



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

Resumen

El cáncer es una de las principales causas de mortalidad en todo el mundo, y se prevé que, en las próximas décadas, se dupliquen los casos de cáncer en la población. A pesar de esto, es posible prevenir, detectar y tratar muchos tipos de cáncer gracias al uso de la radiación como tratamiento contra esta enfermedad.

La radioterapia es uno de los tratamientos más generalizados aplicados a los pacientes que padecen determinados tipos de cáncer. Emplea el uso de radiación ionizante para lesionar o destruir las células cancerosas en el área del tratamiento, y reducir o eliminar por completo los tumores. Pero, al igual que se dañan las células cancerosas, también pueden llegar a dañarse los tejidos sanos circundantes y producir efectos secundarios no deseados.

Los tratamientos de radioterapia se llevan a cabo, generalmente, con aceleradores lineales, denominados LinAc, que permite irradiar un tumor de forma muy precisa, evitando así, dañar el tejido sano circundante. Utiliza haces de diferentes energías, de acuerdo a la energía establecida en la planificación del tratamiento.

Generalmente, cuando dichos haces son de energías elevadas (>10 MeV), se inducen reacciones fotonucleares debido a la interacción de los fotones con el material que constituyen la cabeza del acelerador. Estas reacciones fotonucleares generan neutrones que son indeseables en el tratamiento, ya que son una fuente adicional de radiación y supone un riesgo radiológico adicional para los pacientes y trabajadores.

Con el trabajo que se presenta a continuación, se pretende cuantificar la cantidad de neutrones extra que se han producido en el acelerador lineal médico Varian, debido a dichas reacciones fotonucleares con las partes del acelerador y la propia instalación. Para ello, se hace uso del programa de cálculo que principalmente se usa en la simulación del transporte de neutrones, fotones y electrones: *Monte Carlo N-Particle Code (MCNP)*.

Palabras Clave: Radioterapia, reacciones fotonucleares, neutrones, MCNP.

Resum

El càncer és una de les principals causes de mortalitat a tot el món, i es preveu que, en les pròximes dècades, es dupliquen els casos de càncer en la població. Tot i això, és possible previndre, detectar i tractar molts tipus de càncer gràcies a l'ús de la radiació com a tractament contra aquesta malaltia.

La radioteràpia és un dels tractaments més generalitzats aplicats als pacients que patixen determinats tipus de càncer. Empra l'ús de radiació ionitzant per a lesionar o destruir les cèl·lules canceroses en l'àrea del tractament, i reduir o eliminar per complet els tumors. Però, igual que es danyen les cèl·lules canceroses, també poden arribar a danyar-se als teixits sans circumdants i produir efectes secundaris no desitjats.

Els tractaments de radioteràpia es duen a terme, generalment, amb acceleradors lineals, denominats Linac, que permet irradiar un tumor de forma molt precisa, evitant així, danyar el teixit sa circumdant. Utilitza feixos de diferents energies, d'acord a l'energia establerta en la planificació del tractament.

Generalment, quan aquests feixos són d'energies elevades (> 10 MeV), s'indueixen reaccions fotonuclears a causa de la interacció dels fotons amb el material que constitueixen el cap de l'accelerador. Aquestes reaccions fotonuclears generen neutrons que són indesitjables en el tractament, ja que són una font addicional de radiació i suposa un risc radiològic addicional per als pacients i treballadors.

Amb el treball que es presenta a continuació, es pretén quantificar la quantitat de neutrons extra que s'han produït en l'accelerador lineal metge *Varian*, a causa de les esmentades reaccions fotonuclears amb les parts de l'accelerador i la mateixa instal·lació. Per a això, es fa ús del programa de càlcul que principalment es fa servir en la simulació del transport de neutrons, fotons i electrons: Montecarlo N-Particle Code (MCNP).

Paraules Clau: Radioteràpia, reaccions fotonuclears, neutrons, MCNP

Abstract

The main cause of mortality around the world is cancer, and it is expected that in the coming decades, cases of cancer in the population will be doubled. Despite this, it is possible to prevent, detect and treat many types of cancer using radiation as a treatment against this illness.

Radiation therapy is one of the most widespread treatments applied to patients suffering from certain types of cancer. It employs ionizing radiation to damage or destroy cancer cells in the treatment area, and reduce or eliminate completely tumors. But, just as cancer cells are damaged, surrounding healthy tissues can also become damaged and produce unwanted effects to patients.

Radiotherapy treatments are usually performed with linear accelerators, LinAc, which it allows to irradiate a tumor very accurately, avoiding the damage of surrounding healthy tissue. It uses beams of different energies, according to the energy established in the treatment planning.

Usually, when these beams are high energies beams (> 10 MeV) photonuclear reactions are induced due to the interaction of photons with the LinAc head materials. These photonuclear reactions generate neutrons that are undesirable in the treatment, because they are an additional source of radiation and it means an additional radiological risk for the patients and workers.

The work presented here, expects to quantify the amount of extra neutrons that have occurred in the medical linear accelerator Varian, due to these photonuclear reactions. To do this, we use the calculation program that is mainly used in the simulation of the transport of neutrons, photons and electrons: Monte Carlo N-Particle Code (MCNP).

Keywords: Radiation therapy, photonuclear reactions, neutrons, MCNP.

Índice

1.	Introducción	1
1.1.	Objetivos del trabajo	1
1.2.	Justificación	2
1.3.	Planificación	4
2.	Radioterapia	7
2.1	Antecedentes e introducción	7
2.2	Física de la Radioterapia/ tipos de interacción	9
2.2.1.	Interacción de la radiación con la materia	9
2.2.2.	Interacción de la radiación electromagnética con la materia	11
2.2.3.	Interacción de las partículas cargadas con la materia	17
2.2.4.	Interacción de neutrones con la materia	22
2.3.	Magnitudes radiológicas de uso en radioterapia	24
2.4.	Los neutrones en los tratamientos. Problemática asociada	32
2.5.	Estado del arte.....	34
3.	Equipos de medida de neutrones	37
3.1.	Tipos de detectores.....	37
3.2.	Lil (Eu).....	38
3.2.1.	Bonner sphere/reconstrucción de espectros.....	38
4.	Descripción del código Monte Carlo MCNP (v.6)	39
4.1.	Qué es una simulación MC.....	39
4.2.	El MCNP 6.....	43
4.2.1	Librería de Transporte de Fotones: MCPLIB84.....	44
4.2.2	Librería de Transporte de Electrones: EL03	45
4.2.3	Tallies o Registros Dosimétricos en MCNP6.....	45
4.2.4.	Tally de flujo	47
4.2.5	Tarjeta FMESH	47
4.2.6	Tarjetas de conversión de flujo a dosis (DE/DF).....	47
4.2.7	Tarjeta de introducción de malla (EMBED)	48
4.2.8	Tarjeta EMBEE y tarjetas de conversión de flujo a dosis (EMBEB/EMBEM), (EMBDE/EMBDF).	48
4.3.	Pasos a seguir para generar el input	49
4.3.1.	Tarjeta de título (<i>Title Card</i>)	50
4.3.2.	Tarjeta de celda (<i>Cell Cards</i>).....	50
4.3.3.	Tarjeta de superficie (<i>Surface Cards</i>)	51

4.3.4. Tarjeta de datos (<i>Data Cards</i>)	52
5. Materiales y métodos.....	59
5.1. Modelización del detector y esferas	59
5.1.1. Detector.....	59
5.1.2. Esferas	62
5.2. Modelización del espacio de fases	63
5.3. Parámetros de la simulación	66
5.3.1. Mallado.....	66
5.3.2. Programa UM_PRE_OP	75
5.3.3. Archivos de salida y Programa UM_POST_OP	77
5.3.4. Input de MCNP	79
6. Resultados	93
6.1. Validación del modelo.....	93
6.2. Función respuesta del sistema Bonner Sphere	95
6.3. Respuesta teórica del sistema de esferas Bonner (BSS) dada por la simulación Monte Carlo	96
6.4. Resultados MCNP	98
7. Conclusiones.....	101
Bibliografía.....	103
Anexo I.....	105
• Modelización de las partes del detector	105
• Modelización de las esferas	108
Anexo II.....	111
• Mallado.....	111
Carcasa exterior del detector	111
Tubo ligero de pexiglás.....	111
Centelleador activo ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$	112
Conjunto detector	112
Anexo III.....	113
Archivo de entrada (input) <i>MCNP</i>	113
Presupuesto.....	119

Índice de figuras

- Figura 1: Diagrama de Gantt
- Figura 2: Primera radiografía (1895), Anna Bertha Ludwing
- Figura 3: Colisión elástica
- Figura 4: Colisión inelástica
- Figura 5: Colisión radiativa
- Figura 6: Espesor hemirreductor y decimorreductor
- Figura 7: Efecto fotoeléctrico
- Figura 8: Bordes de absorción fotoeléctrico
- Figura 9: Efecto Compton
- Figura 10: Producción de pares
- Figura 11: Relación procesos de interacción con energía
- Figura 12: Poder de frenado
- Figura 13: Alcance
- Figura 14: Dispersión elástica de neutrones
- Figura 15: Factor de calidad, Q (ICRP 60, 1991)
- Figura 16: Detectores de neutrones
- Figura 17: Estructura archivo de entrada (*input*)
- Figura 18: Formato tarjeta de celda (*cell card*)
- Figura 19: Formato tarjeta de superficie (*surface card*)
- Figura 20: Formato tarjeta *MODE*
- Figura 21: Formato fuente (*SDEF*)
- Figura 22: Formato de Tally de superficie y celda
- Figura 23: Formato Tarjeta de material
- Figura 24: Sección transversal del detector central del BSS
- Figura 25: Entorno gráfico de *SpaceClaim*
- Figura 26: Visualización 3D del detector completo modelado en *SpaceClaim*
- Figura 27: Sección transversal del detector completo modelado en *SpaceClaim*
- Figura 28: Detector Bonner Sphere midiendo neutrones en un LinAc
- Figura 29: Conjunto de esferas del detector BSS
- Figura 30: Visualización 3D de la esfera 1
- Figura 31: Sección transversal de la esfera 1
- Figura 32: Espectro de fotones de 15 MeV utilizado en la simulación
- Figura 33: Localización espacio de fases. Unidades de medida: cm
- Figura 34: Elementos de primer orden
- Figura 35: Elementos de segundo orden
- Figura 36: Detector mallado con *Abaqus/CAE*
- Figura 37: Detector mallado con *Abaqus/CAE*. Posición correcta.
- Figura 38: Esfera mallada con *Abaqus/CAE*
- Figura 39: Conjunto detector y esfera mallado con *Abaqus/CAE*
- Figura 40: Archivo .inp creado por *Abaqus/CAE*
- Figura 41: Opciones del programa *um_pre_op*
- Figura 42: Formato programa *um_pre_op*
- Figura 43: Archivo de entrada creado por *um_pre_op*
- Figura 44: Archivo .inp. Tarjetas de celdas y superficies
- Figura 45: Techo y suelo. Medidas en cm

Figura 46: Localización techo y suelo. Unidades de medida: cm

Figura 47: Formato tarjeta *EMBEDn*

Figura 48: Archivo .inp. Tarjeta *EMBED*

Figura 49: Formato tarjeta *Tally*

Figura 50: *Tallies* archivo .inp

Figura 51: Formato tarjeta *Tally*

Figura 52: Definición del *Tally* en el cristal centelleador ${}^6\text{LiL}(\text{Eu})$ en el input

Figura 53: Definición del *Tally* bajo el espacio de fases en el input

Figura 54: Definición del *Tally* en el plano del detector en el input

Figura 55: Archivo .inp. Tarjeta de materiales

Figura 56: Archivo .inp. Física de transporte

Figura 57: Archivo .inp. Tarjetas de celda

Figura 58: Archivo .inp. Reducción de varianza

Figura 59: Fuente de neutrones de ${}^{241}\text{Am}$ -Be medida con el sistema de esferas Bonner

Figura 60: Medida de recuentos de neutrones de ${}^{241}\text{Am}$ -Be comparada con el recuento de neutrones simulados

Figura 61: Conjunto de esferas del espectrómetro Bonner Sphere

Figura 62: Respuesta de neutrones del espectrómetro de esferas Bonner en función de la energía calculada con MCNP

Figura 63: Matriz respuesta BSS (H.R Vega-Carrillo, "Calculation of Response matrix of a BSS with ${}^6\text{LiL}$ scintillator")

Figura 64: Gráfico de datos obtenidos en la simulación MCNP

Figura 65: Distribución flujo de neutrones dentro de la esfera moderadora (partículas/cm²)

Figura 66: Visualización 3D de la carcasa del detector modelado en *SpaceClaim*

Figura 67: Sección transversal de la carcasa exterior modelado en *SpaceClaim*

Figura 68: Visualización 3D del tubo ligero de plexiglás modelado en *SpaceClaim*

Figura 69: Sección transversal del tubo ligero de plexiglás modelado en *SpaceClaim*

Figura 70: Visualización 3D del centelleador activo modelado en *SpaceClaim*

Figura 71: Sección transversal del centelleador activo modelado en *SpaceClaim*

Figura 72: Visualización 3D de la esfera 2

Figura 73: Sección transversal de la esfera 2

Figura 74: Visualización 3D de la esfera 3

Figura 75: Sección transversal de la esfera 3

Figura 76: Visualización 3D de la esfera 4

Figura 77: Sección transversal de la esfera 4

Figura 78: Visualización 3D de la esfera 5

Figura 79: Sección transversal de la esfera 5

Figura 80: Visualización 3D de la esfera 6

Figura 81: Sección transversal de la esfera 6

Figura 82: Visualización 3D del detector mallado con *Abaqus/CAE*

Figura 83: Visualización 3D del tubo ligero de Plexiglás mallado con *Abaqus/CAE*

Figura 84: Visualización 3D del cristal centelleador ${}^6\text{LiL}$ mallado con *Abaqus/CAE*

Figura 85: Visualización 3D del conjunto detector mallado con *Abaqus/CAE*

Índice de tabla

Tabla 1: Factores de ponderación de la radiación recomendados, w_R

Tabla 2: Factores de ponderación de los tejidos, w_T

Tabla 3: Códigos Monte Carlo

Tabla 4: Registros del código MCNP o *tallies*

Tabla 5: Tarjeta de superficie de MCNP (*MCNP5*) (*manual*)

Tabla 6: Variables más comunes usadas para especificación de fuente general (*SDEF*)

Tabla 7: Comandos de Tallies de MCNP

Tabla 8: Códigos de elementos de malla

Tabla 9: Keywords permitidos en la tarjeta *EMBED*

Tabla 10: Keywords permitidos en la tarjeta *FMESH*

Tabla 11: Datos obtenidos en la simulación MCNP

I. MEMORIA



1. Introducción

En este primer apartado de introducción se explican los objetivos del trabajo, así como la justificación de por qué se ha realizado dicho trabajo. También se expone en este primer apartado la planificación de cómo se ha procedido en cuanto a la realización del trabajo.

1.1. Objetivos del trabajo

En los tratamientos de radioterapia se emplean haces de electrones y fotones para tratar cánceres. Durante dichos tratamientos, cuando se opera a altas energías, por encima de los 10 MeV, los aceleradores lineales inducen reacciones fotonucleares y productos de activación que suponen un riesgo radiológico adicional para los pacientes y los trabajadores.

Teniendo en cuenta este hecho, este trabajo se centra en el estudio de los fotoneutrones producidos por reacciones fotonucleares de los fotones del haz de tratamiento con las partes del acelerador lineal y de la propia instalación.

Para ello, en primer lugar, se realiza la modelización y el posterior mallado del detector de neutrones que se ha utilizado durante las mediciones. El modelo de este detector de neutrones (Bonner Sphere Detector) se ha validado con una geometría y fuente más sencilla. En concreto con medidas experimentales tomadas de una fuente de ^{241}Am -BE contenida en un troxler. Este modelo validado también ha permitido obtener la respuesta del detector a diferentes haces monoenergéticos de energía (matriz respuesta).

En segundo lugar, se simula una situación de irradiación en un búnker de un acelerador lineal médico para detectar los neutrones que se producen por reacciones fotonucleares con los elementos propios del acelerador. En esta simulación se utiliza el modelo validado del detector de neutrones.

Para la realización de la simulación se ha utilizado el código Monte Carlo MCNP6, utilizado para simular el transporte de neutrones, fotones o electrones en radioterapia y física médica, entre otras áreas de aplicación.

Una vez conseguido el objetivo de este trabajo, los resultados obtenidos serán utilizados en trabajos futuros para la reconstrucción del espectro de energía de los neutrones producidos por las reacciones fotonucleares en las partes del detector lineal.



1.2. Justificación

El cáncer es una de las principales causas de mortalidad en todo el mundo; según la Sociedad Española de Oncología Médica (SEOM) en 2012 hubo alrededor de 14 millones de nuevos casos y 8.2 millones de muertes relacionadas con el cáncer. Ese mismo año, la incidencia de cáncer en España fue de 215.534. Se prevé que los casos anuales de cáncer habrán aumentado de 14 millones en 2012 a 22 millones en las próximas décadas; de los cuales, teniendo en cuenta las previsiones demográficas proporcionadas por las Naciones Unidas, 246.713 nuevos casos de cáncer serán diagnosticados en España en el año 2020.

A pesar de ello, actualmente es posible prevenir, detectar y tratar muchos tipos de cáncer gracias al uso de la radiación como tratamiento, complementándose con los tratamientos de quimioterapia y cirugía.

La radioterapia consiste en un tratamiento que emplea el uso de radiación ionizante para destruir las células cancerosas y reducir el tamaño de los tumores. Para ello, se expone la zona determinada a tratar a la radiación. Teniendo en cuenta el origen de la radiación y la administración de ésta al paciente, se puede diferenciar tres tipos de tratamientos de radioterapia:

- Radioterapia externa: la radiación procede de un radionucleído (bombas de cobalto, Co-60) o más recientemente de una fuente artificial como lo son los aceleradores lineales y los tubos de rayos X, y se aplica desde el exterior del paciente.
- Radioterapia interna: la radiación se introduce dentro del cuerpo sellada en un portador, es decir, se utilizan fuentes encapsuladas de pequeño tamaño, y se coloca muy cerca del tumor o dentro del mismo paciente.
- Radioterapia sistémica: la radiación procede de fuentes naturales. Utiliza materiales radioactivos no sellados que se introducen y viajan por dentro del cuerpo.

En cualquier caso, la radioterapia lesiona o destruye las células cancerosas en el área de tratamiento, ya que se daña el ADN de las células, lo que hace imposible que dichas células crezcan y se dividan. Por lo general, estas células mueren y es el propio cuerpo el que las descompone y desecha. Del mismo modo que en un tratamiento de radioterapia se dañan las células cancerosas, también se dañan en cierta medida células sanas colindantes al tumor. Sin embargo, las células



sanas disponen de la capacidad de recuperarse de los efectos de la radiación, regenerándose y recobrando su funcionamiento normal.

Para la realización de los tratamientos de radioterapia se usan aceleradores lineales de electrones, conocidos comúnmente como LinAcs, que emplean haces colimados de electrones y/o fotones para el tratamiento de tumores. Estos aceleradores utilizan ondas electromagnéticas de altas frecuencias para acelerar los electrones que son utilizados directamente en el tratamiento de tumores superficiales, o bien, se les hace impactar sobre un blanco (o target normalmente de tungsteno y cobre) adecuado para producir fotones de alta energía destinados al tratamiento de tumores profundos.

Cuando los haces de electrones y/o fotones son de elevada energía ($E > 10$ MeV), se inducen reacciones electro-nucleares ($e, e'n$) y reacciones fotonucleares (γ, n) que producen neutrones y radioisótopos que son indeseables en el tratamiento, ya que son una fuente adicional de dosis y supone un riesgo radiológico adicional para los pacientes, para el personal que trabaja con los aceleradores lineales médicos y para el público.

Estas reacciones se llevan a cabo principalmente en aire y en los componentes del cabezal del acelerador, como son los colimadores del haz, tanto primario como secundarios, el aplanamiento del filtro, el blanco en el cual los electrones se convierten en radiación de rayos X, las láminas de dispersión y las cuñas, debido a que están compuestos de materiales con núcleos de elevado número atómico (principalmente tungsteno (W) y plomo (Pb)). Estos materiales son la principal fuente de fotoneutrones en los aceleradores debido a su alta sección eficaz para reacciones (γ, n). por otro lado, dichos materiales tienen muy baja sección eficaz de absorción para el rango de energía que se produce en el cabezal de un acelerador lineal, por lo que los fotones tienen una gran probabilidad de penetrar el blindaje y llegar al paciente y a las paredes del bunker.

La mayoría de los neutrones alcanzan las paredes de hormigón, el techo y el suelo de la instalación de radioterapia. En este medio los neutrones experimentan colisiones elásticas principalmente con núcleos de hidrógeno. Los neutrones que disminuyen su velocidad pueden escapar del hormigón y volver al aire, contribuyendo a la distribución específica de energía de los neutrones dentro de la instalación.

Por lo tanto, con la realización de este trabajo se pretende realizar el paso previo para poder conocer con precisión la dosis adicional recibida debido a la contribución de los neutrones producidos en el cabezal del acelerador lineal y en la instalación radiológica.



1.3. Planificación

La duración total de este Trabajo Final de Máster comprende un período aproximado de seis meses, comenzando en el mes de marzo de 2016 y finalizando en el mes de septiembre de 2016. El Trabajo Final de Máster se realizó en el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la Universidad Politécnica de Valencia aprovechando que la alumna fue beneficiaria de una beca de colaboración en dicho departamento. Todos los tiempos reflejados en este apartado son tiempos aproximados, que permiten hacerse una idea de la dedicación total a cada función. A continuación, se exponen las distintas tareas en las cuáles se pueden agrupar el conjunto de trabajos que han resultado necesarios para la realización del trabajo.

- Aprendizaje teórico y práctico del lenguaje de programación de *MCNP*:
 - Estudio del lenguaje de programación C.
 - Realización de ejemplos de órdenes de programación para adquirir conocimientos.

Duración aproximada: 20 días (1º semana – 3º semana marzo)

- Aprendizaje teórico y práctico de las herramientas de *SpaceClaim*, *Abaqus* y *MCNP*
 - Estudio del entorno de programación del software *SpaceClaim*
 - Estudio de los manuales de *Abaqus* y *MCNP*, prestando especial atención a los requerimientos para combinar ambas herramientas.
 - Estudio de los formatos de importación en *Abaqus*
 - Estudio de los pasos necesarios para la creación de la malla
 - Estudio de la estructura del archivo de salida de *Abaqus* aceptado en *MCNP*
 - Estudio de la estructura del archivo de entrada de *MCNP6* y de las tarjetas de entrada necesarias para introducir la malla
 - Estudio de la estructura del archivo de salida de *MCNP*

Duración aproximada: 15 días (3º semana marzo – 1º semana abril)

- Simulación de prueba, aprendizaje del programa *um_post_op* incluido en *MCNP*. Comparación de resultados.
 - Creación de un cubo de tamaño 10 x 10 x 10 cm en geometría convencional y en *SpaceClaim*
 - Mallado del cubo mediante el software *Abaqus*
 - Creación del input de *MCNP* adecuado al cubo realizado con geometría convencional
 - Creación del input de *MCNP* adecuado al cubo realizado con el programa *SpaceClaim*



- Aprendizaje de la herramienta de conversión de los resultados (.eeout) a formato (.vtk) incluida en el programa *um_post_op*
- Aprendizaje del manejo del software de visualización ParaView, visualizador del formato .vtk
- Comparación de resultados

Duración aproximada: 1 mes (abril)

- Reconstrucción del detector BSS y mallado (Bonner Sphere System)
 - Definición y modelado de la geometría del detector en el programa SpaceClaim
 - Definición y modelado de la geometría del conjunto de esferas del detector en el programa SpaceClaim
 - Importación de los archivos (.step), asignación de materiales y mallado del detector en el programa Abaqus.
 - Importación de los archivos (.step), asignación de materiales y mallado de las esferas en el programa Abaqus.
 - Generación de los archivos .inp de Abaqus que posteriormente se utilizarán en el archivo de entrada de MCNP

Duración aproximada: 1 mes (mayo)

- Generación del archivo de entrada (input) de MCNP adecuado a la geometría del detector
 - Aprendizaje del software *um_pre_op*
 - Definición y comprobación de la tarjeta de celda
 - Definición y comprobación de la tarjeta de superficies
 - Definición y comprobación de Tallies
 - Definición y comprobación de la física y la reducción de varianza empleada
 - Definición y comprobación de los materiales

Duración aproximada: 2 meses (junio – julio)

- Simulación del detector BSS en un acelerador lineal
 - Simulación de la irradiación del detector sin esfera
 - Simulación de la irradiación del detector con la esfera 1
 - Simulación de la irradiación del detector con la esfera 2
 - Simulación de la irradiación del detector con la esfera 3
 - Simulación de la irradiación del detector con la esfera 4

- Simulación de la irradiación del detector con la esfera 5
- Simulación de la irradiación del detector con la esfera 6

Duración aproximada: 1 mes (septiembre)

- Análisis de los resultados

Duración aproximada: 12 días (3^o semana septiembre)

- Desarrollo de la memoria del proyecto

Duración aproximada: 3 meses (julio – septiembre)

A continuación, se muestra el diagrama de Gantt:



Figura 1: Diagrama de Gantt

Como se puede observar, este diagrama es lineal; es decir, cada tarea realizada es la predecesora de la tarea posterior, debido a que sólo existe un único recurso de mano de obra que realiza todas las tareas.



2. Radioterapia

2.1 Antecedentes e introducción

El físico y matemático Jules Henri Poincaré (1845 – 1912), tras el descubrimiento de los rayos X por Röntgen (1845 – 1923) en 1895, tuvo la idea de investigar si rayos semejantes a los X eran emitidos por cuerpos diferentes a los “fluorescentes” bajo la acción de la luz. Bajo esta misma hipótesis, el profesor de física de la Escuela Politécnica de París, Antoine Henri Becquerel (1852 – 1908), examinó sales de uranio cotejando que emitían, de forma espontánea y sin acción de la luz, rayos de naturaleza hasta ese momento desconocida. A estos rayos los denominó con el nombre de “uránicos”, lo que más tarde Marie Curie llamaría “radiactividad”.

Estos descubrimientos atrajeron la curiosidad de muchos científicos, entre ellos la joven polaca Marie Sklodwska, que se encontraba en París desarrollando su tesis doctoral sobre “radioactividad espontánea” en la Escuela de Física en 1886; más conocida por su apellido de casada, Curie, tras contraer matrimonio con el prominente físico de la Universidad Soborne, Pierre Curie.

En uno de sus experimentos, al medir el poder de ionización del uranio, descubrió que la radiación era proporcional a su masa y que no era influenciada por la estructura química del uranio ni por circunstancias exteriores. Finalmente concluyó que la radiación era una propiedad atómica, y descubrió que no solamente está presente en el uranio, sino también en otros “radioelementos” como el thorium.

En julio de 1898, junto a su marido, logran aislar un elemento nuevo en una fracción química del mineral perblenda; el cual recibe el nombre de **polonium** en honor a su tierra natal. A finales de ese mismo año, reconocen un segundo elemento radiactivo al que llaman **radium**.

Con este descubrimiento, Marie y Pierre Curie y Henri Becquerel fueron galardonados con el Premio Nobel de Física en 1903, por determinar las propiedades químicas del radium. Poco después, en 1911, Marie alcanza nuevamente el Premio Nobel de Química, además de la distinción de ser nombrada la primera Doctora de Francia, como profesora en la Soborne.

Continuando los pasos de sus progenitores, Irene Curie (1897 – 1956), en colaboración con su marido Frédéric Joliot, descubriría en 1933 un método para producir radioactividad artificial más segura; hecho que le valió el Premio Nobel de Física en 1935. Este descubrimiento dio un nuevo impulso a las aplicaciones médicas de la radiactividad.

Los primeros usos terapéuticos de la radiación se dieron en Europa y Estados Unidos, donde los rayos X se utilizaban especialmente para tratar patologías dermatológicas, reumatismo, neurastenia, leucemia, cáncer de estómago, recto y mamas.

La radioterapia quedó finalmente establecida en medicina en 1919. La angustia frente al cáncer avanzado y los dolores que ocasionaba esta enfermedad incurable motivó, el principio de los tiempos de la radioterapia, el uso indiscriminado de ésta, convirtiéndola en un tratamiento empírico administrado por médicos y cirujanos generales, que se llevaba a cabo en consultorios particulares en lugar de en centros especializados. El radium se distribuía en forma de “sales” y se aplicaba en el cuerpo de diversas formas: placas en tubos, en forma de pomada, en forma de compresas de lino, inyecciones o suspensión oral. La dosis se determinaba por la respuesta al tratamiento.

Después de 1920, la organización de la especialidad fue orientando la práctica hacia el medio especialista en departamentos hospitalarios o clínicas especializadas, estableciéndose programas de residencias.

En los años que precedieron y siguieron a la Segunda Guerra Mundial se hicieron continuos avances en materia de equipo, materiales opacos de contraste, fuentes de alta energía para radioterapia, aplicaciones de radio para el tratamiento de cáncer y otras técnicas clínicas. La exploración radiológica se benefició asimismo de los sistemas de exposición automática, que permitía obtener imágenes más nítidas, y de la intensificación electrónica de la imagen en movimiento con la fluoroscopia.

A partir de la década de los 1970's, la gammagrafía se convirtió en un medio esencial de exploración funcional de numerosos órganos y tejidos; además de que se empezó a aplicar la informática a la radiología. Una de las principales aplicaciones fuer la tomografía computarizada que permitió estudiar cortes del cuerpo en los que se combinaban miles de elementos de información para producir una imagen clara que revelaba nuevos. Diez años después apareció la resonancia magnética, otra técnica de obtención de secciones transversales.



Figura 2: Primera radiografía (1895), Anna Bertha Ludwing



2.2 Física de la Radioterapia/ tipos de interacción

2.2.1. Interacción de la radiación con la materia

Desde el punto de vista de la Física Nuclear, el conocimiento de la interacción de la radiación con la materia es de gran importancia debido a que los usos de la radioactividad están basados en su capacidad de penetración en la materia e interactuar con ella depositando energía en el medio material. A este hecho se le denomina radiación ionizante.

En estas interacciones, la radiación pierde parte o la totalidad de su energía cediéndola al medio que atraviesa mediante distintos mecanismos de interacción, los cuales dependen principalmente:

- Tipo de radiación, en el que influye fundamentalmente la carga eléctrica y la masa.
- Energía de la radiación
- Propiedades del medio material con el que interaccionan.

Para poder clasificar las radiaciones ionizantes, se debe definir primero las diferentes partículas que producen dichas radiaciones:

- Partículas sin carga:
 - Partículas sin masa: Fotones (radiación gamma y rayos X).
 - Partículas con masa: Neutrones
- Partículas cargadas:
 - Partículas ligeras ($m=m_e$): Radiación β (electrones y positrones)
 - Partículas pesadas ($m>m_e$): Radiación α , iones pesados, fragmentos de fisión...

Las radiaciones directamente ionizantes son las radiaciones en las que las propias partículas producen la ionización del medio; es decir, son capaces de liberar electrones ligados de los niveles atómicos del núcleo. Este tipo de radiación ionizante está constituida por partículas cargadas.

Las radiaciones indirectamente ionizantes son las producidas por partículas sin carga (fotones y neutrones). Dichas partículas no producen la ionización del medio directamente, si no que colisionan con otras partículas cargadas presentes en el medio y éstas producen la ionización.

La interacción de la radiación con la materia se puede producir mediante tres tipos de colisión:

- **Colisión elástica:** la partícula incidente es desviada de su trayectoria por los átomos del medio con el que incide, cediendo una cantidad de energía que es absorbida por dichos átomos. En este tipo de colisión, no se produce ninguna alteración del medio a nivel atómico o nuclear.

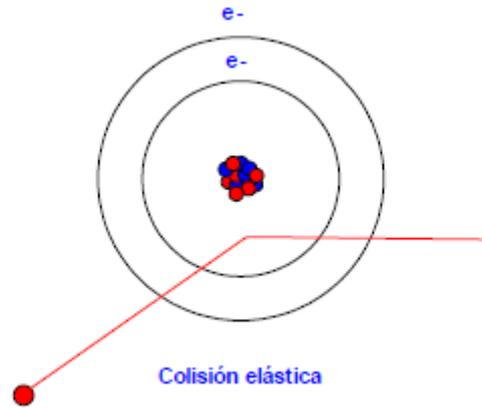


Figura 3: Colisión elástica

- **Colisión inelástica:** la partícula incidente colisiona con los átomos del medio, modificando su estructura electrónica. Se pueden producir excitaciones, que se producen al paso de electrones a niveles energéticos menos ligados, o ionizaciones, que se producen por la expulsión de un electrón del átomo.

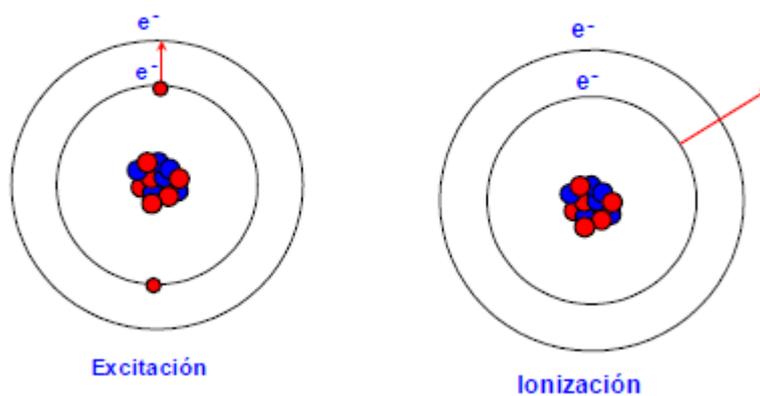


Figura 4: Colisión inelástica

- **Colisión radiativa:** la partícula cargada se frena o se desvía al interactuar con los átomos del medio, emitiendo radiación electromagnética. La energía cinética perdida por la radiación incidente se transforma en energía de la radiación electromagnética emitida.

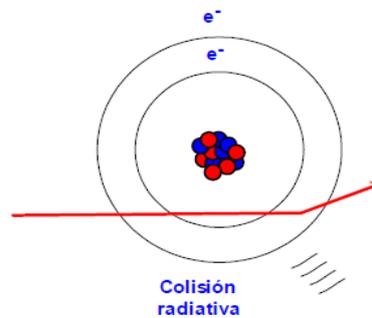


Figura 5: Colisión radiativa

2.2.2. Interacción de la radiación electromagnética con la materia

La radiación electromagnética es una propagación de energía a través del espacio sin necesidad de soporte material. Posee características típicas del movimiento ondulatorio, como la reflexión, la refracción o la difracción, y características propias del movimiento de partícula. Esto se conoce como la naturaleza dual (onda – partícula) de la radiación electromagnética.

La relación entre la naturaleza ondulatoria y la corpuscular es:

$$E = h \cdot f$$

Donde E es la energía de cada fotón, f la frecuencia de la onda asociada y h la constante de Planck.

Todas las ondas, independientemente de su naturaleza, se caracterizan por su longitud de onda y su frecuencia. Del mismo modo el movimiento de una partícula se caracteriza por su energía cinética y su cantidad de movimiento. Al referirnos a la radiación electromagnética utilizaremos ambos conjuntos de magnitudes.

La unidad de medida de la frecuencia es el hertzio (Hz) que es igual a un ciclo por segundo. La unidad de medida de la energía en la escala atómica es el electrón-voltio (eV) que es igual a la energía cinética adquirida por un electrón al ser acelerado en un campo eléctrico con una diferencia de potencial de un voltio.

Las radiaciones electromagnéticas de principal interés en el campo de la radioterapia son los fotones y los rayos X.



ATENUACIÓN

Los fotones al atravesar la materia interactúan tanto con los electrones como con los núcleos atómicos de manera que se va atenuando exponencialmente su número conforme aumenta el espesor atravesado, pero sin llegar nunca a anularse.

La interacción entre fotones y la materia tiene lugar a través de las colisiones aisladas, sin que se produzcan otras interacciones entre dos colisiones. Por ello, los fotones no tienen un alcance definido al atravesar la materia sino una cierta probabilidad de atenuación por unidad de longitud, μ , que se denomina coeficiente de atenuación lineal, que es independiente del camino recorrido. El número de fotones que interactúan por unidad de tiempo con el material de una lámina de espesor dx es proporcional al número de partículas incidentes N y al espesor de dicha lámina, es decir:

$$dN = -\mu \cdot N \cdot dx$$

Integrando la ecuación diferencial se obtiene:

$$N = N_0 \cdot e^{-\mu \cdot l}$$

Esta ecuación es válida siempre que:

- La radiación incidente sea monoenergética, es decir, que el haz sea homogéneo.
- El haz incidente esté colimado, es decir, que las trayectorias de los fotones sean paralelas y normales a la superficie del absorbente.
- El absorbente sea delgado.

Como consecuencia, la atenuación depende del valor de μ y del espesor del absorbente y resulta que para absorber completamente un haz de fotones se requeriría un espesor infinito.

El coeficiente de atenuación definido, depende de la energía de los fotones y de la densidad y número atómico del absorbente y tiene dimensiones de inverso de longitud (m^{-1}). Por esta razón, μ se denomina coeficiente de atenuación lineal.

Los coeficientes de atenuación lineal ofrecen el inconveniente de que varían con el estado físico o de agregación del absorbente. Para evitar esta dificultad, se multiplica y divide el exponente de la ecuación de atenuación por la densidad del absorbente ρ , con lo que resulta:

$$N = N_0 \cdot e^{-(\rho \cdot l)(\mu/\rho)}$$

Y se utiliza el coeficiente de atenuación másico, μ/ρ , cuyas unidades son $m^2 \cdot kg^{-1}$.

Un concepto muy utilizado para caracterizar la atenuación de los fotones o radiación electromagnética, es el llamado recorrido libre medio de los fotones, λ , que se define como el valor medio de la distancia que recorren los fotones del haz de una determinada energía, entre dos interacciones consecutivas. Su relación con el coeficiente de atenuación lineal viene dada por:

$$\lambda = \frac{l}{\mu}$$

El número total de fotones emergentes tras atravesar un material queda reducido al número de fotones del haz incidente menos los fotones que interactuaron. La reducción de la intensidad sufrida por un haz de fotones viene dada por la ecuación anterior. En este caso, el coeficiente de atenuación varía muy levemente con Z y la variación del espesor de la capa hemirreductora de un elemento a otro también es pequeña. Cuanto mayor es la densidad del material, menor el espesor necesario para producir una atenuación dada de la intensidad de la radiación. Es por ello que como absorbente suelen utilizarse materiales pesados como el plomo.

Para determinar el poder de penetración de un haz de fotones se utiliza el concepto de capa hemirreductora, que se define como el espesor del material necesario para reducir la intensidad de la radiación incidente a la mitad. Por tanto, para un haz de fotones de una energía determinada la capa hemirreductora depende del material considerado.

$$HVL = \frac{\ln 2}{\mu}$$

De la misma forma se define el espesor decimorreductor o capa decimorreductora como el espesor de material que reduce a un décimo la intensidad de la radiación incidente.

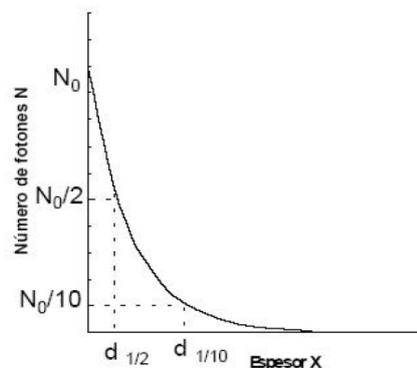


Figura 6: Espesor hemirreductor y decimorreductor

PROCESOS DE INTERACCIÓN

Se distinguen tres mecanismos de interacción de los fotones con la materia: el efecto fotoeléctrico, la dispersión Compton y la producción de pares.

- **Efecto fotoeléctrico:**

El efecto fotoeléctrico consiste en la absorción de un fotón por un electrón el cual luego es eyectado del átomo. A este electrón se le denomina fotoelectrón. Puesto que un electrón libre no puede absorber un fotón y conservar el momento, el efecto fotoeléctrico siempre ocurre con electrones ligados, siendo el núcleo el que absorbe el momento de retroceso. La energía cinética del fotoelectrón corresponde a la diferencia entre la energía del fotón incidente menos la energía de ligadura del electrón en la capa electrónica desde donde fue removido:

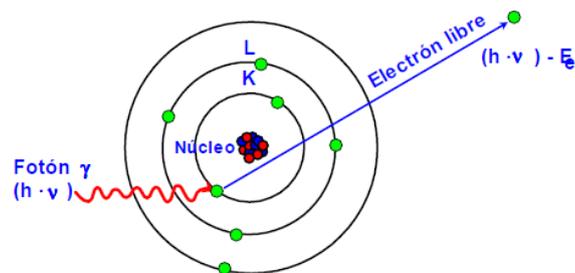


Figura 7: Efecto fotoeléctrico

$$E_f = E_\gamma - E_b$$

La vacante dejada por el fotoelectrón es llenada por otro electrón que proviene de las capas superiores, con la emisión de rayos X característicos del elemento cuya energía es la diferencia de energías entre ambos niveles electrónicos. Alternativamente, esta energía puede ser transferida a un segundo electrón (electrón de Auger), que es eyectado del átomo quedando éste doblemente ionizado.

La figura muestra la dependencia típica de la sección eficaz fotoeléctrica en función de la energía del fotón incidente cuando el material blanco es plomo. Como puede verse, para energías por encima de la mayor energía de ligadura del átomo (capa K), la sección eficaz se incrementa rápidamente a medida que la energía del fotón se acerca a la energía correspondiente a la capa K. pasado este punto, la magnitud de la sección eficaz decrece drásticamente puesto que no hay electrones K “disponibles” para el efecto fotoeléctrico. Esta caída se conoce como borde de absorción K. Por debajo de esta energía la sección eficaz vuelve a crecer hasta alcanzar los bordes L y M sucesivamente.

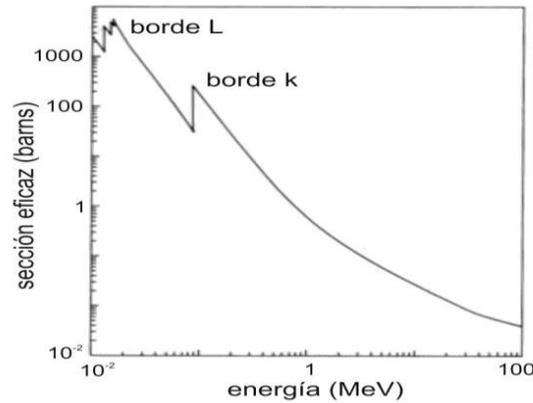


Figura 8: Bordes de absorción fotoeléctrico

Es interesante notar la dependencia de la sección eficaz fotoeléctrica con Z y la energía del fotón incidente. A energías del orden del MeV, la sección eficaz fotoeléctrica es proporcional a Z^5 . Esto indica que los materiales con Z alto son los más indicados para absorción fotoeléctrica.

El efecto fotoeléctrico se produce cuando tiene lugar una interacción entre un fotón y un átomo, representado por uno de sus electrones suficientemente ligado. La consecuencia de una interacción fotoeléctrica es la emisión de electrones (fotoelectrones), debido a la absorción total de la energía del fotón por el electrón ligado.

La energía de emisión de los fotoelectrones es:

$$E_f = E_\gamma - E_b$$

Donde:

E_γ es la energía del fotón incidente

E_b es la energía de ligadura del electrón al átomo.

- **Efecto Compton**

La dispersión Compton es considerada como una colisión elástica entre un fotón incidente y un electrón débilmente ligado al átomo que se puede considerar como libre. Tras este proceso de interacción, el fotón incidente de energía $E_0 = h\nu$ es absorbido, y aparece otro fotón de menor energía $E = h\nu'$. El electrón adquiere una energía cinética igual a la diferencia de dichas energías:

$$E_{cin} = E_0 - E = h\nu - h\nu'$$

La energía del fotón dispersado se calcula aplicando los principios de conservación de la energía y cantidad de movimiento en condiciones relativistas de la forma:

$$E = hv' = \frac{hw}{1 + \alpha(1 - \cos \phi)}$$

Con $\alpha = hv/m_0c^2$, donde m_0 es la masa en reposo del electrón. La energía cinética adquirida por el electrón es:

$$T = hv - hv' = hv \frac{\alpha(1 - \cos \phi)}{1 + \alpha(1 - \cos \phi)}$$

Así, el electrón puede llegar a alcanzar una energía cinética máxima de $T_{m\acute{a}x} = hv \frac{2\alpha}{1+2\alpha}$ para un ángulo $\phi = \pi$.

Tanto el efecto fotoeléctrico como el efecto Compton, tienen como resultado un átomo residual ionizado. En el caso del efecto Compton, dicho electrón es extraído de las capas más externas, por lo que se emite radiación electromagnética de desexcitación de baja energía.

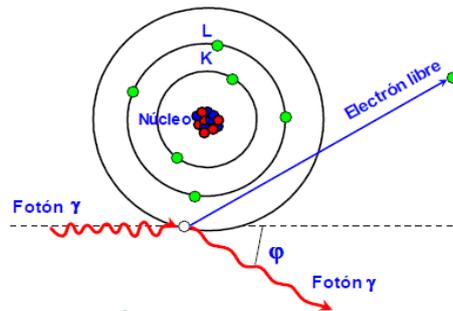


Figura 9: Efecto Compton

- **Producción de Pares**

En el proceso de producción de pares se produce la transformación de un fotón en un par electrón – positrón. Aplicando el principio de conservación del momento lineal, este proceso sólo puede ocurrir en presencia de un tercer cuerpo, generalmente un núcleo. La energía mínima necesaria para la producción de un par electrón – positrón es de 1.022 MeV, equivalente a la masa en reposo del electrón más la del positrón, ambas idénticas y con un valor de 511 keV. Este valor supone el umbral energético del proceso. Posteriormente a la creación del par, ambas partículas se comportan como partículas β , interactuando de forma directa.

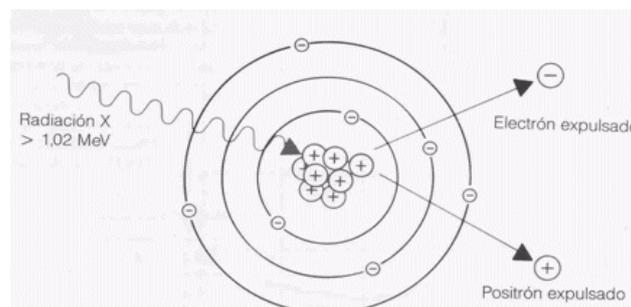


Figura 10: Producción de pares

En la siguiente figura se observa en qué rangos de energía predomina cada uno de los tres efectos descritos anteriormente. Así, el efecto fotoeléctrico es predominante a bajas energías de hasta el orden de 0.1 MeV; en el rango de energías comprendido entre 0.1 MeV a 10 MeV, predomina el efecto Compton; la producción de pares es importante a altas energías, siendo predominante este efecto a energías su

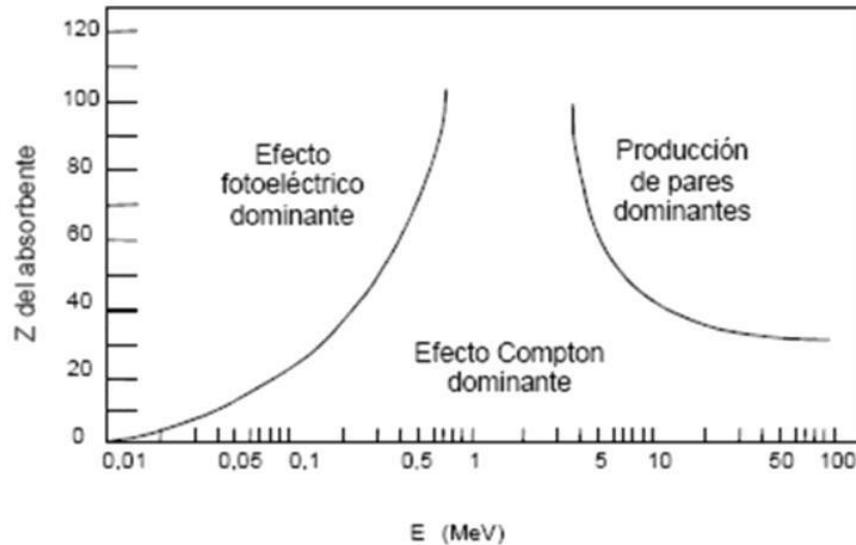


Figura 11: Relación procesos de interacción con energía

2.2.3. Interacción de las partículas cargadas con la materia

Tipos de colisión

Al incidir una partícula cargada en un material blanco, éstas experimentan una serie de colisiones con los átomos constituyentes del medio material y producen una pérdida casi continua de la energía cinética de la partícula, hasta llegar a detenerse. El espesor de material necesario que detiene completamente el haz de esta radiación se conoce como alcance. Para un material blanco dado, el número de interacciones necesario para detener las partículas depende de la energía de la radiación incidente.

Se pueden distinguir los siguientes tipos de procesos de interacción básicos con los electrones y con los núcleos:



- Con electrones:

Colisión elástica:

En este tipo de colisiones, se conservan tanto la energía cinética como la cantidad de movimiento. En estos casos, la partícula es desviada de su trayectoria por los electrones del medio, cediendo parte de su energía en forma de energía cinética a los electrones. En esta colisión, en el medio no se produce ninguna alteración atómica o nuclear.

Colisión inelástica:

En estas colisiones se conserva la cantidad de movimiento, pero no la energía cinética. La partícula al sufrir estas colisiones con los átomos del medio, modifica su estructura electrónica, produciendo excitación, ionización o disociación.

- Con núcleos

Colisión elástica:

La partícula incidente es desviada de su trayectoria por efecto de la interacción Coulombiana con las cargas del núcleo. La partícula incidente pierde en este proceso sólo una fracción de su energía cinética inicial. Ocurre fundamentalmente para el caso de partículas β .

Colisión inelástica:

La partícula incidente pierde una cantidad significativa de energía al ser acelerada o frenada por la interacción Coulombiana con el núcleo. Esta energía se manifiesta como radiación electromagnética y se le denomina radiación de frenado o Bremsstrahlung

Colisión radiativa:

La partícula cargada se “frena” o se “desvía” en su interacción con los átomos del medio y como resultado emite ondas electromagnéticas. Esta radiación es conocida como radiación de frenado o “Bremsstrahlung”. Este proceso, a nivel elemental, se produce con mayor probabilidad en las proximidades del núcleo atómico como consecuencia de pequeñas desviaciones de la partícula incidente, ocasionadas por las cargas eléctricas del núcleo.



Ionización:

Este proceso se da en los choques de la partícula con los electrones atómicos. Si la energía transferida es superior a la energía de enlace del electrón colisionado, éste abandona el átomo y en consecuencia se crea un ión positivo.

Durante la ionización, a lo largo de la trayectoria de la partícula, se produce un cierto número de pares ión – electrón, que en condiciones normales tienden a recombinarse, estableciéndose así una neutralidad eléctrica del medio absorbente.

Se pueden distinguir dos tipos de ionización:

Ionización primaria que es la ionización originada por la transferencia de la energía de la partícula cargada a los electrones atómicos.

Ionización secundaria que es la ionización generada por electrones producidos en la ionización primaria, con energía suficiente para producir a su vez, nuevas ionizaciones en el medio.

Teniendo en cuenta los dos procesos de ionización que se producen, se define la ionización total como la producida por una partícula cargada en su paso a través de la materia y es igual al número total de pares ión – electrón producidos por ionización primaria y secundaria a lo largo de su trayectoria.

Recibe el nombre de ionización específica el número de pares ión – electrón producidos por la partícula incidente, por unidad de recorrido en el medio material. La ionización específica varía a lo largo del recorrido de la partícula.

Excitación:

El proceso de excitación se da si durante la colisión de la partícula incidente con un electrón atómico la energía transferida no es suficiente para producir ionización. En ese caso, el electrón no puede ser expulsado del átomo, pero sí puede ser promovido a una órbita de mayor energía. En esta situación el átomo no es estable y tiende a volver a su estado inicial, el electrón excitado tiende a caer a las capas más profundas, produciéndose energía en forma de radiación electromagnética.

Disociación:

El fenómeno de disociación se produce cuando la energía cedida a una molécula por una partícula alcanza un valor crítico. Este proceso consiste en la ruptura de enlaces químicos moleculares y produce transformaciones químicas en las sustancias irradiadas.

Radiación de frenado:

La radiación de frenado, la partícula incidente se frena o se desvía perdiendo energía cinética con cada colisión. Al desacelerarse, emiten radiación de frenado, también conocida como *Bremsstrahlung*, de naturaleza electromagnética.

Poder de frenado:

Cuando una partícula cargada atraviesa un medio material, va perdiendo su energía en colisiones sucesivas, principalmente en procesos de excitación e ionización de los átomos del medio. En algunos casos se producen colisiones radiativas, emitiéndose radiación de frenado.

Generalmente, la partícula incidente sólo pierde una pequeña fracción de energía en cada colisión debido a que la energía media de excitación e ionización de los átomos del medio es pequeña en comparación con ésta. Por otro lado, el número de interacciones por unidad de recorrido es bastante elevado para una partícula cargada, debido a la elevada densidad electrónica del medio. Como consecuencia de lo anteriormente expuesto, se puede considerar que la pérdida de energía a lo largo del recorrido de una partícula cargada se produce de forma continua. En ciertas condiciones, después de recorrer una distancia dada, la partícula se detendrá.

Esta pérdida de energía se puede describir de una forma cuantitativa mediante la magnitud denominada como poder de frenado S , o pérdida lineal de energía, que se define como la pérdida de energía de la partícula por unidad de longitud de su recorrido en el medio.

$$S(E) = -\frac{dE}{dx}$$

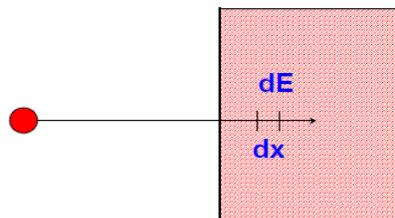


Figura 12: Poder de frenado

siendo dE la pérdida de energía que experimenta la partícula incidente al recorrer una distancia dx en el medio.

Las colisiones inelásticas y radiativas se pueden dar simultáneamente, por lo que el poder de frenado tendrá dos componentes distintas correspondientes a cada tipo de colisión:

$$S(E) = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{ionización/excitación}} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{radiación}}$$

Solamente la energía perdida por excitación e ionización es transferida al medio, por ello se define la transferencia lineal de energía L, que se denomina LET, como la energía transferida al medio por la partícula por unidad de longitud de su recorrido:

$$L = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{ionización/excitación}}$$

Alcance:

El alcance de una partícula en interacción con un medio material es la máxima distancia de penetración en el medio absorbente. Una forma de expresarlo es en función del poder de frenado, de la forma:

$$R = \int_0^E dx = \int_0^E \frac{1}{S(E)} dE$$

En el caso de partículas pesadas, el alcance es igual a la longitud de la trayectoria que describe la partícula, ya que esta es prácticamente rectilínea. Por el contrario, en el caso de los electrones, la trayectoria es muy errática, por lo que el alcance es inferior a la longitud de la trayectoria.

Si las interacciones de todas las partículas de un haz colimado fueran idénticas, al representar el número de partículas que atraviesan un espesor de absorbente, todas las partículas tendrían la misma penetración, obteniéndose una distribución rectangular. Por lo tanto, el valor de R_0 correspondería al alcance en el medio material dado. Sin embargo, como las interacciones de cada una de las partículas son independientes, se observan fluctuaciones debidas a pérdidas de energía, que producen que la distribución real concluya en un tramo descendente con un punto de inflexión.

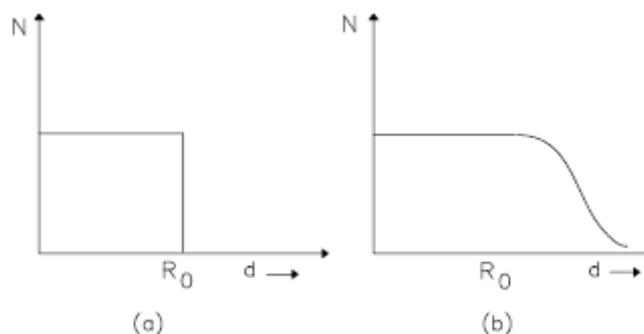


Figura 13: Alcance

2.2.4. Interacción de neutrones con la materia

El principal mecanismo de interacción de los neutrones con la materia es por colisiones directas con los núcleos; ya que como no tienen carga, no producen ionización ni radiación de frenado.

Generalmente, los neutrones pierden su energía debido a colisiones elásticas con los núcleos. Una parte de su energía es transferida a los núcleos de la materia en forma de energía cinética. La disminución de velocidad en los neutrones conduce, generalmente, a una situación de equilibrio termodinámico entre éstos y los núcleos del medio ambiente, y a partir de ese momento, los neutrones son capturados emitiendo una partícula cargada o un fotón gamma.

La atenuación de un haz de neutrones al atravesar la materia es consecuencia de diferentes procesos, cada uno de ellos caracterizados por su sección eficaz. Así, la sección eficaz total es la suma de las secciones eficaces de los distintos procesos que intervienen, que se pueden clasificar principalmente en dos grupos teniendo en cuenta la absorción del neutrón:

$$\sigma_t = \sigma_{\text{absorción}} + \sigma_{\text{dispersión}}$$

Dependiendo de la energía del neutrón incidente, los procesos que dan cuando un neutrón interactúa con un medio material son, principalmente:

Dispersión elástica X(n,n)X:

La dispersión elástica es un proceso de interacción que se puede dar a cualquier energía del neutrón incidente. El neutrón incidente cede una parte de su energía cinética a los núcleos del medio, produciéndose un retroceso del núcleo que queda en un estado estable.

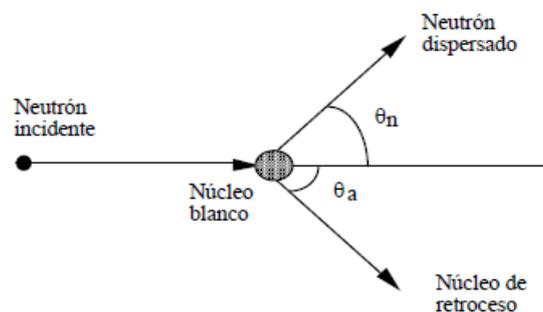


Figura 14: Dispersión elástica de neutrones



La energía del neutrón incidente y la cedida al núcleo se relacionan de la forma:

$$E_a = \alpha E_n \cos^2 \theta_a$$

Siendo E_n la energía del neutrón incidente, E_a la energía cedida al núcleo de retroceso y θ_a el ángulo de difusión del núcleo de retroceso; y $\alpha = \frac{4m_n m_a}{(m_n + m_a)^2}$ con m_n la masa del neutrón y m_a la masa del núcleo de retroceso.

Dispersión inelástica $X(n,n)X^*$:

En la dispersión inelástica el neutrón incidente entrega una cantidad tal de energía que, además de convertirse en energía cinética del núcleo, lo deja en un estado excitado. Desde ese estado excitado, el núcleo vuelve a su estado fundamental emitiendo fotones. Para que ocurra dispersión inelástica, el neutrón incidente debe tener una cantidad de energía suficiente como para excitar al núcleo; para núcleos ligeros existe una energía umbral entre 0.5 y 5 MeV. Por debajo de estos valores de energías, sólo pueden ocurrir dispersiones elásticas.

Captura radiativa $X^A(n,\gamma)X^{A+1}$:

En este tipo de reacción, el neutrón es capturado por el núcleo, formándose un núcleo compuesto de número másico ($A+1$) en estado excitado. Posteriormente, el núcleo regresa a su estado fundamental emitiendo radiación γ . Este proceso de absorción es más probable a bajas energías.

Reacciones de captura:

estas reacciones son más conocidas como (n,p) t (n,α) . En general, estas reacciones son endoenergéticas, por lo que el neutrón incidente debe aportar la energía suficiente para vencer la energía de enlace de la partícula cargada en el núcleo compuesto que la emite.

Fisión:

los neutrones dan lugar a la formación de un núcleo compuesto al interactuar con algunos isótopos del Torio (Th), Uranio (U), Neptunio (Np), Plutonio (Pu) y actínidos pesados. A continuación, dicho núcleo se fracciona en dos fragmentos de masas parecidas y uno o más neutrones instantáneos.



Los fragmentos de fisión poseen un exceso de neutrones que expulsan en parte. Estos neutrones expulsados por los fragmentos de fisión se denominan neutrones inmediatos. Los precursores excitados se desexcitan emitiendo fotones gamma y se convierten en los precursores que tiene una relación N/Z superior a la correspondiente a la estabilidad. Debido a esto se desintegran por emisión beta, convirtiéndose en los padres de una cadena radiactiva. Los productos de fisión de la cadena también producen emisión espontánea de neutrones, llamados neutrones retardados o diferidos.

2.3. Magnitudes radiológicas de uso en radioterapia

Para caracterizar de forma cuantitativa y precisa las radiaciones ionizantes y sus posibles efectos es necesario disponer de un conjunto de magnitudes con sus correspondientes unidades.

En 1925 se creó la *Comisión Internacional de Unidades y Medidas de la Radiación* (ICRU), que se encarga de la definición formal de las magnitudes y unidades radiológicas, así como de desarrollar recomendaciones internacionalmente aceptables acerca del uso de dichas magnitudes y los métodos adecuados de medida. En los informes ICRU 60 e ICRU 51 se pueden encontrar definiciones formales y descripciones completas de las magnitudes fundamentales utilizadas en dosimetría de radiaciones y en protección radiológica. En la legislación española, las definiciones de las distintas magnitudes se encuentran en el Anexo I del Real Decreto 783/2001, por el que se aprueba el Reglamento sobre protección sanitaria contra radiaciones ionizantes. Tras la reciente publicación de las nuevas recomendaciones de ICRP (ICRP 103) se espera la aparición de un nuevo Real Decreto con ligeras modificaciones relacionadas con los límites de dosis recibidos.

Las magnitudes radiológicas se pueden clasificar en cinco categorías:

Radiometría: trata con magnitudes asociadas a un campo de radiación. Son: cantidad (fluencia de partícula) y calidad (distribución espacial) de un haz de radiación.

Coefficientes de interacción: trata con magnitudes asociadas a la interacción de la radiación con la materia. Permiten relacionar las magnitudes radiométricas con las magnitudes dosimétricas. Son: atenuación, absorción, etc...

Dosimetría: Trata con magnitudes relacionadas con la medida de la energía absorbida y de su distribución. Se conciben como una medida física que se correlaciona con los efectos reales o potenciales de la radiación.



Radiactividad: Trata de las magnitudes asociadas con el campo de radiación producido por las sustancias radiactivas.

Radioprotección: Trata las magnitudes que están relacionadas con el efecto biológico de las magnitudes dosimétricas, y que atienden tanto al tipo de radiación como a la naturaleza del medio irradiado.

Magnitudes radiométricas

Estas magnitudes se emplean en metrología y dosimetría de radiaciones para caracterizar el campo de radiación y su interacción con la materia. En el caso de los neutrones, se pueden clasificar en función de su energía cinética y ángulo de emisión con respecto a una fuente.

Las principales magnitudes utilizadas para caracterizar un campo de radiación neutrónica son:

Fluencia neutrónica

La fluencia de neutrones Φ se define como el cociente entre dN y da :

$$\Phi = \frac{dN}{da}$$

siendo dN el número de partículas que atraviesan una esfera de sección recta da centrada en un punto.

Esta magnitud se expresa en m^{-2} .

La tasa de fluencia neutrónica se define como: $\dot{\Phi} = \frac{d\Phi}{dt}$

Siendo $d\Phi$ el incremento de fluencia neutrónica durante el intervalo de tiempo dt . La unidad en el SI es $m^{-2} \cdot s$

Distribución espectral de fluencia neutrónica

La distribución espectral de fluencia neutrónica Φ_E se define la variación de fluencia neutrónica en un punto con un intervalo de energía:

$$\Phi_E = \frac{d\Phi}{dE}$$

Siendo $d\Phi$ la variación de fluencia de neutrones y dE el intervalo de energía comprendido entre E y $E+dE$.

Esta magnitud se expresa en $J^{-1}m^{-2}$ o en $MeV^{-1}cm^{-2}$



Ángulo de emisión

Se define distribución angular de fluencia neutrónica como el cociente entre la variación de fluencia neutrónica en un punto y un intervalo de ángulo

$$\Omega_E = \frac{d\Phi}{d\varphi}$$

Para la caracterización de la emisión de una fuente de neutrones, las principales magnitudes utilizadas son:

Emisión neutrónica instantánea B

Se define emisión neutrónica instantánea como el cociente

$$B = \frac{dN^*}{dt}$$

Siendo dN^* la esperanza matemática del número de neutrones emitidos por la fuente en un intervalo de tiempo dt . La unidad de dicha magnitud en el SI es s^{-1} .

Emisión angular B_Ω

La emisión angular se define como el cociente entre el número de neutrones que se propagan en una dirección dada dentro de un ángulo sólido

$$B_\Omega = \frac{dB}{d\Omega}$$

Se expresa en $s^{-1}sr^{-1}$

Distribución espectral de emisión de una fuente de neutrones $B_E(E)$

Se define como el cociente entre la variación de la emisión de la fuente en el intervalo de energía comprendido entre E y $E+dE$

$$B_E(E) = \frac{dB}{dE}$$

Se expresa en $J^{-1}s^{-1}$ o $MeV^{-1}s^{-1}$



Magnitudes dosimétricas

Exposición

La exposición se emplea para medir la capacidad de la radiación para producir iones en el aire. Esta

magnitud se define como: $X = \frac{dQ}{dm}$

Siendo dQ el valor absoluto de la carga total de todos los iones de un mismo signo producidos en aire, cuando todos los electrones liberados por los fotones absorbidos en la masa dm sean detenidos completamente en el aire.

La definición de la exposición implica una serie de consideraciones y restricciones:

- Es una magnitud definida exclusivamente para un haz o campo de fotones en aire.
- El efecto medido es la ionización de aire cuando la magnitud de importancia es la energía absorbida.

Antiguamente, la unidad de exposición era el Roentgen. Sin embargo, hoy en día esa unidad está obsoleta y ha sido reemplazada por el culombio por kilogramo, C/kg, que es la unidad de exposición en el SI

$$1 \text{ C/kg} = 3876 \text{ R}$$

$$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C/kg}$$

La tasa de exposición se define como: $\dot{X} = \frac{dX}{dt}$

Siendo dX el incremento de exposición durante el intervalo de tiempo dt. La unidad en el SI es el C/kg*s

Kerma

El kerma es una magnitud característica de un campo de partículas no cargadas (neutrones y fotones).

Se define como: $K = \frac{dE_{tr}}{dm}$

Siendo dE_{tr} la suma de todas las energías cinéticas iniciales de todas las partículas ionizantes cargadas liberadas por las partículas ionizantes no cargadas, en un elemento de volumen de aire de masa dm.

La unidad del Kerma en el SI es el Gray (Gy) que equivale a un julio/kilogramo

$$1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg}$$

La unidad antigua del kerma es el rad, cuya relación con la actual unidad del SI es:

$$1 \text{ rad} = 10^{-2} \text{ J/kg} = 1 \text{ cGy}$$



La tasa de kerma se define como: $\dot{K} = \frac{dK}{dt}$

Siendo dK la variación de kerma en el intervalo de tiempo dt. La unidad en el SI es el Gy/s

Dosis absorbida

La magnitud de la dosis absorbida resulta válida para cualquier tipo de radiación, y requiere especificar el material en el que se cede la energía. La dosis absorbida, D, en un material dado se define como:

$$D = \frac{\overline{d\varepsilon}}{dm}$$

Siendo $\overline{d\varepsilon}$ la energía media impartida por las radiaciones ionizantes en un elemento de volumen y dm la masa correspondiente a dicho elemento de volumen del medio atravesado.

La unidad de dosis absorbida en el SI es el Gy

La energía impartida ε por la radiación ionizante en un volumen de materia del medio atravesado viene dada por la expresión: $\varepsilon = \sum \varepsilon_{in} - \sum \varepsilon_{ex} + \sum Q$

Con:

- $\sum \varepsilon_{in}$ la suma de las energías de todas las partículas ionizantes que entran en el volumen considerado.
- $\sum \varepsilon_{ex}$ la suma de las energías de todas las partículas ionizantes que salen del volumen considerado.
- $\sum Q$ la suma algebraica de todas las energías absorbidas o cedidas en el interior del volumen considerado, por reacciones nucleares u otro tipo de transformación.

La tasa de dosis absorbida \dot{D} se define como: $\dot{D} = dD/dt$

Donde dD es el incremento de dosis absorbida durante el intervalo de tiempo dt, y se expresa en Gy/s

Magnitudes de radioprotección

Dosis equivalente, H

Esta magnitud tiene en cuenta la distinta eficacia biológica relativa de los diferentes tipos de radiación ionizante en los niveles bajos de exposición. Se define como:

$$H = Q \cdot D$$

Siendo D la dosis absorbida y Q el factor de calidad en ese punto, que se introduce para cuantificar la mayor o menor eficacia biológica de las partículas cargadas generadas en el proceso de absorción de

energía. De acuerdo con los estudios realizados, ICRP recomienda una relación entre el factor de calidad Q y la transferencia lineal de energía, $L_{\infty}=L$, para un material como el agua.

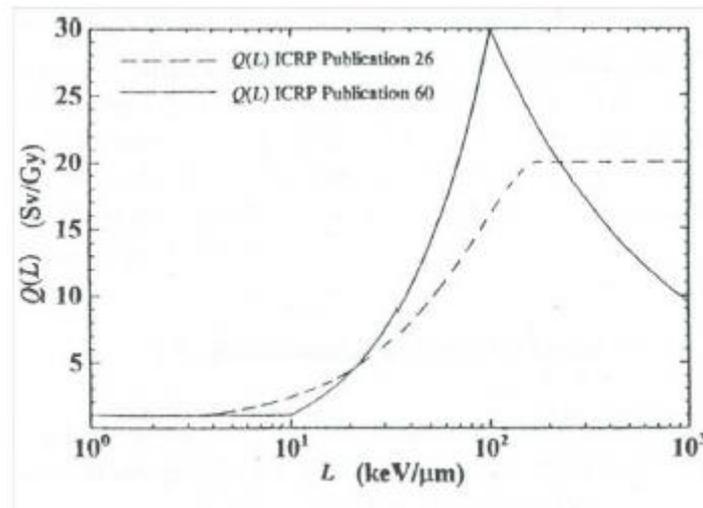


Figura 15: Factor de calidad, Q (ICRP 60, 1991)

La unidad en el SI es el sievert (Sv) que equivale a un J/Kg.

La tasa de equivalente de dosis se define como: $\dot{H} = \frac{dH}{dt}$ donde dH es el incremento de equivalente de dosis durante el intervalo del tiempo dt . Se expresa en Sv/s

Dosis equivalente en un órgano, H_T

La probabilidad de sufrir efectos estocásticos sobre la salud debidos a radiaciones ionizantes, depende de la dosis absorbida y del tipo y energía de la radiación considerada. Para tener en cuenta este efecto, se definen los “factores ponderados de radiación”.

La dosis equivalente en un órgano o tejido T debida a la radiación R , $H_{T,R}$ se define como:

$$H_{T,R} = w_R D_{T,R}$$

Siendo $D_{T,R}$ la dosis absorbida media para la radiación R en el órgano o tejido T , y w_R es el factor de ponderación para la radiación R .

Si existen radiaciones y energías con distintos valores de w_R , la dosis equivalente en el órgano o tejido T , H_T , es:

$$H_T = \sum_R w_R D_{T,R}$$

La unidad de dosis equivalente en un órgano en el SI es el sievert (Sv) que equivale a un J/Kg.

Tipo y rango de energía		Factor de ponderación (w_R)
Fotones, todas las energías		1
Electrones y muones, todas las energías		1
Neutrones	Energía inferior a 10 keV	5
	Energía entre 10 keV a 100 keV	10
	Energía entre 100 keV a 2 MeV	20
	Energía entre 2 MeV a 20 MeV	10
	Energía superior a 20 MeV	5
Protones, salvo retroceso, de energía 2 MeV		5
Partículas alfa, fragmentos de fisión, núcleos pesados		20

Tabla 1: Factores de ponderación de la radiación recomendados, w_R

Dosis Efectiva, E

Los órganos y los tejidos del cuerpo humano no son todos igual de radiosensibles. Dependiendo de cada órgano, la probabilidad de aparición de efectos estocásticos es distinta. Por ello, la magnitud dosis efectiva tiene en cuenta la combinación de diferentes dosis en diferentes órganos como consecuencia de una irradiación del cuerpo entero.

Se define como: $E = \sum_T w_T H_T = \sum_{T,R} w_T w_R D_{T,R}$

Donde H_T es la dosis equivalente en el órgano o tejido T y w_T es el factor de ponderación para dicho órgano.

Por otro lado, la suma de los factores de ponderación para los distintos órganos del cuerpo humano debe ser la unidad: $\sum_T w_T = 1$



Tejido u órgano	W_T
Gónadas	0.20
Médula ósea (roja)	0.12
Colon	0.12
Pulmón	0.12
Estómago	0.12
Vejiga	0.05
Mama	0.05
Hígado	0.05
Esófago	0.05
Tiroides	0.05
Piel	0.01
Superficie de los huesos	0.01
Resto del organismo	0.05

Tabla 2: Factores de ponderación de los tejidos, w_T

Dosis integral (Energía Impartida)

La energía total impartida por la radiación al interactuar con el material, se podrá calcular como la suma de los productos de las dosis en cada elemento de masa por los valores de esos elementos de masa. Si la dosis es constante en todo el material, la dosis integrada es el producto de la dosis por la masa irradiada.

La dosis integral, o energía impartida, se mide en Julios (J)



Dosis en órganos

Esta magnitud permite estimar con precisión el riesgo que tendrá el paciente como consecuencia de la irradiación.

Estas dosis sólo se pueden medir directamente en órganos superficiales como mama, tiroides o testículos. Para la medida directa de dosis en órganos profundos, hay que recurrir al uso de maniqués que simulan el cuerpo humano y sobre los que se hace una reproducción de la exploración radiológica con el mismo protocolo al que se utiliza en pacientes.

2.4. Los neutrones en los tratamientos. Problemática asociada

En una instalación médica de aceleración de electrones, los electrones y los fotones (rayos X) son las partículas que se producen intencionadamente con energías altas (≈ 20 MeV) con el fin de destruir las células cancerosas, lo que produce el efecto terapéutico deseado. A dichas energías, estas partículas inducen reacciones nucleares en las cuales se producen los neutrones y los radioisótopos. Estos neutrones y radioisótopos no son deseables en las terapias, ya que son una fuente adicional de dosis para los pacientes, para el personal médico. Las reacciones que se inducen, principalmente, son reacciones electronucleares ($e, e'n$) y fotonucleares (γ, n). Estas reacciones se llevan a cabo cuando las partículas impactan con los componentes del cabezal del acelerador y en el aire. Las principales fuentes de producción de neutrones, en el caso de un haz de fotones, son los colimadores y el blanco en el cual los electrones se convierten en rayos X. En el caso del haz de electrones, la mayoría de los neutrones son producidos en el sistema colimador y en las láminas de dispersión. Los neutrones que se generan en estas reacciones tienen un alto espectro de energía, y la mayoría de ellos alcanzan las paredes de hormigón, el techo y el suelo de la instalación de radioterapia, pudiendo escapar del hormigón y volver al aire, debido a que disminuye su velocidad al colisionar elásticamente con los núcleos de hidrogeno del material. De esta forma, contribuyen a la distribución específica de energía de los neutrones dentro de la instalación de radioterapia.

Los fotones inducen reacciones fotonucleares, que en consecuencia, generan neutrones en el rango de energía térmica y de resonancia, produciendo isótopos. El campo de neutrones es prácticamente uniforme en toda la sala del acelerador. Así, los radioisótopos originados de las reacciones neutrónicas pueden ser producidos en los componentes y accesorios del acelerador, así como en la pared, techo y suelo de la instalación. Además, los neutrones pueden inducir reacciones de captura simple en la puerta de entrada de la instalación. De las reacciones de captura simple, se emiten rayos γ . Por lo



tanto, la radiación γ puede aparecer cerca de la puerta de la instalación de radioterapia en la sala de operación durante la emisión de haces terapéuticos de alta energía.

Características de reacciones fotonucleares, electronucleares y captura simple

- *Reacciones fotonucleares (γ, n)*

Los rayos gamma de altas energías (energías superiores a los 10 MeV) se producen principalmente en los aceleradores; comúnmente son denominados rayos X. La radiación gamma producida en un acelerador está caracterizada por un espectro de energía continuo, correspondiendo la energía máxima del espectro a la máxima energía de los electrones al colisionar con un blanco. Esta radiación puede inducir reacciones fotonucleares (γ, n), ($\gamma, 2n$) y (γ, p). En estas interacciones los rayos gamma ceden su energía a los núcleos, por lo que la energía emitida debe ser al menos tan grande como la energía de enlace de un neutrón o protón con el fin de expulsarlo del núcleo. De este modo, en una reacción fotonuclear, un núcleo se transforma en otro con un número másico menor. Para núcleos pesados, en una reacción fotonuclear, se pueden producir dos neutrones ($\gamma, 2n$). La separación de estos dos neutrones necesita que el fotón incidente sea más energético; por lo que el umbral de energía de la producción de dos neutrones está cerca del extremo final del espectro de haz de rayos X de alta energía.

La sección eficaz de las reacciones fotonucleares depende del número atómico; su valor para núcleos ligeros es de varios milibarns, y para núcleos pesados, de cientos de milibarns. Además, la sección eficaz máxima corresponde, aproximadamente, a una energía de 22 MeV para núcleos ligeros y se desplaza, aproximadamente, a 12 MeV al incrementar el número atómico.

- *Reacciones electronucleares ($e, e'n$)*

Los electrones con energías de varios MeV o superiores pueden inducir reacciones electronucleares ($e, e'n$), que son dispersiones inelásticas de un electrón en el campo de fuerzas del núcleo atómico. El electrón cede parte de su energía al núcleo, que es usada parcialmente para separar un neutrón del núcleo y a su vez, se convierte en energía cinética del neutrón separado. La sección eficaz de las reacciones electronucleares aumenta al aumentar la energía de los electrones. Las secciones eficaces de las reacciones electronucleares son aproximadamente tres órdenes de magnitud menores que las de las reacciones fotonucleares en el rango de energía de los haces terapéuticos



- *Reacciones de captura simple (n,γ)*

Los neutrones térmicos y de resonancia pueden ser capturados por un núcleo atómico durante la interacción entre un neutrón y un núcleo, emitiéndose un fotón. La energía del fotón E_γ es igual a $\Delta m \cdot c^2$, donde $\Delta m = M_{\text{neut}} + M_{\text{nuc}} - M'_{\text{nuc}}$ es la diferencia entre la suma de las masas del neutrón M_{neut} y del núcleo M_{nuc} antes de captura neutrónica y la masa del núcleo M'_{nuc} después de la captura neutrónica. Por tanto, E_γ es llamada energía de enlace de un neutrón. Para casi todos los isótopos, la reacción (n,γ) puede ser inducida por neutrones térmicos. Las reacciones de captura simple también pueden ocurrir en el rango de energía del neutrón de resonancia donde la sección eficaz de las reacciones de captura neutrónica tiene picos altos (picos de resonancia)

2.5. Estado del arte

Durante los inicios de la radioterapia muchos elementos desconocidos fueron objeto de estudio intensivo, dando como resultado que, a mediados del siglo pasado, ya se dispusiera de sistemas para la dosimetría, de herramientas para la planificación a mano del tratamiento en dos dimensiones, de haces de MV básicos procedentes de irradiadores de cobalto y de los primeros aceleradores lineales. A estos primeros aceleradores lineales se le añadía el uso de tomografía convencional, que ampliaba la información aportada por la radiología al revelar la disposición de los tejidos en cortes transversales, permitiendo evaluar la atenuación de los haces de irradiación al atravesar los tejidos anatómicos.

Años después, en 1972, se incorporó el uso médico de la tomografía computarizada; incorporándose el uso sistemático de dicha práctica a la planificación de la radioterapia. Ya en los años 80, cuando la radioterapia conformada tridimensional (RTC3D) comenzaba a ser objeto de estudio y sistemático y a estandarizarse para los tratamientos curativos, se empezó a realizar un uso sistemático de la tomografía computarizada para obtener información en tres dimensiones del tumor y de su relación con las estructuras adyacentes, procesable con programas informáticos específicos. Es entonces cuando se empieza a planificar el tratamiento con la misma intención con la que se administra: para distribuir la dosis de irradiación homogéneamente en un volumen blanco; y diseñar haces de radiación para obtener distribuciones de dosis conformadas, es decir, con la forma del volumen blanco.

Desde finales del siglo XX hasta actualmente, se desarrolla la radioterapia con intensidad modulada (IMRT). El desarrollo de esta técnica está ligado, desde el punto de vista técnico, al de los colimadores multiláminas, ideados para sustituir a los bloques de colimación secundaria que colocados en la salida



del haz sirven para conformar la sección transversal del mismo a la forma del volumen blanco en ese plano. Con la incorporación de los colimadores multiláminas a los aceleradores lineales se ha podido disponer automáticamente de haces irregulares para avanzar en la radioterapia conformada tridimensional.

La radioterapia con intensidad modulada permite el máximo grado de conformación entre la dosis administrada y el volumen blanco. Es considerada el desarrollo lógico para obtener la máxima optimización en la radioterapia conformada tridimensional: modular o ajustar la intensidad de la dosis prescrita para un volumen determinado, atendiendo a las variables que presenta el tejido que debe atravesar cada haz de irradiación. Dicha conformación en tres dimensiones para cada uno de los haces incidentes, permite ajustar las dosis de irradiación a los límites cóncavos del volumen blanco, preservando tejidos sensibles que se acercan al centro de la zona a tratar.

Para realizar un tratamiento de radioterapia con intensidad modulada en aceleradores lineales, el colimador multiláminas configura en cada haz las divisiones necesarias y a la forma que convenga para conseguir los objetivos del tratamiento. Esto lo hace de manera estática o dinámica.

También se han desarrollado para radioterapia con intensidad modulada procedimientos alternativos no ligados a los aceleradores lineales clásicos. Se trata de la tomoterapia helicoidal, ideal para la irradiación corporal total, y el *Cyberknife* creado para seguir con el haz de irradiación, por medio de un dispositivo de obtención de imágenes en feedback con la emisión de radiación, los cambios de posición durante el tratamiento.

El siguiente paso en la optimización de la precisión en el tratamiento con radiación es controlar y medir la movilidad del blanco durante el tratamiento. El desafío ahora y en el futuro es el desarrollo de la radioterapia guiada por imagen, concretamente la radioterapia con intensidad modulada guiada por imagen. Actualmente, se utilizan y se investigan diversos medios técnicos para asegurar la posición del blanco antes de cada fracción y durante la administración del tratamiento; como la utilización de TAC en cuatro dimensiones para la planificación del tratamiento, dispositivos electrónicos en los aceleradores lineales para obtener imágenes planas y en tres dimensiones, y diferentes métodos para cuantificar el desplazamiento del volumen blanco y de los órganos de riesgo, entre otros.

Otro tipo de radioterapia menos común en el tratamiento de pacientes es la radioterapia con partículas cargadas, protones o iones pesados. Las instalaciones que proporcionan este tipo de terapia y el número de pacientes a los que se ha tratado es mínimo frente a la radioterapia convencional; a pesar de que las distribuciones de dosis que se obtienen con iones son mejores que las obtenidas con fotones.



Las técnicas de alta precisión en la administración de la irradiación que se acaban de analizar no resultan sin soluciones para disponer de imágenes en las unidades de tratamiento, tanto en 2D como en 3D. El perfeccionamiento futuro de la radioterapia pasa por la producción de mejores imágenes para guiar los tratamientos en tiempo real.

3. Equipos de medida de neutrones

3.1. Tipos de detectores.

Los neutrones carecen de carga eléctrica, lo que hace que su detección sea más complicada. Como no tiene carga eléctrica no ionizan directamente la materia, y al no ser desviados por los campos eléctricos de los núcleos o electrones, son capaces de atravesar muchos centímetros de materia sin sufrir interacciones, y siendo, por tanto, invisibles a los detectores.

Para que un detector de cualquier tipo sea útil para detectar neutrones, debe ser diseñado de manera que en su interior se produzcan abundantes dispersiones o reacciones nucleares. Así, se mide la ionización secundaria producida por los núcleos contra los que los neutrones han colisionado. Los neutrones rápidos generalmente son detectados por las dispersiones que producen; y los lentos, por las reacciones nucleares.

La dosimetría de neutrones se basa fundamentalmente en el empleo de detectores de neutrones térmicos (neutrones de energías menores a 0.5 eV) asociados a detectores de ionización o de centelleo, por lo que será necesario emplear un medio moderador de tamaño y geometría adecuados para disminuir la velocidad de los neutrones con mayores energías. La máxima transferencia media de energía por colisión tendrá lugar al chocar un neutrón con un núcleo de hidrógeno, debido a que la energía media cedida por el neutrón al núcleo es mayor cuanto más semejantes sean las partículas en masa. Dicho neutrón se convierte, tras la colisión, en un protón de retroceso. Por dicha razón, los detectores se rodean de materiales hidrogenados, resultando que los monitores de neutrones para la vigilancia de área suelen ser cilindros o esferas que mantienen la isotropía requerida pero que resultan voluminosos.



Figura 16: Detectores de neutrones



Los detectores más comunes de neutrones lentos son contadores proporcionales y detectores de centelleo. Los detectores de cámara de ionización contienen en su interior una proporción alta de gas trifluoruro de boro (BF_3) enriquecido con un isótopo de boro (^{10}B) para provocar las reacciones. También suelen usarse detectores de gas que contienen helio (^3He) para provocar reacciones en cadena. Los detectores de centelleo, contienen cristales de centelleo de yoduro de litio (LiI) enriquecido con ^6Li para provocar las reacciones que darán lugar a la detección de neutrones.

3.2. LiI (Eu)

3.2.1. Bonner sphere/reconstrucción de espectros

El espectrómetro Bonner sphere, llamado también sistema de esferas Bonner (BSS), es un dispositivo usado para determinar el espectro de energía de un haz de neutrones. Desde que el método se describió por primera vez en 1960 por Bramblett, Ewing y Tom W. Bonner, ha sido el sistema más utilizado en las mediciones de neutrones relacionadas con la protección radiológica, ya que es el único dispositivo que puede detectar neutrones de un amplio rango de energía, desde neutrones térmicos hasta neutrones de cientos de MeV.

Este espectrómetro se basa en la utilización de un detector de neutrones térmicos incrustado en esferas moderadoras de polietileno de diferentes diámetros, y la electrónica asociada en el caso de un detector activo como $^{10}\text{BF}_3$ o ^3He , o centelleadores como $^6\text{LiI}(\text{Eu})$. Una de las principales ventajas de este sistema es la isotropía de la respuesta a los neutrones, que resulta de su forma simétrica esférica.

Las esferas del espectrómetro Bonner Sphere actúan como moderadores de los neutrones de mayor energía y termalizan los neutrones en un grado que depende de la energía inicial y del diámetro de la esfera. Los neutrones rápidos que llegan al sistema se desaceleran dentro del moderador, llegando al detector en estado térmico. Sin embargo, los neutrones que inicialmente son térmicos son parcialmente absorbidos dentro del moderador y no alcanzan el detector de centelleo. Aumentando el diámetro de la esfera moderadora, desplazamos el pico de sensibilidad del sistema hacia energías más altas, y de esta manera, es posible realizar una espectrometría de neutrones.

A pesar de su baja resolución, el sistema de esferas Bonner presenta un buen rendimiento para fines de protección radiológica. Sin embargo, están limitados en el caso de detectores activos en radiación ambiental pulsada o de alta intensidad debido a la acumulación de tiempos muertos. Ante esta limitación, la mejor solución es el uso de detectores pasivos.



4. Descripción del código Monte Carlo MCNP (v.6)

4.1. Qué es una simulación MC

La simulación Monte Carlo es la mejor alternativa disponible en la actualidad para resolver el problema del transporte de la radiación a través de la materia cuando se trata con geometrías complejas, tales como las que se encuentran en las diversas aplicaciones médicas que utilizan radiaciones ionizantes.

Los métodos de simulación Monte Carlo se utilizan en muchos campos de la ciencia y la tecnología, para resolver tipos de problemas muy diversos, desde resolución de ecuaciones diferenciales a la simulación directa de transporte de la radiación, problemas estadísticos o planificación industrial. Estos métodos se pueden emplear en todos aquellos problemas que por sí mismos tienen naturaleza probabilística (transporte de la radiación) o en los que por medio de análisis se convierten en problemas probabilísticos (ecuaciones diferenciales). La base fundamental del método Monte Carlo es el uso de números aleatorios para asignar procesos.

La descripción teórica del transporte de la radiación y su interacción con la materia fue uno de los temas clave de la física del siglo XX. El problema principal consiste en determinar, para una fuente de radiación y unas geometrías dadas, el flujo de partículas en cada punto del espacio y en cada instante de tiempo, el cual servirá para obtener otras magnitudes como la dosis absorbida.

Antes de la aparición de los ordenadores, la resolución de este tipo de problemas venía ligada al estudio de la *ecuación de Boltzmann*, que describe el balance entre flujos de partículas entrantes y salientes de un volumen infinitesimal.

El desarrollo de las técnicas basadas en métodos de Monte Carlo debe su origen a los trabajos realizados en los laboratorios de Los Álamos y se remonta a alrededor de 1944. El término *Monte Carlo* fue adoptado como nombre de código en las simulaciones de la difusión de neutrones realizadas en dichos laboratorios durante la Segunda Guerra Mundial, como parte del trabajo implementado para desarrollar armas nucleares.

En el caso que nos ocupa, la Radioterapia, los números aleatorios se utilizan para simular la *historia* o trayectoria de un fotón o electrón y de todas las partículas secundarias generadas por estos al incidir en cualquier medio material, por lo que se puede hablar de transporte acoplado de fotones y electrones, ya que independientemente de que el haz calculado sea de un tipo u otro en todo momento se ponen en juego procesos que requieren simular los dos tipos de partículas.



La simulación de la historia de una partícula (electrón, fotón, positrón) que incide en un medio viene determinada por la geometría y composición del medio, el estado inicial de la partícula (tipo, posición y ángulos de incidencia y energía) y la selección aleatoria de los diferentes tipos de procesos físicos que esa partícula pueda sufrir en función de la distribución de probabilidad que gobierna cada uno de esos procesos.

Si la partícula incidente es un fotón la simulación se realiza paso a paso y se tienen en cuenta los siguientes parámetros:

1. Distancia hasta la próxima interacción. En cada paso el fotón es transportado en su dirección incidente hasta una distancia aleatoria donde sufrirá la siguiente interacción. La probabilidad de elegir una u otra distancia viene determinada por el recorrido libre medio de ese fotón en el medio en cuestión.
2. Tipo de interacción. También en cada paso se decide qué tipo de interacción sufrirá el fotón (dispersión (Rayleigh) coherente, dispersión (Compton) incoherente, efecto fotoeléctrico, producción de pares y tripletes) en función de sus distribuciones de probabilidad que son función de la energía del fotón y de la naturaleza del medio.
3. Nuevo ángulo y energía. En función de la interacción decidida se elige el nuevo ángulo y energía a partir de las distribuciones de probabilidad, función de la interacción, la energía y el medio.
4. Nuevas partículas. Si el suceso genera o pone en movimiento una o más partículas, éstas se añadirán junto con sus datos de energía inicial, posición y ángulo al conjunto de la simulación.

En las últimas décadas gracias al rápido avance en cuanto a la memoria y velocidad de los procesadores, se ha incrementado el uso del Método Monte Carlo en el transporte de la radiación, tanto en aplicaciones médicas como en protección radiológica.

El método Monte Carlo requiere generar una gran cantidad de números aleatorios que reproduzcan probabilidades de cada tipo de interacción con el medio para simular el transporte de cada partícula, con lo que, sin la ayuda de los ordenadores esta tarea sería demasiado extensa e inviable.

En esos métodos, las trayectorias de las partículas se generan reproduciendo aleatoriamente las probabilidades físicas naturales de interacción con medios materiales. Todos los datos físicos que van a determinar el transporte de las partículas estarán en los algoritmos del código usado, de modo que las distintas partículas (fotones, neutrones, partículas alfa, iones, etc.), al atravesar la materia sufren



una serie de interacciones con los átomos que la forman, dando lugar a fenómenos de absorción, dispersión y producción de partículas secundarias. La gran cantidad de números encargados de reproducir las probabilidades de cada tipo de interacción con el medio para simular el transporte de cada partícula, hacen, que sin la ayuda de los ordenadores, esta tarea sea demasiado extensa e inviable.

Actualmente, existe una variedad de códigos específicos basados en Monte Carlo cada uno con sus peculiaridades. A continuación, se muestra una lista de los más comúnmente utilizados, y de cada uno de ellos se mencionan algunas de sus características principales.

Algunos de estos códigos se pueden obtener de manera gratuita a través del *Radiation Safety Information Computational Center (RSICC)* o *Nuclear Energy Agency (NEA)*.

Código	Datos generales
EGS4	<p>Partícula: Fotones, electrones y positrones. Inicialmente para altas partículas.</p> <p>Geometría: elixible, definida por el usuario.</p> <p>Origen: Stanford Linear Accelerator Center. Estados Unidos.</p> <p>Requisitos: Habilidades de programación en FORTRAN o MORTRAN.</p>
ETRAN	<p>Partícula: Fotones, electrones y positrones.</p> <p>Geometría: Mediante combinación de cilindros y láminas paralelas semi-infinitas.</p> <p>Origen: National Institute of Standars and Technology. Estados Unidos.</p> <p>Requisitos: Manejo de archivos de datos de entrada. Interpretación de resultados.</p>
ITS (Compuesto por TIGER, CYLTRAN y ACCEPT)	<p>Partícula: Fotones, electrones y positrones. Métodos de ETRAN.</p> <p>Geometría: Composición mediante láminas paralelas (TIGER), cilindros (CYLTRAN) y cuerpos geométricos elementales (ACCEPT).</p> <p>Origen: Sandia National Laboratory. Estados Unidos.</p> <p>Requisitos: Manejo de archivos de datos de entrada. Interpretación de resultados.</p>

MCNP	<p>Partícula: Neutrones, fotones, electrones y positrones, partículas elementales y núcleos ligeros. Métodos de ETRAN para el transporte de electrones y positrones.</p> <p>Geometría: Flexible, definida por los usuarios mediante superficies y celdas.</p> <p>Origen: Los Álamos National Laboratory. Estados Unidos.</p> <p>Requisitos: Manejo de archivos de entrada de datos. Interpretación de resultados.</p>
PENELOPE	<p>Partícula: Fotones, electrones y positrones.</p> <p>Geometría: Combinación de cilindros semi-infinitos y láminas paralelas.</p> <p>Origen: Universidad de Barcelona. España.</p> <p>Requisitos: Habilidades de programación en FORTRAN 77. Manejo de archivos de datos de entrada mediante el uso de los programas PENCYL y PENSLAB.</p>
GEANT	<p>Partícula: Fotones, electrones (inicialmente altas energías) y partículas elementales.</p> <p>Geometría: Combinación de geometrías básicas.</p> <p>Origen: CERN.</p> <p>Requisitos: Habilidades de programación en C++.</p>

Tabla 3: Códigos Monte Carlo

De entre todos estos códigos para este trabajo se ha escogido el código MCNP en su versión 6 por diversas razones. La primera radica en las capacidades de simulación del código: MCNP emplea una definición de fuente en general mucho más sofisticada que otros códigos Monte Carlo y es mucho más flexible en lo que se refiere a la especificación de la geometría simulada, en especial en esta nueva versión se permite el uso de geometrías CAD malladas para la definición de la geometría. Esto resulta enormemente útil para las simulaciones con geometrías de pacientes reales, que terminan siendo más complicadas de simular en otros códigos. También incorpora la opción de activar o desactivar efectos físicos durante el transporte de partículas y utilizar técnicas de reducción de varianza. Otra razón fundamental es la experiencia acumulada por el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la UPV con el código MCNP; el cual, durante varios años de trabajo, se ha optimizado, paralelizado y estudiado a fondo, proporcionando así una gran capacidad para adaptar las simulaciones del transporte de partículas al campo de la planificación en radioterapia.



El código MCNP (Monte Carlo N-Particle) es un código de transporte de radiación (fotones, neutrones y electrones) basado en el método Monte Carlo, que permite la estimación de magnitudes dosimétricas tales como la corriente, el flujo, la energía depositada o la energía depositada por unidad de masa, normalizadas según el número de historias simuladas. Éste código se originó en *Los Álamos National Laboratory* a partir de la conjunción de diversos códigos de transporte de radiación basados en Monte Carlo. En 1963 salió a la luz el código MCS que solucionaba problemas simples con neutrones, y que se substituyó por el código MCN en 1965, posibilitando así la modelación de geometrías 3D y añadiendo las librerías de secciones eficaces almacenadas en ficheros independientes. Más tarde, en 1973, se originó el código MCNG, que conjugaba el anterior código MCN con el MCG, empleado en el transporte acoplado de neutrones y fotones de altas energías. En 1977 vio la luz la primera versión del código MCNP, que respondía al nombre de Monte Carlo Neutron Photon, constituido por el código MCNG conjugado con el código MCP, que solucionaba problemas de transporte de fotones y neutrones de hasta 1 keV. Desde 1977, el código MCNP ha evolucionado significativamente, dando lugar a un abanico de versiones.

4.2. El MCNP 6

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

En lo referente al diseño de la fuente en el problema, el MCNP proporciona una amplia variedad de recursos que posibilitan una gran cantidad de configuraciones. Resulta también posible describir funciones de probabilidad independientes para cada variable: energía, posición, tiempo, dirección, etc. Así mismo, se pueden utilizar funciones de probabilidad definidas previamente en el código.

Por otro lado, MCNP dispone de librerías de secciones eficaces atómicas y nucleares creadas a partir de los valores existentes en *Evaluated Nuclear Data File (ENDF)*, *Evaluated Nuclear Data Library (ENDL)* y *Activation Library (ACTL)* compilados por Livermore, a los que se suman las evaluaciones del grupo de investigación *Applied Nuclear Science T-2* de Los Álamos. La totalidad de los datos mencionados se encuentra listada en el fichero *XDIR* y puede seleccionarse cada uno de ellos en la ejecución de un caso concreto.



En definitiva, las ventajas del uso de este código son:

1. La relativa facilidad para diseñar modelos arbitrarios en 3D en formato CAD.
2. El uso de librerías de energía continua nuclear y atómica del ENDF.
3. Dispone de una amplia variedad de condiciones de fuente.
4. Dispone de diferentes tipos de *tallies* relacionados con la corriente de la partícula, el flujo de la partícula y la deposición de energía.
5. Pueden resolverse problemas de neutrones, fotones, electrones, acoplado neutrón –fotón y acoplado fotón-electrón.
6. Fácil instalación

De manera resumida, cuando se define el archivo de entrada al código MCNP referente a un problema de fotones, se deben incluir los parámetros siguientes:

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

4.2.1 Librería de Transporte de Fotones: MCPLIB84

El código de Monte Carlo MCNP utiliza por defecto la librería MCPLIB04 para el transporte de fotones basada en la librería EPDL97. 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 para cada elemento.

Actualmente la librería utilizada para el transporte de fotones en MCNP6 es la librería MCPLIB84 que es una versión extendida de la anterior.



4.2.2 Librería de Transporte de Electrones: EL03

La librería EL03 de secciones eficaces y otros datos para electrones se basa en la serie integrada de códigos TIGER (ITS) versión 3.0. El código de Monte Carlo MCNP6 utiliza por defecto la librería EL03 para el transporte de electrones, sustituyendo a la anterior librería EL01. Esta librería es una ampliación de la anterior librería EL01, basada a su vez en los códigos ITS versión 1.0.

MCNP6 incorpora un modelo de transporte para partículas cargadas condensado 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 (hard and soft collisions) 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.

Otro archivo esencial, aparte de las dos librerías mencionadas anteriormente, es el archivo *XSDIR*. En él, se encuentran las rutas de los datos de secciones eficaces, así como tablas de isótopos, pesos atómicos e identificadores de las librerías de secciones eficaces.

4.2.3 Tallies o Registros Dosimétricos en MCNP6

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 su energía.

Existe un número limitado de tipos de *tallies* que en combinación con otras funciones del código facilitan el cálculo de gran cantidad de magnitudes de interés. En particular, el código MCNP6 incluye siete *tallies* diferentes para estimar los resultados durante una simulación.

Cada *tally* en MCNP6 está capacitado para registrar una magnitud distinta en situaciones diversas. De esta forma se clasifican en *tallies* de superficie (*F1*, *F2*), de volumen (*F4*, *F6*, *F7*, *F8*) y puntuales (*F5*). En los primeros, el registro se realiza cada vez que una partícula atraviesa la superficie de control, mientras que los segundos realizan el registro 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.

En la siguiente tabla recoge su designación, la magnitud que contabilizan y las unidades en que se expresa:

Nombre	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:P F6:E	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

Tabla 4: Registros del código MCNP o *tallies*

4.2.4. Tally de flujo

El registro más comúnmente utilizado en el ámbito clínico y por tanto más adecuado para este trabajo es el tally F4. Se trata de un estimador de la longitud de la trayectoria de flujo de una celda. Si se tiene en cuenta que el flujo de una partícula se puede definir como:

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

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 definida como:

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

4.2.5 Tarjeta FMESH

La tarjeta FMESH permite definir una malla (no es la misma malla geométrica creada anteriormente) superpuesta a la geometría de los problemas y establecer el recuento de partículas. Los resultados se escriben en un archivo de salida independiente, con nombre MESHTAL. Por defecto, el recuento de la 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*, y cada partícula contribuye según su energía.

4.2.6 Tarjetas de conversión de flujo a dosis (DE/DF)

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. 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.



4.2.7 Tarjeta de introducción de malla (EMBED)

El código de transporte Monte Carlo N-Particle (MCNP6) de Los Álamos National Laboratory's (LANL) trata una configuración tridimensional arbitraria de materiales en celdas geométricas limitadas por superficies de primer y segundo grado y toros elípticos de cuarto grado. Esta capacidad de uso de geometría sólida constructiva (CSG) ha quedado más que validada en estos últimos años. Sin embargo, durante mucho tiempo se ha reconocido que a medida que aumenta la complejidad del modelo, este proceso de describir la geometría es difícil, tediosa, consume tiempo, y propenso a errores. Por ello, además de la capacidad de la combinación de varios cuerpos geométricos predefinidos, MCNP6 da al usuario la flexibilidad añadida de crear geometrías de una forma novedosa respecto a sus versiones anteriores.

Esta nueva forma de crear la geometría se basa en que MCNP6 permite la incorporación de una malla no estructurada (UM) dentro de sus geometrías CSG, pudiendo crear así una geometría híbrida, utilizando ambas modalidades.

Para introducir este nuevo tipo de geometría mallada MCNP6 dispone de la tarjeta de entrada EMBED en la que se especifica el nombre del archivo que contiene la geometría mallada.

4.2.8 Tarjeta EMBEE y tarjetas de conversión de flujo a dosis (EMBEB/EMBEM), (EMBDE/EMBDF).

Este tipo de tarjetas funcionan de forma similar a las tarjetas anteriormente mencionadas FMESH y sus respectivas tarjetas de conversión de flujo a dosis DE y DF.

Al igual que ocurría en el FMESH, en EMBEE se elige el tally de acuerdo con la convención de tallies explicada en la *Tabla 5* entre (4,6 o 7) y el tipo de partícula.

Para la conversión de flujo a dosis análogamente a DE y DF, se utiliza para la geometría mallada EMBEB y EMBEM, para especificar las energías y los factores de conversión respectivamente. De la misma forma se podrían utilizar las tarjetas EMBDE y EMBDF creadas expresamente para suplir el papel de las DE y DF en geometrías malladas.

4.3. Pasos a seguir para generar el input

El archivo de entrada de MCNP (input file) se utiliza para describir la geometría del problema, las especificaciones de los materiales y las fuentes de radiación, así como el formato y los tipos de resultados necesarios para el cálculo. Las geometrías específicas del problema se desarrollan definiendo celdas que están limitadas por una o más superficies. Estas celdas pueden contener o un material específico o un material definido como vacío.

Los archivos de entrada de MCNP se estructuran en tres secciones principales: tarjetas de celda (*Cell cards*), tarjetas de superficie (*Surface cards*) y tarjeta de datos (*Data cards*).

La primera estructura que aparece en un archivo de entrada es un bloque de mensajes (*Message Block*), que puede contener cualquier tipo de información y cuya aparición en el *input* es opcional.

La siguiente tarjeta requerida en el *input* es la tarjeta de título. Esta tarjeta está limitada a una línea de 80 columnas y se utiliza como título en varios lugares en el archivo de salida de MCNP.

Tras cada tarjeta que se define en el archivo de entrada, se debe escribir un terminador de línea en blanco que delimita cada una de las tarjetas. Este terminador de línea se utiliza para detener la lectura del archivo de entrada, incluso si existen líneas adicionales.

A continuación, se muestra la estructura del archivo de entrada:

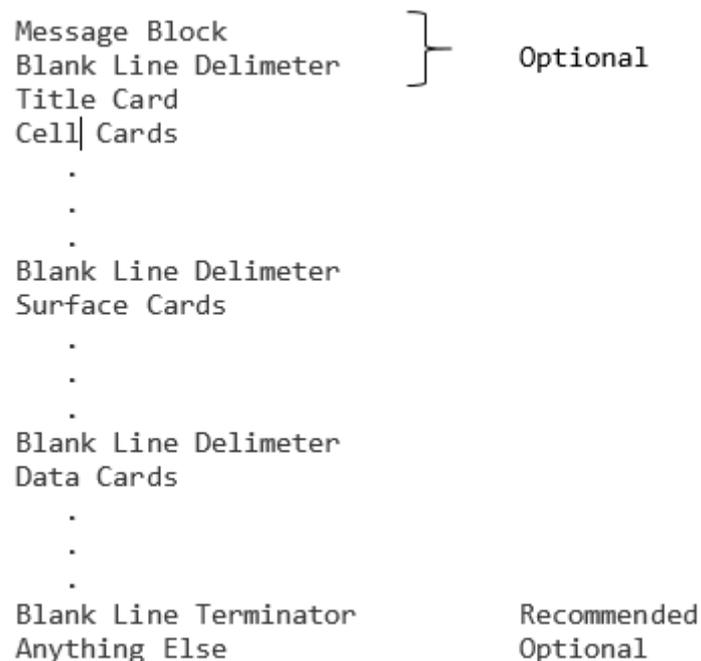


Figura 17: Estructura archivo de entrada (*input*)



4.3.1. Tarjeta de título (*Title Card*)

La tarjeta de título es la primera tarjeta que aparece en un archivo de entrada de MCNP y como máximo, puede constar de 80 caracteres distribuidos en 80 columnas. Esta tarjeta puede contener información que describa el problema y, de esta forma, servir como referencia rápida de la información contenida en el archivo y como etiqueta para ser distinguible fácilmente entre diversos archivos de entrada. Dicha tarjeta de título también aparecerá en los archivos de salida de MCNP.

4.3.2. Tarjeta de celda (*Cell Cards*)

A continuación de la tarjeta de título, se define la sección de tarjeta de celda, sin línea en blanco delimitadora entre ellas. Las celdas se utilizan para definir la forma y el material contenido en el espacio físico del problema. Se definen mediante intersecciones, uniones y complementos de las regiones rodeadas por las superficies (":" para uniones y " " para intersecciones). El formato específico para definir una tarjeta de celda es el siguiente:

```
j m d geom params
```

Figura 18: Formato tarjeta de celda (*cell card*)

Donde:

j: Número de celda. Debe ser un número entero de 1 a 999999, siendo este el número que se le asigna a la celda a la hora de definirla.

m: Número de material. Debe ser un número entero de 1 a 99999 y especifica el material presente en una celda particular. La sección de tarjeta de datos del archivo de entrada se utiliza para definir la composición de cada material específico utilizado en problema particular. Si dos o más celdas contienen el mismo material, cada celda tendrá un Número de celda diferente, pero el mismo número de material.

d: Densidad del material. Se especifica la densidad del material que contiene la celda. Si la entrada de densidad es positiva se trata de una densidad atómica con unidades de átomos/cm³. Si por el contrario la entrada de densidad es negativa, se trata de densidad másica con unidades de g/cm³.



geom: Especificación geométrica. Utiliza operadores booleanos junto con números de superficies con sus respectivos signos para describir cómo las superficies enlazan regiones del espacio para crear la celda.

params: se utiliza para especificar los parámetros de celda en la línea de la tarjeta de celda en lugar de especificarlos en la tarjeta de datos.

4.3.3. Tarjeta de superficie (*Surface Cards*)

Tras finalizar con las definiciones de las tarjetas de celda, se coloca una línea blanca delimitadora que da paso a la sección de tarjeta de superficie. En esta tarjeta de superficie se especifican los planos que hay que definir para crear la geometría asociada al problema. Se definen mediante coeficientes de las ecuaciones analíticas de las superficies. El formato específico para una tarjeta de superficie es el siguiente:

`j n a list`

Figura 19: Formato tarjeta de superficie (*surface card*)

Donde:

j: representa el número de superficie asignado y debe comenzar entre las columnas 1 y 5.

n: es el número de la transformación de coordenadas de dicha superficie. Si no hay transformación de coordenadas no es necesario definir nada en esta localización o definir 0.

a: representa el tipo de superficie

list: es un espacio para que el usuario pueda indicar parámetros que describen la ecuación de la superficie, como dimensiones y radios

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P PX PY PZ	plane	general normal to x-axis normal to y-axis normal to z-axis	$Ax + By + Cz - D = 0$ $x - D = 0$ $y - D = 0$ $z - D = 0$	A B C D D D D
SO S SX SY SZ	sphere	centered at origin general centered on x-axis centered on y-axis centered on z-axis	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $(x-x)^2 + (y-y)^2 + (z-z)^2 - R^2 = 0$ $(x-x)^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + (y-y)^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 + (z-z)^2 - R^2 = 0$	R x y z R x R y R z R
C/X C/Y C/Z CX CY CZ	cylinder	parallel to x-axis parallel to y-axis parallel to z-axis on x-axis on y-axis on z-axis	$(y-y)^2 + (z-z)^2 - R^2 = 0$ $(x-x)^2 + (z-z)^2 - R^2 = 0$ $(x-x)^2 + (y-y)^2 - R^2 = 0$ $y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 - R^2 = 0$	y z R x z R x y R R R R
K/X K/Y K/Z KX KY KZ	cone	parallel to x-axis parallel to y-axis parallel to z-axis on x-axis on y-axis on z-axis	$\sqrt{(y-y)^2 + (z-z)^2} - t(x-x) = 0$ $\sqrt{(x-x)^2 + (z-z)^2} - t(y-y) = 0$ $\sqrt{(x-x)^2 + (y-y)^2} - t(z-z) = 0$ $\sqrt{y^2 + z^2} - t(x-x) = 0$ $\sqrt{x^2 + z^2} - t(y-y) = 0$ $\sqrt{x^2 + y^2} - t(z-z) = 0$ ±1 used only for 1-sheet cone	x y z t ² ± 1 x y z t ² ± 1 x y z t ² ± 1 x t ² ± 1 y t ² ± 1 z t ² ± 1
SQ	ellipsoid hyperboloid paraboloid	axis parallel to x-, y-, or z-axis	$A(x-x)^2 + B(y-y)^2 + C(z-z)^2 + 2D(x-x) + 2E(y-y) + 2F(z-z) + G = 0$	A B C D E F G x y z
GQ	cylinder, cone ellipsoid paraboloid hyperboloid	axis not parallel to x-, y-, or z-axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gz + Hy + Jz + K = 0$	A B C D E F G H J K
TX TY TZ	elliptical or circular torus. Axis is parallel to x-, y-, or z-axis		$(x-x)^2/B^2 + (\sqrt{(y-y)^2 + (z-z)^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$ $(y-y)^2/B^2 + (\sqrt{(x-x)^2 + (z-z)^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$ $(z-z)^2/B^2 + (\sqrt{(x-x)^2 + (y-y)^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$	x y z A B C x y z A B C x y z A B C
XYZP		surfaces defined by points – see pages 3-15 to 3-17		

Tabla 5: Tarjeta de superficie de MCNP (MCNP5) (manual)

4.3.4. Tarjeta de datos (Data Cards)

El formato de la sección de tarjeta de datos es el mismo que el de las secciones de tarjeta de celda y superficie. El nombre de la tarjeta es la primera entrada y debe comenzar en las primeras cinco columnas. Las tarjetas de datos más importantes para las aplicaciones de física médica incluyen:

1. Tipo de problema (MODE).
2. Parámetros de celda y superficie.
3. Especificación de la fuente.
4. Especificación del tally.
5. Especificación del material.
6. Final del problema.



Tarjeta *MODE*

La tarjeta de código *Mode* especifica qué partículas pueden ser creadas y seguidas en el problema. Se define de la forma:

`MODE x1 ... xl`

`X1 = N` para el transporte de neutrones

`P` para el transporte de fotones

`E` para el transporte de electrones o positrones

Figura 20: Formato tarjeta *MODE*

Si en el archivo de entrada de MCNP se omite la tarjeta *MODE* se supone *MODE N*; es decir, sólo transporte de neutrones.

Por defecto, *MODE N P* no tiene en cuenta los foto-neutrones, pero sí los fotones inducidos por neutrones. La producción de partículas fotonucleares puede activarse en la física del problema.

Parámetros de celda y superficie

Los datos relacionados con celdas individuales pueden ser introducidos en la tarjeta de celda (*cell card*) o en la sección de la tarjeta de datos (*Data card*) del input. Sin embargo, los datos relativos a las superficies individuales sólo se pueden introducir en la sección de tarjeta de datos. En ese caso, las entradas deben estar listadas en el mismo orden que las tarjetas de superficie asociadas que aparece anteriormente en el archivo de entrada. El número de entradas en una celda o tarjeta de datos de superficie debe ser igual al número de celdas o de superficies en el problema.

La tarjeta *IMP:N* se utiliza para especificar la importancia de celdas relativas. Dicha tarjeta se utiliza para terminar la historia de la partícula si la importancia es 0 y para la división geométrica para ayudar a las partículas a moverse más fácilmente a regiones importantes de la geometría.



Especificación de la fuente

Se dispone de cuatro métodos para definir partículas iniciales:

1. Fuente general (tarjeta *SDEF*)
2. Fuente superficial (tarjeta *SSR*)
3. Fuente crítica (tarjeta *KCODE*)
4. Fuente facilitada por el usuario

Para fines de física médica, la especificación de la fuente general *SDEF* suele ser suficiente. La tarjeta fuente general se define de la siguiente forma:

SDEF source variable=specification..

Figura 21: Formato fuente (*SDEF*)

En términos de física médica, la especificación de una variable fuente es generalmente un valor explícito o un número de distribución prefijado. Sin embargo, también puede ser especificada como una función de otra variable. Las variables más comunes utilizadas para la especificación de la fuente son:

Variable	Significado	Valor por defecto
CEL	Celda	Determinada por la posición de la partícula XXX,YYY,ZZZ
TME	Tiempo	0
SUR	Superficie	0 (celda de la fuente)
ERG	Energía (MeV)	14 MeV
NRM	Signo de la superficie normal	+1
POS	Punto de referencia para la posición muestreada	0,0,0
RAD	Distancia radial de la posición desde POS o AXS	0



EXT	Celda: distancia desde POS a lo largo de AXS Superficie: coseno del ángulo desde AXS	0 0
AXS	Vector de referencia para EXT y RAD	No dirección
X	Coordenada x de la posición	No X
Y	Coordenada y de la posición	No Y
Z	Coordenada z de la posición	No Z
PAR	Tipo de partícula emitida	1, n=neutrón si MODE N, NP, o PE 2, p=fotón si MODE P o PE 3, e=electrón si MODE E 4, f=positrón si MODE E
WGT	Peso de la partícula	1

Tabla 6: Variables más comunes usadas para especificación de fuente general (*SDEF*)

La tarjeta *SDEF* puede definir los parámetros básicos de la fuente por defecto; esto es, una fuente puntual isotrópica, de 14 MeV de energía, en la posición origen (0, 0, 0), en el tiempo 0 y con peso 1.

Especificación del Tally

Las tarjetas de Tally se utilizan para especificar lo que se quiere obtener de los cálculos de Monte Carlo, flujo a través de una superficie, flujo en un punto, energía media depositada en una celda...

El formato de los tallies para las superficies y celdas es la siguiente:

$$Fn:pl \ S_1 \ (S_2...S_3) \ S_6S_7$$

n = tally number
 pl = N or P or N,P or E
 S₁ = problem number of Surface or cell for tallying or T

Figura 22: Formato de Tally de superficie y celda

El código MCNP6 proporciona siete tipos de tallies diferentes, todos normalizados para ser por partícula iniciada.

En los tallies *F1* y *F2* sólo se pueden utilizar las superficies que delimitan las celdas y las enumeradas en las tarjetas de celdas. El tally número 6, *F6*, no permite trabajar con electrones (E) y el tally 7, *F7*, permite sólo trabajar con neutrones. *T* indica un tally que represente el promedio del flujo a través de todas las superficies o celdas indicadas.

Los tallies más utilizados son:

Mnemonic	Tally Description	Fn units	*Fn units
F1:N or F1:P or F1:E	Current integrated over a surface	particles	MeV
F2:N or F2:P or F2:E	Flux averaged over a surface	particles/cm ²	MeV/cm ²
F4:N or F4:P or F4:E	Flux averaged over a cell	particles/cm ²	MeV/cm ²
F5a:N or F5a:P	Flux at point or ring detector	particles/cm ²	MeV/cm ²
F6:N or F6:N,P or F6:P	Energy deposition averaged over a cell	MeV/g	jerks/g
F8:P or F8:E or F8:P,E	Energy distribution of pulses in a detector	pulses	MeV

Tabla 7: Comandos de Tallies de MCNP



Especificación de material

Las tarjetas de materiales especifican tanto la composición isotópica como las secciones eficaces de los materiales que componen la celda.

El formato de una tarjeta de material es el siguiente:

```
mn zaid1 fraction1 zaid2 fraction2 ...
```

Figura 23: Formato Tarjeta de material

Donde:

mn: nombre de la tarjeta de material (m) seguido inmediatamente por el número del material (n) en la tarjeta. Estos caracteres deben estar comprendidos entre las columnas 1 y 5.

zaid: Número de identificación del nucleido. Este número se usa para identificar el elemento o nucleido deseado. El formato del número **ZAID** es el siguiente: ZZAAA.abx

- ZZZ es el número atómico del elemento o nucleído.
- AAA es el número másico del nucleido.
- ab es el identificador de la sección eficaz.
- x es el tipo de dato. Comúnmente se utilizan: C para la sección eficaz de neutrones de energía continua, P para fotones, E para electrones, U para fotonucleares y H para protones.

fraction: fracción de nucleido. Si el valor es positivo, se trata de la densidad atómica (átomos/b-cm); si el valor es negativo, se trata de la fracción de peso (g/cm^3).



5. Materiales y métodos

5.1. Modelización del detector y esferas

5.1.1. Detector

El detector central del espectrómetro de esferas Bonner (BSS) es un cristal de centelleo activo cilíndrico de 4 mm x 4 mm (diámetro x altura) de ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$, enriquecido un 96% con ${}^6\text{Li}$, (LUDLUM Modelo 42-5). Los neutrones térmicos son detectados por su reacción con el litio: ${}^6\text{Li}(n,\alpha){}^3\text{H}$ ($Q=4.78$ MeV).

Un contador cuenta los impulsos electrónicos producidos en el fotomultiplicador. Se considera que el número de reacciones que se producen en el centelleador de ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$ es proporcional al número de pulsos registrados por el escalador. Este centelleador está conectado a través de un tubo ligero de plexiglás (Plexiglass light pipe) a un tubo fotomultiplicador blindado magnéticamente. El espectro de impulsos se recoge mediante una unidad de control que también separa el fondo gamma de los eventos inducidos por neutrones.

El detector tiene geometría cilíndrica y la parte activa correspondiente al cristal de ${}^6\text{LiI}$ está situada a 0.9 cm de la superficie externa derecha del conjunto de aluminio. El interior del detector es vacío y el tubo ligero que conecta el centelleador al fotomultiplicador es de plexiglás. A continuación, se muestra un corte en sección transversal del detector central:

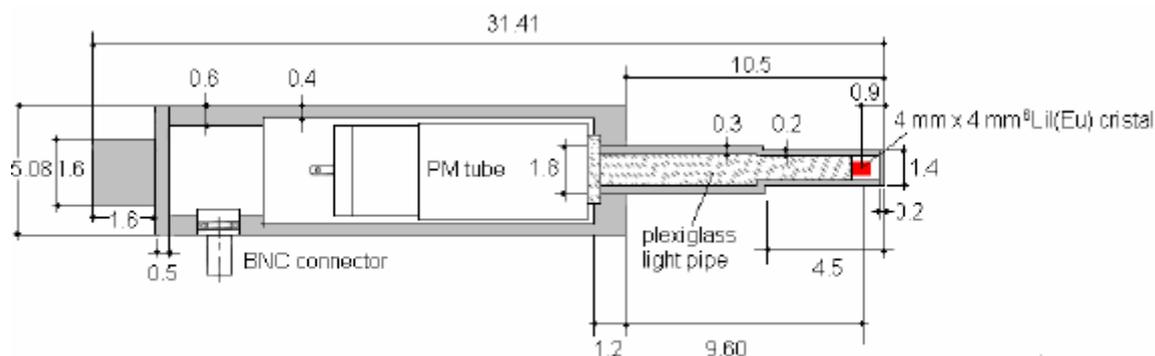


Figura 24: Sección transversal del detector central del BSS

Su técnica de medición es bastante simple. El detector de neutrones térmicos se ajusta dentro de las esferas que son sensibles a neutrones de energía más alta dependiendo del espesor de la esfera del moderador. Con una secuencia de diferentes tamaños de esferas, el centelleador interno puede registrar neutrones en un amplio rango de energía, y se puede obtener información sobre el espectro de neutrones a partir de la velocidad de recuento correspondiente a cada esfera. El espectro de neutrones se puede desarrollar usando un algoritmo matemático.

A partir de la información obtenida de la geometría del detector, se procede a su modelado en 3D para su posterior mallado y uso en el problema que se está analizando. Para ello, se disponen de diversos programas de modelado, pero finalmente se hace uso del programa *SpaceClaim Engineer*.

SpaceClaim es un software de modelado conceptual para diseño en 3D, en el que se crean geometrías 3D usando sólidos y superficies en tres dimensiones. *SpaceClaim* genera dos tipos de archivos, en uno de ellos se incluyen los sketches, partes y ensambles, y en el otro se incluyen la creación de dibujos. Los modelos que se crean en *SpaceClaim* pueden ser portados a diversos programas de modelado como *AutoCAD*, *SolidWorks*, *CATIA*, *SolidEdge*...

En este trabajo, las extensiones o formatos que se utilizan principalmente para exportar modelos de *SpaceClaim* son: .step (STEP), .igs (IGES), .sat (ACIS), entre otros.

En la siguiente figura se muestra una imagen del entorno gráfico del programa de modelado en 3D:

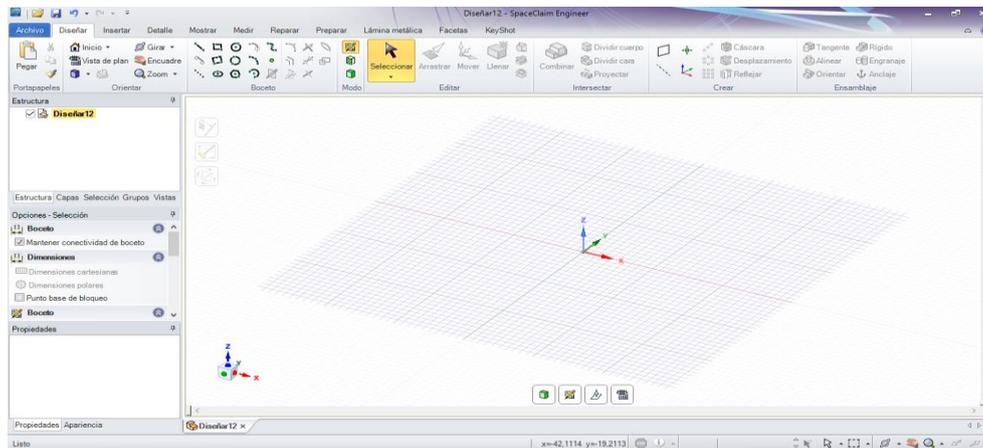


Figura 25: Entorno gráfico de *SpaceClaim*

Con la geometría del detector dada anteriormente, se procede a la reconstrucción en 3D de dicha geometría en el programa *SpaceClaim*. En las siguientes figuras se muestran el modelado del detector y un corte transversal de este. En la visualización 3D se observa el detector cilíndrico completo, que corresponde a la forma de la carcasa exterior. Por el contrario, en la imagen de la sección transversal del detector, se puede observar las diversas partes del detector, diferenciadas cada parte con distintos rayados: la carcasa exterior de aluminio, el interior del detector en vacío, el tubo ligero de pexiglas y el centelleador cilíndrico de ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$.

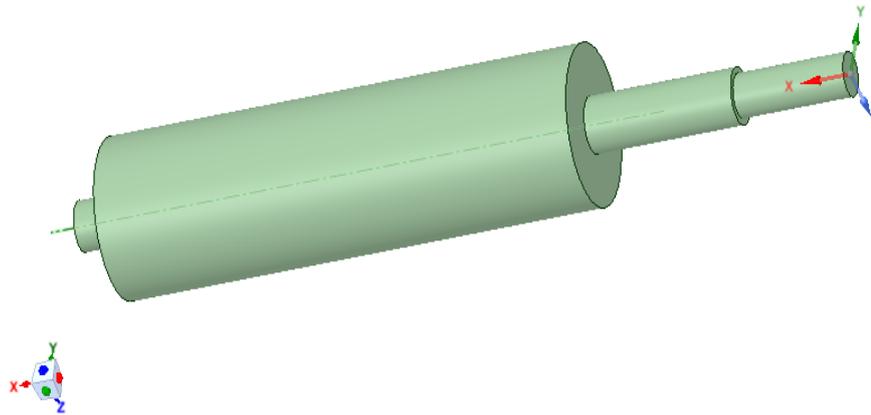


Figura 26: Visualización 3D del detector completo modelado en *SpaceClaim*

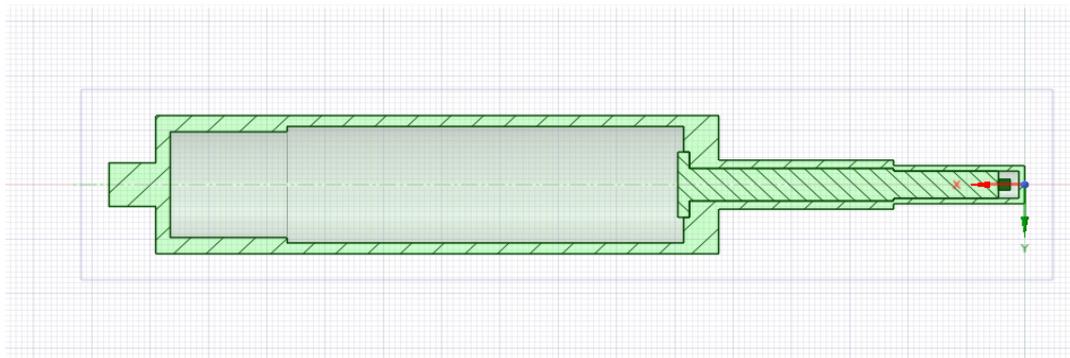


Figura 27: Sección transversal del detector completo modelado en *SpaceClaim*



Figura 28: Detector Bonner Sphere midiendo neutrones en un LinAc

En la figura 28 se puede observar el uso de este detector en la instalación donde se encuentra el acelerador lineal médico (Hospital Universitari La Fe de Valencia) con objeto de medir los neutrones inducidos con las diferentes esferas de polietileno.

La modelización de las diferentes partes del detector se encuentra detallada en el Anexo I.

5.1.2. Esferas

El detector sistema de esferas Bonner (BSS) se compone, además del detector explicado anteriormente, de un conjunto de esferas de polietileno de densidad 0.95 g/cm^3 . Las dimensiones de las esferas son:

1. Esfera de diámetro 2" ($\varnothing = 50.8 \text{ mm}$)
2. Esfera de diámetro 3" ($\varnothing = 76.2 \text{ mm}$)
3. Esfera de diámetro 5" ($\varnothing = 127 \text{ mm}$)
4. Esfera de diámetro 8" ($\varnothing = 203.2 \text{ mm}$)
5. Esfera de diámetro 10" ($\varnothing = 254 \text{ mm}$)
6. Esfera de diámetro 12" ($\varnothing = 304.8 \text{ mm}$)

Esta configuración de esferas permite obtener información espectral de neutrones térmicos de hasta 20 MeV.

En la siguiente figura se muestra el conjunto de esferas del detector BSS:

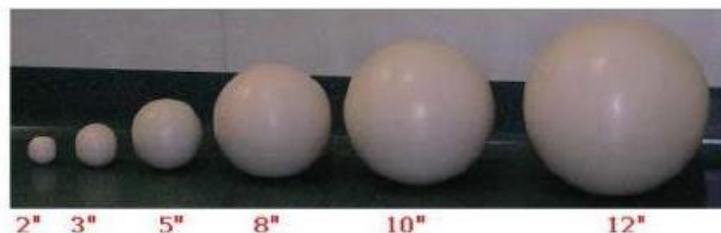


Figura 29: Conjunto de esferas del detector BSS

Al igual que el detector, para obtener los archivos de geometría necesarios para el mallado y posterior uso de la información en el archivo de entrada de MCNP, las esferas se han modelado en 3D en el programa *SpaceClaim*. Cada una de las esferas genera un archivo que será exportado para su posterior mallado.

A continuación, se muestra el modelado de la esfera 1; el modelado del resto de esferas se encuentra en el Anexo I:

Esfera 1

Esfera de diámetro 2" ($\varnothing = 50.8$ mm)

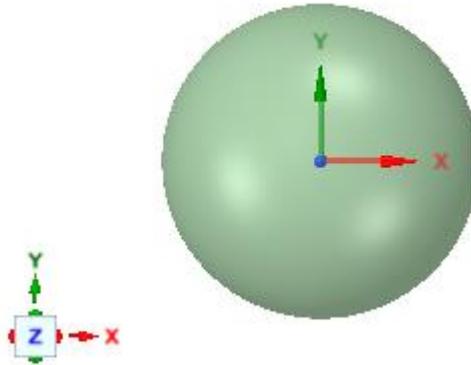


Figura 30: Visualización 3D de la esfera 1

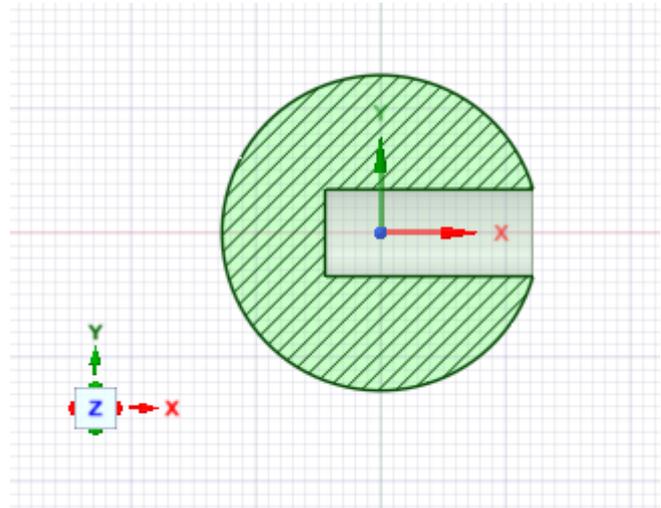


Figura 31: Sección transversal de la esfera 1

5.2. Modelización del espacio de fases

Para la realización de la simulación de este trabajo, se parte de una fuente superficial (espacio de fases) generada previamente. Este espacio de fases corresponde con las partículas (fotones, electrones y neutrones) almacenados en una superficie a la salida del cabezal del LinAc.

La tarjeta SSR se utiliza para leer un archivo de fuente superficial o un archivo de fuente de fisión *KCODE* creado en un cálculo de MCNP anterior.

Esta tarjeta SSR corresponde con el espacio de fases que se utilizará en la simulación final del problema. Este espacio de fases se ha generado simulando el haz de radiación hasta un plano que se ha definido de forma perpendicular al eje de simetría del haz y situado a la salida de las mordazas de la unidad de radioterapia; concretamente, a 55.5 cm de la fuente.

El archivo del que la tarjeta SSR lee la información de la fuente superficial es un archivo WSSA que se debe haber creado previamente usando la tarjeta SSW. Esta tarjeta se utiliza para escribir archivos de fuentes superficiales o archivos de fuentes de fisión *KCODE* para posteriormente ser usados en los cálculos que realiza MCNP. El archivo WSSA se crea durante la ejecución de la tarjeta SWW. Finalmente, el archivo WSSA se debe renombrar con la nomenclatura RSSA para que pueda ser leído por la tarjeta SSR.

Al simular el problema desde un espacio de fases, y no desde una fuente volumétrica, se reduce el tiempo de cálculo al no tener que considerar toda la geometría y partes del cabezal del acelerador. El espacio de fases almacena diversos parámetros para cada partícula: el tipo de partícula, la energía, la posición, la dirección, el peso estadístico y una serie de parámetros adicionales para controlar el número total de historias primarias que se simularon para calcular la incertidumbre estadística de los resultados. El número total de historias simuladas para obtener el espacio de fases en la tarjeta SWW fue de 1×10^9 .

El modelo MCNP del *Varian* fue validado previamente a 15 MeV en trabajos anteriores. Para validar el espectro reconstruido, se realizó una simulación Monte Carlo completa. El espectro a 15 MeV obtenido es el siguiente:

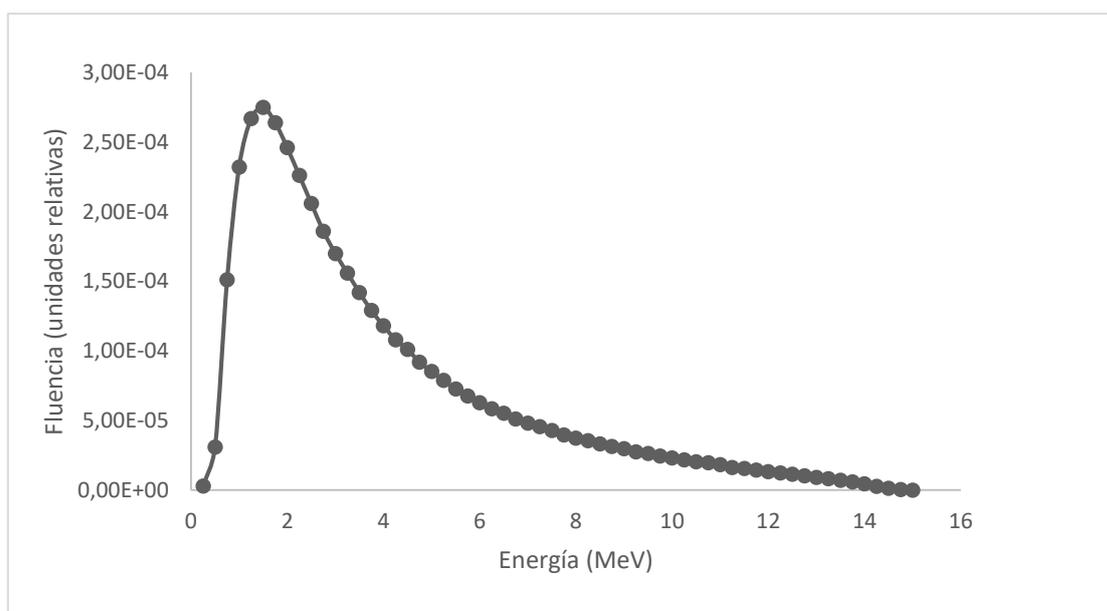


Figura 32: Espectro de fotones de 15 MeV utilizado en la simulación

Para la simulación final realizada en este trabajo, se parte del haz de partículas proveniente del espacio de fases diseñado. El espacio de fases tiene un tamaño de campo cuadrado de 1 x 1 metros con un espesor de 0.2 m. El centro del espacio de fases está situado en el eje central que une la fuente con el isocentro a 44.5 cm de éste. A su vez, el isocentro está a 1 metro de distancia del detector.

A continuación, se muestra en un plano la distribución de los elementos que se han comentado:

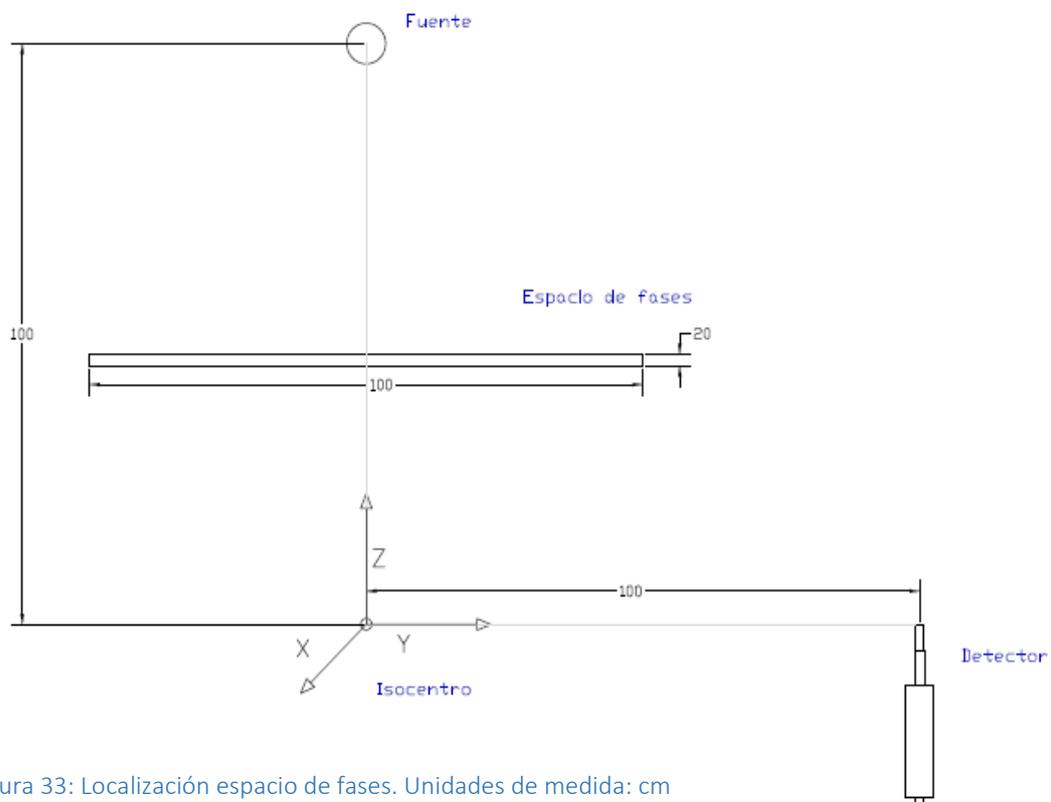


Figura 33: Localización espacio de fases. Unidades de medida: cm

Esta distribución del detector en el búnker del acelerador lineal se ha estipulado con vistas a futuras medidas experimentales.



5.3. Parámetros de la simulación

5.3.1. Mallado

Para realizar el mallado de las distintas partes del detector se utiliza el programa Abaqus.

Abaqus es un software de simulación diseñado para la realización de cálculos de ciencia e ingeniería como cálculos estructurales estáticos lineales y no lineales, dinámicos, de mecánica de fluidos y térmicos, entre otros, para los que aplica el método de los elementos finitos. Es parte de la plataforma *SIMULIA* de *Dassault Systemes*.

Abaqus UNIFIED FEA es un conjunto de programas de elementos finitos que es parte de la división Análisis por Elementos Finitos Unificados de *SIMULIA* y se compone de los siguientes programas:

- **Abaqus/CAE** (“Complete Abaqus Environment”). Con este programa se puede crear, editar, monitorizar diagnosticar y visualizar de forma rápida y eficiente análisis avanzados de Abaqus. Soporta conceptos de ingeniería como modelado paramétrico, operación interactiva y programada...

El usuario puede crear geometrías complejas, importar modelos de CAD para mallarlos o integrar geometrías malladas de otro software de elementos finitos.

Abaqus/CAE contiene módulos que permiten la sincronización de conjuntos CAD y CAE con otros programas similares y permiten la actualización rápida de modelos sin pérdida de funciones de análisis definidas por el usuario. Estos módulos son: un módulo para postproceso y visualización de análisis, módulos para importar geometría directa de *CATIA*, *Pro/ENGINEER* y *SolidWorks*, y un último módulo de importación de geometría complementaria de software como *NX*, *Parasolid* e *Ideas*.

Abaqus/CAE también ofrece amplias opciones de visualización que permiten interpretar y comunicar los resultados de cualquier análisis de Abaqus.

Este es el programa que se ha utilizado para la realización del trabajo, pero tan sólo se ha hecho uso de la parte de modelado.

- **Abaqus/Standard**: este programa es utilizado para solucionar análisis estáticos y dinámicos de baja velocidad, donde la localización de concentración de esfuerzos es crítica.
- **Abaqus/Explicit**: es un software utilizado para simular y resolver eventos dinámicos o de conducta no lineal como choques e impactos. Es un programa de producción en ingeniería con pre y post análisis.

- **Abaqus Multiphysics:** proporciona capacidades adicionales de Abaqus para estudiar multifísica que incluye eléctrica, térmica, acústica, fluidos, entre otras.
- **Abaqus/CFD** (Computational Fluid Dynamics): este programa proporciona herramientas avanzadas de dinámica de fluidos computacional con un amplio soporte para preprocesamiento y postprocesamiento proporcionado en Abaqus/CAE. Puede resolver tipos de problemas de flujo incompresible como laminar y turbulento y convección térmica.

Para realizar el mallado del detector se utiliza el programa Abaqus/CAE ya que genera la malla en un formato que es aceptado por el software Monte Carlo N-Particle Transport que realizará la simulación. Pero para ello, se deben definir una serie de parámetros en Abaqus:

Terminología

Se deben definir una serie de parámetros que se definen con el mismo nombre en el programa MCNP6 y pueden dar lugar a contradicciones entre ambos a la hora de acoplar los dos programas:

- **Elements:** Son los bloques más pequeños en que se divide la geometría. En MCNP6 se utilizan los elementos de geometría de primer orden y de geometría de segundo orden. Los elementos de primer orden son elementos lineales y están basados en tetraedros que se definen mediante cuatro nodos angulares conectados por seis aristas rectas. Los elementos de segundo orden son elementos parabólicos y están basados en tetraedros que se definen mediante cuatro nodos angulares, seis nodos centrales y seis aristas.

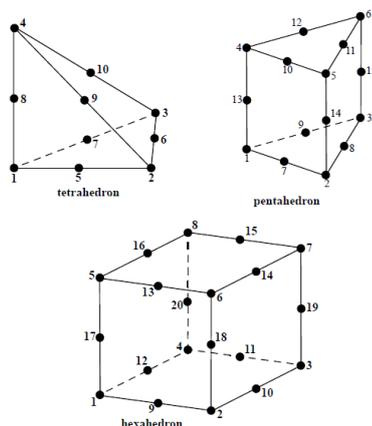


Figura 34: Elementos de primer orden

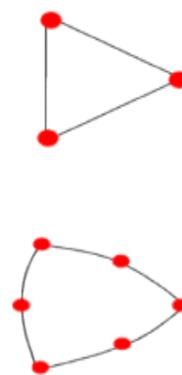


Figura 35: Elementos de segundo orden



- **Mesh:** Es la agrupación de los elementos creando un modelo. La malla o “mesh” es una representación de la geometría descrita por un modelo sólido en *Abaqus/CAE*.
- **Elsets:** es una colección de elementos o un sub-set de la malla asociado con una etiqueta o nombre específico.
- **Part:** es el primer objeto geométrico más pequeño creado en *Abaqus/CAE*. Hace referencia a cada una de las partes en que se divide una figura, las cuales pueden ser ensambladas para crear una geometría mayor. Cada “part” puede contener una representación de la malla y a cada uno se le pueden asignar características como materiales
- **Instance:** son copias de las partes que se utilizan para construir un ensamblaje. En figuras simétricas, pueden repetirse tantas copias como se precise sin necesidad de crear diferentes partes.
- **Assembly:** es la figura geométrica de mayor tamaño creada en *Abaqus/CAE*. Puede componerse de una sola “instance” o de varias, pudiendo ser visto como un objeto compuesto.
- **Pseudo-cell or inferred-cell:** en librerías de mallas no estructuradas, se refiere a un “elset” con una definición de material distinta. Sin embargo, en MCNP6, hace referencia a una definición de celda especial, que se define con una superficie nula, y es usada para asociar celdas normales de MCNP con “elset” de malla no estructurada.
- **Background cell:** es una celda que sirve como medio en el que se encuentra la malla no estructurada. Es una celda de MCNP dentro de la cual la malla ha sido colocada.
- **Mesh universo:** es el universo MCNP que consiste en la malla y en el “Background cell”. Este universo no puede contener niveles más bajos de universos o celdas en su interior. La malla no estructurada no debe cortar de ninguna manera con la celda que la contiene.



Construcción de la geometría mallada

Para que pueda ser usado en MCNP, se debe crear un modelo de malla en una parte o un conjunto de partes que han sido ensamblados con *Abaqus*.

Las mallas geométricas se pueden clasificar en estructuradas y no estructuradas. Las mallas estructuradas se caracterizan por estar compuestas de celdas de un tamaño similar y del mismo tipo. Son fáciles de generar, pero no permiten modelar eficientemente problemas geoméricamente complejos.

Las mallas no estructuradas permiten el uso de celdas de distinto tipo y/o de diferente tamaño. Estas mallas requieren algoritmos y estructuras de datos más complejos que las anteriores, pero permiten modelar geometrías complejas y optimizar el número de celdas usadas de acuerdo a las necesidades.

Los tipos de malla aceptados por MCNP6 son los basados en tetraedros, pentaedros o hexaedros de primer orden y de segundo orden. El tipo de malla que más se aproxima a la geometría real son las que utilizan elementos de segundo orden debido a que, a diferencia de las que utilizan elementos de primer orden, sus aristas y caras pueden asumir formas curvilíneas si la geometría lo requiere.

Cada tipo de malla recibe un código para definirse, el cual aparecerá también especificado en el archivo de entrada, en la línea de "Element Type". Los códigos que describen el tipo de malla son los siguientes:

Elemento de malla	Código
Tetraedro de primer orden	C3D4
Pentaedro de primer orden	C3D6
Hexaedro de primer orden	C3D8
Tetraedro de segundo orden	C3D10
Pentaedro de segundo orden	C3D15
Hexaedro de segundo orden	C3D20

Tabla 8: Códigos de elementos de malla



Para este trabajo, se han utilizado mallas no estructuradas de tetraedros de primer orden (C3D4), ya que, al no ser una geometría muy compleja, se ajustan adecuadamente. Al ser un mallado de elementos tetraédricos de primer orden, es un mallado más sencillo que permite acortar el tiempo de simulación ya que se realizan cálculos menos pesados.

A continuación, se describe el proceso que se ha seguido para realizar el mallado de las geometrías del problema.

En primer lugar, para cada una de las partes se deben crear siempre dos elsets: un elset para el material, un segundo set para la estadística, y si la parte que se está mallando es una fuente, se definirá un tercer elset.

tras esto, se deben definir los materiales que se asignarán a cada parte. Para ello, se definen principalmente tres campos:

- Name/description: donde se define el nombre del material y, si fuese necesario, una breve descripción de dicho material
- Material behaviors: donde se indica que se proporcionará, como valor característico del material, su densidad.
- Density: donde se define la distribución, que en este problema se toma una distribución uniforme; y se define también como dato el valor de densidad, que será usado por el programa MCNP.

A continuación, cada parte es mallada independientemente de la forma que se le indica al programa anteriormente. El programa *Abaqus* crea cada una de las mallas de la forma más optimizada.

Finalmente, se genera el “assembly” combinando todas las partes creadas y se procede a modificar su posición, si la posición en la que se ha creado por defecto no es la correcta, para que el conjunto esté en el lugar exacto que indica el problema

A continuación, se muestran el detector del problema mallado:

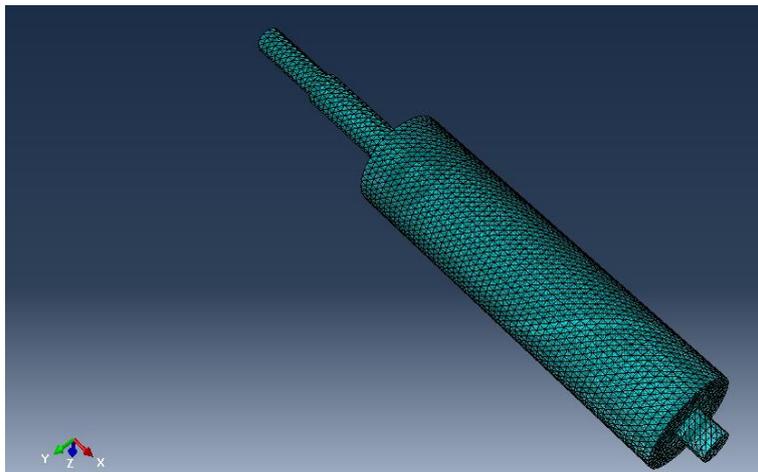


Figura 36: Detector mallado con *Abaqus/CAE*



Figura 37: Detector mallado con *Abaqus/CAE*. Posición correcta.

Como se puede observar en la imagen anterior, la optimización de la malla pasa por que todos los elementos de ésta son prácticamente del mismo tamaño, ya que la geometría es relativamente sencilla. En los puntos donde la geometría es más compleja, como por ejemplo en los cambios de sección del interior de las esferas, el tamaño de los elementos será menor para mayor detalle y menor pérdida de información de la geometría real. El resto de elementos del detector, mallados con el programa *Abaqus/CAE*, se observan en el Anexo II.

Una vez se ha mallado cada una de las partes del detector, se procede al ensamblaje de todas las partes en un conjunto.

Tal y como se ha visto anteriormente en la figura 39, el detector se localiza a un metro de distancia del isocentro. Por ello, el origen de coordenadas del conjunto (“assembly”) se ha desplazado respecto al origen de coordenadas global del resto de la geometría, para que el detector y su malla se encuentren ubicados en el lugar exacto

- **Esfera**

Esta figura muestra una de las seis esferas que se han definido y mallado para su posterior utilización en el archivo de entrada.

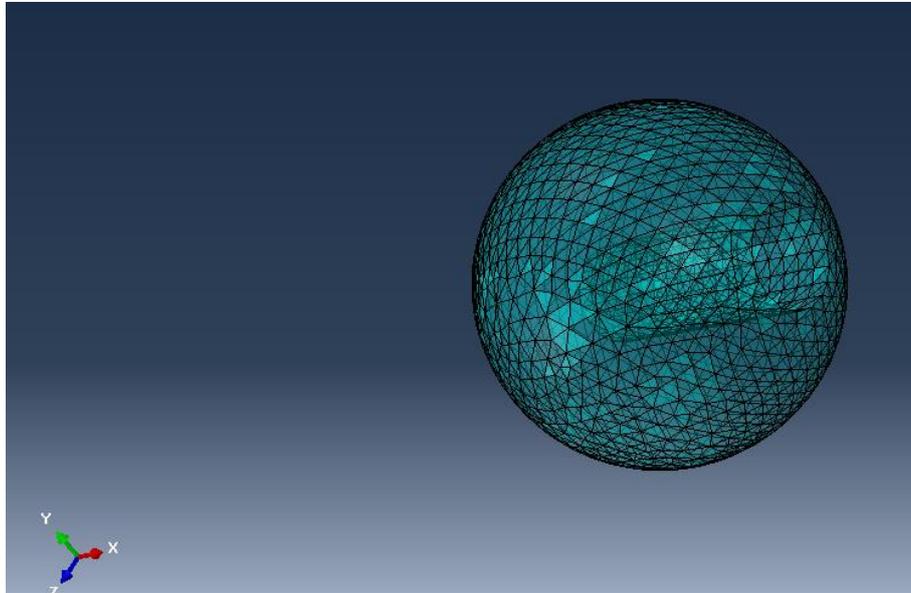


Figura 38: Esfera mallada con *Abaqus/CAE*

- **Conjunto detector con esfera**

El conjunto mallado del detector con cada una de las esferas queda de la siguiente manera:



Figura 39: Conjunto detector y esfera mallado con *Abaqus/CAE*



Tras todo el proceso de mallado del detector, el programa *Abacus/CAE* genera un archivo de entrada .inp donde se almacena toda la información de la geometría, el mallado y los materiales del problema. Para el problema que se está planteando, se generan siete archivos diferentes: un archivo con la información de la malla del detector, y otros seis archivos con la información de la malla del conjunto del detector con cada una de las seis esferas con las que se va a estudiar la detección de neutrones.

A continuación, se muestra un archivo .inp generado por *Abaqus/CAE* en el que se puede observar cómo quedan determinados todos los parámetros:



```

!Heading
** Job name: detector-esfera_5 Model name: Model-1
** Generated by: Abaqus/CAE 6.14-1
*Preprint, echo=NO, model=NO, history=NO, contact=N
**
** PARTS
**
*Part, name="A - carcasa exterior"
*Node
    1, 31.4099998, 0.800000012, 0.
    2, 31.4099998, -0.800000012, 0.
    3, 29.8099995, 0.800000012, 0.
    4, 29.8099995, -0.800000012, 0.
    5, 29.8099995, -2.53999996, 0.
    6, 29.8099995, 2.53999996, 0.
    7, 0., 0.699999988, 0.
    8, 0., -0.699999988, 0.
    9, 10.5, 2.53999996, 0.
    10, 10.5, -2.53999996, 0.
    11, 4.5, 0.699999988, 0.
    12, 4.5, -0.699999988, 0.
    13, 10.5, 0.899999976, 0.
    14, 10.5, -0.899999976, 0.
    15, 4.5, -0.899999976, 0.
    16, 4.5, 0.899999976, 0.
    ...
282437, 25529, 15908, 25555, 25541
282438, 24976, 15908, 12855, 25540
*Nset, nset=SET-MATERIAL_04, generate
    1, 51007, 1
*Elset, elset=SET-MATERIAL_04, generate
    1, 282438, 1
*Nset, nset=SET-STATISTIC_04, generate
    1, 51007, 1
*Elset, elset=SET-STATISTIC_04, generate
    1, 282438, 1
*End Part
**
**
** ASSEMBLY
**
*Assembly, name=Assembly
**
*Instance, name="A - carcasa exterior-1", part="A - carcasa exterior"
    0., 100., 0.
    0., 100., 0., 0., 101., 0., 90.
*End Instance
**
*Instance, name="B - sólido pexiglass light pipe-1", part="B - sólido pexiglass light pipe"
    0., 100., 0.
    0., 100., 0., 0., 101., 0., 90.
*End Instance
**
*Instance, name="C - sólido cristal-1", part="C - sólido cristal"
    0., 100., 0.
    0., 100., 0., 0., 101., 0., 90.
*End Instance
**
*Instance, name="D - esfera_5_1-1", part="D - esfera_5_1"
    0., 100., 0.
    0., 100., 0., 0., 101., 0., 90.
*End Instance
**
*End Assembly
**
** MATERIALS
**
** MATERIAL DE LA CARCASA EXTERIOR
*Material, name=MATERIAL-PART_001
*Density
-2.699,
** MATERIAL DEL SÓLIDO DE PLEXIGLASS
*Material, name=MATERIAL-PART_002
*Density
-1.19,
** MATERIAL DEL CRISTAL
*Material, name=MATERIAL-PART_003
*Density
-3.494,
** MATERIAL DE LA ESFERA 1
*Material, name=MATERIAL-PART_004
*Density
-0.95,

```

Figura 40: Archivo .inp creado por Abaqus/CAE



5.3.2. Programa UM_PRE_OP

El programa *um_pre_op* (unstructured mesh pre operations), incluido en *MCNP*, es un programa utilitario que realiza varias manipulaciones en el archivo de entrada diseñado para ayudar en la configuración del problema con la malla no estructurada (UM). Como el programa *MCNP*, *um_pre_op* está diseñado para ejecutarse desde la línea de comandos. Incluye funciones como la creación del “esqueleto” del input de *MCNP* (-m) a partir del archivo .inp generado en *Abaqus/CAE*, la capacidad de convertir geometrías voxelizadas (-lc) a un archivo de *Abaqus/CAE* (.inp), la comprobación de volumen (-vc) de los elementos finitos y la comprobación de elementos (-ec) para elementos girados o deformados.

A partir del archivo .inp de *Abaqus*, el programa *um_pre_op* genera la parte del archivo de entrada que hace referencia a la geometría mallada, para que posteriormente *MCNP* puede interpretar la geometría en el archivo de entrada. La información del modelo mallado es usada para crear tarjetas pseudo-cell apropiadas, la background cell y el universo mínimo para mantener la malla universo.

El programa proporciona una guía de ayuda en la que se pueden observar las diferentes opciones que ofrece junto con sus argumentos:

```
** PRE-PROCESSOR PROGRAM FOR UM CAPABILITY **  
  
Functions:  
1) Create MCNP input file from Abaqus .inp file  
2) Convert MCNP simple lattice to Abaqus .inp file  
3) Volume check the Abaqus .inp file and pseudo-cells  
4) Element check the Abaqus .inp file  
  
Command Line Arguments:  
  
-b,  --back          background material for input file  
-h,  --help          summary of features & arguments  
-m,  --mcnp          generate MCNP skeleton input file -- (1)  
-o,  --output        output file name  
  
-cf, --controlfile  file with lattice conversion controls  
-dc, --datacards    data cards file to include  
-ex, --extension    output file extension  
-ff, --fillfile     file with lattice fill description  
-lc, --latconvert   convert simple lattice to Abaqus -- (2)  
-vc, --volcheck     volume check the .inp file -- (3)  
-ec, --elementcheck element check the .inp file -- (4)  
-len, --length      scale factor for mesh dimensions
```

Figura 41: Opciones del programa *um_pre_op*



Se puede crear un archivo de entrada “esqueleto” de MCNP desde un archivo .inp de *Abaqus* usando la opción `-m`. El nombre del archivo de salida que se va a crear se establece con la opción `(-o)`; y el nombre de extensión que se va a crear, se establece con la opción `(-ex)`.

El formato utilizado en este trabajo para la obtención de los archivos de entrada “esqueleto” a partir de archivos .inp generados por *Abaqus/CAE* es el siguiente:

```
um_pre_op -m -o new detector-esfera_1.inp
```

Figura 42: Formato programa *um_pre_op*

Tras finalizar la orden, el programa genera el archivo de entrada .inp siguiente:

```
No description for this unstructured mesh file
c
c Created from file      : detector-esfera_1.inp
c Created on           : 6-22-2016 @ 12:10: 9
c
c
c PSEUDO CELLS
1      1      -2.69900      0 u=1
2      2      -1.19000      0 u=1
3      3      -3.49400      0 u=1
4      4      -0.950000     0 u=1
5      0              0 u=1
c
c LEGACY CELLS
6      0              -99 fill=1
7      0              99
c
c
c SURFACES
99 sph  1.44371E+01  1.00000E+02  0.00000E+00  2.08186E+01
c
c DATA CARDS
embed1 meshgeo=abaqus
      mgeoin=detector-esfera_1.inp
      meeout=detector-esfera_1.eeout
      length= 1.00000E+00
      background=      5
      matcell= 1 1 2 2 3 3 4 4
c
c
c
```

Figura 43: Archivo de entrada creado por *um_pre_op*



Este es uno de los archivos .inp creados a partir de la geometría y el mallado del detector con la esfera 1. Como este trabajo realiza siete simulaciones con diferentes configuraciones (simulación con el detector únicamente, simulación con el detector y la esfera 1, simulación con el detector y la esfera 2, simulación con el detector y la esfera 3, simulación con el detector y la esfera 4, simulación con el detector y la esfera 5, simulación con el detector y la esfera 6), se obtienen siete archivos .inp como el anterior pero cada uno correspondiente a su distribución.

5.3.3. Archivos de salida y Programa UM_POST_OP

Archivos de salida

Tras la finalización de la simulación de MCNP se generan, de acuerdo a como se hayan definido en el archivo de entrada, unos archivos de salida que proporcionan la información obtenida de la simulación.

- **Out:** este archivo de salida se genera por defecto. Si se genera por defecto, el nombre del archivo es "out", si en el archivo de entrada se le ha especificado algún nombre, dicho nombre se le adjudicará al archivo de salida.
- **Meshtal:** este archivo de salida aparecerá en el caso de que se haya definido algún *Tally*. En dicho archivo se encuentran almacenados los resultados de flujo en cada voxel definido por el *Tally fmesh* (explicado más adelante) o en el caso de haber añadido factores de conversión, se obtendrá dosis.
- **.eeout:** aquí se recogen los resultados correspondientes a los elementos de malla. Al igual que el archivo *meshtal*, almacena los resultados de flujo o de dosis en cada una de las celdas o elementos definidos por la malla geométrica de *Abaqus*. Este archivo puede tratarse posteriormente mediante el programa *um_post_op* para convertirlo en formato *.vtk* que podrá ser visualizado con el programa *PARAVIEW*.

Programa um_post_op

El programa *um_post_op* (*unstructured mesh post operations*) es una utilidad que permite diferentes formas de manipulación del archivo *.eeout* (*elemental edit output*). Este programa al igual que la versión de pre procesado, está escrito en FORTRAN y usa varias rutinas y estructuras de datos procedentes de REGL (Revised Eolus Grid Library) con el propósito de mantener cierta consistencia con



MCNP. Entre algunas de sus funciones son añadir o juntar múltiples archivos *.eeout* en uno, convertir archivos binarios a ASCII y generar los archivos de visualización *“.vtk”*.

Para recordar la funcionalidad de este programa se puede ver las opciones en la ventana de comandos introduciendo el siguiente comando:

```
um_post_op -help
```

De esta manera aparecerá el siguiente mensaje donde se puede observar todas las diferentes opciones que ofrece la herramienta junto con sus argumentos:

```
** UTILITY PROGRAM FOR UNSTRUCTURED MESH EEOUT FILE **
```

```
Functions:
```

- 1) add many eeout files into one
- 2) merge many eeout files into one
- 3) convert binary files into ascii files
- 4) generate vtk files for VisIt visualization
- 5) generate pseudo-tallies by instance
- 6) write a single edit to an ascii file
- 7) generate a histogram of edit errors

```
Command Line Arguments:
```

```
-h,  --help          summary of features & arguments  
-a,  --add           add multiple files (no weighting)  
-m,  --merge        merge multiple files  
-o,  --output       single output file name  
-p,  --pos          value range for wse and wsep  
-bc, --binconvert   convert binary file to ascii
```

5.3.4. Input de MCNP

Como se ha explicado a lo largo del punto 4.3. el fichero de entrada se divide en tres zonas principales: zona de implementación de celdas, zona de definición de superficies y zona de datos.

Cell Card y Surface Card

Las tarjetas de celda requieren:

- Una celda para cada malla, también llamadas “pseudo-cell”.
- Debe definirse una celda de fondo que sirva como “background”. No puede haber celdas malladas fuera de esta celda.

Ambas dos, aparecen descritas como celdas normales, pero están constituidas por una superficie nula o de valor 0. A cada de estas celdas es necesario asignarle el número de universo al que pertenecen.

A continuación, se muestra la parte del archivo de entrada de MCNP en el que se definen estas dos secciones:

```
c
c PSEUDO CELLS
1      1      -2.69900      0  u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
2      2      -1.19000      0  u=1 imp:p=4 imp:n=4 imp:e=4
3      3      -3.49400      0  u=1 imp:p=16 imp:n=16 imp:e=16
4      5      -0.950000     0  u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
5      0              0  u=1 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
c
c CELDAS
6      4      -0.0012048  -99 #8 #9 #10 fill=1 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
7      0              99      imp:p=0 imp:n=0 imp:e=0
8      4      -0.0012048  1 -2 -3 4 5 -31 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
9      6      -2.35000     6 -7 8 -9 10 -11 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
10     6      -2.35000     6 -7 8 -9 12 -13 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1

c SURFACES
99  sph  0  0  0  1000
1  PX -50
2  PX 50
3  PY 50
4  PY -50
5  PZ 43.5
31 PZ 44.5
6  PX -338.71
7  PX 338.71
8  PY -514.5
9  PY 514.5
10 PZ 150
11 PZ 230
12 PZ -130
13 PZ -50
14 S 0 100 0 10

c
```

Figura 44: Archivo .inp. Tarjetas de celdas y superficies

Las pseudo-celdas (“pseudo-cell”) y la celda de fondo (“background cell”) del archivo .inp han sido generadas a partir del archivo de entrada .inp de *Abaqus/CAE* mediante el programa *um_pre_op*, como ya se ha comentado anteriormente.

Las pseudo-celdas 1, 2, 3 y 4, corresponden a la carcasa de aluminio, al tubo ligero de pexiglás, al cristal centelleador de ${}^6\text{Li}(\text{Eu})$ y a la esfera, respectivamente. La pseudo-celda número 5 corresponde a la celda de fondo o “background”.

En cuanto a las celdas, las celdas número 9 y 10 corresponden a un techo y un suelo, respectivamente. Ambas celdas son de cemento y se han definido para simular las paredes de un búnker real y poder así, tener también recuento de neutrones diferidos. Tanto el techo como el suelo, que se han creado para realizar la simulación final, son de dimensiones 1029 x 80 x 777.42 cm. Ambas partes están colocadas de forma que su punto central coincide con la línea central que une el isocentro con la fuente.

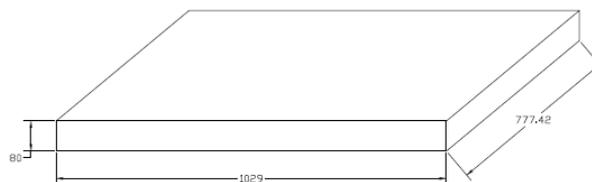


Figura 45: Techo y suelo. Medidas en cm

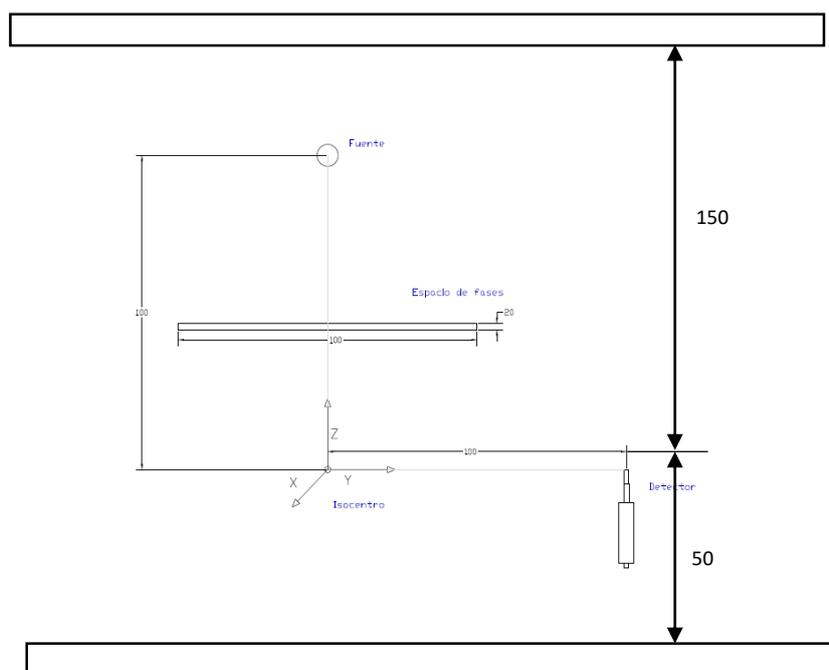


Figura 46: Localización techo y suelo. Unidades de medida: cm



Las celdas 6 y 7 corresponden a una esfera creadas para realizar la función de universo, situada en el origen de coordenadas (en este caso corresponde al isocentro) y de radio 1000 cm. La celda 6 contiene el interior de la esfera excepto las superficies de suelo y techo, y el material en el interior es aire. La celda 7 incluye todo el exterior de la esfera y el material de la celda es vacío.

Como se ha comentado anteriormente, la sección de superficies es un conjunto de tarjetas de superficie que definen los planos que delimitan y crean las superficies. Como se puede observar en la figura anterior, las superficies 1, 2, 3, 4, 5 y 31 definen el espacio de fases cuadrado de dimensiones 100 x 100 x 10 cm, y situado, el centro de su plano inferior, a 43.5 cm del isocentro, centrado con la línea central que une el isocentro con la fuente.

Las superficies 6, 7, 8, 9, 10 y 11 definen el techo de dimensiones 1029 x 777.42 x 80 cm, y está situado, el centro de su plano inferior, a 150 cm del isocentro, centrado con la línea central que une el isocentro con la fuente. De igual forma se define el suelo, delimitado por las superficies 6, 7, 8, 9, 12 y 13; el suelo está situado, el centro de su plano superior a 50 cm del isocentro en la dirección negativa del plano Z, es decir, por debajo del isocentro.

Tarjeta *EMBEDn*

Para soportar la importación de la malla, MCNP6 dispone de seis tarjetas de datos: la tarjeta *EMBED* que es necesaria para la importación de la malla estructurada y no estructurada, y cinco tarjetas opcionales válidas sólo para mallas no estructuradas: *EMBEE*, *EMBEB*, *EMBEM*, *EMBTB* y *EMBTM*.

La tarjeta utilizada en este problema para la realización del archivo de entrada es la tarjeta de especificación de geometría embebida *EMBED*. Esta tarjeta se encarga de incrustar una geometría de malla en el archivo de entrada de MCNP6. El formato de dicha tarjeta es el siguiente:

```
EMBEDn KEYWORD=value(s)...
```

Figura 47: Formato tarjeta *EMBEDn*

Donde:

n: número de universo asignado a la malla embebida.

Keyword:

Keyword	Descripción
BACKGROUND=C _b	Número de “pseudo-cell” procedente del bloque de celdas que sirve como celda “background”. Requerido
MATCELL=m ₁ C ₁ m ₂ C ₂ ...	<p>Pares de números</p> <ul style="list-style-type: none"> • m_i número de la “pseudo-cell” de la malla • c_i número de la “pseudo-cell” en MCNP <p>Requerido</p>
MESHGEO=<format>	Tipo de geometría de la malla. Permite valores de <i>Abaqus</i> o <i>Ink3dnt</i> . Requerido
MGEOIN=<filename>	Nombre del archivo de entrada .inp que contiene la descripción de la malla. Requerido
MEEOUT=<filename>	Nombre asignado al archivo de salida .eeout. Recomendado
MEEIN=<filename>	Nombre del archivo eeout a leer, requerido para continuar ejecuciones. No debe tener el mismo nombre que MEEOUT. Requerido para continuar la ejecución de una malla no estructurada
CALC_VOLS	<ul style="list-style-type: none"> • si CALC_VOLS=YES, calcula volúmenes y masas de la geometría de las “pseudo-cell” • si CALC_VOLS=NO, no calcula volúmenes y masas. <p>Opcional</p>
DEBUG	<ul style="list-style-type: none"> • Si DEUG=ECHOMESH escribe los parámetros de la geometría embebida en el archivo de salida <p>Opcional</p>
FILETYPE=[ASCII BINARY]	<p>Tipo de archivo de salida eeout</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si FILETYPE=ASCII el archivo de salida se escribe en formato ASCII

	<ul style="list-style-type: none"> • Si FILETYPE=BINARY el archivo de salida se escribe en formato BINARIO <p>Opcional</p>
GMVFILE=<filename>	Nombre del archivo de salida para la geometría gmv. Opcional
LENGTH=f _L	Factor de conversión a centímetros para todas las dimensiones de los archivos de entrada y salida. Opcional

Tabla 9: Keywords permitidos en la tarjeta *EMBED*

A continuación, se muestra la definición de esta tarjeta en el archivo de entrada del problema:

```

c
c DATA CARDS
embed1 meshgeo=abaqus
      mgeoin=detector-esfera_5_malla_grande.inp
      meeout=detector-esfera_5_malla_grande.eeout
      length= 1.00000E+00
      background=      5
      matcell= 1 1 2 2 3 3 4 4
      overlap=exit
  
```

Figura 48: Archivo .inp. Tarjeta *EMBED*

Tallies

Como se ha comentado anteriormente, las tarjetas de *Tally* se utilizan para especificar lo que el usuario quiere obtener de los cálculos de Monte Carlo. Algunos de los *Tallies* que se utilizan son: corriente de partículas a través de una superficie, flujo en un punto, energía...

El formato de la tarjeta *Tally* es el siguiente:

$$Fn: \langle pl \rangle s_1 . . . s_k$$

Figura 49: Formato tarjeta *Tally*

Donde:

n: es el número de *Tally*.

<pl>: en el tipo de partículas que recoge.

S_i: es el número de la celda o superficie del problema donde se aplica el *Tally*.

En este trabajo se crearon dos tipos de *Tallies*: *Tallies* definidos de la forma que se acaba de explicar, y *Tallies* de malla superpuesta.

Las tarjetas *Tally* definidas en el archivo de entrada del problema son cuatro *Tallies* diferentes aplicados a la misma celda.

```
F74:N 3  
F84:P 3  
*F94:N 3  
*F104:P 3
```

Figura 50: *Tallies* archivo .inp

Como se ha comentado anteriormente, los números que preceden a la letra F en la definición de la tarjeta, corresponden al número de *Tally* definido. Todos ellos, están aplicados a la celda que contiene el cristal centelleador ${}^6\text{Li}(\text{Eu})$.

Los dos primeros *Tallies* definidos (F74:N 3 y F84:P 3), son *Tallies* que aportan información de flujo medio, en unidades de partículas/cm², en la celda número 3. El *Tally* F74:N 3 registra neutrones y el *Tally* F84:P 3 registra protones.

Los dos últimos *Tallies* definidos (*F94:N 3 y *F104:P 3), al igual que los anteriores, aportan información de flujo medio de partículas en la celda número 3, pero en diferente unidad de medida: MeV/cm². Al igual que en el caso anterior, el *Tally* F74:N 3 registra neutrones y el *Tally* F84:P 3 registra protones.

La tarjeta de *Tallies* de malla superpuesta, denominada *FMESH*, permite al usuario definir un registro de malla superpuesta sobre la geometría del problema. Los resultados de esta malla se escriben en un archivo de salida independiente con el nombre *MESHTAL*. Por defecto, los cálculos de la malla superpuesta del flujo medio de partículas sobre una celda son en unidades de partículas/cm². Para que dichas unidades sean de energía (MeV/cm²), en la definición de la tarjeta *FMESH*, debe preceder un asterisco (*).

El formato de la tarjeta *FMESH* es el siguiente:

```
FMESHn:<p1> KEYWORD=value(s)
```

Figura 51: Formato tarjeta *Tally*

Donde:

n: es el número de *Tally*.

<p1>: en el tipo de partículas que recoge.



KEYWORD: los valores de KEYWORD necesarios para la definición de la tarjeta *FMESH* son:

Keyword	Descripción
GEOM	Geometría de la malla en coordenadas cartesianas (XYZ) o cilíndricas (RST). Por defecto: GEOM=XYZ.
ORIGIN	Coordenadas de origen de la malla. Por defecto: ORIGIN=0,0,0.
AXS	Vector que proporciona la dirección de los ejes de una malla cilíndrica. Por defecto: AXS=0,0,1.
VEC	Vector que define junto con AXS, el plano para $\emptyset=0$. Por defecto: VEC=1,0,0.
IMESH	Ubicación de los puntos de malla gruesa en la dirección x para la geometría rectangular o en la dirección r para la geometría cilíndrica. Por defecto: ninguno
IINTS	Número de puntos de malla fina dentro de cada malla gruesa correspondiente en la dirección x para la geometría rectangular o en dirección r para la geometría cilíndrica. Por defecto: IINTS=1
JMESH	Ubicación de los puntos de malla gruesa en la dirección y para la geometría rectangular o en la dirección z para la geometría cilíndrica. Por defecto: ninguno
JINTS	Número de puntos de malla fina dentro de cada malla gruesa correspondiente en la dirección y para la geometría rectangular o en dirección z para la geometría cilíndrica. Por defecto: JINTS=1
KMESH	Ubicación de los puntos de malla gruesa en la dirección z para la geometría rectangular o en la dirección \emptyset para la geometría cilíndrica. Por defecto: ninguno
KINTS	Número de puntos de malla fina dentro de cada malla gruesa correspondiente en la dirección z para la geometría rectangular o en dirección \emptyset para la geometría cilíndrica. Por defecto: KINTS=1
OUT	Formato de salida

	<ul style="list-style-type: none">• Si OUT=COL: se proporciona un formato de salida columnar, enumerando las coordenadas del centro de la celda, los resultados del <i>Tally</i> y el error relativo asociado. Por defecto.• Si OUT=CF: se proporciona un formato de salida columnar, enumerando las coordenadas del centro de la celda, los resultados del <i>Tally</i> y el error relativo asociado. Además, se sacan datos de volumen y los resultados del <i>Tally</i> multiplicado por el volumen.• Si OUT=IJ o IK o JK: los resultados del <i>Tally</i> se muestran como series de matrices 2D, con I=x o r, J=y o z, y K=z o \emptyset, dependiendo del sistema de coordenadas elegido. La primera matriz contiene los resultados del <i>Tally</i> y la segunda matriz, los errores relativos. Las filas y columnas están etiquetadas por los puntos medios de las correspondientes celdas de la malla. Estos pares de matrices se muestran por cada celda de la malla en la tercera coordenada.• Si OUT=NONE: no se muestra ningún archivo <i>MESTHAL</i>.
--	--

Tabla 10: Keywords permitidos en la tarjeta *FMESH*

En la realización de este trabajo, se han definido seis *Tallies* de este tipo:

- *Tally* en el cristal centelleador ${}^6\text{LiL}(\text{Eu})$

En el cristal centelleador se han definido dos *Tallies* con la misma malla superpuesta, pero de diferentes unidades. Así, el *Tally* “fmesh14:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en partículas/cm², y el *Tally* “fmesh24:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en MeV/cm².

```
c
c TALLYS
fmesh14:n geom=xyz origin= -0.2 99.8 -1.1 &
imesh 0.2 iints 1 jmesh 100.2 jint 1 kmesh 0.7 kints 1 out=ij
*fmesh24:n geom=xyz origin= -0.2 99.8 -1.1 &
imesh 0.2 iints 1 jmesh 100.2 jint 1 kmesh 0.7 kints 1 out=ij
c
```

Figura 52: Definición del *Tally* en el cristal centelleador ${}^6\text{LiL}(\text{Eu})$ en el input



- *Tally* bajo el espacio de fases

Bajo el espacio de fase, se han definido dos *Tallies* con la misma malla superpuesta, pero de diferentes unidades. Así, el *Tally* “fmesh34:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en partículas/cm², y el *Tally* “fmesh44:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en MeV/cm². Estos *Tallies* se definen para validar el correcto funcionamiento del espacio de fases.

```
c
c TALLY BAJO ESPACIO DE FASES
fmesh34:n geom=xyz origin= -50 -50 41.5 &
imesh 50 iints 10 jmesh 50 jint 10 kmesh 42.5 kints 1 out=ij
*fmesh44:n geom=xyz origin= -50 -50 41.5 &
imesh 50 iints 10 jmesh 50 jint 10 kmesh 42.5 kints 1 out=ij
c
```

Figura 53: Definición del *Tally* bajo el espacio de fases en el input

- *Tally* en el plano del detector

En el plano del detector, se definen dos *Tallies* con la misma malla superpuesta, pero de diferentes unidades. Así, el *Tally* “fmesh54:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en partículas/cm², y el *Tally* “fmesh64:n” proporciona el valor de flujo medio de neutrones a través de la malla en MeV/cm². Estos *Tallies* se definen para validar que al detector le están llegando las partículas lanzadas desde el espacio de fases.

```
c
c TALLY PLANO DEL DETECTOR
fmesh54:n geom=xyz origin= -110 -110 0 &
imesh 110 iints 22 jmesh 110 jint 22 kmesh 1 kints 1 out=ij
*fmesh64:n geom=xyz origin= -110 -110 0 &
imesh 110 iints 22 jmesh 110 jint 22 kmesh 1 kints 1 out=ij
F74:N 3
F84:P 3
*F94:N 3
*F104:P 3
c
```

Figura 54: Definición del *Tally* en el plano del detector en el input



Material

Como se ha explicado anteriormente, para generar el archivo de entrada de MCNP es necesario definir una tarjeta en la que se especifican los distintos materiales empleados en la geometría del problema mediante la composición de los elementos químicos según su fracción de peso.

En este caso, los materiales que se han utilizado son:

- Tubo ligero de plexiglás (C₅H₈O₂)_n:
 - Composición: C (60%), H (8%) y O (32%)
 - Densidad: 1.18 g/cm³
- Aire:
 - N (75.53%), O (23.18%), Ar (1.28%) y C (0.01%)
 - Densidad: 1.2048 x 10⁻³ g/cm³
- Cristal centelleador ⁶LiI:
 - Composición: ⁶Li (4.36%), ⁷Li (0.18%) y I (95.46%)
 - Densidad: 3.494 g/cm³
- Polietileno (CH₂):
 - Composición: C (85.7%) y H (14.3%)
 - Densidad: 0.944 g/cm³
- Aluminio (Al):
 - Composición: Al (100%)
 - Densidad: 2.6990 g/cm³
- Cemento
 - Composición: H (1 %), C (0.1%), O (52.91%), Na (1.6%), ²⁶Mg (0.022%), ²⁴Mg (0.157%), ²⁵Mg (0.02%), Al (3.38%), Si (33.7%), ⁴⁰Ca (4.26%) y ⁴⁴Ca (0.087%)
 - Densidad: 2.35 g/cm³



A continuación, se muestra la tarjeta de materiales definida en el archivo de salida:

```

c
c Materiales
c Aire
m4 7014 -0.7553 8016 -0.2318 18000.35c -0.0128 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
c Flexiglas light pipe
m2 6000 -0.600 1001 -0.0800 8016 -0.3200 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx2:p 0 0 j
mx2:n 6000.70c j j
c Aluminio
m1 13027 -1.00 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
c Cristal
m3 003006 -0.0436 003007 -0.0018 053127 -0.9546 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx3:p 0 0 j
c Polietilieno
m5 1001 -0.1430 6000 -0.8570 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx5:p 0 j
mx5:n j 6000.70c
c Cemento (concrete portland)
m6 1002 -0.010000 6012.50c -0.001000 8016 -0.529107 11023 -0.016000 &
12026 -0.00022 12024 -0.00157 12025 -0.0002 13027 -0.033872 14028 -0.337021 &
20040 -0.0426 20044 -0.00091 &
c 19039 -0.0121 19041 -0.00087 &
pnlib=70u plib=84p elib=03e nlib=80c $Cemento
c

```

Figura 55: Archivo .inp. Tarjeta de materiales

Física de transporte

Para las reacciones con fotones se hace necesario el modelo de la física fotonuclear cuya descripción se hace con la instrucción *PHYS:P*, que lleva implícito el transporte detallado de fotones. A continuación, se muestra el formato de dicha instrucción:

PHYS:P EMCPF IDES NOCOH PNINT NOPOD

donde:

- **EMCPF:** indica el límite superior de energía para el tratamiento detallado (por encima de este valor se usa el modelo simple).
- **IDES:** =0/1 indica si el Bremsstrahlung se incluye o no para *MODE P*, y para *MODE P E* controla la generación de electrones debida a fotones si la fuente es de electrones solamente.
- **NOCOH:** indica si se incluye el scattering coherente.
- **PNINT:** =-1/0/1 indica si las interacciones fotonucleares son usadas de manera análoga y si son o no utilizadas.
- **NOPOD:** permite la inclusión del ensanchamiento Doppler en energías debido a la velocidad de los electrones ligados.



La física utilizada en este trabajo ha sido:

PHYS:N 16
PHYS:P 16 0 0

Figura 56: Archivo .inp. Física de transporte

que sólo realiza el seguimiento de neutrones y fotones de hasta 16 MeV de energía.

Reducción de varianza

Para la generación del archivo de entrada, se han definido varias técnicas de reducción de varianza para mejorar la eficiencia del cálculo.

Una de las técnicas por las que se ha reducido la varianza ha sido por el método de control de la población, en el que cada región del espacio recibe un peso o una 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 pasan de una celda de importancia menor a otra de importancia mayor, su número es multiplicado para mejorar su muestreo.

Las importancias aparecen en el archivo de entrada en las tarjetas de celdas:

```
c PSEUDO CELLS
1      1      -2.69900      0 u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
2      2      -1.19000      0 u=1 imp:p=4 imp:n=4 imp:e=4
3      3      -3.49400      0 u=1 imp:p=16 imp:n=16 imp:e=16
4      5      -0.950000     0 u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
5      0
c
c CELDAS
6      4      -0.0012048  -99 #8 #9 #10 fill=1 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
7      0
99      imp:p=0 imp:n=0 imp:e=0
8      4      -0.0012048  1 -2 -3 4 5 -31 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
9      6      -2.35000     6 -7 8 -9 10 -11 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
10     6      -2.35000     6 -7 8 -9 12 -13 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
```

Figura 57: Archivo .inp. Tarjetas de celda

Como se puede observar, se define una importancia mayor a la celda que interesa que proporcione mejores resultados: la celda del cristal centelleador de $^6\text{LiI}(\text{Eu})$.

Otra técnica de reducción de varianza definida en el archivo de entrada ha sido el método de corte por energía (*Energy cutoff*). Este método se fundamenta en la supresión de aquellas partículas de baja energía que no contribuyen de manera relevante a la solución. Concretamente, 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.

```
CUT:P J 7 -1  
CUT:E J 7 -1  
CUT:N J J -10E-09
```

Figura 58: Archivo .inp. Reducción de varianza

Las dos primeras líneas, establecen un corte de energía en fotones y electrones en 7 MeV, debido a que los fotones y electrones de energías por debajo de 7 MeV no son interesantes de estudiar para este trabajo puesto que no van a generar fotoneutrones.

La tercera línea no establece ningún corte de energía, tiene en cuenta todos los neutrones de energías comprendidas entre 1 eV y 16 MeV



**ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA**

Estudio de la dosis recibida por los trabajadores de las instalaciones de un Acelerador Lineal de Electrones (LinAc) debido a la contribución de fotoneutrones y productos de activación



**UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA**

6. Resultados

6.1. Validación del modelo

Para validar la precisión de la simulación del detector realizada con MCNP6 y asegurar que coincidan con los resultados que se obtienen en una instalación radiactiva de un acelerador lineal, se utiliza el modelo del detector para medir una fuente de neutrones de $^{241}\text{Am-Be}$. Para poder validar el modelo realizado en este trabajo, los resultados del recuento de neutrones obtenidos del espectrómetro y el recuento de neutrones simulado con MCNP deben ser muy similares, y así poder afirmar que la simulación realizada es precisa.

La realización del modelo a partir de la fuente de neutrones de $^{241}\text{Am-Be}$, forma parte de un trabajo previo.

Para verificar la precisión de la simulación MCNP6 en el cálculo de la función respuesta del sistema de esferas Bonner (BSS), se llevó a cabo un experimento utilizando el BSS para medir la fuente de neutrones $^{241}\text{Am-Be}$ de un medidor de densidad de humedad superficial (Troxler 3430 Plus). Esta fuente de neutrones pertenece a la única instalación radiactiva de la Universitat Politècnica de Valencia. Su actividad es de 1,48 GBq y presenta una fluencia de neutrones de $7 \cdot 10^4$ neutrones por segundo.

La siguiente figura muestra el experimento realizado con diferentes tamaños de esfera. El cristal ^6Li se localizó a una distancia de 20 cm de la fuente de neutrones. Se midió las tasas de recuento de neutrones para cada esfera aplicando una metodología de rechazo gamma.



Figura 59: Fuente de neutrones de $^{241}\text{Am-Be}$ medida con el sistema de esferas Bonner

Por otro lado, se realizaron simulaciones de MCNP6 para reproducir detenidamente el proceso del real. En este caso, los neutrones fueron emitidos divergiendo en lugar de emitirse paralelos. El espectro de los neutrones emitidos se obtuvo a partir del espectro estándar del $^{241}\text{Am-Be}$ de la norma ISO 8529-1. Se emitieron 10^7 neutrones para cada esfera, se normalizaron los recuentos simulados y los

recuentos medidos en la realidad y luego se compararon. Esta comparación se observa en la siguiente figura.

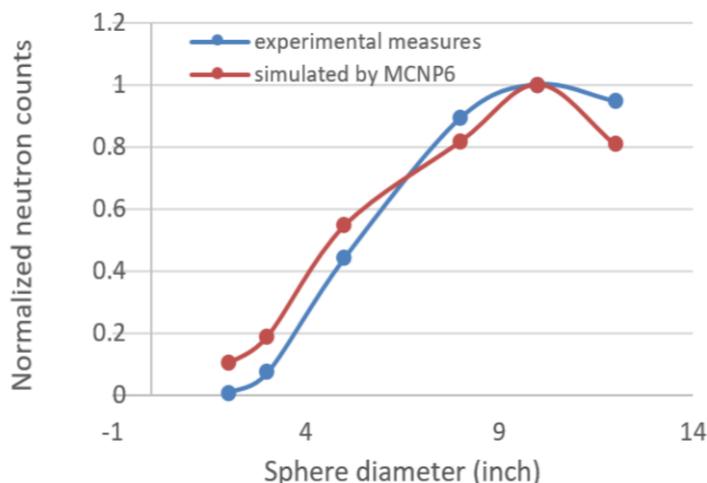


Figura 60: Medida de recuentos de neutrones de $^{241}\text{Am-Be}$ comparada con el recuento de neutrones simulados

Como puede verse, la respuesta del detector se expresa en recuentos relativos normalizados a una respuesta de esfera 5 de 10 ". La comparación muestra que los resultados de MCNP6 son altamente consistentes con las medidas, y el mayor error relativo entre las dos curvas fue de 10%.

Para completar el estudio de validación, la función respuesta de este espectrómetro de Esfera Bonner de neutrones (planificado para ser colocado dentro de una instalación médica de LinAc) fue cuidadosamente calculada con 29 haces de energía discretos de 10 keV a 20 MeV con una incertidumbre de menos del 3%, que fue dada por la simulación basada en MCNP6. Esta matriz respuesta fue comparada con otras obtenidas en bibliografía (H.R. Vega-Carrillo, I. Donaïre, E. Gallego, E. Manzanares-Acuña, A. Lorente, M.P. Iñiguez Calculation of Response matrix of a BSS with 6LiI scintillator, Revista Mexicana de física S54 (1) 57-62), reflejando el buen ajuste de nuestro modelo.

En el futuro, para obtener unos resultados espectrométricos fiables de los neutrones generados en el acelerador lineal, es necesario conocer esta matriz de respuesta del sistema de esferas Bonner. Esta matriz respuesta nos permitirá conocer el espectro energético de los neutrones emitidos por el acelerador a partir de medidas experimentales, y poder así calcular con mejor precisión la dosis recibida por los pacientes y los trabajadores.

Dada la matriz de respuesta del sistema de esferas Bonner y un algoritmo desarrollado, el sistema se utilizará para evaluar el espectro de neutrones generados. La validación de la matriz de respuesta

obtenida de la simulación representa el primer paso para realizar la deconvolución necesaria para obtener el espectro de energía de los neutrones, ya que un buen conocimiento de la matriz respuesta es crucial para obtener resultados fiables.

El sistema de esferas Bonner se utiliza para evaluar cualquier espectro de neutrones incidentes arbitrario del entorno, o generado por una instalación radiactiva. Una vez obtenido el espectro de neutrones y utilizando los factores de conversión, la integración de dicho espectro puede dar la cantidad radiológica deseada.

El sistema de esferas Bonner consiste en un conjunto de esferas de polietileno de densidad 0.95 g/cm^3 , de diámetros (en pulgadas) 0" (que corresponde al detector sin esfera), 2", 3", 5", 8", 10" y 12". Con estas esferas se puede obtener información espectral de neutrones entre un rango de neutrones térmicos a neutrones de 20 MeV.

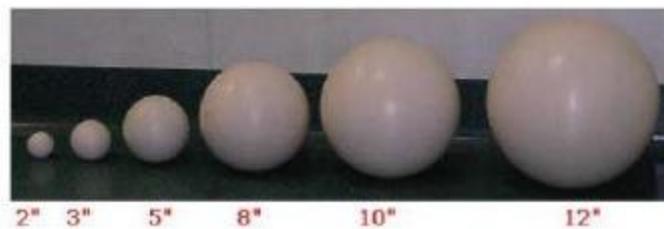


Figura 61: Conjunto de esferas del espectómetro Bonner Sphere

6.2. Función respuesta del sistema Bonner Sphere

La respuesta (en cm^2) de una Esfera de Bonner se define como el número esperado de recuentos causados por los neutrones incidentes de un flujo unitario de una fuente paralela dividida por la fluencia de neutrones en el punto donde se coloca el centro de la esfera en ausencia de esta:

$$R(E) = \frac{N}{\Phi(E)}$$

donde N es el número de recuentos del detector, y $\Phi(E)$ es el flujo de neutrones a la energía E (n / cm^2). Asumiendo tanto un campo de neutrones isotrópico como una respuesta de BSS, $R(E)$ para cada configuración de esfera, viene dada por la ecuación:

$$R_i(E) = \Phi_i(E) \cdot S_{Si} \cdot N_{Li-6} \cdot V_{Cristal} \cdot \sigma_{(n,\alpha)}(E)$$



donde Φ es la fluencia de las partículas (cm^{-2}), S_s es el área de la fuente del disco neutrónico (cm^2), $N_{\text{Li}} = 1.525 \cdot 10^{24}$ átomos / barn \cdot cm es la densidad atómica del ${}^6\text{Li}$ (en 10^{24} / cm^3), V_{Crystal} es el volumen del contador (cm^3) y $\sigma_{(n, \alpha)}$ es la sección eficaz de la reacción ${}^6\text{Li} (n, \alpha) {}^3\text{H}$ (barn).

6.3. Respuesta teórica del sistema de esferas Bonner (BSS) dada por la simulación Monte Carlo

Las simulaciones se han realizado con la versión Monte Carlo MCNP 6.1.1 (Laboratorio Nacional Los Alamos). En particular, esta nueva versión introduce como novedad el uso de geometrías de malla no estructurada diseñadas mediante software CAD-CAE que mejoran la precisión de la definición de geometría de los modelos, lo que podría conducir a una mejora en la exactitud del cálculo.

Se ha creado un modelo detallado de detector de acuerdo con el diseño del detector y la información del fabricante usando geometrías de malla, y las diferentes esferas fueron modeladas para realizar las seis simulaciones correspondientes a cada una de ellas.

Para obtener la función de respuesta del BSS, se han utilizado haces de neutrones monoenergéticos desde 10 keV a 20 MeV utilizando 29 haces monoenergéticos para cada una de las esferas y sin ella, realizando un total de 203 simulaciones.

Todas las esferas son irradiadas en vacío por un haz de neutrones discreto paralelo.

Se requieren las tablas térmicas $S(\alpha, \beta)$ para obtener la sección transversal del polietileno, ya que son absolutamente esenciales para obtener respuestas correctas en problemas que involucran termalización de neutrones. El detector modelado tiene una densidad de $3.494 \text{ g} / \text{cm}^3$ y está compuesto por 4.36 % de ${}^6\text{Li}$, 0.18 % de ${}^7\text{Li}$ y 95.46 % de I.

El tratamiento de la sección transversal MCNP6 es continuo, con interpolación lineal entre puntos de energía. Las secciones transversales de neutrones de energía continua utilizadas son las disponibles en el paquete estándar y extraídas de los archivos de datos nucleares evaluados: ENDF / B-VII. Para el caso del polietileno, se ha utilizado poly.20t.

El *Tally* utilizado en estas simulaciones MCNP6 ha sido la fluencia de neutrones (en función de la energía) dentro del detector de centelleo, y usando secciones transversales adecuadas, se ha obtenido el número de reacciones de ${}^6\text{Li} (n, \alpha) {}^3\text{H}$ por neutrón incidente. La respuesta se calcula en términos de reacciones/n por unidad de fluencia (es decir, cm^2) expresada como una función de la energía de neutrones.

Las simulaciones ejecutan 10^8 neutrones para lograr incertidumbres estadísticas relativas por debajo del 3%.

La siguiente figura presenta la función de respuesta a neutrones del sistema BSS después de aplicar el procedimiento a las seis esferas.

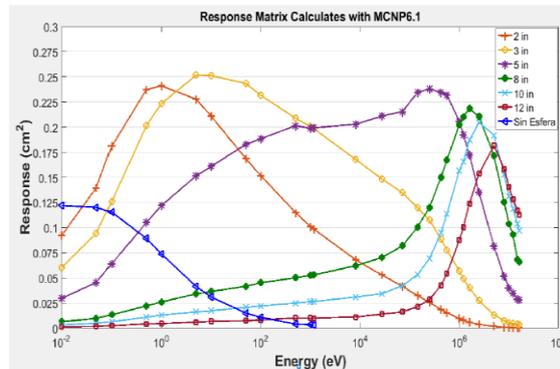


Figura 62: Respuesta de neutrones del espectrómetro de esferas Bonner en función de la energía calculada con MCNP

A partir de la figura, se puede observar que a medida que el tamaño de la esfera aumenta, el pico de la función respuesta se mueve gradualmente al rango de alta energía, la esfera más grande tiende a ser más sensible a los neutrones de mayor energía.

Se comparó esta matriz de respuesta con la otra función de respuesta del mismo tipo tomado de la literatura publicada y se encontró que coinciden con un alto grado de precisión.

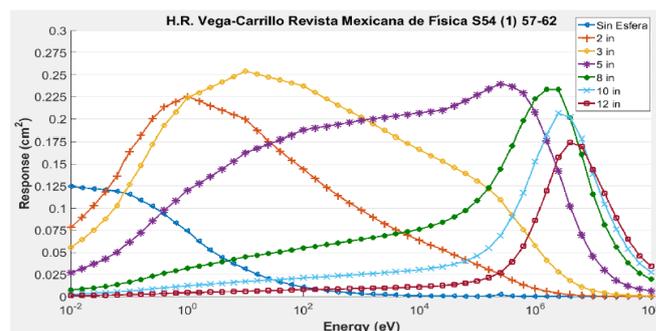


Figura 63: Matriz respuesta BSS (H.R. Vega-Carrillo, "Calculation of Response matrix of a BSS with ${}^6\text{LiI}$ scintillator")

Por lo tanto, el modelo del detector de esferas Bonner queda validado por las medidas experimentales de la fuente de ${}^{241}\text{Am-Be}$, por lo que se puede afirmar, que los datos obtenidos de la simulación que se va a realizar en este trabajo con MCNP6 de flujo de partículas en el acelerador lineal (LinAc) *Varian* serán correctos.

6.4. Resultados MCNP

Para realizar la simulación del detector con MCNP6, se ha partido de una superficie fuente o espacio de fases que se ha generado previamente en otra simulación y cuyo espectro de energía es de 15 MeV. Este espacio de fases tiene un tamaño de campo de 1 m² por 20 cm de ancho, y está situado en el eje central que une la fuente con el isocentro a 44.5 cm de éste y a 55.5 cm de la fuente.

La simulación de este trabajo se ha lanzado con un número de partículas NPS de 1·10¹¹. La simulación MCNP6 se ha ejecutado en la máquina Quasar, Cluster de computación del grupo ISIRYM, utilizando un total de 12 procesadores MPI, con un tiempo de cálculo de 257 horas y un total de 9241910 partículas leídas.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en la simulación del problema mediante el programa MCNP. Los valores de flujo medio de partículas se normalizan para que se lea el registro de todas las partículas en la esfera que registra un mayor número de partículas por cm², la esfera número 2.

Detector	Øesf. (pulgadas)	partículas/cm2	Normalizado
sin_esfera	0	1.63420E-10	0.92422194
esfera_1	2	1.75470E-10	0.99237073
esfera_2	3	1.76819E-10	1
esfera_3	5	1.33810E-10	0.75676257
esfera_4	8	6.91492E-11	0.39107336
esfera_5	10	4.45392E-11	0.25189148
esfera_6	12	2.57680E-11	0.14573095

Tabla 11: Datos obtenidos en la simulación MCNP

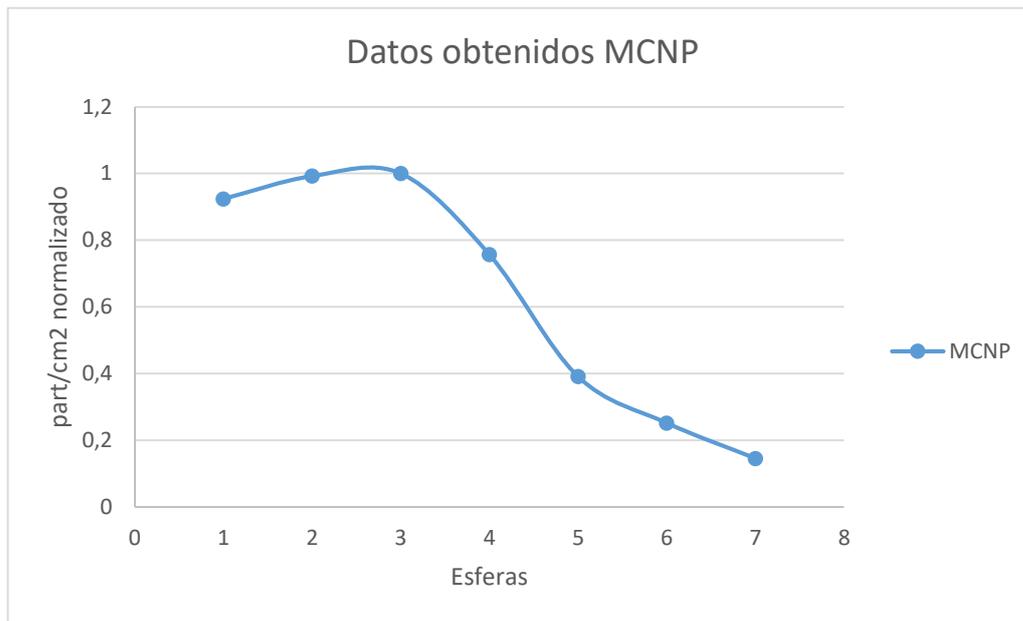


Figura 64: Gráfico de datos obtenidos en la simulación MCNP

Como se observa en la figura 58, la regresión de la curva que se consigue tras graficar los datos obtenidos en la simulación del detector con MCNP nos ofrece la cantidad de neutrones medidos por un detector para cada una de las esferas de polietileno. Se observa que la dirección de la curva obtenida en la simulación realizada del Linac es diferente a la curva realizada con la fuente $^{241}\text{Am-Be}$. Esto se debe a la diferencia de espectros que posee el Am-Be con respecto al espectro de neutrones inducidos que se generan en el LinAc. Precisamente, este trabajo permitirá en el futuro poder estudiar y reconstruir el espectro de neutrones generado.

Finalmente, se muestra como resultado una imagen correspondiente a la distribución del flujo medio de partículas en el detector simulado. Concretamente, estos datos corresponden a la simulación realizada del modelo del detector con la esfera número 5. Como se observa en la imagen, se recibe una mayor cantidad de neutrones en la parte izquierda de la esfera, parte que está enfocada al isocentro y por lo tanto a la zona de la fuente. A medida que estos neutrones van atravesando la esfera moderadora, se van termalizando y, por lo tanto, los neutrones que llegan al cristal centelleador son menos energéticos y llega menor flujo de partículas.

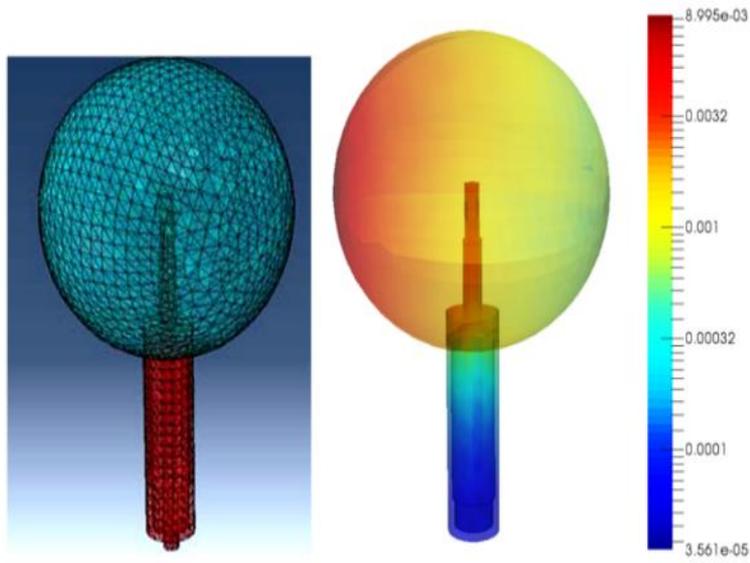


Figura 65: Distribución flujo de neutrones dentro de la esfera moderadora (partículas/cm²)



7. Conclusiones

El trabajo realizado en este TFM se enmarca dentro del campo de investigación de la planificación de tratamiento en radioterapia y de la simulación con métodos Monte Carlo en transporte de radiación. El objetivo principal de este trabajo ha sido el desarrollo de una simulación de irradiación en una instalación de un acelerador lineal médico, con un modelo de detector de espectrómetro de esferas Bonner (BSS), que es capaz de cuantificar el flujo medio de fotoneutrones extra que se producen en la realización de un tratamiento de radioterapia por activación de los elementos propios del acelerador y de la instalación.

Para el correcto desarrollo del trabajo, ha sido necesario el aprendizaje de los diferentes softwares utilizados: tanto el software utilizado para modelar y obtener la geometría necesaria para el modelo en 3D, *SpaceClaim*, como el software utilizado para definir y mallar cada una de las partes que componen el detector del modelo, *Abaqus/CAE*.

También ha sido de vital importancia el aprendizaje y manejo del programa utilizado para simular el modelo del detector, Monte Carlo N-Particle transport code (*MCNP*).

El aprendizaje y posterior manejo de estos programas han aportado la capacidad de poder realizar las tareas específicas de cada uno de ellos en proyectos posteriores; por lo que se puede considerar que, con la realización de este trabajo, se ha conseguido un objetivo secundario.

El modelo del detector ha sido validado con las medidas experimentales de una fuente de $^{241}\text{Am-Be}$ y su comparación con los resultados de simulación utilizando el modelo creado del detector. Tras el análisis de los resultados de la simulación en comparación con la validación del modelo del detector, se concluye que los resultados obtenidos son bastante precisos, con lo que queda validado el modelo del espectrómetro de la simulación.

Además, se ha calculado la matriz respuesta de este detector comparándola con datos bibliográficos ampliando así el estudio de validación del detector previamente realizado.

Con esto, se concluye que los resultados obtenidos en la simulación MCNP situando el detector en la instalación del LinAc son correctos, y el modelo realizado para dicha simulación es válido y utilizable para cualquier simulación futura.

Una vez obtenidos los datos de la simulación de los neutrones medidos para cada esfera de polietileno y utilizando la matriz respuesta calculada, una rama derivada de este trabajo sería la obtención de la dosis absorbida (cantidad de energía depositada en la materia por unidad de masa en un volumen



determinado) extra proporcionada al paciente y a los trabajadores de la instalación radiactiva, producida por neutrones en el propio acelerador. Para ello, sería necesario el tratamiento de la información, para obtener los resultados en unidades de dosis. Sin embargo, esto no se ha realizado ya que está fuera de las competencias establecidas para la realización de este trabajo final de máster.

La continuación a este trabajo vendría dada por validar los resultados obtenidos de la simulación con resultados experimentales obtenidos tras la medición en una instalación de radioterapia que operara con el mismo acelerador lineal con el que se ha simulado este trabajo, un acelerador *Varian*.

Tras la realización de este TFM, la principal línea futura de trabajo sería la reconstrucción del espectro de energía de los neutrones producidos por la activación de las partes del acelerador lineal *Varian*.



Bibliografía

- [1] Roger L. Martz, *"The MCNP6 Book On Unstructured Mesh Geometry: User's Guide"*, LA-UR- 11-05668 Rev. 8, MCNP6 code release to RSICC, Oak Ridge, TN and general distribution.
- [2] Monte Carlo team, *"MCNP6TM – User's manual, Version 6.1.1beta"*, Los Álamos National Laboratory, LA-CP-14-00745, Rev. 0, June 2014.
- [3] Dassault Systèmes, 3DExperience Company, *"ABAQUS 6.14, ABAQUS/CAE User's Guide"*, 2014, (<http://server-ifb147.ethz.ch:2080/v6.14/index.html>)
- [4] Bielajew, A.F. *"Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particles transport"*. USA, Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences. University of Michigan, 2001.
- [5] Ortega Aramburu, X., Jorba Bisbal, J. *"Radiaciones ionizantes: utilización y riesgos Volumen I."* Barcelona, 1996.
- [6] Ródenas Diago, José. *"Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva"*. Inter tecnica ediciones. UPV. 2003.
- [7] *"American Cancer Society"*. www.cancer.org.
- [8] *"Radiaciones ionizantes"*. www.insht.es
- [9] Hakim Mazrou, Zahir Idiri, Tassadit Sidahmed, Malika Allab, *"MCNP5 evaluation of a response matrix of a Bonner Sphere Spectrometer with a high efficiency ⁶Lil (Eu) detector from 0.01 eV to 20 MeV neutrons"* Budapest, Hungary, 2010
- [10] Helmut W Fischer, Ben E Tabot, Björn Poppe, *"Activation Processes in Medical Linear Accelerators and Spatial Distribution of Activation Products"* University of Bremen, Bremen, Germany
- [11] Sergio Morató, Belén Juste, Rafael Miró, Gumersindo Verdú, Vicent Guardia *"Evaluation of the Response of a Bonner Sphere Spectrometer with a ⁶Lil detector using 3D meshed MCNP6.1.1 models"*
- ¹Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental, Universitat Politècnica de València, Valencia, España
- [12] Cruzate, J.A.; Carelli, J.L. and Gregori, B.N., *Bonner Sphere Spectrometer, Workshop on Uncertainty Assessment in Computational Dosimetry, Bologna, Italy (2007)*.
- [13] Consejo de seguridad nuclear www.csn.es
- [14] Reglamento sobre protección sanitaria contra radiaciones ionizantes www.boe.es



[15] ICRP publication 103, ICRP publication 60 www.icrp.org

[16] Sergio Morató Rafet *“Planificación en Radioterapia mediante el uso de modelos realistas personalizados de pacientes a partir de imagen TC con malla no estructurada”*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, España

[17] Belén Jeanne Juste Vidal *“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)”*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, España

[18] H.R. Vega-Carrillo, I. Donaire, E. Gallego, E. Manzanares-Acuña, A. Lorente, M.P. Iñiguez
Calculation of Response matrix of a BSS with 6LiI scintillator, *Revista Mexicana de física* S54 (1) 57-62

Anexo I

- Modelización de las partes del detector

Carcasa Exterior

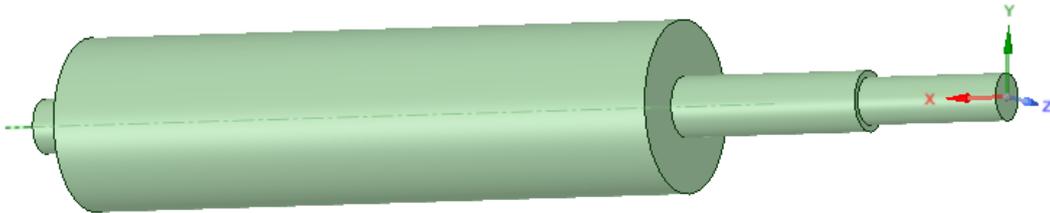


Figura 66: Visualización 3D de la carcasa del detector modelado en *SpaceClaim*

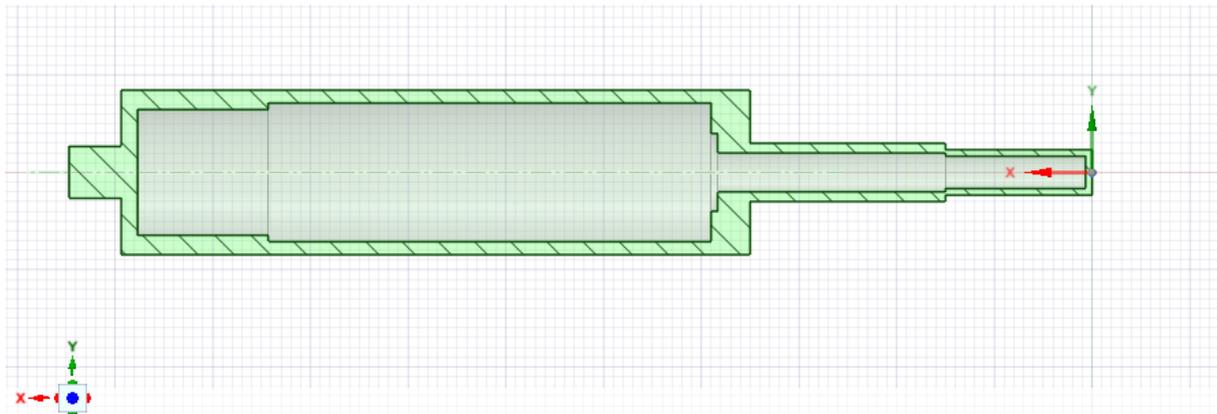


Figura 67: Sección transversal de la carcasa exterior modelado en *SpaceClaim*

Tubo ligero de plexiglás

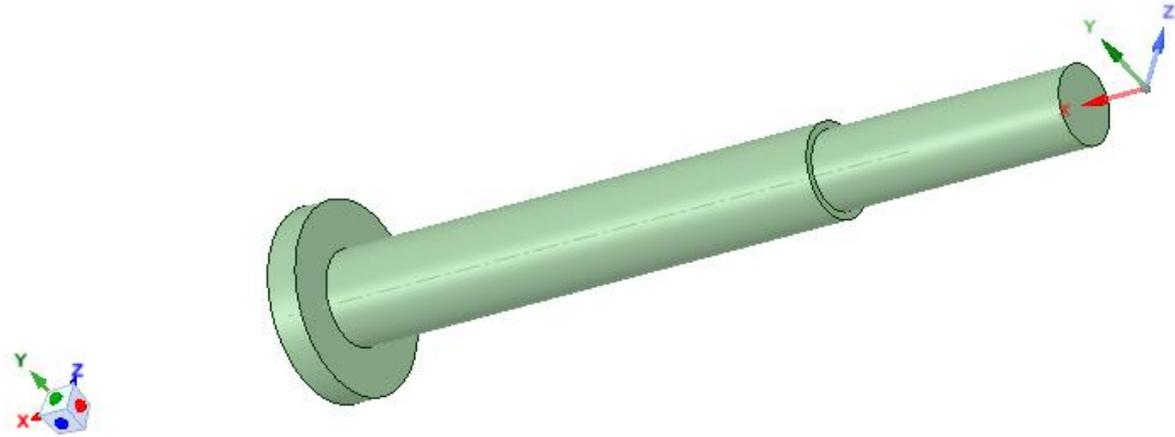


Figura 68: Visualización 3D del tubo ligero de plexiglás modelado en *SpaceClaim*

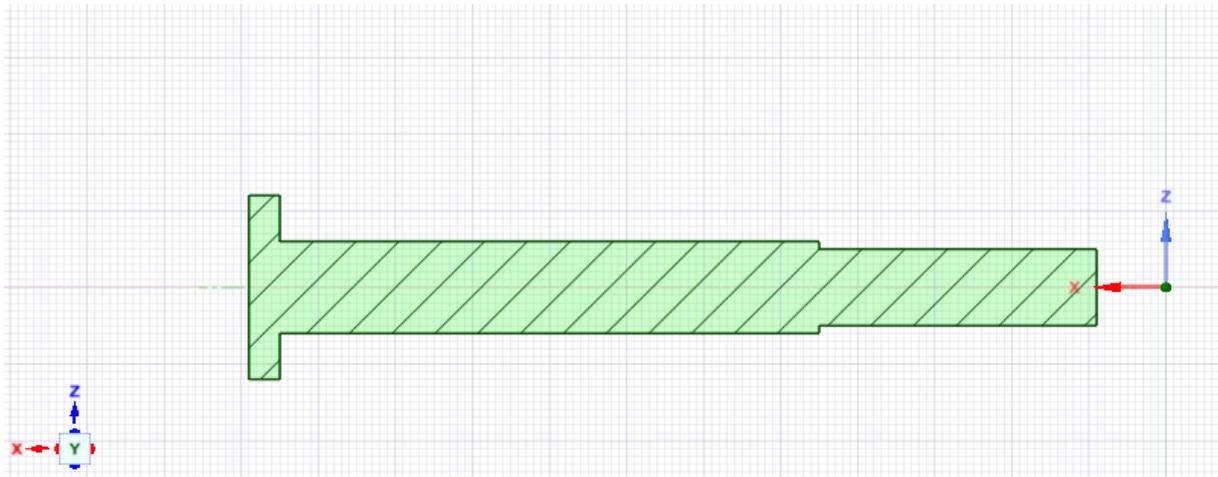


Figura 69: Sección transversal del tubo ligero de plexiglás modelado en *SpaceClaim*

Centelleador Activo ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$

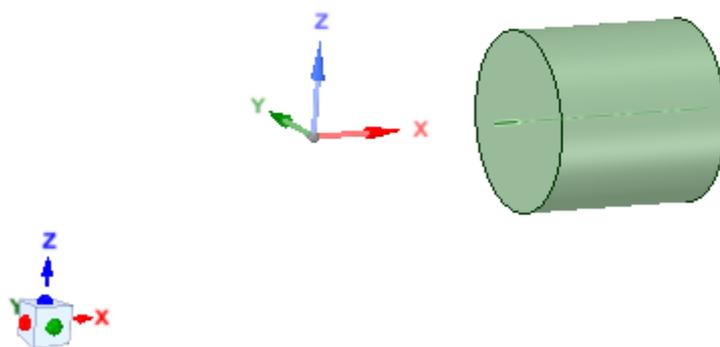


Figura 70: Visualización 3D del centelleador activo modelado en *SpaceClaim*

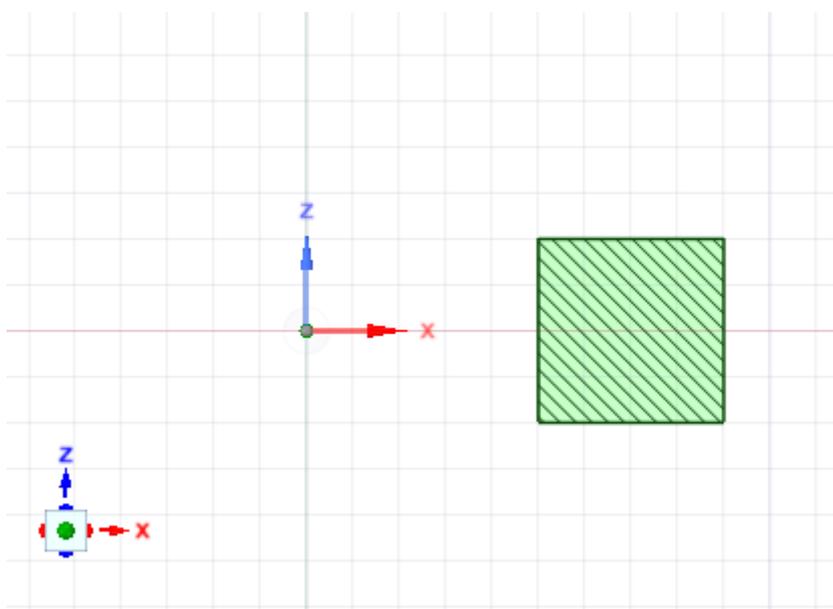


Figura 71: Sección transversal del centelleador activo modelado en *SpaceClaim*

- Modelización de las esferas

Esfera 2

Esfera de diámetro 3" ($\varnothing = 76.2$ mm)

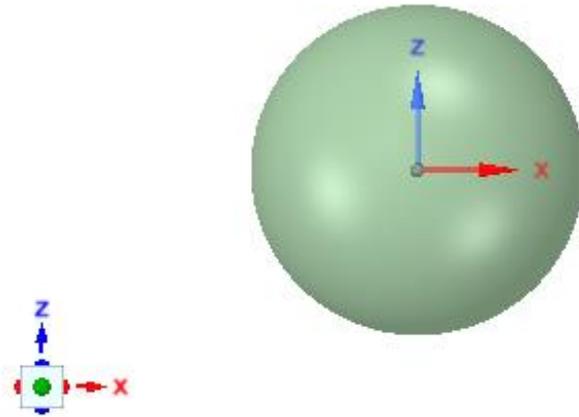


Figura 72: Visualización 3D de la esfera 2

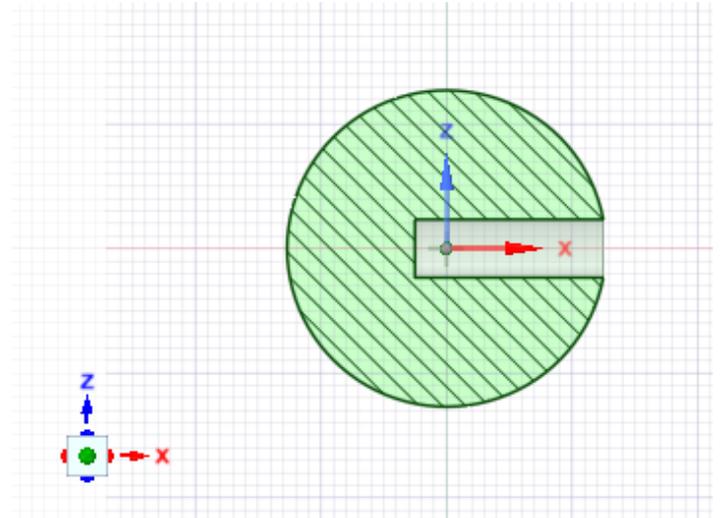


Figura 73: Sección transversal de la esfera 2

Esfera 3

Esfera de diámetro 5" ($\varnothing = 127$ mm)

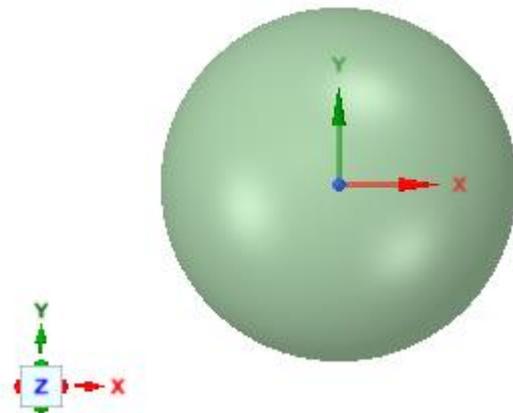


Figura 74: Visualización 3D de la esfera 3

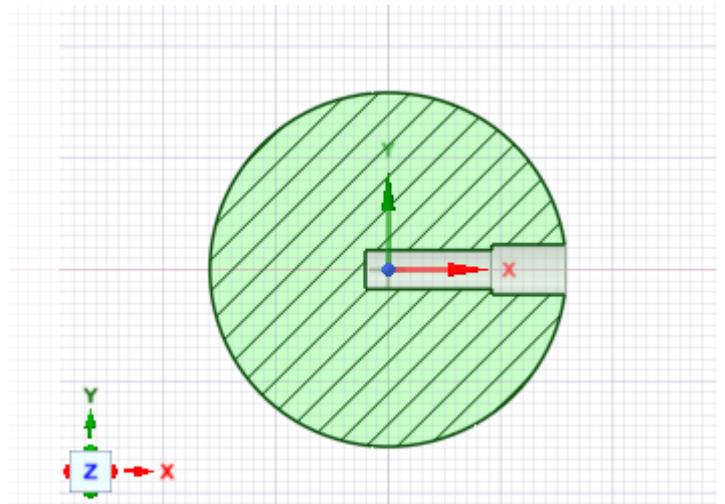


Figura 75: Sección transversal de la esfera 3

Esfera 4

Esfera de diámetro 8" ($\varnothing = 203.2$ mm)

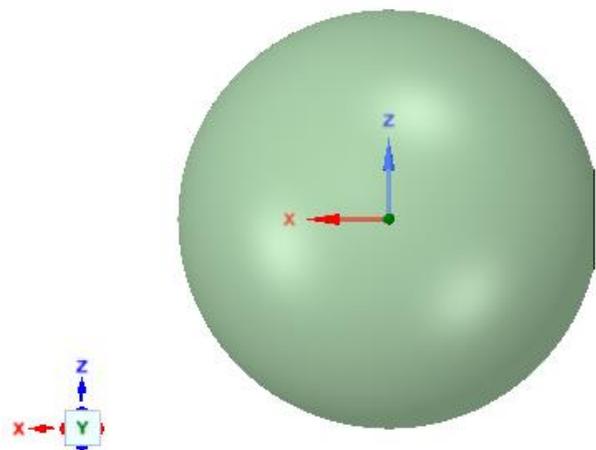


Figura 76: Visualización 3D de la esfera 4

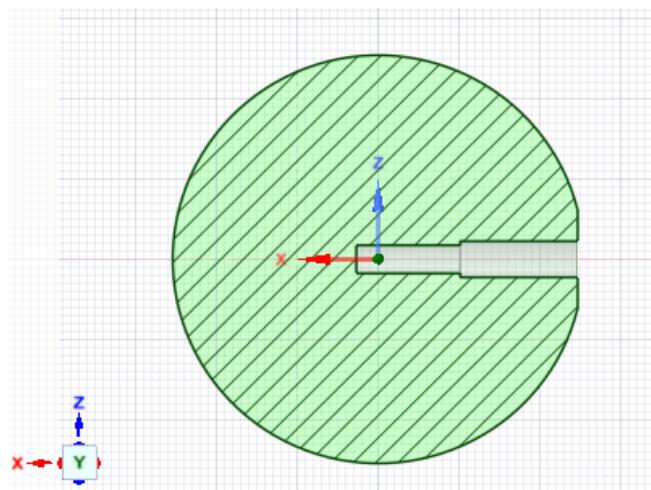


Figura 77: Sección transversal de la esfera 4

Esfera 5

Esfera de diámetro 10" ($\varnothing = 254$ mm)

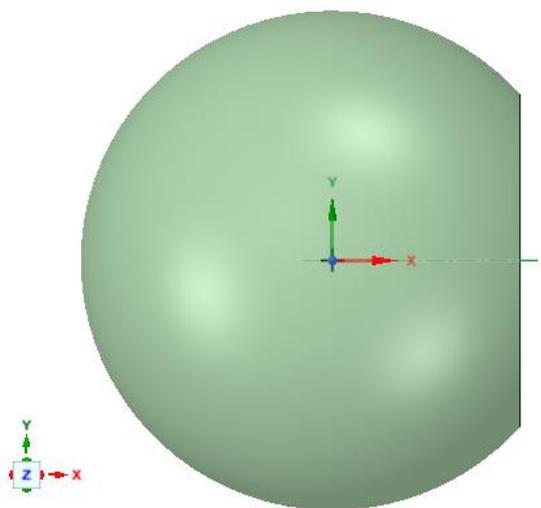


Figura 78: Visualización 3D de la esfera 5

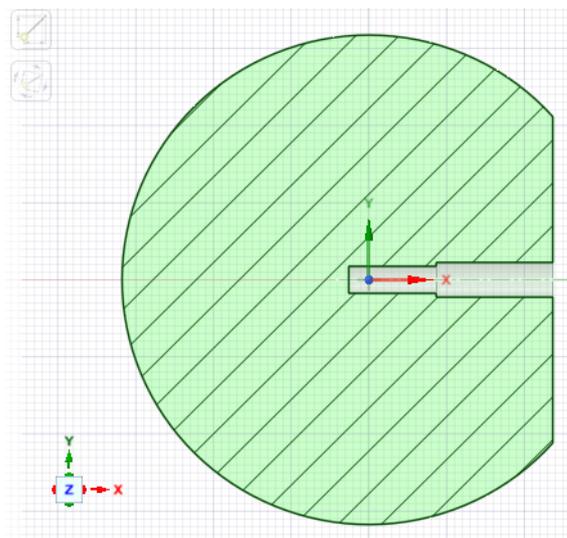


Figura 79: Sección transversal de la esfera 5

Esfera 6

Esfera de diámetro 12" ($\varnothing = 304.8$ mm)

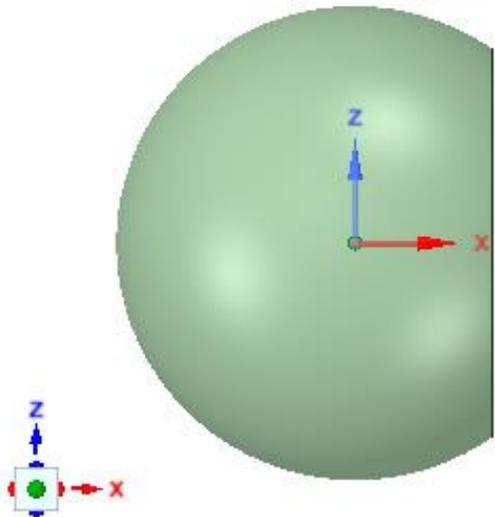


Figura 80: Visualización 3D de la esfera 6

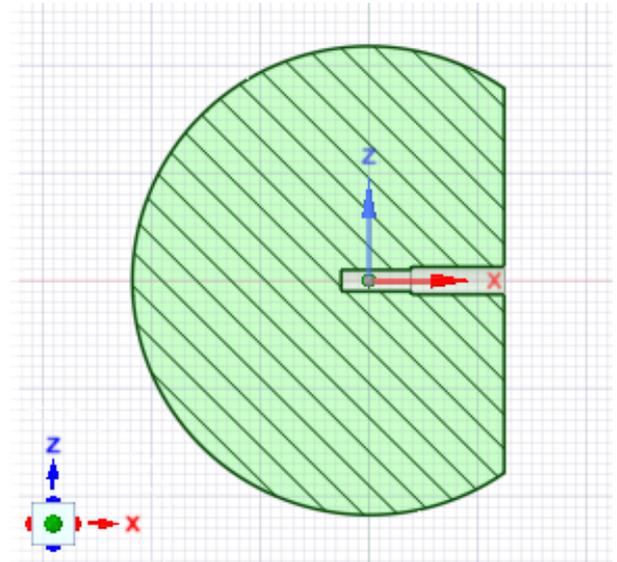


Figura 81: Sección transversal de la esfera 6

Anexo II

- Mallado

Carcasa exterior del detector

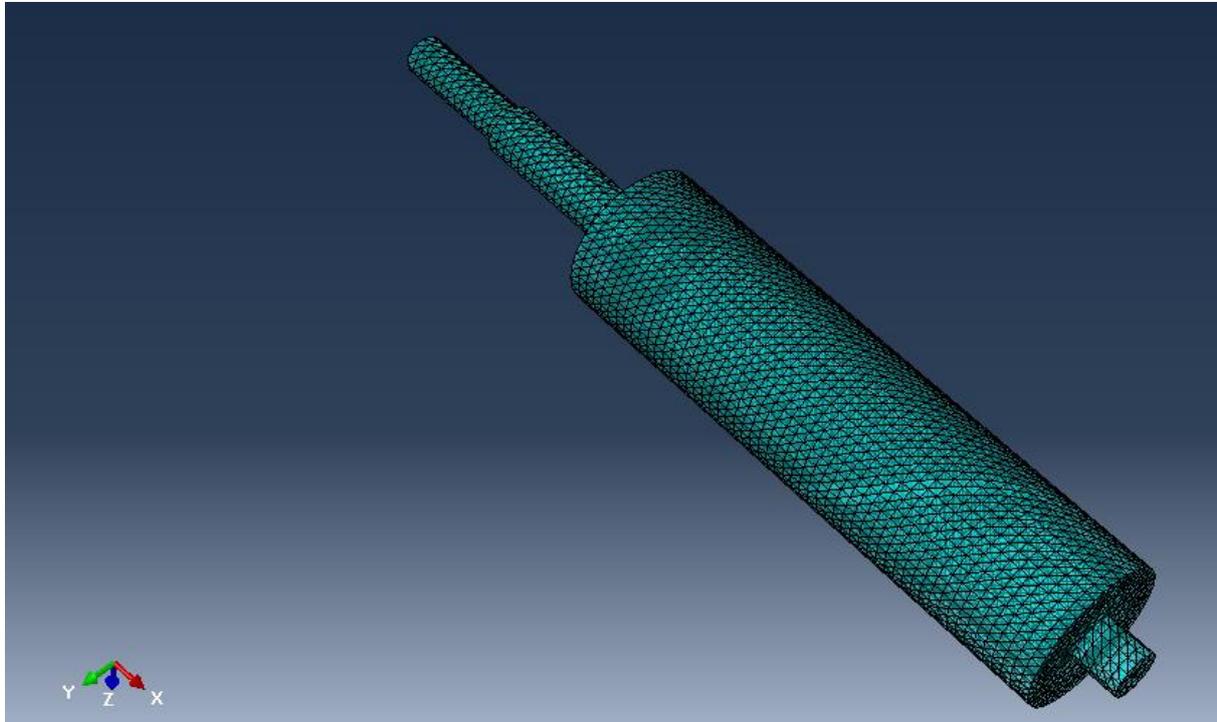


Figura 82: Visualización 3D del detector mallado con *Abaqus/CAE*

Tubo ligero de pexiglás

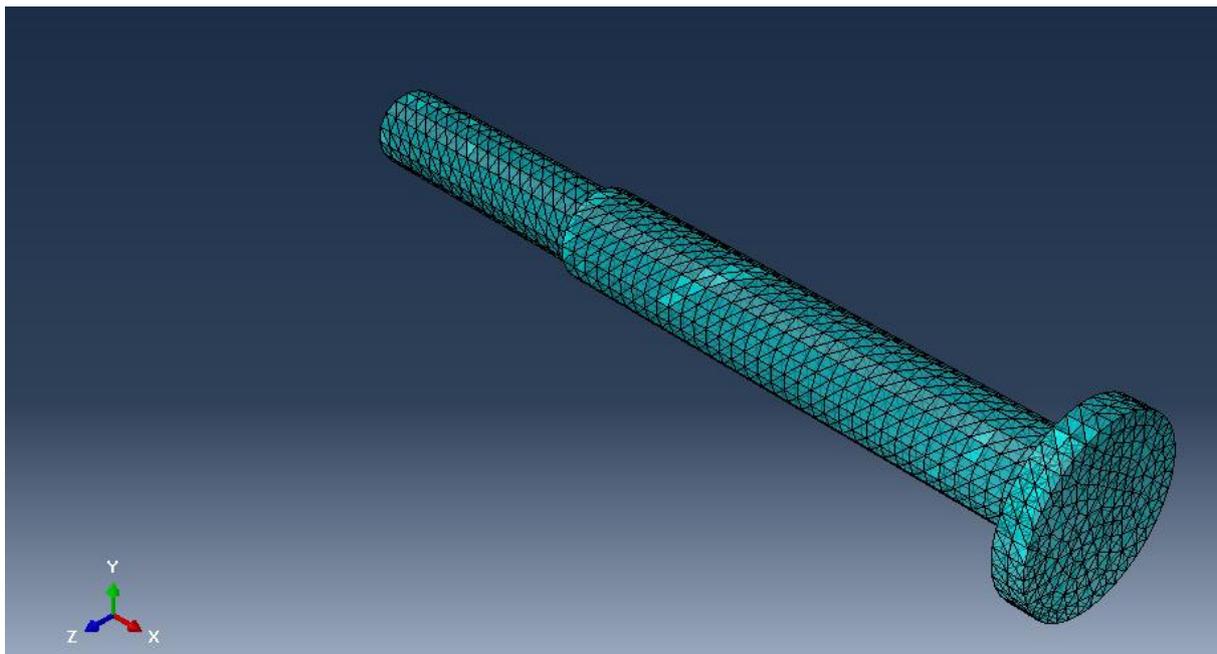


Figura 83: Visualización 3D del tubo ligero de Plexiglás mallado con *Abaqus/CAE*

Centelleador activo ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$

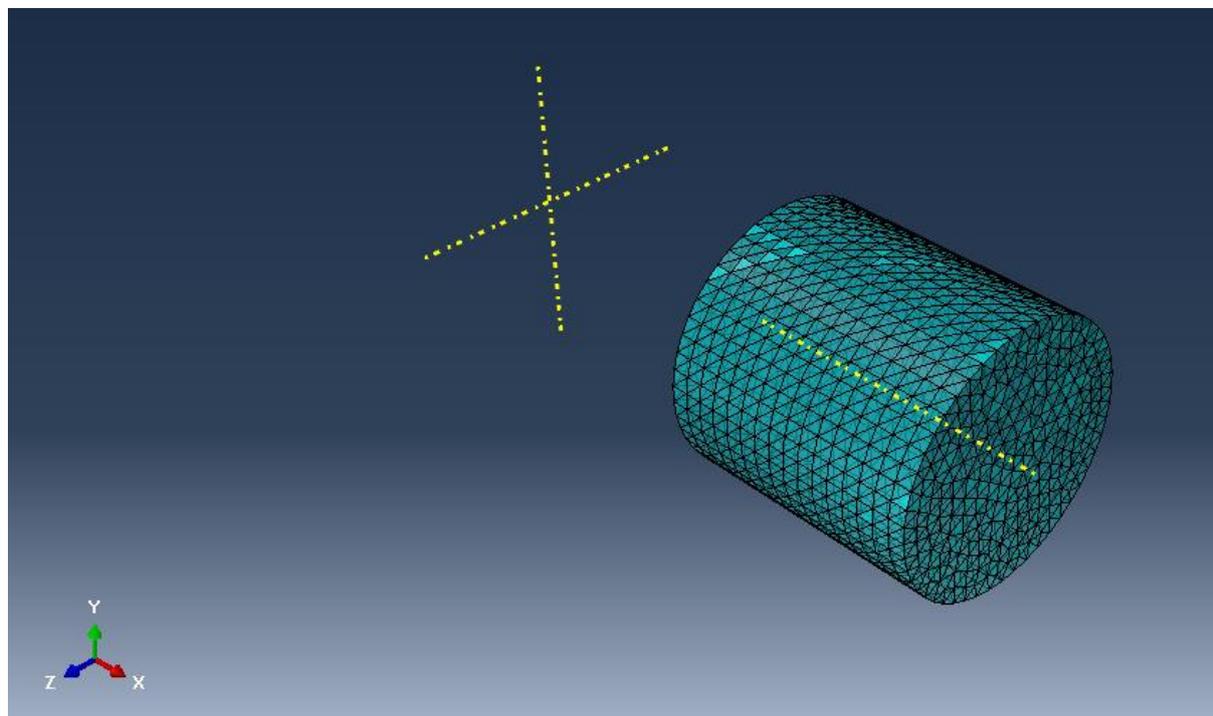


Figura 84: Visualización 3D del cristal centelleador ${}^6\text{LiI}$ mallado con *Abaqus/CAE*

Conjunto detector



Figura 85: Visualización 3D del conjunto detector mallado con *Abaqus/CAE*



Anexo III

Archivo de entrada (input) MCNP

Input Detector

```

c
c PSEUDO CELLS
1      1      -2.69900      0  u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
2      2      -1.19000      0  u=1 imp:p=4 imp:n=4 imp:e=4
3      3      -3.49400      0  u=1 imp:p=16 imp:n=16 imp:e=16
4      5      -0.95000      0  u=1 imp:p=8 imp:n=8 imp:e=8
5      0
c
c CELDAS
6      4      -0.0012048  -99 #8 #9 #10 fill=1 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
7      0      99          imp:p=0 imp:n=0 imp:e=0
8      4      -0.0012048  1 -2 -3 4 5 -31 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
9      6      -2.35000      6 -7 8 -9 10 -11 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1
10     6      -2.35000      6 -7 8 -9 12 -13 imp:p=1 imp:n=1 imp:e=1

c SURFACES
99 sph  0  0  0  800
1 PX -50
2 PX 50
3 PY 50
4 PY -50
5 PZ 43.5
31 PZ 44.5
6 PX -338.71
7 PX 338.71
8 PY -514.5
9 PY 514.5
10 PZ 150
11 PZ 230
12 PZ -130
13 PZ -50
14 S 0 100 0 10

c
c DATA CARDS
embed1 meshgeo=abaqus
      mgeoin=detector-esfera_4_malla_grande.inp
      meeout=detector-esfera_4_malla_grande.eeout
      length= 1.00000E+00
      background= 5
      matcell= 1 1 2 2 3 3 4 4
      overlap=exit

c
c TALLYS
fmesh14:n geom=xyz origin= -0.2 99.8 -1.1 &

```



```
imesh 0.2 iints 1 jmesh 100.2 jint 1 kmesh 0.7 kints 1 out=ij
*fmesh24:n geom=xyz origin= -0.2 99.8 -1.1 &
imesh 0.2 iints 1 jmesh 100.2 jint 1 kmesh 0.7 kints 1 out=ij
c
c TALLY BAJO ESPACIO DE FASES
fmesh34:n geom=xyz origin= -50 -50 41.5 &
imesh 50 iints 10 jmesh 50 jint 10 kmesh 42.5 kints 1 out=ij
*fmesh44:n geom=xyz origin= -50 -50 41.5 &
imesh 50 iints 10 jmesh 50 jint 10 kmesh 42.5 kints 1 out=ij
c
c TALLY PLANO DEL DETECTOR
fmesh54:n geom=xyz origin= -110 -110 0 &
imesh 110 iints 22 jmesh 110 jint 22 kmesh 1 kints 1 out=ij
*fmesh64:n geom=xyz origin= -110 -110 0 &
imesh 110 iints 22 jmesh 110 jint 22 kmesh 1 kints 1 out=ij
F74:N 3
F84:P 3
*F94:N 3
*F104:P 3
c
c Materiales
c Aire
m4 7014 -0.7553 8016 -0.2318 18000.35c -0.0128 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
c Plexiglas light pipe
m2 6000 -0.600 1001 -0.0800 8016 -0.3200 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx2:p 0 0 j
mx2:n 6000.70c j j
c Aluminio
m1 13027 -1.00 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
c Cristal
m3 003006 -0.0436 003007 -0.0018 053127 -0.9546 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx3:p 0 0 j
c Polietileno
m5 1001 -0.1430 6000 -0.8570 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c
mx5:p 0 j
mx5:n j 6000.70c
c Cemento (concrete portland)
m6 1002 -0.010000 6012.50c -0.001000 8016 -0.529107 11023 -0.016000 &
12026 -0.00022 12024 -0.00157 12025 -0.0002 13027 -0.033872 14028 -
0.337021 &
20040 -0.0426 20044 -0.00091 &
c 19039 -0.0121 19041 -0.00087 &
pnlb=70u plib=84p elib=03e nlib=80c $Cemento
c
SSR
c
c fuente
```



```
c SDEF POS=0 0 100 ERG=15 PAR=1 &  
c VEC=0 0 -1 DIR=d1  
c SI1 H -1 0.965926 1  
c SP1 D 0 0 1  
c  
mode p e n  
dbcn 48J 1  
PRDMP 1000 -1 1 2 0  
RAND gen=2 STRIDE=150000  
PHYS:N 16  
PHYS:P 16 0 0  
CUT:P J 7 -1  
CUT:E J 7 -1  
CUT:N J J -10E-09  
NPS 1E10  
print
```





II. PRESUPUESTO





Presupuesto

Mentis 8.1.12 - Versión evaluación

		Estudio de la dosis recibida por los trabajadores de las instalaciones de un Acelerador Lineal de Electrones (LinAc) debido a la contribución de foneutrones y productos de activación PRESUPUESTO DE RECURSOS POR CLASE	Pág.: 1	
		Estudios Previos	Ref.: prorec8	
			Fec.:	
Código	Cantidad	Descripción del recurso	Precio	Importe
.		Estudio de la dosis recibida por los trabajadores de las instalaciones de un Acelerador Lineal de Electrones (LinAc) debido a la contribución de foneutrones y productos de activación		
0000001		Estudios Previos		
7.3		Material		
6	1,000	Software SpaceClaim	550,00	550,00
7	1,000	Software Abaqus	400,00	400,00
8	1,000	Paquete Microsoft Office Professional 2010	699,00	699,00
		Total 7.3:		1.649,00
12.0		Tarea		
01	20,000	Aprendizaje lenguaje programación LINUX	25,68	513,60
02	10,000	Aprendizaje software SpaceClaim	25,68	256,80
03	20,000	Aprendizaje software Abaqus	25,68	513,60
04	30,000	Aprendizaje software MCNP	25,68	770,40
05	5,000	Aprendizaje software ParaView	25,68	128,40
		Total 12.0:		2.182,80
		Total Capítulo 0000001		3.831,80
0000002		Simulación prueba		
12.0		Tarea		
001	5,000	Definición geometría del cubo	25,68	128,40
003	10,000	Generación del input cubo	25,68	256,80
		Total 12.0:		385,20
		Total Capítulo 0000002		385,20
0000003		Modelado y mallado del detector		
12.0		Tarea		
0001	20,000	Definición y modelado de la geometría del detector	25,68	513,60
0002	5,000	Mallado de la geometría del detector	25,68	128,40
		Total 12.0:		642,00
		Total Capítulo 0000003		642,00
0000004		Simulación		
7.3		Material		
10	1,000	Detector espectrómetro Bonner Sphere	27.892,00	27.892,00
		Total 7.3:		27.892,00
12.0		Tarea		
00001	60,000	Generación del archivo de entrada (input) del detector	25,68	1.540,80
		Total 12.0:		1.540,80
		Total Capítulo 0000004		29.432,80
0000004		Desarrollo de la memoria		
2.0		Elemento constructivo		
000006	5,000	Análisis de resultados	25,68	128,40
000007	200,000	Redacción de la memoria	25,68	5.136,00
		Total 2.0:		5.264,40
		Total Capítulo 0000004		5.264,40

Mentis 8.1.12 - Versión evaluación



Métrie 8.1.12 - Versión evaluación

	Estudio de la dosis recibida por los trabajadores de las instalaciones de un Acelerador Lineal de Electrones (LinAc) debido a la contribución de foneutrones y productos de activación	Pág.: 1
	RESUMEN DE CAPÍTULOS	Ref.: preres2
		Fec.:

Nº Orden	Código	Descripción de los capítulos	Importe
01	0000001	Estudios Previos	3.831,80
02	0000002	Simulación prueba	385,20
03	0000003	Modelado y mallado del detector	642,00
04	0000004	Simulación	29.432,80
05	0000004	Desarrollo de la memoria	5.264,40

PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL 39.556,20

13% Gastos Generales 5.142,31

6% Beneficio Industrial 2.373,37

PRESUPUESTO BRUTO 47.071,88

21% I.V.A. 9.885,09

PRESUPUESTO LIQUIDO 56.956,97

Suma el presente presupuesto la cantidad de:

CINCUENTA Y SEIS MIL NOVECIENTOS CINCUENTA Y SEIS EUROS CON NOVENTA Y SIETE CÉNTIMOS