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Alemania. 2006.
- [Podgorsak, 1996] Zankowski CE., Podgorsak EB., *Ionization gradient chamber in absolute photon and electron dosimetry*. Radiology Oncology (Eslovenia) Vol. 30, pp.138–41; 1996.
- [Pointon, 1991] Pointon R.C.S., *The Radiotherapy of malignant disease*, Springer-Verlag. 1991.
- [Press, 2002] Press WH., et al. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press. 2002.
- [Rogers D., 2002] Rogers D., *Monte Carlo Techniques in Radiotherapy*, 2002
- [Rogers et al., 1995] <http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/BEAM/beamhome.html>
- [Rogers et al., 1995] Rogers D. W. O., Faddegon B. A., Ding G. X., Wei J. y Mackie T R., *BEAM: a Monte Carlo code to simulate radiotherapy treatment units*. Med. Phys. Vol. 22 pp.503–24; 1995.
- [Rogers, 2006] Rogers D. W. O., *Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics*, Phys. Med. Biol. 51 pp. 287-301, 2006.

- [RSICC] RSICC Home Page. The Radiation Safety Information Computational Center (RSICC) www-rsicc.ornl.gov
- [SABRINA] B.L. Kirk., *SABRINA Quick Guide Informal Notes*, ORNL. August 1989.
- [Salvat et al., 1996] <http://www.nea.fr/html/dbprog/penelope-2003.pdf>
- [Scanditronix] *Scanditronix Wellhöfer Brochure. Detector for relative and absolute dosimetry.* Scanditronix Wellhöfer Products. <http://www.scanditronix-wellhofer.com/fileadmin/pdf>
- [Schiff, 1946] Schiff L I., *Energy-angle distribution of betatron target radiation.* Phys. Rev. Vol. 70 pp. 87; 1946.
- [SEFM] Sociedad Española de Física Médica: www.sefm.es
- [Sempau et al., 2000] Chetty et al. 2003 <http://www.upc.es/inte/downloads/dpm.htm>
- [Sempau, 2002] Josep Sempau. *Simulación Monte Carlo del transporte de la radiación. Aplicaciones en el campo de la física médica.* Institut de Tècniques Energètiques, Universitat Politècnica de Catalunya. Revista Radioprotecció. Edició Marzo 2002. nº 31 vol. IX; 2002.
- [Sheikh-Bagheri y Rogers, 2002] Sheikh-Bagheri D., Rogers D. W. O., *Monte Carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the BEAM code*, Medical Physics, vol. 29, pp. 391-402, 2002.
- [Singiresu] Singiresu S. Rao. *Engineering Optimization.* John Wiley & Sons, Inc ISBN 0-471-55034-5.
- [Sobol, 1980] Sobol IM., *El Método Monte Carlo.* 1980
- [Spencer, 1954] Spencer, L. V., Fano U., *Energy spectrum resulting from electron slowing down.* Phys. Rev Vol. 93, pp.1172–1181; 1954.
- [Stephen, 1988] Stephen M., Seltzer, *An Overview of ETRAN Monte Carlo Methods in Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, edited by Theodore M. Jenkins, Walter R. Nelson, and Alessandro Rindi, p. 153 (Plenum Press, New York, 1988).
- [Stone, 1946] Stone R., *Fifty years of radiology: from Roentgen to the era of atomic power.* Western J Surg. Vol. 54, n. 153; 1946.
- [Storm, 1970] Storm E., Israel H., *Photon cross sections from 1 keV to 100 MeV for elements Z=1 to Z=100.* Nucl Data Sect. Vol. 7, n. 565; 1970.
- [SUSA] SUSA, System of Uncertainty and Sensitivity Analysis software.
- [Mayles et al., 2007] Mayles P., Nahum A., y Rosenwald J. C.. *Handbook of Radiotherapy Physics. Theory and Practice.* Taylor y Francis. ISBN: 978-0-7503-0860-1; 2007.
- [Técnicas Radiofísicas] *Manual PCRT 3.* Técnicas Radiofísicas SL.
- [Tikhonov, 1963] Tikhonov AN., *Solution of Incorrectly Formulated Problems and the Regularization Method*, Soviet Math. Dok., n4 pp.1035-1038; 1963.
- [Turner, 1985] Turner J. E., Wright H. A., Hamm R., *A Monte Carlo Primer For Health Physicists*, 1985
- [Unesa, 2009] *Efectos biológicos de la exposición a dosis bajas de radiación ionizante.* Unesa, 2009
- [Valkealahti, 1989] Valkealahti S., Schou J., Nieminen RM., *Energy deposition of keV electrons in light elements.* J Appl Phys; Vol 65 n.6, pp. 2258-2266; 1989.
- [Van Dyk, 1993] Van Dyk J., Barnett R.B., Cygler J.E. and Shragge P.C., *Commissioning and quality assurance of treatment planning computers*, Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys., Vol 26, pp. 261-273; 1993.
- [Venselaar, 2001] Venselaar J., Welleweerd H., Mijneer B., *Tolerances for the accuracy of photon beam dose calculations of treatment planning.* Radiotherapy Oncology. Vol 60, pp. 191-201; 2001.

[Venselaar, 2001] Venselaar J., Welleweerd H., *Application of a test package in an intercomparison of the photon dose calculation performance of treatment planning systems used in a clinical setting*. Radiotherapy Oncology. Vol 60, pp. 203-213; 2001.

[Vised] *Visual Editor for MCNP*. PNNL, USA.

[Walecka, 2001] Walecka J. D., *Electron Scattering for Nuclear & Nucleon Structure*. Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology. 2001

[White, 2002] White MC., *Photoatomic Data Library MCPLIB04: A New Photoatomic Library Based on Data from ENDF/B-VI Release 8 (2002)*. Los Alamos National Laboratory internal memorandum X-5:MCW-02-111 <http://www.xdiv.lanl.gov/PROJECTS/DATA/nuclear/pdf/mcw-02-111.pdf>.

[Wing et al., 1991] Wing M. G., *A Primer on Integral Equations of the First Kind. The Problem of Deconvolution and Unfolding*. Philadelphia: SIAM, 1991.

[Wavelet Toolbox] Misiti M., Misiti Y., Oppenheim G., *Wavelet Toolbox User's Guide*. Matlab

[Wang, 2005] Wang B., Goldstein M., Xu G. y Sahoo N., *Adjoint Monte Carlo method for prostate external photon beam treatment planning: an application to 3D patient anatomy*. Phys. Med. Biol. Vol. 50, pp. 923–935; 2005.

[X-5 Monte Carlo Team, 2003] X-5 Monte Carlo Team, *MCNP – A General Monte Carlo N Particle Transport Code, Version 5*, LA-UR-03-1987, Los Alamos Nacional Laboratory, April 2003.