



ugr

Universidad
de Granada

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Modelo semianalítico para cálculos de dosimetría en radioterapia

Manuel Sabariego Quintanilla

Tesis Doctoral

Director de Tesis: José Ignacio Porras Sánchez

Programa de Doctorado:

Avances Clínicos y Desarrollo Tecnológico en Radiología,
Medicina Física y Física Médica

Granada, Febrero de 2016

Editor: Universidad de Granada. Tesis Doctorales
Autor: Manuel Pedro Sabariego Quintanilla
ISBN: 978-84-9125-754-7
URI: <http://hdl.handle.net/10481/43469>

A Paula, Andrea, Clara e Inma

Agradecimientos

Hoy es un día feliz, pues éstas son las últimas frases que escribo de un largo y arduo trabajo. No puedo evitar que en estos momentos se agolpen en mi mente recuerdos de toda mi vida, de muchas personas que, de una manera u otra, me ayudaron en este camino y a las que quiero hacerles llegar desde esta tribuna, mi más sincero agradecimiento.

A todos esos maestros y profesores que marcaron en mí el interés por el conocimiento y más recientemente a Antonio Lallena, que me animó a iniciar este doctorado; a Ignacio Porras, mi director de tesis, por su inestimable ayuda, comprensión y trato humano.

A las personas de talento anónimo que pueblan estos lares como Luis Contreras, compañero de facultad, por las matemáticas que me enseñó y su optimismo contagioso; mis compañeros del mundo laboral Guillermo Jabares, Antonio Morales, Juan Ruiz Tallón, Juan Gómez, Gregorio Leiva y Antonio Vilchez, por las dificultades y buenos momentos vividos luchando con las averías y por lo que aprendí de ellos sobre electricidad, electrónica y el “misterioso mundo ” de las ondas herzianas.

A Manolo Fernández, Mercedes Navarro, Pedro Lanzat y Lola Ocaña, amigos incondicionales, por su contagiosa alegría y apoyo en esta última etapa de trabajo.

A mi padre Isidoro, que desgraciadamente falleció y que hoy me gustaría estuviese presente, y a mi madre Dolores por ese gran esfuerzo y sacrificio que hicieron por sacarnos adelante.

A mis hermanos, María Jesús y su esposo Kees Windhorst por introducirme en el idioma inglés y porque siempre creyeron en mí; Santy y su esposa Cosco por todo su cariño y confianza.

A mis hijas Paula, Andrea y Clara, mi gran pasión, por todo el amor que me ofrecen y por el tiempo que no les pude dedicar y para las que me gustaría que este trabajo fuese un ejemplo de esfuerzo y perseverancia.

Y a mi esposa Inma, compañera infatigable de un largo viaje vital, por todo su amor y apoyo en el tránsito de esos largos y oscuros días del desánimo.

A todos ellos y a los que, por no extenderme, no he nombrado.

¡INFINITAS GRACIAS!

Contenido

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| Introducción | 1 |
| 1. Modelo semianalítico | 7 |
| 1.1. Características generales del modelo | 7 |
| 1.2. Cómputo de fotones y electrones generados | 9 |
| 1.3. Contribución a la energía de las distintas generaciones de fotones . . . | 13 |
| 1.3.1. Contribución de la generación $k = 0$ | 13 |
| 1.3.2. Contribución de la generación $k = 1$ | 15 |
| 1.3.3. Contribución de la generación k -ésima | 18 |
| 1.3.4. Aproximación simplificada para $e_k(r)$ | 22 |
| 1.3.5. Contribución total de los fotones dispersados | 24 |
| 1.4. Significado físico de los parámetros | 25 |
| 2. Simulaciones y Ajustes | 29 |
| 2.1. Simulaciones | 29 |
| 2.1.1. Aspectos generales de la simulación | 29 |
| 2.1.2. Algoritmo de separación de fotones dispersados | 32 |
| 2.1.3. Estimación de errores en los histogramas | 34 |
| 2.1.4. Validación de los Algoritmos | 35 |
| 2.2. Ajustes | 40 |
| 2.2.1. Aspectos generales de los ajustes | 40 |
| 2.2.2. Importancia relativa de las generaciones de fotones dispersados . | 41 |
| 2.2.3. Ajustes de los fotones primarios | 41 |
| 2.2.4. Ajuste de los fotones dispersados | 44 |
| 3. Aplicación a una fuente lineal | 53 |
| 3.1. Cálculo de la dosis depositada por una fuente lineal | 54 |
| 3.1.1. Cálculo de las funciones del TG-43 para una fuente lineal | 59 |
| 4. Aplicación al cálculo de fracciones específicas de absorción. | 71 |
| 4.1. Consideraciones iniciales | 71 |
| 4.2. Fracción específica de absorción cuando la fuente es puntual | 72 |
| 4.3. Fracción específica de absorción entre dos esferas | 77 |
| 4.4. Contraste numérico. | 81 |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5. Aplicación a la terapia por captura de neutrones | 83 |
| 5.1. Cálculo de la dosis de fotones en BNCT | 85 |
| Conclusiones y perspectivas | 91 |
| A. Ajustes en otros medios | 93 |
| B. Transformación de sumas en $S_{n,m}(z)$ | 101 |
| C. Integrales auxiliares $I_n(x, y; \mu)$ y $J_n(x, y, z, \mu)$ | 103 |
| C.1. Integrales $I_n(x, y; \mu)$ | 103 |
| C.1.1. Aproximaciones de $I_n(L, R; \mu)$ para R pequeño | 104 |
| C.2. Integrales $J_n(x, y, z; \mu)$ | 106 |
| Bibliografía | 108 |

Introducción

La importancia y el gran impacto social que representa la lucha contra el cáncer, así como el peso que la terapia con radiaciones ionizantes tiene en dicho contexto, hacen que los métodos para calcular distribuciones espaciales de dosis absorbidas en diferentes medios cobren especial relevancia y hayan sido objeto de una amplia investigación durante las últimas décadas. Entre las terapias más frecuentes en uso clínico podemos situar a aquellas que utilizan fotones como agente ionizante, siendo la forma en que se ha encauzado su dosimetría objeto de diversos enfoques y métodos a lo largo de los años, los cuales podríamos englobar dentro tres puntos de vista diferentes: el enfoque determinista, la visión estocástica y el empleo de modelos físicos.

Una forma general y con gran potencialidad de abordar la dosimetría de fotones, dentro de una visión determinista del problema, es utilizar una *ecuación de transporte* como la de Boltzmann. Esta ecuación surge de un modelo semiclásico para sistemas ideales y aislados de partículas puntuales que se mueven formando un gas, interactuando entre ellas y que no están en equilibrio.

La solución de la ecuación de Boltzmann es una función de distribución $f(\vec{r}, \vec{p})$ en el espacio de las fases de 6 dimensiones $(r_x, r_y, r_z, p_x, p_y, p_z)$ que nos indica el número de partículas que tienen la posición en el intervalo $(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r})$ y el momento en $(\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p})$. Con esta información es posible calcular múltiples propiedades como densidades de corriente, flujos de energía, conductividad eléctrica, coeficientes de difusión, etc.

Para el caso de fotones y electrones que interactúan con un medio material, la aplicación de la ecuación de Boltzmann supone asumir ciertas restricciones, entre las que podemos destacar: (i) el sistema no está en equilibrio pero se encuentra en estado estacionario, lo que permite no considerar su variación con el tiempo; (ii) las trayectorias son rectas entre dos interacciones sucesivas; (iii) las partículas son puntuales; (iv) las interacciones se realizan de forma instantánea en los centros de dispersión (átomos y electrones), los cuales ocupan una posición precisa en el espacio, por lo que el cambio en la energía y dirección son inmediatos y no están correlacionados antes y después del choque (hipótesis de caos); (v) las interacciones se realizan con un centro de dispersión a la vez (aproximación de gas diluido) ignorando así los efectos de interferencia y difracción.

La aplicación del formalismo de Boltzmann implica resolver un sistema de ecuaciones integro-diferenciales acopladas (una para cada tipo de partícula implicada, como fotones, electrones y positrones [1]), en las que además, se deben aplicar las condiciones de contorno del sistema concreto a tratar.

La resolución de estas ecuaciones es una tarea muy difícil no solo analítica sino incluso numéricamente, por lo que durante muchos años, el uso de la ecuación de Boltzmann en la dosimetría de fotones quedó muy limitado.

Con el aumento del poder de computación en los ordenadores actuales, en los últimos años se han desarrollado códigos para la resolución numérica de la ecuación de Boltzmann con muy buenos resultados, tanto en precisión como en tiempo de cómputo [2] [3]. Estos códigos, denominados GBBS (grid-based Boltzmann solver), discretizan el espacio, el ángulo y la energía, resolviendo la ecuación de Boltzmann iterativamente en pequeños elementos de volumen [4], lo que permite su aplicación en medios no homogéneos. Attila[©] es un código GBBS de propósito general que abarca desde la fusión nuclear [5] hasta la tomografía óptica [6] y que ha sido usado con éxito para cálculos de dosimetría por Gifford *et al.* 2006 [7] y Vassiliev *et al.* 2008 [8].

Transpire Inc. (Gig Harbor, WA, USA), basándose en Attila, desarrolló el código AcurosTM, que está optimizado para las necesidades específicas de los cálculos de dosis en radioterapia resultando unas diez veces más rápido que Attila [2]. Acuros se ha implementado en sistemas de planificación como el Eclipse versión 10.1 de Varian (Varian Medical Systems, Palo Alto, CA, USA).

El *enfoque estocástico* de abordar el problema viene representado por el uso de los métodos Monte Carlo. Utilizados primeramente en el desarrollo de la bomba atómica, en su aplicación al transporte de radiación para aplicaciones en radioterapia, constituyen en la actualidad una herramienta muy precisa y fiable en dichas aplicaciones, proporcionando tests para el desarrollo de otros métodos de cálculo en dosimetría, como es el caso del modelo que se presenta en esta tesis.

Dado un evento gobernado por una probabilidad de ocurrencia, los métodos Monte Carlo reproducen dicha ocurrencia mediante la simulación de un gran número de tales eventos a través de números aleatorios distribuidos de acuerdo a dicha probabilidad. Se trata, en consecuencia, de una simulación de la realidad física, incluyendo la varianza inherente a tales procesos probabilísticos.

En el transporte de la radiación, el método Monte Carlo reproduce trazas individuales (historias) de cada partícula en su tránsito por el medio material. Conocidas las probabilidades o secciones eficaces de todos los procesos implicados, el algoritmo Monte Carlo en cada evento, sorteando el tipo de proceso, la distancia y dirección hasta la siguiente interacción, la energía depositada en ella y así sucesivamente hasta que la partícula termina absorbiéndose. Para una visión general de los métodos Monte Carlo véase, por ejemplo, [9–11].

Al realizar una simulación paso a paso de gran número de partículas, el algoritmo Monte Carlo está reproduciendo el transporte de radiación, sobre el cual la ecuación de Boltzmann proporciona una solución determinista, por lo que los algoritmos Monte Carlo constituyen una solución estocástica a dicha ecuación y ambas soluciones convergen en la medida de lo precisas que sean las aproximaciones usadas en ambos métodos [2, 10].

El principal problema en el uso de técnicas Monte Carlo es el tiempo de computación necesario para simular millones de historias. Dicho tiempo ha ido disminuyendo en la medida que la potencia de los ordenadores ha aumentado, sin embargo, en la actualidad

sigue siendo grande, lo que limita su uso masivo en la planificación de los tratamientos con pacientes.

En aras de disminuir dicho tiempo de procesado, los códigos Monte Carlo han ido evolucionado hacia algoritmos mixtos, en los cuales varias interacciones con pérdida de energía pequeña (menores que un cierto valor umbral) son condensados en un único evento, mientras que por encima de esos valores umbrales la simulación se realiza de forma detallada.

Otra forma de aumentar la velocidad de proceso, es la de simular menor número de historias, lo que supone aumentar la varianza asociada, por lo que se hace necesario el uso de técnicas que reduzcan esta varianza [10, 12]. Entre ellas son de uso común algoritmos como: *Interaction forcing* o forzado de la interacción, la cual obliga a realizar la interacción en los eventos de interés cuya probabilidad sea baja, en detrimento de aquellos casos con mayor probabilidad pero de menor interés para nuestra simulación; *Russian roulette* (Ruleta Rusa), que desecha la simulación de partículas situadas fuera de la región espacial de nuestro interés; *Splitting* (división), que constituye el caso contrario al de la ruleta rusa, dividiendo el peso de la acción de una partícula dentro de la región de interés en la de varias partículas cuya suma de pesos es igual a la originaria, produciendo para un mismo efecto el aumento en el número de partículas y por tanto una disminución de la varianza; *Ant colony algorithm* [13] [14], algoritmo de reciente implementación y basado en el comportamiento de las colonias de hormigas cuando al encontrar una fuente de alimentos, dejan un rastro de feromonas para indicar su situación a otros individuos de la colonia e inspirándose en este rastro, el algoritmo establece una prioridad para escoger en qué casos usar la Ruleta Rusa y en cuales el Splitting.

Entre los códigos Monte Carlo más utilizados para el transporte de radiación, encontramos: ETRAN [15]; EGS4 [16]; EGSnrc [17]; GEANT [18]; GEANT4 [19]; MCNPX [20] y PENELOPE [12, 21]. En la realización de esta tesis se ha utilizado, casi en exclusiva, el código PENELOPE en sus diversas versiones debido a que ofrece muy buenos resultados así como una gran versatilidad y facilidad de uso, habiéndose utilizado MCNPX solamente en el capítulo 5 para simular los haces de neutrones en BNCT, que PENELOPE no simula.

La dificultad en la solución de la ecuación de Boltzmann y el alto tiempo de computación que conlleva la aplicación de los algoritmos Monte Carlo ha fomentado, a lo largo de los años, la búsqueda de alternativas en el cálculo de la dosimetría de fotones. Algunos autores [22] clasifican estos métodos en dos grandes grupos, por un lado los que están basados en medidas empíricas sobre medios y maniquís estandarizados, que posteriormente son extrapolados a otros casos mediante correcciones (*correction-based algorithms*) y por otro, los que están basados en principios físicos que simplifican el transporte de la radiación facilitando el cálculo de dosis (*model-based algorithms*), entre los cuales podríamos clasificar el desarrollado en esta tesis.

Los métodos basados en correcciones, desarrollados con anterioridad a 1980, ofrecen una precisión aceptable en medios homogéneos como el agua y todavía son usados en la práctica clínica como una estimación manual de dosis y en algún software comercial [23,24] como *segunda opinión* o test, sin embargo, para medios no homogéneos como los

tejidos humanos no ofrecen resultados muy precisos. Algunos de estos métodos son los que basan en los valores: PDD (*percentage depth dose*), desde 1941 [25]; TAR (*tissue-air ratio*) (1953) [26]; TPR (*tissue-phantom ratio*) (1965) [27] y TMR (*tissue-maximum ratio*) (1970) [28].

Los *algoritmos basados en modelos* parten del estudio de los procesos físicos, donde un haz de partículas interacciona con el medio en un punto liberando energía que parte se deposita en el lugar de la interacción y otra parte se dispersa a través de electrones y fotones secundarios que la depositan alrededor del punto de interacción.

Un primer enfoque a la dosimetría de fotones desde el punto de vista expresado en el párrafo anterior, se resume en el trabajo de Berger [29] sobre fuentes puntuales, el cual constituye la inspiración inicial del trabajo desarrollado en esta tesis.

Sobre la dosis que deposita una fuente puntual, Berger distingue dos aportaciones: i) la debida a los fotones que salen directamente de la fuente o primarios y que se atenúan según una exponencial decreciente a cualquier distancia r del origen y por tanto, no incluye el desequilibrio electrónico que se produce a distancias muy cercanas a la fuente; ii) la debida a los fotones dispersados, para los que utiliza una relación entre la dosis total y la depositada por los fotones primarios llamada *Buildup factor* (factor de acumulación) [30]. En un trabajo previo a esta tesis [31] se proporcionaron para fuentes puntuales y agua como medio material, expresiones semianalíticas de la dosis depositada por los fotones dispersados y su dependencia con la energía, así como para los buildup factors.

Un grupo muy importante dentro de los algoritmos basados en modelos lo constituyen los *Kernel based models* o *convolution-superposition* (consultar la ref. [32] para una visión global). Estos métodos consisten en la superposición, o en términos matemáticos, convolución de dos funciones, una de ellas que nos indica la energía depositada y el lugar donde los fotones primarios realizan la interacción a la que Ahnesjö (1989) [33] denomina TERMA (*total energy released to unit mass*), mientras que la otra da cuenta de como se distribuye la energía alrededor de los puntos de interacción y se le suele llamar EDK (*Energy Deposition Kernels*). La diferencia en el tratamiento y cálculo de estos kernels es lo que da lugar a los diferentes algoritmos, entre los que destacaremos: *Pencil beam convolution* (PBC) [34–37]; *Analytical Anisotropic Algorithm* (AAA) [38, 39] y *Collapsed Cone Convolution* (CCC) [40–43]. Todos ellos son aplicables a medios heterogéneos, donde el algoritmo CCC es el que ofrece resultados más precisos, siendo PBC el de menor exactitud.

La búsqueda de métodos de cálculo que consuman poco tiempo de uso de CPU y que ofrezcan buena precisión, ha sido el propósito que ha guiado la investigación en dosimetría de fotones durante largo tiempo. En este sentido, disponer de fórmulas analíticas supone un enorme ahorro de tiempo de computación y dependiendo de lo realistas que sean, así será la precisión que proporcionen. En este contexto, el objetivo principal de esta tesis es el ofrecer expresiones semianalíticas simples, deducidas de un modelo estadístico sencillo que puedan ser utilizadas en la dosimetría de fotones en radioterapia y en general, en otras aplicaciones relacionadas con el transporte de fotones en medios materiales.

La presente tesis se articula globalmente de la siguiente manera: el primer capítulo se dedica al establecimiento y desarrollo teórico del modelo; el capítulo segundo se dedica a la obtención empírica de los parámetros presentes en las ecuaciones principales y a la comprobación de la bondad de sus predicciones mediante la comparación con simulaciones realizadas con PENELOPE; los capítulos tercero, cuarto y quinto se dedican a la aplicación del modelo a casos concretos en diferentes campos de la física médica.

Capítulo 1

Modelo semianalítico

En este capítulo se describe el modelo semianalítico desarrollado y analizado en el presente trabajo, cuya parte fundamental está publicada en la referencia [44].

Nuestro punto de partida va a ser una fuente puntual de fotones monoenergéticos sumergida en un medio homogéneo, isótropo e infinito.

Teniendo en cuenta la simetría esférica, podemos determinar la tasa de dosis absorbida en un punto a distancia r como la energía por unidad de tiempo depositada en una capa esférica de espesor infinitesimal (Figura 1.1) dividida por la masa de la capa.

$$\dot{D}(r) = \frac{d\dot{E}}{dm} = \frac{d\dot{E}}{\rho dV} = \frac{A n_\gamma}{4\pi r^2 \rho} e(r), \quad (1.1)$$

donde A es la actividad de la fuente, n_γ es el número de fotones emitidos por desintegración, ρ es la densidad del medio y $e(r)$ representa la energía total depositada por unidad de longitud y por partícula inicial.

Obtener expresiones para la magnitud $e(r)$ es el objetivo principal en el desarrollo de este modelo semianalítico.

1.1. Características generales del modelo

Suponemos que la fuente emite N fotones iniciales que irán interaccionando con el medio, sufriendo sucesivas dispersiones hasta su absorción y que vamos a clasificar en generaciones que etiquetaremos como k . Los fotones primarios son los emitidos por la fuente, su energía la denotaremos por E_S y los asociaremos a la generación $k = 0$. Denominamos como fotones dispersados a los fotones secundarios que aparecen a consecuencia de las interacciones de los primarios y se clasificarán en generaciones con $k > 0$ de acuerdo con el siguiente criterio: la generación $k + 1$ incluye:

(i) los fotones procedentes de la dispersión Compton de los fotones de la generación k .

(ii) los fotones de Bremsstrahlung producidos por cualquier electrón¹ secundario generado por un fotón de la generación k , es decir, los que son emitidos como conse-

¹A lo largo del texto escribiremos “electrones” para referirnos tanto a electrones como a positrones

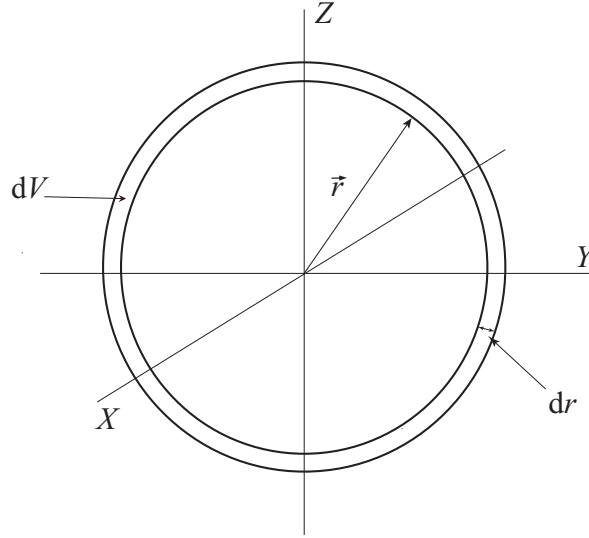


Figura 1.1: Esquema de una fuente puntual monoenergética que emite fotones isotrópicamente en todas direcciones

cuencia de una dispersión Compton, una absorción fotoeléctrica o una producción de pares, y

(iii) los rayos X característicos producidos al rellenarse los huecos creados en capas atómicas internas por procesos Compton o fotoeléctricos debidos a fotones de la generación k .

En nuestro modelo, calculamos $e(r)$ como la suma de las contribuciones de todas y cada una de las generaciones:

$$e(r) = \sum_{k=0}^{\infty} e_k(r), \quad (1.2)$$

contribuciones que se analizan por separado.

Observemos que los fotones primarios son introducidos como una generación más en igualdad de tratamiento al de los fotones dispersados.

Sea R_k el alcance promedio de los electrones producidos por fotones de la generación k en su interacción. Dividimos el medio en capas esféricas centradas en la fuente de espesor Δ y establecemos que $\Delta \ll R_k$. En esta situación, un electrón producido por un fotón de la generación k atravesará, en media, un número de capas:

$$n_k = \frac{R_k}{\Delta}. \quad (1.3)$$

Suponemos que este pequeño tamaño de Δ nos permite rechazar la posibilidad de que el fotón interactúe más de una vez en la capa.

Asumimos que todos los electrones producidos por fotones de una generación dada son descritos en términos de un “electrón promedio”, que: (i) es emitido hacia adelante en la misma dirección que el fotón que lo crea; (ii) sigue una trayectoria lineal y (iii) deposita la misma cantidad de energía en cada una de las capas que atraviesa. Dada

esta hipótesis, si denotamos por $E_k^{(e)}$ a la energía media de los electrones producidos por los fotones de la generación k , deducimos que estos electrones depositan, hasta su total absorción en el medio, una cantidad constante de energía por unidad de longitud ϵ_k , igual a:

$$\epsilon_k = \frac{E_k^{(e)}}{R_k} = \frac{E_k^{(e)}}{n_k \Delta}. \quad (1.4)$$

Las hipótesis (i) y (ii) sobre los electrones producidos por los fotones de la generación k asumen una situación de equilibrio electrónico de los electrones secundarios producidos por éstos, en cuanto que suponen que se compensan los efectos de retrodispersión (la energía que no se contabiliza en una capa m por electrones generados en la capa $m + 1$ se compensa con el exceso que se contabiliza en ésta por los generados en la capa $m - 1$). Por otro lado, el supuesto (iii) significa que estamos considerando un poder de frenado constante que solo depende de la energía inicial del electrón emitido.

El hecho de tener en cuenta el depósito de energía por capas de los electrones generados, nos permitirá describir de forma sencilla la zona de *build up* de la dosis absorbida debida a los fotones, que no puede obtenerse cuando se utiliza la aproximación usual de la absorción local de los electrones emitidos.

1.2. Cómputo de fotones y electrones generados

Una vez establecidas las características generales del modelo, vamos a determinar el número de fotones de cada generación que atraviesan las distintas capas y el número de electrones que se producen en cada una de ellas debido a la interacción con la materia de aquéllos.

Sea p_k la probabilidad de que un fotón de la k -ésima generación emita un electrón cuando viaja una distancia Δ en el medio. Podemos expresar dicha probabilidad como:

$$p_k = \sigma_e n_B \Delta, \quad (1.5)$$

donde σ_e es la sección eficaz total, que incluye las secciones eficaces de todos los procesos mediante los cuales un fotón produce electrones al interactuar con el medio y n_B es la densidad de blancos. Es interesante señalar que para fotones de las generaciones $k > 0$, la probabilidad p_k representa una probabilidad media pues los fotones dispersados, aún siendo de la misma generación, no tienen todos la misma energía.

Definimos el coeficiente:

$$\mu_k = \frac{p_k}{\Delta}. \quad (1.6)$$

Este coeficiente representa un coeficiente de atenuación para los fotones de la generación k . Para el caso $k = 0$ (fotones primarios),

$$\mu_0 = \mu \quad (1.7)$$

es el bien conocido coeficiente de atenuación lineal para fotones con la energía inicial E_s .

Paralelamente definimos q_k como la probabilidad media de que un fotón de generación k produzca un fotón de generación $k + 1$ al atravesar una distancia Δ en el medio, siendo el correspondiente coeficiente efectivo

$$\nu_k = \frac{q_k}{\Delta}. \quad (1.8)$$

Como el medio es homogéneo las probabilidades p_k y q_k no dependen de las capas que puedan ser atravesadas.

Es importante remarcar que los coeficientes μ_k , ν_k y ϵ_k son independientes del grosor Δ de la capa.

Con estas definiciones vamos a contar cuántos fotones de la generación k atraviesan una capa genérica j , que denotaremos como $N_{k;j}^\gamma$ y cuántos electrones producen esa capa, $N_{k;j}^e$.

Capa $j = 1$.

Si recordamos que p_0 es la probabilidad de que un fotón de la generación $k = 0$ interaccione (emitiendo un electrón) cuando recorre una distancia Δ en el medio, al final de la primera capa tendremos

$$N_{0;1}^\gamma = N(1 - p_0) \quad (1.9)$$

fotones primarios, donde N es el número de fotones iniciales. Por otro lado, como q_0 es la probabilidad de que un fotón de la generación $k = 0$ produzca un fotón de la generación $k = 1$ al atravesar la misma distancia, se habrán producido

$$N_{1;1}^\gamma = N q_0 \quad (1.10)$$

fotones dispersados de la generación $k = 1$ o primeros dispersados. Por consiguiente, al final de la primera capa tendremos

$$N_{0;1}^e = N p_0 \quad (1.11)$$

electrones producidos por los fotones primarios al atravesar esta primera capa.

Capa $j = 2$.

El número de fotones primarios que encontraremos al final de la segunda capa se obtiene partiendo de los que permanecieron sin interaccionar en la primera capa ($N_{0;1}^\gamma$ Ec.(1.9)) por la probabilidad de no colisionar al atravesar la segunda capa ($1 - p_0$), esto es:

$$N_{0;2}^\gamma = N_{0;1}^\gamma (1 - p_0) = N(1 - p_0)(1 - p_0) = N(1 - p_0)^2. \quad (1.12)$$

Mientras que los electrones generados en esta capa por los fotones primarios remanentes después de atravesar la primera serán:

$$N_{0;2}^e = N_{0;1}^\gamma p_0 = N p_0 (1 - p_0). \quad (1.13)$$

Los primeros dispersados (generación $k = 1$) que tendremos son: los que provienen de los fotones primarios restantes al final de la capa anterior ($N_{0;1}^\gamma q_0$), que interaccionan en esta capa creando dispersados de la generación $k = 1$ y por otro lado, $N_{1;1}^\gamma (1 - p_1)$, que son los primeros dispersados que se crearon al final de la capa anterior y que en esta segunda capa no interaccionan, es decir:

$$\begin{aligned} N_{1;2}^\gamma &= N_{0;1}^\gamma q_0 + N_{1;1}^\gamma (1 - p_1) \\ &= N q_0 (1 - p_0) + N q_0 (1 - p_1) \\ &= N q_0 [(1 - p_0) + (1 - p_1)] = N q_0 \sum_{i=0}^1 (1 - p_0)^{1-i} (1 - p_1)^i, \end{aligned} \quad (1.14)$$

Los electrones producidos por los fotones primeros dispersados al final de esta segunda capa serán:

$$N_{1;2}^e = N_{1;1}^\gamma p_1 = N q_0 p_1. \quad (1.15)$$

Por último, al final de esta segunda capa, los primeros dispersados habrán dado lugar a fotones de la siguiente generación de dispersados, cuyo número será:

$$N_{2;2}^\gamma = N_{1;1}^\gamma q_1 = N q_0 q_1. \quad (1.16)$$

Éstos fotones ya no volverán a interaccionar en esta capa ya que hemos asumido, al establecer el modelo, que sufrirán como máximo una interacción por capa.

Capa j -ésima.

La generalización de los resultados anteriores a la capa j -ésima es directa. Como se ilustra de forma esquemática en la Tabla 1.2, al final de cada capa j tendremos fotones de generaciones desde $k = 0$ hasta $k = j$ (los que se han creado en esta última capa). Al pasar de una capa a otra, para $k \leq j - 1$ el cómputo de fotones de cada generación se va realizando con dos contribuciones: (i) la de los fotones de la misma generación y la capa anterior, cuyo número es $N_{k;j-1}^\gamma$ que no interaccionen en dicha capa $j - 1$ y cuyo número se reducirá en un factor $(1 - p_k)$, (ii) la de los fotones de la anterior generación $k - 1$ que salgan de la capa anterior, cuyo número es $N_{k-1;j-1}^\gamma$ y que interaccionen, con probabilidad q_{k-1} , produciendo un fotón dispersado en dicha capa $j - 1$.

Por tanto, obtenemos la relación de recurrencia:

$$N_{k;j}^\gamma = q_{k-1} N_{k-1;j-1}^\gamma + (1 - p_k) N_{k;j-1}^\gamma. \quad (1.17)$$

Esta expresión es también aplicable al caso $k = j$, en cuyo caso se reduce al primer término, ya que $N_{k;j}^\gamma = 0$ si $k > j$.

| Capa | N_0^y | N_1^y | N_2^y | N_3^y | ... | N_k^y |
|------|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | $N(I - p_0)$ | Nq_0 | | | ... | |
| 2 | $N(I - p_0)^2$ | $Nq_0[(I - p_1) + (I - p_0)]$ | Nq_0q_1 | | ... | |
| 3 | $N(I - p_0)^3$ | $Nq_0[(I - p_1)^2 + (I - p_0)(I - p_1) + (I - p_0)^2]$ | $Nq_0q_1[(I - p_2) + (I - p_1) + (I - p_0)]$ | $Nq_0q_1q_2$ | ... | |
| 4 | $N(I - p_0)^4$ | $Nq_0[(I - p_1)^3 + (I - p_0)(I - p_1)^2 + (I - p_0)^2(I - p_1) + (I - p_0)^3]$ | $Nq_0q_1[(I - p_2)^2 + (I - p_1)(I - p_2) + (I - p_1)^2 + (I - p_0)(I - p_2) + (I - p_0)(I - p_1) + (I - p_0)^2]$ | $Nq_0q_1q_2[(I - p_3) + (I - p_2) + (I - p_1) + (I - p_0)]$ | ... | |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| m | $N(I - p_0)^m$ | $Nq_0 \sum_{i=0}^{m-1} (I - p_0)^i (I - p_1)^{m-1-i}$ $\approx Nq_0 m (I - \tilde{p}_1)^{m-1}$ | $Nq_0q_1 \sum_{i_1=0}^{m-2} \sum_{i_2=i_1}^{m-2} (I - p_0)^{i_1} (I - p_1)^{i_2-i_1} (I - p_2)^{m-2-i_2}$ $\approx Nq_0q_1 \frac{m(m-1)}{2} (I - \tilde{p}_2)^{m-2}$ | $Nq_0q_1q_2 \sum_{i_1=0}^{m-3} \sum_{i_2=i_1}^{m-3} \sum_{i_3=i_2}^{m-3} (I - p_0)^{i_1} (I - p_1)^{i_2-i_1} (I - p_2)^{i_3-i_2} (I - p_3)^{m-3-i_3}$ $\approx Nq_0q_1q_2 \frac{m(m-1)(m-2)}{6} (I - \tilde{p}_3)^{m-3}$ | ... | $Nq_0q_1 \cdots q_{k-1} \sum_{i_1=0}^{m-k} \sum_{i_2=i_1}^{m-k} \cdots \sum_{i_n=i_{n-1}}^{m-k} (I - p_0)^{i_1} (I - p_1)^{i_2-i_1} \cdots (I - p_{k-1})^{i_n-i_{n-1}} (I - p_k)^{m-k-i_n}$ $\approx Nq_0q_1 \cdots q_{k-1} \binom{m}{k} (I - \tilde{p}_k)^{m-k}$ |

Tabla 1.2: Número de fotones de generación k que emergen de cada capa, y su aproximación de primer orden en términos de los coeficientes $\tilde{p}_k = (p_0 + p_1 + \dots + p_k)/(k + 1)$.

Puede demostrarse fácilmente por inducción que la solución de esta ecuación, para una capa $j = m$ y para todo $k \leq m$ es la siguiente:

$$N_{k;m}^\gamma = Nq_0q_1 \cdots q_{k-1} \sum_{i_1=0}^{m-k} \sum_{i_2=i_1}^{m-k} \cdots \cdot \cdot \cdot \sum_{i_k=i_{k-1}}^{m-k} (1-p_0)^{i_1} (1-p_1)^{i_2-i_1} \cdots (1-p_{k-1})^{i_k-i_{k-1}} (1-p_k)^{m-k-i_k}. \quad (1.18)$$

Finalmente, los electrones generados por cada generación de fotones k , en esta misma capa m , se obtienen a partir de los que salen de la capa anterior multiplicados por la probabilidad de producción de electrones p_k :

$$N_{k;m}^e = p_k N_{k;m-1}^\gamma = Nq_0q_1 \cdots q_{k-1} p_k \sum_{i_1=0}^{m-1-k} \sum_{i_2=i_1}^{m-1-k} \cdots \cdot \cdot \cdot \sum_{i_k=i_{k-1}}^{m-1-k} (1-p_0)^{i_1} (1-p_1)^{i_2-i_1} \cdots (1-p_{k-1})^{i_k-i_{k-1}} (1-p_k)^{m-1-k-i_k}. \quad (1.19)$$

1.3. Contribución a la energía de las distintas generaciones de fotones

En esta sección vamos a obtener las expresiones de las contribuciones de cada una de las generaciones de fotones a la energía depositada en una capa arbitraria m . Para ello suponemos que el alcance de los electrones producidos por los fotones es superior al tamaño de la capa de tamaño Δ y habrá que sumar todas las contribuciones de todos los electrones que atraviesen dicha capa, producidos por la misma generación de fotones k , pudiendo estimar así la energía por unidad de longitud depositada en la capa mediante el límite $\Delta \rightarrow 0$, obteniendo una expresión analítica para la función $e(r)$ por separado para cada generación de fotones k . Estas contribuciones parciales a $e(r)$ serán denotadas por $e_k(r)$.

1.3.1. Contribución de la generación $k = 0$

Según nuestro modelo consideramos que los electrones producidos por los fotones primarios recorren una distancia media $R_0 = n_0\Delta$, es decir, recorren n_0 capas. Si el número de capa m es inferior o igual a n_0 , todos los electrones producidos en las capas anteriores contribuyen a la energía depositada. Recordemos que hemos denotado como ϵ_0 la energía por unidad de longitud depositada en cada capa y que asumimos constante a lo largo de la trayectoria del electrón. Por tanto, si denotamos por $e_{0,m}$ la energía por unidad de longitud y por partícula primaria, depositada en la capa m por los electrones

generados por los fotones primarios, dicha magnitud vendrá dada por:

$$e_{0;m} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^m \epsilon_0 N_{0;j}^e \quad m \leq n_0. \quad (1.20)$$

En estas primeras capas se van generando los electrones que van produciendo los fotones primarios y van acumulando energía de forma creciente con el número de capa. Es la región denominada de *build-up* de la dosis absorbida en el medio.

Si el número de capa m es mayor que n_0 , solamente los electrones generados en las capas desde $m - n_0 + 1$ a m depositan energía en dicha capa. A partir de la capa n_0 se produce la denominada situación de *equilibrio electrónico*, en el cual se compensa la energía que cada electrón producido en dicha capa deposita en la siguiente con la energía que deposita en ésta otro electrón generado en la anterior. En este caso, la ecuación para $e_{0,m}$ será

$$e_{0;m} = \frac{1}{N} \sum_{j=m-n_0+1}^m \epsilon_0 N_{0;j}^e \quad m > n_0. \quad (1.21)$$

Vamos a realizar explícitamente estas sumas empleando la expresión (1.19). Para la primera región de interés, $m \leq n_0$, tenemos:

$$e_{0;m} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^m \epsilon_0 N_{0;j}^e = \epsilon_0 p_0 \sum_{j=1}^m (1 - p_0)^{j-1} = \epsilon_0 [1 - (1 - p_0)^m], \quad (1.22)$$

donde hemos tenido en cuenta la suma de los términos de una progresión geométrica.

Calcularemos ahora el límite cuando $\Delta \rightarrow 0$, en un paso al continuo de la variable r y recordando que $r = m\Delta$ y $p_0 = \mu_0\Delta$:

$$e_{0;m} = \epsilon_0 [1 - (1 - \mu_0\Delta)^{r/\Delta}], \quad (1.23)$$

y finalmente:

$$e_0(r) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{0;m} = \epsilon_0 (1 - e^{-\mu_0 r}) \quad r \leq R_0. \quad (1.24)$$

En el segundo caso, $m > n_0$, tenemos:

$$\begin{aligned} e_{0;m} &= \frac{1}{N} \sum_{j=m-n_0+1}^m \epsilon_0 N_{0;j}^e = \epsilon_0 p_0 \sum_{j=m-n_0+1}^m (1 - p_0)^{j-1} \\ &= \epsilon_0 p_0 \frac{(1 - p_0)^{m-n_0} - (1 - p_0)^m}{p_0} \\ &= \epsilon_0 (1 - p_0)^m [(1 - p_0)^{-n_0} - 1], \end{aligned} \quad (1.25)$$

y de nuevo, mediante el paso al continuo obtenemos:

$$\begin{aligned} e_0(r) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{0;m} = \epsilon_0 \lim_{\Delta \rightarrow 0} (1 - \mu_0\Delta)^{r/\Delta} [(1 - \mu_0\Delta)^{-R_0/\Delta} - 1] \\ &= \epsilon_0 e^{-\mu_0 r} (e^{\mu_0 R_0} - 1). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Resumiendo para los tramos ($m \leq n_0$) y ($m > n_0$), podemos expresar la energía por unidad de longitud y por partícula, depositada en un medio homogéneo a una distancia r , por los fotones primarios como:

$$e_0(r) \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{0;m} = \begin{cases} A_0 (1 - e^{-\mu_0 r}) & r \leq R_0, \\ A_0 e^{-\mu_0 r} (e^{\mu_0 R_0} - 1) & r > R_0, \end{cases} \quad (1.27)$$

donde hemos renombrado $A_0 = \epsilon_0$, por razones que se verán más adelante.

Puede comprobarse fácilmente que la función $e_0(r)$ es continua en $r = R_0$. Podemos observar también que la Ec.(1.27), para $r \leq R_0$ es del mismo tipo que la usada por Nizin [45] para describir la región donde no se ha alcanzado el equilibrio electrónico y que para $r > R_0$ obtenemos la forma de exponencial decreciente de Berger [29], la cual es generalmente utilizada para todo $r > 0$, sin embargo, es la primera vez que una expresión de la forma de la Ec.(1.27) se obtiene desde primeros principios.

1.3.2. Contribución de la generación $k = 1$

De acuerdo con la Ec.(1.18), el número de fotones de la generación $k = 1$, o primeros dispersados, al final de la capa j es:

$$N_{1;j}^\gamma = N q_0 \sum_{i=0}^{j-1} (1 - p_0)^i (1 - p_1)^{j-1-i}. \quad (1.28)$$

Como p_0 y p_1 son muy pequeños, ya que Δ lo hemos considerado así al establecer el modelo, podemos desarrollar en serie los binomios y quedarnos con los términos lineales, resultando:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{j-1} (1 - p_0)^i (1 - p_1)^{j-1-i} &\approx \sum_{i=0}^{j-1} (1 - ip_0) [1 - (j-1-i)p_1] \\ &\approx \sum_{i=0}^{j-1} 1 - ip_0 - (j-1-i)p_1 \\ &= [(1 - (j-1)p_0) + (1 - (j-1)p_1)] \frac{j}{2} \\ &= j [1 - (j-1) \frac{p_0 + p_1}{2}]. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Definiendo ahora:

$$\tilde{p}_1 = \frac{p_0 + p_1}{2} \quad (1.30)$$

y asumiendo que toma valores pequeños, podemos escribir:

$$\sum_{i=0}^{j-1} (1 - p_0)^i (1 - p_1)^{j-1-i} \approx j [1 - (j-1)\tilde{p}_1] \approx j(1 - \tilde{p}_1)^{j-1}, \quad (1.31)$$

pudiendo expresar la Ec.(1.28) de la forma:

$$N_{1;j}^\gamma \approx N q_0 j(1 - \tilde{p}_1)^{j-1}. \quad (1.32)$$

De esta manera, el número de electrones que producen los fotones de la generación $k = 1$ en la capa j , será, de acuerdo con las Ecs.(1.19),(1.32):

$$N_{1;j}^e = p_1 N_{1;j-1}^\gamma \approx N q_0 p_1 (j-1)(1 - \tilde{p}_1)^{j-2}. \quad (1.33)$$

Al igual que con los fotones de la generación $k = 0$, para calcular la energía, por unidad de longitud y por fotón inicial, depositada en la capa m , distinguimos dos situaciones $m \leq n_1$ y $m > n_1$.

En el primer caso, tendremos:

$$e_{1;m} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^m \epsilon_1 N_{1;j}^e = \epsilon_1 q_0 p_1 \sum_{j=1}^m (j-1)(1 - \tilde{p}_1)^{j-2}. \quad (1.34)$$

Vemos aquí que el sumatorio corresponde a la suma de términos de una progresión aritmético-geométrica. Para su cálculo la vamos a separar en suma de dos progresiones:

$$\begin{aligned} e_{1;m} &= \epsilon_1 q_0 p_1 \sum_{j=1}^m (j-1)(1 - \tilde{p}_1)^{j-2} \\ &= \epsilon_1 q_0 p_1 \left[\sum_{j=1}^m j(1 - \tilde{p}_1)^{j-2} - \sum_{j=1}^m (1 - \tilde{p}_1)^{j-2} \right] \\ &= \epsilon_1 q_0 p_1 \left[\left(\frac{(1 - \tilde{p}_1)^{-1} - \tilde{p}_1 m (1 - \tilde{p}_1)^{m-1}}{(1 - (1 - \tilde{p}_1))^2} \right) - \left(\frac{(1 - \tilde{p}_1)^{-1} - (1 - \tilde{p}_1)^{m-1}}{1 - (1 - \tilde{p}_1)} \right) \right] \\ &= \frac{\epsilon_1 q_0 p_1}{\tilde{p}_1^2} \left[1 - (1 - \tilde{p}_1)^{m-1} [1 + \tilde{p}_1 m - \tilde{p}_1] \right]. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Para encontrar ahora la dependencia en el continuo con la distancia r , en analogía con el procedimiento visto anteriormente, debemos calcular el límite para capas infinitésimamente pequeñas. Definiendo el coeficiente:

$$\tilde{\mu}_1 = \frac{\tilde{p}_1}{\Delta} = \frac{\mu_0 + \mu_1}{2}. \quad (1.36)$$

cuando $r \leq R_1$, encontramos:

$$e_1(r) \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{1;m} = A_1 \left[1 - e^{-\tilde{\mu}_1 r} (1 + \tilde{\mu}_1 r) \right], \quad (1.37)$$

donde hemos llamado

$$A_1 = \frac{\epsilon_1 \nu_0 \mu_1}{\tilde{\mu}_1^2}. \quad (1.38)$$

En el caso $m > n_1$ obtendremos:

$$\begin{aligned}
e_{1;m} &= \frac{1}{N} \sum_{j=m-n_1+1}^m \epsilon_1 N_{1;j}^e = \epsilon_1 q_0 p_1 \sum_{j=m-n_1+1}^m (j-1) (1-\tilde{p}_1)^{j-2} \\
&= \epsilon_1 q_0 p_1 \sum_{j=m-n_1+1}^m j(1-\tilde{p}_1)^{j-2} - \sum_{j=m-n_1+1}^m (1-\tilde{p}_1)^{j-2},
\end{aligned} \tag{1.39}$$

donde calculando la suma de las progresiones

$$\begin{aligned}
e_{1;m} &= \epsilon_1 q_0 p_1 \\
&\left[\left(\frac{(m-n+1)(1-\tilde{p}_1)^{m-n-1} + \frac{(1-\tilde{p}_1)^{m-n} - (1-\tilde{p}_1)^{m-1}}{1-(1-\tilde{p}_1)} - m(1-\tilde{p}_1)^{m-1}}{1-(1-\tilde{p}_1)} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left(\frac{(1-\tilde{p}_1)^{m-n-1} - (1-\tilde{p}_1)^{m-1}}{1-(1-\tilde{p}_1)} \right) \right],
\end{aligned} \tag{1.40}$$

que simplificando y reordenando términos, se obtiene:

$$\begin{aligned}
e_{1;m} &= \frac{\epsilon_1 q_0 p_1}{\tilde{p}_1^2} (1-\tilde{p}_1)^m [(m-n-1)\tilde{p}_1(1-\tilde{p}_1)^{-n}(1-\tilde{p}_1)^{-1} \\
&\quad + (1-\tilde{p}_1)^{-n} - (1-\tilde{p}_1)^{-1} - (\tilde{p}_1 m(1-\tilde{p}_1)^{-1}) \\
&\quad - (\tilde{p}_1(1-\tilde{p}_1)^{-n}(1-\tilde{p}_1)^{-1}) + (\tilde{p}_1(1-\tilde{p}_1)^{-1})].
\end{aligned} \tag{1.41}$$

Al igual que en el caso anterior y usando las ecuaciones (1.36) y (1.38), pasaremos al continuo a través del cálculo del límite:

$$\begin{aligned}
e_1(r) &\equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{1;m} \\
&= A_1 e^{-\tilde{\mu}_1 r} \{ e^{\tilde{\mu}_1 R_1} - 1 + \tilde{\mu}_1 [(r-R_1) e^{\tilde{\mu}_1 R_1} - r] \} \quad r > R_1,
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Es interesante hacer notar aquí que, la energía depositada se expresa en términos de un polinomio de primer grado multiplicado por una función exponencial decreciente.

En resumen, la energía por unidad de longitud y por partícula inicial, depositada por los fotones dispersados de la generación $k = 1$ a lo largo de toda su trayectoria, puede expresarse por la siguiente ecuación:

$$e_1(r) = \begin{cases} A_1 [1 - e^{-\tilde{\mu}_1 r} (1 - \tilde{\mu}_1 r)] & r \leq R_1, \\ A_1 e^{-\tilde{\mu}_1 r} \{ e^{\tilde{\mu}_1 R_1} - 1 \\ + \tilde{\mu}_1 [(r - R_1) e^{\tilde{\mu}_1 R_1} - r] \} & r > R_1. \end{cases} \quad (1.43)$$

1.3.3. Contribución de la generación k -ésima

Como vimos en la ecuación (1.18) de la sección 1.2, el número de los fotones dispersados de k -ésima generación al final de una capa j viene dado por:

$$N_{k;j}^\gamma = N q_0 q_1 \cdots q_{k-1} \sum_{i_1=0}^{j-k} \sum_{i_2=i_1}^{j-k} \cdots \\ \cdots \sum_{i_k=i_{k-1}}^{j-k} (1 - p_0)^{i_1} (1 - p_1)^{i_2 - i_1} \cdots (1 - p_{k-1})^{i_k - i_{k-1}} (1 - p_k)^{j - k - i_k}, \quad (1.44)$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en secciones anteriores, ahora debemos calcular la energía depositada por los electrones que, procedentes de capas anteriores, atraviesan una capa genérica m . Esto nos va a suponer añadir un nuevo sumatorio en nuestro desarrollo y para simplificar el cálculo buscamos una aproximación que nos permita reducir las sumas.

Cuando analizamos la contribución de los fotones dispersados de la generación $k = 1$ (sección 1.3.2.), hicimos uso de una aproximación a través del desarrollo en serie de los binomios, que nos llevó a la aparición de forma natural de una probabilidad media \tilde{p}_1 , quedando la expresión general del número de fotones muy simplificada, sin sumatorios y con una única probabilidad \tilde{p}_1 en lugar de las p_0 y p_1 .

Procediendo de igual manera, desarrollaremos la Ec.(1.44) en serie de potencias y nos quedaremos con los términos de primer orden obteniendo:

$$N_{k;j}^\gamma \approx N q_0 q_1 \cdots q_{k-1} \sum_{i_1=0}^{j-k} \sum_{i_2=i_1}^{j-k} \cdots \sum_{i_k=i_{k-1}}^{j-k} (1 - i_1 p_0) (1 - (i_2 - i_1) p_1) \cdots \\ \cdots (1 - (i_{k-1} - i_{k-2}) p_{k-1}) (1 - (j - k - i_{k-1}) p_k). \\ \approx N q_0 q_1 \cdots q_{k-1} \binom{j}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k} \\ + O(p_0 p_1 + p_0 p_1 p_2 + \cdots + p_0 p_1 \cdots p_k), \quad (1.45)$$

donde hemos definido

$$\tilde{p}_k = \frac{1}{k+1} \sum_{i=0}^k p_i \quad (1.46)$$

y agrupado en el resto O , los términos de orden superior. Puesto que las probabilidades p_k se van haciendo cada vez más pequeñas en el paso al continuo (proporcionales a Δ), podemos despreciar este término.

Como ejemplo, podemos visualizar el caso de fotones de la generación $k = 2$ y capa $j = 5$. En este caso la Ec.(1.45) se convierte en:

$$N_{2;5}^\gamma = N_{q_0 q_1} \sum_{i=0}^{5-2} \sum_{j=i}^{5-2} (1 - ip_0) (1 - (j-i)p_1) (1 - (5-2-j)p_2), \quad (1.47)$$

que expresando todos los sumandos y reagrupando se obtiene:

$$\begin{aligned} N_{2;5}^\gamma &= N_{q_0 q_1} \left[10 + 10 \left(\frac{3(p_0 + p_1 + p_2)}{3} \right) \right] + [5p_0 p_1 + 5p_0 p_2 + 5p_1 p_2 - p_0 p_1 p_2] \\ &= N_{q_0 q_1} \binom{5}{2} (1 - 3\tilde{p}_2) + [5p_0 p_1 + 5p_0 p_2 + 5p_1 p_2 - p_0 p_1 p_2] \\ &= N_{q_0 q_1} \binom{5}{2} (1 - \tilde{p}_2)^{5-2} + [5p_0 p_1 + 5p_0 p_2 + 5p_1 p_2 - p_0 p_1 p_2], \end{aligned} \quad (1.48)$$

donde $(1 - 3\tilde{p}_2)$ corresponde a los términos de primer orden del desarrollo en serie de $(1 - \tilde{p}_2)^3$.

Así pues, tendremos que

$$N_{k;j}^\gamma = N_{q_0 q_1 \cdots q_{k-1}} \binom{j}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k}, \quad (1.49)$$

y el número de electrones generados en una capa j por fotones de generación k , vendrá dado por

$$\begin{aligned} N_{k;j}^e &= p_k N_{k;j-1}^\gamma \\ &= N_{q_0 q_1 \cdots q_{k-1}} p_k \binom{j-1}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-1-k} \quad j \geq k. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Aplicaremos este resultado al cálculo de la energía depositada por los electrones de la generación k al atravesar una capa arbitraria m . Teniendo en cuenta, como vimos en la sección 1.2, que si $j < k$ implica que $N_{k;j}^e = 0$, entonces para calcular la energía

depositada por unidad de longitud y por fotón en una capa m dentro del tramo $m \leq n_k$, el sumatorio lo empezaremos en la capa $j = k + 1$, es decir:

$$e_{k;m} = \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k \sum_{j=k+1}^m \binom{j-1}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k-1}. \quad (1.51)$$

En el tramo donde $m > n_k$ el sumatorio entre $j = m - n_k + 1$ y m lo expresaremos como resta de dos sumatorios, uno entre $j = k + 1$ y m y otro entre $j = k + 1$ y $m - n_k$

$$\begin{aligned} e_{k;m} &= \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k \sum_{j=m-n_k+1}^m \binom{j-1}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k-1} \\ &= \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k \left[\sum_{j=k+1}^m \binom{j-1}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k-1} - \sum_{j=k+1}^{m-n_k} \binom{j-1}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{j-k-1} \right]. \end{aligned} \quad (1.52)$$

El siguiente paso, como hemos visto con la contribución de las generaciones anteriores, es pasar al continuo a través del límite cuando $\Delta \rightarrow 0$. Para calcular este límite debemos introducir Δ en las ecuaciones 1.51 y 1.52 por medio de las expresiones

$$r = m\Delta, \quad R_k = n_k\Delta \quad y \quad \tilde{\mu}_k = \frac{\tilde{p}_k}{\Delta},$$

para lo cual, m y n_k tienen que aparecer explícitamente en los sumandos de dichas ecuaciones en lugar de en los índices de las sumas. Para ello convertiremos los sumatorios de capas en sumatorios de generaciones. Procederemos de la siguiente manera:

Cambiamos el índice $i = j - 1$ en la ecuación (1.51)

$$e_{k;m} = \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k \sum_{i=k}^{m-1} \binom{i}{k} (1 - \tilde{p}_k)^{i-k} \quad (1.53)$$

y definimos la función

$$S_{n,m}(z) = \sum_{i=n}^m \binom{i}{n} z^{i-n} \quad n \leq m, \quad (1.54)$$

podemos escribir la Ec.(1.53 (caso $m \leq n_k$), como

$$e_{k;m} = \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k S_{k,m-1}(1 - \tilde{p}_k). \quad (1.55)$$

Para el otro caso ($m > n_k$), escribimos también la Ec.(1.52) en términos de esta función:

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{j=k+1}^m \binom{j-1}{k} (1-\tilde{p}_k)^{j-k-1} - \sum_{j=k+1}^{m-n_k} \binom{j-1}{k} (1-\tilde{p}_k)^{j-k-1} \right] = \\
& = \left[\sum_{i=k}^{m-1} \binom{i}{k} (1-\tilde{p}_k)^{i-k} - \sum_{i=k}^{m-n_k-1} \binom{i}{k} (1-\tilde{p}_k)^{i-k} \right] \\
& = S_{k,m-1}(1-\tilde{p}_k) - S_{k,m-n_k-1}(1-\tilde{p}_k), \tag{1.56}
\end{aligned}$$

donde se ha realizado el cambio de índices $j-1=i$.

En el Apéndice B se deduce la siguiente expresión para la función $S_{n,m}(z)$ mediante una suma hasta el primer índice n :

$$S_{n,m}(z) = \frac{1}{(1-z)^{n+1}} \left[1 - \sum_{i=0}^n \binom{m+1}{i} (1-z)^i z^{m+1+i} \right]. \tag{1.57}$$

Sustituyendo esta expresión de los sumatorios en las ecuaciones(1.55) y (1.56), obtenemos la energía depositada por fotones de la generación k por unidad de longitud y por partícula, es decir:

$$e_{k;m} = \frac{\epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k}{\tilde{p}_k^{k+1}} \left[1 - \sum_{i=0}^k \binom{m}{i} \tilde{p}_k^i (1-\tilde{p}_k)^{m-i} \right] \quad (m \leq n_k), \tag{1.58}$$

$$e_{k;m} = \epsilon_k q_0 q_1 \cdots q_{k-1} p_k [S_{k,m-1}(1-\tilde{p}_k) - S_{k,m-n_k-1}(1-\tilde{p}_k)] \quad (m > n_k), \tag{1.59}$$

donde

$$\begin{aligned}
& S_{k,m-1}(1-\tilde{p}_k) - S_{k,m-n_k-1}(1-\tilde{p}_k) = \\
& = \frac{1}{\tilde{p}_k^{k+i}} \left[1 - \sum_{i=0}^k \binom{m}{i} \tilde{p}_k^i (1-\tilde{p}_k)^{m-i} - 1 + \sum_{i=0}^k \binom{m-n_k}{i} \tilde{p}_k^i (1-\tilde{p}_k)^{m-n_k-i} \right] \\
& = \frac{1}{\tilde{p}_k^{k+i}} \left[\sum_{i=0}^k \binom{m-n_k}{i} \tilde{p}_k^i (1-\tilde{p}_k)^{m-n_k-i} - \sum_{i=0}^k \binom{m}{i} \tilde{p}_k^i (1-\tilde{p}_k)^{m-i} \right] \tag{1.60}
\end{aligned}$$

En estas expresiones, los sumatorios de capas de las Ec.(1.51) y Ec.(1.52) han sido sustituidos por sumatorios de generaciones como pretendíamos, pudiendo ahora pasar al continuo a través del límite cuando $\Delta \rightarrow 0$, que conduce a:

$$e_k(r) \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} e_{k;m} = \begin{cases} A_k \left(1 - e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i \right) & r \leq R_k, \\ A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i [(r-R_k)^i e^{\tilde{\mu}_k R_k} - r^i] & r > R_k, \end{cases} \tag{1.61}$$

donde hemos agrupado los factores constantes en

$$A_k = \frac{\epsilon_k \nu_0 \nu_1 \cdots \nu_{k-1} \mu_k}{\tilde{\mu}_k^{k+1}}. \quad (1.62)$$

1.3.4. Aproximación simplificada para $e_k(r)$

Hasta ahora hemos encontrado expresiones analíticas para la energía depositada en el medio por cada generación de fotones $e_k(r)$. La continuación natural en este desarrollo es buscar alguna forma para expresar la contribución total de todas ellas y esto implica la suma de $e_k(r)$ para todas estas generaciones.

A primera vista, la labor se presenta complicada, ya que, como vemos en las Ec.(1.61), la $e_k(r)$ viene representada por dos expresiones que coinciden en el punto R_k , el cual será diferente en cada generación. Y esta diferencia en las R_k presenta una gran dificultad a la hora de hacer la suma para todas las generaciones de fotones. Esto nos sugiere buscar alguna aproximación.

En primer lugar, vamos a tener en cuenta el hecho de que el producto $\tilde{\mu}_k R_k \ll 1$. Esto se justifica teniendo en cuenta que $\tilde{\mu}_k^{-1}$ es del orden del alcance de los fotones de generación k -ésima, el cual es mucho mayor que el de los electrones producidos por dicha generación de fotones, es decir, que R_k . Por consiguiente, $\tilde{\mu}_k$ será mucho más pequeño que R_k , además, a medida que avanza la generación de fotones dispersados, éstos van teniendo menor energía y R_k será menor cuanto mayor sea esta generación. Esta aproximación no tiene mucho sentido para el caso de los fotones primarios pues, como vemos en las Ec.(1.27), no aparece el producto $\tilde{\mu}_k R_k$. En consecuencia y en lo que sigue, vamos a hacer la aproximación mencionada solamente para generaciones donde $k \geq 1$. De esta manera, mantenemos el tratamiento clásico habitual, distinguiendo por un lado la contribución de los fotones primarios y por otro, el de todos los dispersados.

Nos centraremos a continuación, en la segunda parte de las Ec.(1.61), es decir, para $r > R_k$. Partiremos de

$$e_k(r) = A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i [(r - R_k)^i e^{\tilde{\mu}_k R_k} - r^i] \quad r > R_k. \quad (1.63)$$

Fijándonos en el paréntesis mayor de esta expresión, por un lado tenemos el binomio $(r - R_k)^i$ y por otro la exponencial $e^{\tilde{\mu}_k R_k}$. Desarrollando ambos en series

$$\begin{aligned} (r - R_k)^i &= r^i - i r^{i-1} R_k + O(R_k^{k+1}), \\ e^{\tilde{\mu}_k R_k} &= 1 + \tilde{\mu}_k R_k + O(\tilde{\mu}_k^{k+1} R_k^{k+1}), \end{aligned} \quad (1.64)$$

donde las funciones O representan el resto de términos de los desarrollos con potencias mayores a uno. En virtud de la aproximación comentada anteriormente, las desprecia-

remos en adelante. Entonces, la Ec.(1.63) se transformará en:

$$\begin{aligned}
e_k(r) &\sim A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i \left[(r^i - i r^{i-1} R_k) (1 + \tilde{\mu}_k R_k) - r^i \right] \\
&= A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \left[\tilde{\mu}_k^i r^i \tilde{\mu}_k R_k - i \tilde{\mu}_k^i R_k r^{i-1} \right] \\
&= A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \left[\tilde{\mu}_k^i r^i \left(\tilde{\mu}_k R_k - \frac{i R_k}{r} \right) \right].
\end{aligned} \tag{1.65}$$

Recordemos que estamos en el tramo donde $r > R_k$, por lo que a medida que aumenta r , por un lado la fracción $\frac{i R_k}{r}$ tenderá a cero y por otro, en el sumatorio $\sum_{i=0}^k$ prevalecerá el término de mayor exponente sobre el resto de sumandos, por lo que nos quedaremos con éste.

La expresión final que obtendremos será:

$$e_k(r) \sim \frac{A_k}{k!} \tilde{\mu}_k R_k (\tilde{\mu}_k r)^k e^{-\tilde{\mu}_k r} \quad r > R_k, \quad k \geq 1. \tag{1.66}$$

Nos interesa también simplificar la Ec.(1.61) para $r \leq R_k$ y para ello haremos uso del hecho de que los valores de los alcances de los electrones R_k disminuyen a medida que k aumenta, ya que las energías de los fotones de generación $k+1$ son menores que los de generación k y por ende, la de los electrones también. Nos encontramos pues, en un escenario en el que $r \leq R_k$ y R_k va disminuyendo. Veamos cómo evoluciona esta ecuación cuando $r \rightarrow 0$. Esto es:

$$\begin{aligned}
e_k(r) &= A_k \left(1 - e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i \right) \\
&= A_k \left[1 - e^{-\tilde{\mu}_k r} \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i - \sum_{i=k+1}^{\infty} \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i \right) \right].
\end{aligned} \tag{1.67}$$

Vemos en el paréntesis interior de esta última expresión dos sumatorios. El primero corresponde al desarrollo en serie de una exponencial, mientras que el otro es una suma de términos decrecientes.

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i = e^{\tilde{\mu}_k r},$$

$$\sum_{i=k+1}^{\infty} \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i = \frac{1}{(k+1)!} \tilde{\mu}_k^{k+1} r^{k+1} + O(\tilde{\mu}_k^{k+2} r^{k+2}), \quad (1.68)$$

donde la función O agrupa las potencias mayores que $k+1$.

Sustituyendo estos términos en la Ec.(1.67) y recordando que $r \rightarrow 0$, obtenemos finalmente:

$$\begin{aligned} e_k(r) &= A_k \left[1 - e^{-\tilde{\mu}_k r} \left(e^{\tilde{\mu}_k r} - \left(\frac{1}{(k+1)!} \tilde{\mu}_k^{k+1} r^{k+1} + O(\tilde{\mu}_k^{k+2} r^{k+2}) \right) \right) \right] \\ &\sim \frac{A_k}{(k+1)!} \tilde{\mu}_k^{k+1} r^{k+1} + O(\tilde{\mu}_k^{k+2} r^{k+2}), \end{aligned} \quad (1.69)$$

ecuación donde se observa que la función $e_k(r)$ presenta un cero de orden $k+1$ en $r=0$. Como hemos comentado anteriormente, R_k disminuye al aumentar k , por lo que la región donde $r \leq R_k$ también va disminuyendo y por tanto la contribución de $e_k(r)$ es cada vez más despreciable. Por todo ello y en aras de conseguir unas expresiones más simples, despreciamos esta expresión y extrapolamos el comportamiento de $e_k(r)$ para $r > R_k$ a todo r .

En la sección 2.2.4 y en la Figura 2.7, se discuten la magnitud de estas aproximaciones que, como veremos, no conducen a errores apreciables en la aplicación de nuestro modelo.

La expresión que nos brindará este modelo para la energía por unidad de longitud y por partícula, depositada en el medio por los fotones dispersados de generación k -ésima en todos los tramos será:

$$\hat{e}_k(r) = \frac{A_k}{k!} \tilde{\mu}_k R_k (\tilde{\mu}_k r)^k e^{-\tilde{\mu}_k r} \quad r \geq 0, \quad k \geq 1. \quad (1.70)$$

1.3.5. Contribución total de los fotones dispersados

Hasta ahora, hemos encontrado una expresión (Ec.(1.70)) que nos indica la energía depositada por unidad de longitud y por partícula por una sola generación (k -ésima) de fotones dispersados. Nuestro propósito final será encontrar otra expresión que muestre esta energía depositada por todas las generaciones de fotones dispersados. Como definimos al establecer el modelo en la Ec.(1.2), suponemos la energía total depositada por los fotones dispersados, como la suma de las aportaciones de todas las generaciones de $k > 0$, es decir:

$$e_{\text{sc}}(r) = \sum_{k=1}^{k_{\text{max}}} \hat{e}_k(r) = \sum_{k=1}^{k_{\text{max}}} \frac{A_k}{k!} \tilde{\mu}_k R_k (\tilde{\mu}_k r)^k e^{-\tilde{\mu}_k r}, \quad (1.71)$$

donde k_{max} representa el número máximo de generaciones consideradas. Como veremos más adelante, los valores de $\tilde{\mu}_k$ son del mismo orden, por ello si aproximamos todos

estos coeficientes por el valor del coeficiente de atenuación para los fotones primarios μ_0 , encontramos como expresión un polinomio de grado k_{\max} en $\mu_0 r$ multiplicado por una exponencial decreciente con $\mu_0 r$, que es la expresión propuesta por Berger (1968) [29], donde utilizó el método estadístico de los momentos descrito por Spencer y Fano (1951) [46], a la distribución de dosis depositada por fotones dispersados en agua para encontrar la distribución más probable que cumpliera esos momentos.

Si la aproximación de todos estos coeficientes $\tilde{\mu}_k$, la hacemos a través de un coeficiente medio efectivo $\mu' \neq \mu_0$, obtenemos la forma funcional usada, para el mismo propósito, por Sabariego *et al.* (2007) [31].

Renombrando términos constantes en la Ec.(1.71), podemos reescribirla de una forma más simple que facilitará los ajustes posteriores que haremos para determinar los parámetros, es decir:

$$\tilde{e}_{\text{sc}}(r) = \sum_{k=1}^K C_k (\mu'_k)^{k+1} r^k e^{-\mu'_k r} \quad (1.72)$$

Como vemos, se trata de una expresión similar a la Ec.(1.71), donde

$$\begin{aligned} C_k &= \frac{A_k}{k!} R_k \\ \mu'_k &= \tilde{\mu}_k, \end{aligned} \quad (1.73)$$

son unos parámetros efectivos, que calcularemos a través del ajuste de las curvas de deposición de energía previamente simuladas con PENELOPE.

No obstante, en la práctica hemos comprobado que truncando el polinomio en la Ec.(1.72) hasta $K = 2$, es decir, teniendo en cuenta solamente la primera y segunda generación de fotones dispersados, se obtienen ajustes muy precisos de los valores Monte Carlo y en consecuencia la expresión que utilizaremos en mayor medida será:

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{\text{sc}}(r) &= \sum_{k=1}^2 C_k (\mu'_k)^{k+1} r^k e^{-\mu'_k r} \\ &= C_1 (\mu'_1)^2 r e^{-\mu'_1 r} + C_2 (\mu'_2)^3 r^2 e^{-\mu'_2 r} \end{aligned} \quad (1.74)$$

1.4. Significado físico de los parámetros

Una característica interesante de este modelo es que los parámetros utilizados que surgen en las ecuaciones finales, tienen un sentido físico y algunos de ellos son de uso común en el estudio del transporte de fotones.

Los parámetros R_k , como ya definimos al establecer las premisas iniciales y de partida (Ec.(1.3)), son los alcances medios de los electrones liberados por la interacción de fotones de la generación k .

En cuanto a μ_k , si observamos su definición en la Ec.(1.6), representa la probabilidad de interacción por unidad de longitud, es decir, son coeficientes de atenuación lineal de las distintas generaciones, extendiendo el concepto de coeficiente de atenuación lineal μ usualmente asociado a los fotones primarios y que coincide con nuestro μ_0 .

Para ver el contenido físico de los parámetros A_k , definimos en primer lugar como E_k a la energía depositada, por fotón inicial, por los fotones de la generación k en el medio (a través de los electrones que generan). Está claro que la suma de todas ellas debe ser igual a la energía inicial de los fotones:

$$E_S = \sum_{k=0}^{\infty} E_k. \quad (1.75)$$

En el caso de los fotones primarios, esta contribución a la energía (E_0) coincide con la energía media de los electrones generados por dichos fotones, que denominamos $E_0^{(e)}$ en la Ec.(1.4). Esto es debido a que depositan su energía en la primera interacción, ya que la que depositan en las sucesivas se adscribe a las contribuciones de otras generaciones. Sin embargo, para las siguientes generaciones no se da esta coincidencia ya que E_k es la energía depositada por fotones de la generación k por fotón inicial, mientras que $E_k^{(e)}$ coincide con la energía depositada por cada fotón de dicha generación.

En la Ec.(1.4), definimos la constante ϵ_0 que más tarde, por conveniencia, la renombramos como A_0 . En ella la definimos como, energía por unidad de longitud y por partícula que depositan los electrones producidos por los fotones primarios a lo largo de su recorrido en su interacción con el medio homogéneo. Esto es:

$$\epsilon_0 = A_0 = \frac{E_0}{(n_0 \Delta)} = \frac{E_0}{R_0}, \quad (1.76)$$

Por tanto,

$$E_0 = A_0 R_0. \quad (1.77)$$

Comprobamos esta hipótesis mediante integración de la energía depositada por unidad de longitud y fotón inicial a todo r :

$$\begin{aligned} E_0 &= \int_0^{\infty} e_0(r) dr \\ &= \int_0^{R_0} A_0 (1 - e^{-\mu_0 r}) dr + \int_{R_0}^{\infty} A_0 e^{-\mu_0 r} (e^{\mu_0 R_0} - 1) dr \\ &= \left[\frac{A_0 - A_0 e^{-\mu_0 R_0}}{\mu_0} + A_0 \left(\frac{e^{-\mu_0 R_0} - 1}{\mu_0} + R_0 \right) \right] = A_0 R_0. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Veamos qué ocurre si ahora calculamos la misma integral para las expresiones deducidas en el caso de la generación k -ésima.

$$\begin{aligned}
E_k &= \int_0^\infty e_k(r) dr \\
&= \int_0^{R_k} A_k \left(1 - e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i r^i \right) dr \\
&\quad + \int_{R_k}^\infty A_k e^{-\tilde{\mu}_k r} \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i [(r - R_k)^i e^{\tilde{\mu}_k R_k} - r^i] dr,
\end{aligned} \tag{1.79}$$

que ordenando términos

$$\begin{aligned}
E_k &= \int_0^{R_k} A_k dr \\
&+ A_k \left[\sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} \tilde{\mu}_k^i \left(- \int_0^{R_k} e^{-\tilde{\mu}_k r} r^i dr + \int_{R_k}^\infty e^{-\tilde{\mu}_k r} ((r - R_k)^i e^{\tilde{\mu}_k R_k} - r^i) dr \right) \right].
\end{aligned} \tag{1.80}$$

Tenemos un primer sumando que corresponde a una integral inmediata de valor $A_k R_k$ y un segundo que corresponde a un sumatorio en i en el que, entre paréntesis, aparece la resta de dos integrales por partes, cuyo valor para cualquier i es cero y por tanto, todo el segundo sumando en la Ec.(1.80) se anula y finalmente obtenemos:

$$\begin{aligned}
E_k &= \int_0^\infty e_k(r) dr = \int_0^{R_k} A_k dr = A_k R_k \\
A_k &= \frac{E_k}{R_k}.
\end{aligned} \tag{1.81}$$

Por ello, el coeficiente A_k está relacionado con la energía depositada por los fotones de la generación k , por fotón inicial, a través del alcance de los electrones de dicha generación.

En realidad, como vimos en la sección 1.3.3, Ec.(1.62),

$$A_k = \frac{\epsilon_k \nu_0 \nu_1 \cdots \nu_{k-1} \mu_k}{\tilde{\mu}_k^{k+1}},$$

por lo que A_k no solamente contiene la información referente a la energía media liberada por los electrones, sino que además incluye información, a través de los coeficientes ν_k y μ_k , sobre todas las dispersiones sufridas en su recorrido, es decir, de su historia.

Es interesante hacer notar que, realizando la misma integración anterior pero usando ahora la expresión simplificada de $e_k(r)$ deducida en la sección 1.3.4, Ec.(1.70), llegamos al mismo resultado, esto es:

$$\begin{aligned}
E_k &= \int_0^\infty \hat{e}_k(r) dr = \int_0^\infty \frac{A_k}{k!} \tilde{\mu}_k R_k (\tilde{\mu}_k r)^k e^{-\tilde{\mu}_k r} dr \\
&= A_k R_k \frac{\tilde{\mu}_k}{k!} \int_0^\infty (\tilde{\mu}_k r)^k e^{-\tilde{\mu}_k r} dr = A_k R_k \frac{\tilde{\mu}_k}{k!} \frac{k!}{\tilde{\mu}_k} = A_k R_k.
\end{aligned} \tag{1.82}$$

Este resultado concede además, un argumento de validez a las aproximaciones realizadas para llegar a la expresión simplificada (1.70).

Por otro lado, la fracción de energía depositada en el medio por los electrones generados por fotones de generación k será:

$$f_k = \frac{E_k}{E_S} = \frac{A_k R_k}{E_S}, \tag{1.83}$$

y recordando la definición del coeficiente de absorción de energía μ_{en} , como fracción de energía absorbida por unidad de longitud, podemos establecer unos coeficientes de absorción para cada generación

$$(\tilde{\mu}_{\text{en}})_k = \tilde{\mu}_k f_k = \tilde{\mu}_k \frac{A_k R_k}{E_S}. \tag{1.84}$$

Nótese que para el caso de los fotones primarios, este coeficiente coincide con el coeficiente de absorción μ_{en} , a la energía de la fuente E_S .

$$\mu_{\text{en}} = \tilde{\mu}_0 f_0 = \tilde{\mu}_0 \frac{A_0 R_0}{E_S}. \tag{1.85}$$

En la Tabla 2.3 de la sección 2.2.3, podemos ver los valores f_0 calculados con el modelo, y de $f_0^{(\text{MC})}$ calculados mediante simulación Monte Carlo.

Capítulo 2

Simulaciones y Ajustes

2.1. Simulaciones

La continuación natural al desarrollo teórico del modelo será imprimirle un valor práctico, para ello tenemos que evaluar los valores de los parámetros que aparecen en sus ecuaciones. Este cálculo no podemos deducirlo de consideraciones teóricas, por consiguiente vamos a recurrir al ajuste de estas ecuaciones a histogramas de energía depositada en función de la distancia, que previamente habremos obtenido mediante simulación Monte Carlo. Construiremos para dicho propósito un programa en lenguaje FORTRAN, en el que implementaremos un algoritmo que separe las contribuciones de cada generación y en el que utilizaremos las subrutinas de PENELOPE [21] para simular la interacción con el medio.

2.1.1. Aspectos generales de la simulación

Partimos de una fuente puntual de fotones (Figura 1.1) inmersa en un maniquí de un medio determinado, lo suficientemente grande para asegurarnos que ningún fotón saldrá al exterior.

La fuente se supone monoenergética y el medio lo consideramos isótropo y homogéneo. Los fotones son emitidos uniformemente en todas direcciones, lo que nos dará simetría esférica para las distribuciones analizadas. Esta situación es especialmente importante al estudiar los fotones dispersados, pues independientemente de las direcciones y ángulos de dispersión, contabilizaremos la energía depositada a una distancia dada de la fuente.

En estas simulaciones determinamos principalmente histogramas de energía depositada por fotón inicial emitido en cortezas esféricas de anchura determinada y un cierto radio interior, dividiendo finalmente por la energía inicial E_S . De esta manera lo expresamos en términos de fracción de energía depositada o *Kernel Puntual* [47].

Denotamos por $E_{k;m}^{(MC)}$ esta fracción de energía total por partícula, depositada por todos los electrones liberados por fotones de generación k -ésima en una capa determinada m y la correspondiente dosis por

$$D_{k;m}^{(\text{MC})} = E_S \frac{E_{k;m}^{(\text{MC})}}{\rho V_m}, \quad (2.1)$$

donde V_m es el volumen de la m -ésima corteza esférica, ρ la densidad del medio y E_S la energía inicial de la fuente.

PENELOPE [12, 21] es un código de clase II, es decir, que mezcla la simulación detallada con una simulación condensada. Este comportamiento se controla mediante unos parámetros (C_1 , C_2 , W_{cc} y W_{cr}) que indican ciertos valores umbral, a partir de los cuales se realiza una simulación detallada o condensada cuando no son alcanzados (consultar su definición en las ref. [12, 21]).

Al respecto indicar que, en aras de conseguir mayor precisión en los histogramas, se hicieron pruebas modificando estos parámetros para aumentar la simulación detallada sin encontrarse diferencias apreciables en los resultados y por contra, el tiempo de ejecución del programa aumentaba considerablemente, por lo que se utilizaron los valores recomendados por defecto por los autores del código y que suponen un equilibrio entre buena precisión y tiempo razonable de ejecución. En la Tabla 2.1 se muestran estos valores

| C_1 | C_2 | W_{cc} | W_{cr} |
|-------|-------|----------|----------|
| 0.05 | 0.05 | 5 keV | 1 keV |

Tabla 2.1: Parámetros utilizados en las simulaciones realizadas en este trabajo [12, 21].

Como hemos visto a lo largo del desarrollo del modelo, hay dos tramos de interés de r , esto es, antes de alcanzar el equilibrio electrónico ($r \leq R_0$), y después de alcanzarlo ($r > R_0$).

El hecho de que el tramo donde $r \leq R_0$ sea mucho más pequeño que el de $r > R_0$, nos crea un problema a la hora de elegir la anchura de las capas para la simulación.

Necesitamos disponer en el primer tramo un número de intervalos suficiente como para poder hacer un ajuste significativo, por lo que es necesario que el tamaño de éstos sea muy pequeño, mientras que en el segundo, al ser éste mucho más grande, un número de intervalos suficiente para el ajuste supone una anchura de éste mucho mayor. Por ejemplo, si escogemos un tamaño pequeño para que en el tramo $r \leq R_0$ dispongamos de, al menos 100 intervalos, implica que en $r > R_0$ habría del orden de 10000 intervalos. Y un tamaño pequeño en esta anchura de la capa supone una varianza mayor, por lo que habrá que lanzar mayor número de fotones y por ende, implica un mayor tiempo de computación.

Como solución a este inconveniente, se modificó el programa principal para obtener histogramas con tres tamaños de intervalo diferentes: (i) un primero que nos asegure que hasta alcanzar R_0 tengamos, al menos, entre 50 y 100 intervalos, dependiendo de la energía de la fuente, ya que R_0 aumenta con ésta; (ii) un segundo tamaño de intervalo entre este punto y aproximadamente una distancia, en unidades de recorrido libre medio o *Mean Free Path* (MFP), de 5 MFP ($\mu_0 r = 5$), en el que establecemos

del orden de 1000 intervalos; (iii) y un tercero hasta 20 MFP, que recoge la cola del histograma y en el que establecemos unos 100 intervalos. De esta manera podemos observar de una forma detallada, la región de acumulación o de *buildup* ($r \leq R_0$), una región central donde se deposita la mayor parte de la energía y una tercera, ya a gran distancia, donde se deposita la cola del histograma, optimizando así el tiempo de computación y la varianza final en éstos.

Otros parámetros que podemos escoger en nuestro programa son las energías de absorción de electrones y positrones. Valores estos, por debajo de los cuales, el programa considera a la partícula absorbida, deja de simularla y continúa con la siguiente. Valores altos de estos umbrales provocan que el programa termine antes de simular la partícula y esto se traducirá en un menor tiempo de computación pero también una menor precisión al establecer el lugar donde se deposita la energía y por tanto, en el cálculo de la dosis. Por ejemplo, si la energía de absorción de electrones y positrones fuese igual a la de la fuente, el programa entendería que la energía de éstos se deposita localmente en el mismo lugar donde se generaron y entonces lo que estaríamos simulando sería el *Kerma* (Kinetic energy released per unit mass) o energía cinética transferida a los electrones, que como luego éstos la depositarán a lo largo de su alcance, no corresponde exactamente con la energía depositada en el medio (dosis) [48, 49].

En nuestro caso, si estimamos una energía de absorción para los electrones igual a la de la fuente, precisamente lo que hacemos es eliminar la posibilidad de estudiar cómo se deposita la dosis en el tramo de equilibrio electrónico ($r \leq R_0$) y poder ajustar las ecuaciones del modelo en este tramo. Por otro lado, si escogemos una energía de absorción, para la cual el alcance de los electrones a esa energía, sea mayor que la anchura del intervalo en este tramo, parte de la energía que depositen éstos no se recogerá dentro de ese intervalo y el resultado será erróneo. De aquí la importancia en la elección de la energía de absorción de los electrones para obtener un resultado óptimo en las simulaciones.

Primeramente estimaremos la anchura del intervalo, asegurándonos de que en el tramo $r \leq R_0$ permanezcan entre 70 y 100 intervalos. A continuación elegiremos una energía de absorción para los electrones, de tal forma que el alcance de ellos no sobrepase esta anchura del intervalo. De esta manera nos aseguramos que un electrón de esta energía, si se libera en un intervalo determinado, siempre depositaría su energía dentro de él y por tanto, no habrá error al considerar en la simulación una absorción local de éstos.

Para ajustar al máximo los valores de la energía de absorción de los electrones y así obtener la mejor relación entre precisión y velocidad de proceso, se ha implementado otra simulación para calcular hasta donde llegan los electrones en un medio y una energía determinada. De este programa extraemos histogramas con el número de partículas que llegan a una distancia r y escogemos como alcance máximo el primer r a partir del cual ya no ha llegado ningún electrón, en lugar de los valores tabulados en la literatura. Se han obtenido histogramas de este tipo, para cada energía y medio material estudiado en el presente trabajo. En la Figura 2.1, podemos ver un ejemplo para cuatro energías.

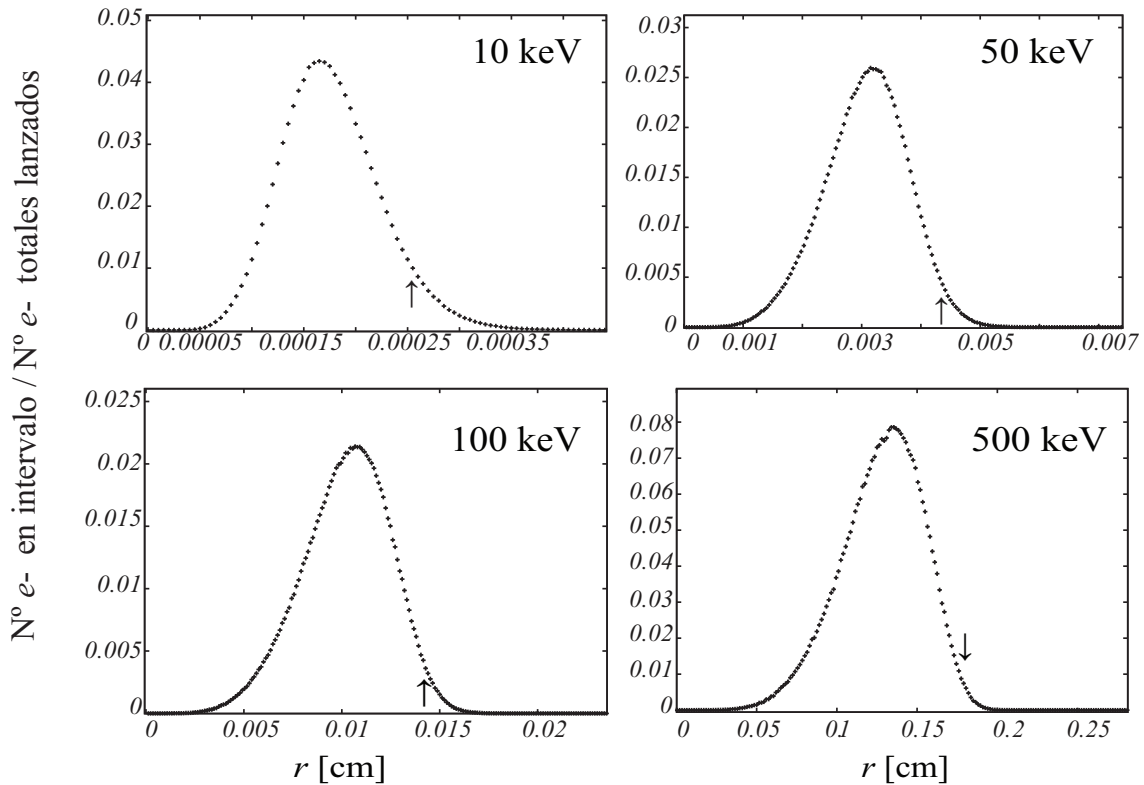


Figura 2.1: Histogramas donde se muestra el alcance de los electrones en agua para energías de éstos de 10, 50, 100 y 500 keV. Las flechas indican los valores tabulados en la ref. [50]

La energía de absorción para los fotones la hemos fijado en todos los casos a 1 keV, que es un valor usual y lo suficientemente pequeño como para seguir el camino de los fotones con una precisión aceptable.

El número de historias simuladas para el cálculo de los parámetros de ajuste han sido entre 10^8 y $5 \cdot 10^8$ partículas, llegando hasta 10^{11} en el caso de alguna de las aplicaciones estudiadas, lo que nos ha producido unas barras de error muy pequeñas, de hecho, en las gráficas donde expresamos los resultados no se aprecian, pues son menores que los símbolos con los que se representan los puntos del histograma.

Por último, decir que el medio homogéneo usado principalmente es agua, pues se trata de un medio con densidad similar a la del cuerpo humano y es habitualmente usado en dosimetría. Se ha cubierto un amplio rango de energías iniciales, desde 10 keV hasta 20 MeV. Otros medios estudiados, aunque en menor profusión son: aire seco, tejido ICRU 4 componentes, tejido adiposo, músculo estriado, tejido óseo y tejido epidérmico, cuyos parámetros de ajuste pueden consultarse en el apéndice A.

2.1.2. Algoritmo de separación de fotones dispersados

Construidos todos los procesos y secuencias que gobiernan la interacción en nuestra simulación, debemos buscar ahora la forma de separar las contribuciones a la energía depositada por los fotones primarios y por los dispersados. Para ello, vamos a colocar en

cada partícula una “etiqueta” que nos la identificará como dispersada o no dispersada. Esta etiqueta debe mantenerse con el mismo valor en todas las partículas secundarias que deriven de una partícula original lanzada, es decir, para todas las partículas de una misma historia. En el caso de los dispersados, esta etiqueta aumentará su valor en cada nueva generación de dispersados. Hasta que no interaccionen la primera vez no podremos saber si se ha dispersado o no, por ello analizaremos la primera interacción que realiza cada fotón tras salir de la fuente y en base a ésta asignamos las etiquetas de la siguiente manera:

- Si la primera interacción es una absorción fotoeléctrica, tendrá etiqueta de no dispersado y la energía depositada se acumulará en el histograma de no dispersados.
- Si la interacción es una producción de par electrón-positrón entonces, como en el caso anterior, incrementará el histograma de no dispersados.
- Por último, si se produce una dispersión incoherente (Compton), al fotón se le pondrá la etiqueta de dispersado y a partir de aquí toda la energía que deposite él y sus secundarios contabilizarán en el histograma de dispersados, mientras que al electrón se le pondrá la de no dispersado, no obstante, si este electrón antes de absorberse emite un fotón de bremsstrahlung, a este fotón se le asignará la etiqueta de dispersado, manteniendo la del electrón como de no dispersado.
- Independientemente de cuál sea la primera interacción, la energía depositada en ella siempre se contabilizará en el histograma de no dispersados.

Seguiremos ahora el resto de interacciones asignando todos los fotones (rayos X característicos, fotones Compton, fotones dispersados en procesos Rayleigh y fotones bremsstrahlung producidos por electrones liberados en procesos anteriores) a la siguiente generación de dispersados ($k + 1$), mediante el aumento del valor numérico de su etiqueta.

Haremos este seguimiento hasta la generación $k = 10$ y a partir de aquí, las siguientes generaciones se computarán todas juntas en un resto. Acumularemos esta energía depositada en los intervalos de conteo que hemos diseñado en la sección anterior 2.1.1.

La distancia r entre la fuente y el lugar donde se deposita la energía se anota de forma exacta en cada deposición y así calcularemos un r efectivo dentro de cada intervalo, el cual representará a dicho intervalo en los ajustes y las gráficas. Aunque los r efectivos estarán todos alrededor de los puntos centrales de los intervalos, el uso de aquellos en lugar de éstos añade un poco más de precisión en el resultado de los ajustes.

Dentro de un intervalo se distribuirán los valores de la variable aleatoria r . Para estimar un r efectivo no es válido calcular su valor medio, el cual solamente sería válido si las partículas siempre depositaran la misma energía en cada interacción, que no es el caso, por lo que hay que ponderar r con la energía depositada, por lo que se estimará este valor a través del cálculo de la ponderación cuadrática media, es decir:

$$r_{ef} = \sqrt{\frac{\sum_i (E_i r_i^2)}{\sum_i (E_i)}} \quad (2.2)$$

2.1.3. Estimación de errores en los histogramas

La simulación Monte Carlo, por su naturaleza estadística, presenta una varianza y nuestro objetivo ahora es calcularla para los histogramas obtenidos en este trabajo.

Cuando lanzamos un fotón, éste interacciona con la materia depositando energía en ciertos intervalos y genera partículas secundarias que a la vez depositan energía en otros o en los mismos intervalos. Esta partícula primaria y todas sus secundarias, es decir una historia, dará lugar a una energía depositada que llamamos $e_{i,m}$ (donde el subíndice i se refiere a la historia y el m al intervalo) la cual tendrá una función de distribución $f(e_m)$, un valor medio y una varianza. Este depósito de energía por historia es lo que queremos obtener en nuestro histograma, pero no conocemos su función de distribución, su media ni su varianza. Para encontrarlas, primero repetiremos la situación N veces, es decir, lanzaremos N partículas y a continuación haremos uso del teorema del límite central.

Lanzamos pues N fotones y construimos una nueva variable aleatoria que será el valor medio de la energía depositada por cada historia en un intervalo del histograma, es decir:

$$E_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,m}. \quad (2.3)$$

Vemos que E_m es otra variable aleatoria, pues las $e_{i,m}$ lo son. Nos preguntamos ahora cual es la función de distribución de probabilidad, el valor medio o esperado y la varianza que seguirá esta función E_m .

El teorema del límite central nos dice que la función en que se distribuirán los valores de E_m es una distribución normal (gaussiana) y con un valor medio idéntico al de la distribución de partida $e_{i,m}$, que es la que estamos buscando. Esto es:

$$\langle E_m \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,m} \right\rangle = \langle e_{i,m} \rangle \quad (2.4)$$

su varianza es igual a

$$\text{var} \{E_m\} = \frac{1}{N} \text{var} \{e_{i,m}\} \quad (2.5)$$

y su desviación típica viene dada por

$$\sigma_{E_m} = \sqrt{\text{var} \{E_m\}}. \quad (2.6)$$

Vemos que el valor medio de N historias es un buen estimador del valor medio de una historia, que es lo que buscamos. También su desviación típica, que se puede entender como error estadístico en la determinación de ese valor medio y que es inversamente proporcional a \sqrt{N} (Ec.(2.5) y Ec.(2.6)), es decir, a mayor número de historias simuladas

este error disminuye con \sqrt{N} . Este teorema constituye la idea básica de las técnicas Monte Carlo.

Como mencionamos anteriormente, a lo largo de este trabajo se han simulado un número de historias N entre 10^8 y 10^{11} , dependiendo del caso concreto a tratar, lo que nos ha reportado unos niveles de error suficientemente pequeños para nuestro propósito. Por otro lado, el cálculo de la desviación típica lo hemos implementado directamente en nuestro programa, computando para cada intervalo m la energía total depositada por historia tal y como establece la ecuación 2.3 y simultáneamente la cantidad

$$\langle E_m^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_{i,m})^2, \quad (2.7)$$

y por último

$$\sigma_{E_m} = \sqrt{\frac{1}{N-1} [\langle E_m^2 \rangle - \langle E_m \rangle^2]}. \quad (2.8)$$

Como error de los resultados hemos considerado el intervalo $\pm\sigma_{E_m}$ ($K = 1$), que nos da un grado de confianza del 68.3 %, es decir, el valor verdadero se encuentra en ese intervalo con una probabilidad del 68.3 %.

2.1.4. Validación de los Algoritmos

Llegados a este punto y antes de realizar los cálculos conducentes a obtener los resultados de interés, necesitamos asegurarnos de que el programa de simulación funciona correctamente y no ofrece resultados ilógicos, así como constatar que la separación de las diferentes generaciones de fotones es correcta.

En primer lugar hemos controlado internamente la corrección de los cálculos. Para ello, dentro del propio programa, se ha implementado un pequeño algoritmo que va contando las energías depositadas por historia en catorce contadores, uno para la energía total depositada, otro para los fotones primarios, un tercero para los fotones dispersados totales, del cuarto al decimotercero para la energía depositada por cada generación de fotones dispersados, y el decimocuarto para el resto de generaciones. De esta forma podemos comprobar: (i) la energía total depositada por historia es la misma que la energía con la que el fotón es emitido de la fuente; (ii) la suma de los contadores de la deposición para primarios y dispersados totales, coincide con el contador de la energía total y con la energía inicial del fotón lanzado; (iii) la suma de todos los contadores de todas las generaciones de fotones dispersados coincide con el contador de dispersados totales.

Una vez establecida la validez interna de los datos que se obtienen de la simulación, debemos buscar alguna forma de asegurarnos de que efectivamente reflejan lo que queremos, es decir, las contribuciones separadas de los fotones primarios, los dispersados totales y las contribuciones individuales de cada generación y para ello, haremos comparaciones con datos publicados. Debe indicarse que no hemos encontrado datos en la literatura sobre las diferentes generaciones de fotones, por lo que solamente haremos

la comprobación con fotones primarios, dispersados totales y dosis total (primarios + dispersados), es decir:

$$\dot{D}(r) = \dot{D}^P(r) + \dot{D}^S(r), \quad (2.9)$$

donde el índice P se refiere a fotones primarios y S a fotones dispersados.

Validación de la dosis primaria

Para el caso de los fotones primarios haremos uso de la Ec. (1.1), que volvemos a expresar aquí para la dosis primaria

$$\dot{D}^P(r) = \frac{A n_\gamma}{4\pi r^2 \rho} e^P(r), \quad (2.10)$$

donde según las referencias [29] y [47]

$$e^P(r) = \mu_{\text{en}} e^{-\mu r} \quad (2.11)$$

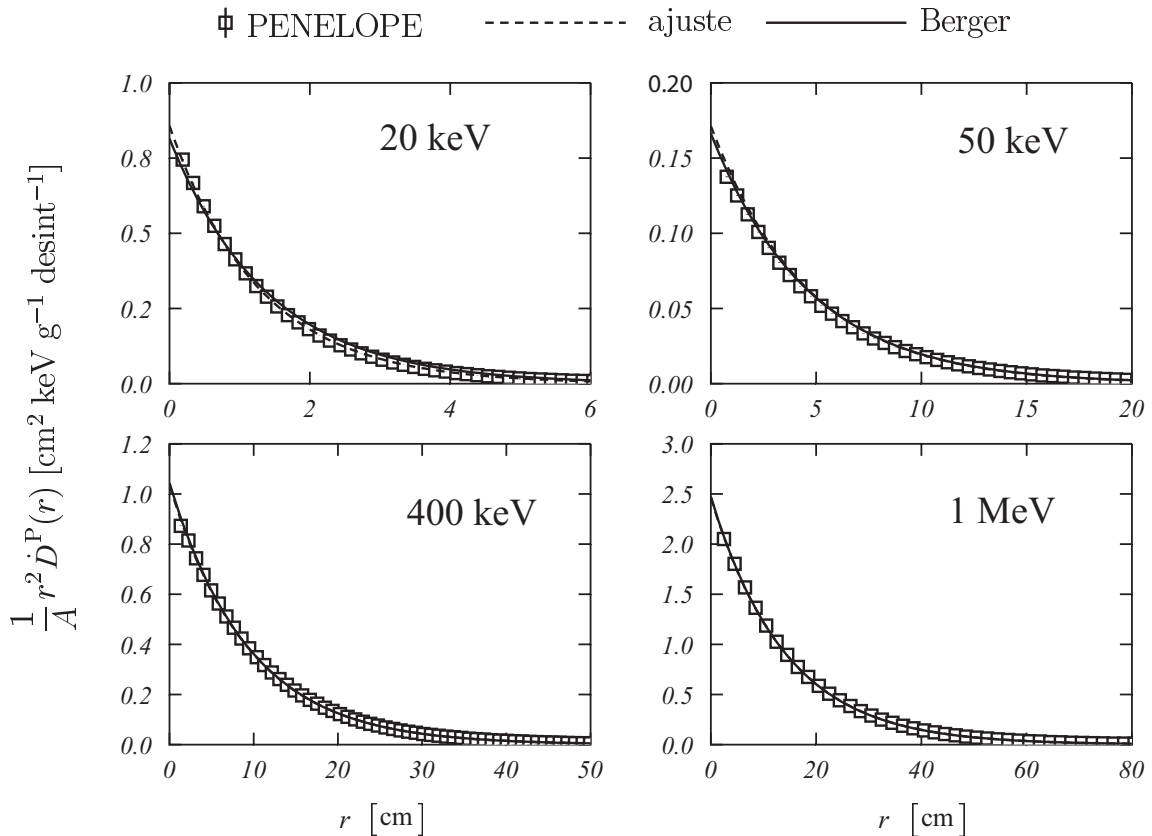


Figura 2.2: Valores $r^2 \dot{D}^P(r)/A$ para los fotones primarios en función de la distancia r a una fuente puntual de 20, 50 y 400 keV y 1 MeV. Los símbolos representan los resultados obtenidos en nuestra simulación. Las líneas continuas corresponden a los resultados de Berger [29]. Las líneas de trazos representan el ajuste a la Ec.(2.11) de los valores Monte Carlo discutido en el texto.

| Energía [keV] | μ [cm^{-1}] | | | μ_{en} [cm^{-1}] | | |
|------------------|----------------------------|-----------|-------------|----------------------------------------|-----------|--------------|
| | Ref. [51] | Ref. [52] | M C | Ref. [51] | Ref. [52] | M C |
| 20 | 0.711 | 0.8096 | 0.77960(3) | 0.512 | 0.5503 | 0.53846(4) |
| 30 | 0.337 | 0.3756 | 0.34795(2) | 0.149 | 0.1557 | 0.14950(1) |
| 50 | 0.214 | 0.2269 | 0.218085(3) | 0.0418 | 0.04223 | 0.043062(1) |
| 60 | 0.197 | 0.2059 | 0.19476(2) | 0.0320 | 0.03190 | 0.030568(4) |
| 100 | 0.168 | 0.1707 | 0.167378(9) | 0.0256 | 0.02546 | 0.024883(3) |
| 200 | 0.136 | 0.1370 | 0.13625(1) | 0.0297 | 0.02967 | 0.029327(3) |
| 400 | 0.106 | 0.1061 | 0.105531(4) | 0.0328 | 0.03279 | 0.032488(3) |
| 600 | 0.0894 | 0.08956 | 0.089067(5) | 0.0329 | 0.03284 | 0.032622(2) |
| 1000 | 0.0706 | 0.07072 | 0.070307(4) | 0.0311 | 0.03103 | 0.030969(2) |
| 2000 | 0.0493 | 0.04942 | 0.049021(2) | 0.0263 | 0.02608 | 0.0264268(2) |
| 3000 | 0.0396 | 0.03969 | 0.039082(1) | 0.0233 | 0.02281 | 0.0233729(2) |

Tabla 2.2: Coeficientes de atenuación lineal y coeficientes de absorción de energía obtenidos mediante el ajuste de la Ec.(2.11) a la simulación Monte Carlo con PENELOPE realizada en este trabajo. Se comparan con los valores de las Refs. [51] y [52].

En primer lugar, compararemos los datos obtenidos con nuestro algoritmo en los fotones primarios, con los obtenidos mediante las ecuaciones anteriores y usando en ellas los coeficientes μ_{en} y μ calculados con el ajuste de las simulaciones (línea discontinua en Fig. 2.2) y con los expresados en la Tabla 2.2 (columnas segunda y quinta) [51, 52].

Suponiendo que la fuente emite un fotón en cada desintegración ($n_\gamma = 1$ desint $^{-1}$), en la Fig. 2.2 observamos los valores obtenidos en nuestra simulación (cuadrados) con los de Berger [29] (línea continua), para las cantidades $r^2 \dot{D}^P(r)/A$ debidas a los fotones primarios correspondientes a fuentes de 20, 50 y 400 keV y 1 MeV. Se ha tomado esta cantidad para representar en la gráfica, en lugar de la dosis, para eliminar el efecto del cuadrado de la distancia y así observar mejor las diferencias. Por otro lado, no contemplamos el tramo de equilibrio electrónico, pues la ecuación de Berger (Ec.2.11) es para todo r y no contempla ese tramo.

Los resultados, como vemos, son prácticamente coincidentes con los de Berger (líneas continuas). Se observa, que los valores encontrados en el ajuste para los coeficientes μ_{en} y μ están en acuerdo razonable con los encontrados en la literatura (Refs. [51] y [52]), apareciendo mayores discrepancias para el coeficiente de absorción de energía, en el que hemos constatado una gran sensibilidad a la anchura del intervalo.

Validación de la dosis dispersada

En la referencia [29], Berger propone una expresión para la dosis depositada por los fotones dispersados, que expresa como la dosis de los fotones primarios multiplicada por un polinomio de grado $N + 1$, es decir:

$$\dot{D}^S(r) = \frac{A n_\gamma}{4\pi r^2 \rho} M(r), \quad (2.12)$$

donde hemos llamado

$$M(r) = e^S(r) = e^P(r)P_{N+1}(r) = \mu_{\text{en}} \exp(-\mu r) P_{N+1}(r), \quad (2.13)$$

y P_{N+1} es un polinomio del tipo

$$P_{N+1}(x) = \sum_{n=0}^N a_n x^{n+1}. \quad (2.14)$$

Sobre estas ecuaciones, hemos hecho dos cálculos diferente. El primero corresponde al

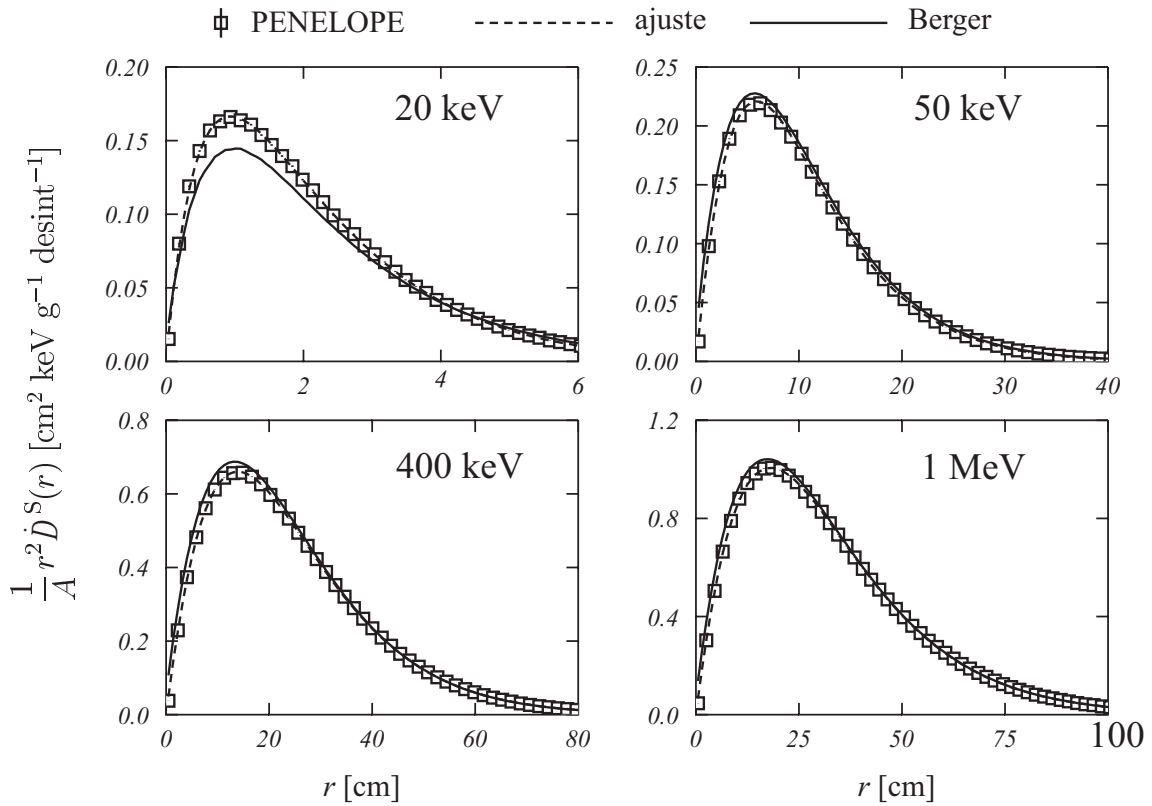


Figura 2.3: Valores $r^2 \dot{D}^S(r)/A$ de los fotones dispersados en función de la distancia r a una fuente puntual de 20, 50 y 400 keV y 1 MeV. Los cuadrados representan los resultados obtenidos en nuestra simulación. Las líneas continuas corresponden a los resultados de Berger [29]. Las líneas a trazos corresponden a los ajustes realizados con la función M de la ecuación (2.13).

uso de los coeficientes a_n , μ y μ_{en} , expresados en la referencia [29] (con línea continua en la Fig. 2.3), mientras que el segundo corresponde al uso de coeficientes a_n , μ y μ_{en} , encontrados al ajustar los datos de nuestra simulación a la ecuación (2.13). Se han realizado distintos ajustes aumentando progresivamente el grado del polinomio y manteniendo los valores de μ y μ_{en} iguales a los encontrados en el ajuste de la contribución de los primarios (ver Tabla 2.2). En la Fig. 2.3 hemos incluido, con línea

de trazos, los resultados obtenidos en estos ajustes con $N = 3$ para las energías $E_0 = 400$ keV y 1 MeV, $N = 4$ para $E_0 = 50$ keV y $N = 5$ para $E_0 = 20$ keV. Puede comprobarse que un aumento en el grado de los respectivos polinomios no modifica significativamente el valor de χ^2 .

Es posible obtener, como podemos ver, una buena descripción de la dosis depositada por los fotones dispersados sobre la base de la hipótesis de Berger. Cabe decir, no obstante, que existe un acuerdo razonable excepto para el caso de fotones de 20 keV, donde el cálculo de Berger subestima el resultado obtenido con PENELOPE.

Validación de la dosis total

Compararemos ahora la dosis total depositada en el medio, con datos de ésta obtenidos de la literatura.

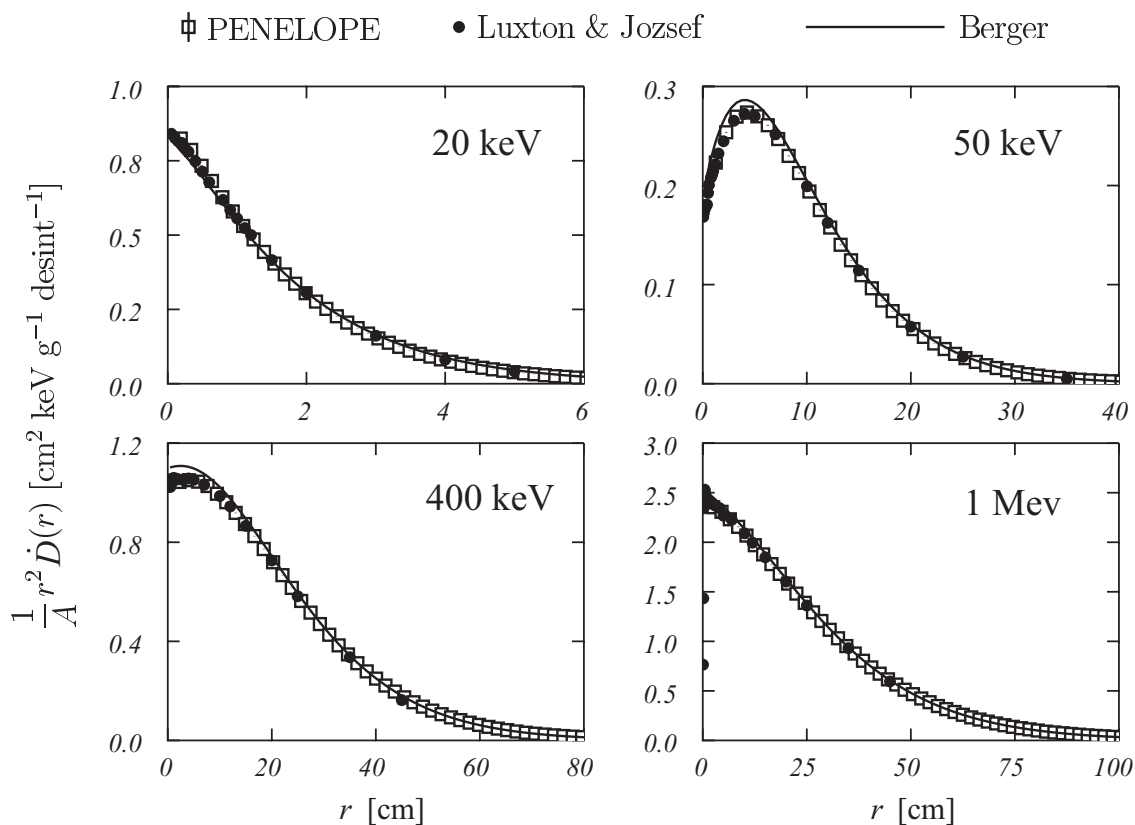


Figura 2.4: Valores de la dosis total expresados como $r^2\dot{D}(r)/A$ en función de la distancia r a una fuente puntual de fotones de 20, 50 y 400 keV y 1 MeV. Los cuadrados representan los resultados obtenidos en nuestra simulación. Las líneas continuas corresponden a los resultados de Berger [29]. Los círculos negros representan los resultados de la simulación de Luxton y Jozsef [53].

En la Fig. 2.4, los resultados obtenidos en nuestra simulación para $r^2\dot{D}(r)/A$ (cuadrados) se comparan con los que predice Berger [29] (línea continua), para fotones de

20, 50, 400 keV y 1 MeV. También se incluyen (círculos negros) los resultados de un cálculo de Luxton y Jozsef [53] que determinaron las distribuciones radiales de dosis y la dosis depositada en agua para fuentes puntuales de fotones de energías entre 10 keV y 2 MeV mediante el código de simulación Monte Carlo EGS4.

El acuerdo con los resultados de Luxton y Jozsef [53], como podemos comprobar, es excelente en todos los casos, sin embargo, los cálculos de Berger [29] muestran una ligera sobrevaloración de los resultados de PENELOPE a distancias cercanas a la fuente.

Estos resultados permiten validar las simulaciones realizadas con PENELOPE y podemos pasar a analizar la parte relevante de nuestro trabajo, esto es, obtener con fiabilidad los parámetros correspondientes a las ecuaciones deducidas por el modelo.

2.2. Ajustes

2.2.1. Aspectos generales de los ajustes

En este trabajo hemos realizado distintos ajustes de los datos de los histogramas obtenidos en las simulaciones $\{(x_k, y_k), k = 1, 2, \dots, n\}$ a funciones que dependen, en general de forma no lineal, de las abscisas correspondientes y de un conjunto de parámetros

$$y_k = f(x_k, p_1, p_2, \dots, p_m). \quad (2.15)$$

Cada uno de los valores del histograma corresponde a una muestra determinada extraída de una distribución de probabilidad gaussiana. Si tenemos n puntos en el histograma a ajustar, tendremos una probabilidad conjunta que, por ser variables independientes, será un productorio de gaussianas de la forma:

$$P(y_1, y_2, \dots, y_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sigma_k} \exp\left(\frac{-\chi^2}{2}\right), \quad (2.16)$$

donde la función χ^2 corresponde a:

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^n \frac{1}{\sigma_k^2} [y_k - f(x_k, p_1, p_2, \dots, p_m)]^2. \quad (2.17)$$

La χ^2 es también una función de distribución de probabilidad que da cuenta de las diferencias entre el histograma y la función de ajuste.

Haciendo uso ahora de la hipótesis de máxima verosimilitud, contrastaremos la bondad de la función de ajuste que proponemos. Esta hipótesis considera, que la mejor estimación que podemos efectuar de los parámetros de la función de ajuste propuesta, es la que corresponde al máximo de la función de distribución de probabilidad expresada en la ecuación 2.16. Este máximo supone pues un mínimo de la función χ^2 que, por otro lado, es lo que da el nombre al método (*mínimos cuadrados*).

Este método, no obstante, para funciones que no dependen linealmente de los parámetros, no ofrece estimación de los errores en el cálculo de estos. Para estimarlos

hacemos uso del teorema del límite central y el método Monte Carlo, para lo cual reitaramos el ajuste un número N de veces y en cada una de ellas, sorteamos para cada punto x_k un valor de $y_k^{(n)}$ según una distribución gaussiana centrada en y_k (la ordenada original del histograma) y con desviación típica σ_k . Se obtiene de esta manera, para cada parámetro, una distribución de valores de los cuales obtenemos la desviación típica asociada que consideramos como su error.

En los ajustes realizados en esta tesis, el número N de repeticiones ha sido de entre 100 y 500 veces, según los casos, lo que garantiza la fiabilidad de las estimaciones.

Debe hacerse constar que, en muchas de las gráficas de este trabajo no se aprecian las barras de error, pues estas son menores que las dimensiones de los puntos señalados en ellas. En las distintas tablas se muestran los errores de manera abreviada de forma que, por ejemplo, un valor tal como 0.10609(4) significa 0.10609 ± 0.00004 .

En nuestro programa de ajuste, se ha utilizado el algoritmo de Levenberg-Marquardt [54] para la minimización de χ^2 , implementándolo en un programa principal desarrollado en FORTRAN, en el cual se incluye el cálculo de errores mediante algoritmo Monte Carlo.

2.2.2. Importancia relativa de las generaciones de fotones dispersados

Analizaremos primeramente, la importancia relativa de las contribuciones $e_k(r)$, debidas a las diferentes generaciones de fotones.

En la Figura 2.5 hemos representado, para $E_S = 10$ keV, 100 keV, 1 MeV y 10 MeV, los valores MC de $e_k^{(\text{MC})}(r)$ para las generaciones $k = 0, 1, 2, 3$ y el resto $e_R^{(\text{MC})}(r) = e_4^{(\text{MC})}(r) + e_5^{(\text{MC})}(r) + \dots$

En primer lugar, tanto a baja como a alta energía, se puede observar como las contribuciones de las k -ésimas generaciones se van haciendo más pequeñas a medida que k aumenta. En particular, para $E_S = 10$ keV, la contribución $e_R^{(\text{MC})}(r)$ es mucho más pequeña que la $e_3^{(\text{MC})}(r)$.

A energías intermedias sin embargo, donde la dispersión Compton es el proceso dominante, esto no ocurre. Es notable destacar, que para 100 keV y $r > 10$ cm es precisamente $e_R^{(\text{MC})}(r)$ la contribución dominante. Esto es debido al hecho de que, aparte de la preponderancia de la dispersión Compton y por tanto haber mayor número de dispersiones para las energías medias (E_k) de estas generaciones, la fracción de energía retenida por los fotones en estas dispersiones es mayor que para energías mayores.

2.2.3. Ajustes de los fotones primarios

Para estudiar la contribución de los fotones primarios, hemos ajustado la ecuación (1.27) a los histogramas simulados con PENELOPE, cuyos valores denotamos como $e_0^{(\text{MC})}(r)$. El resultado para los cuatro valores de E_S utilizados en la fig. 2.5, se muestra en esta otra Figura 2.6, en ella hemos usado una escala logarítmica en el eje de abscisas,

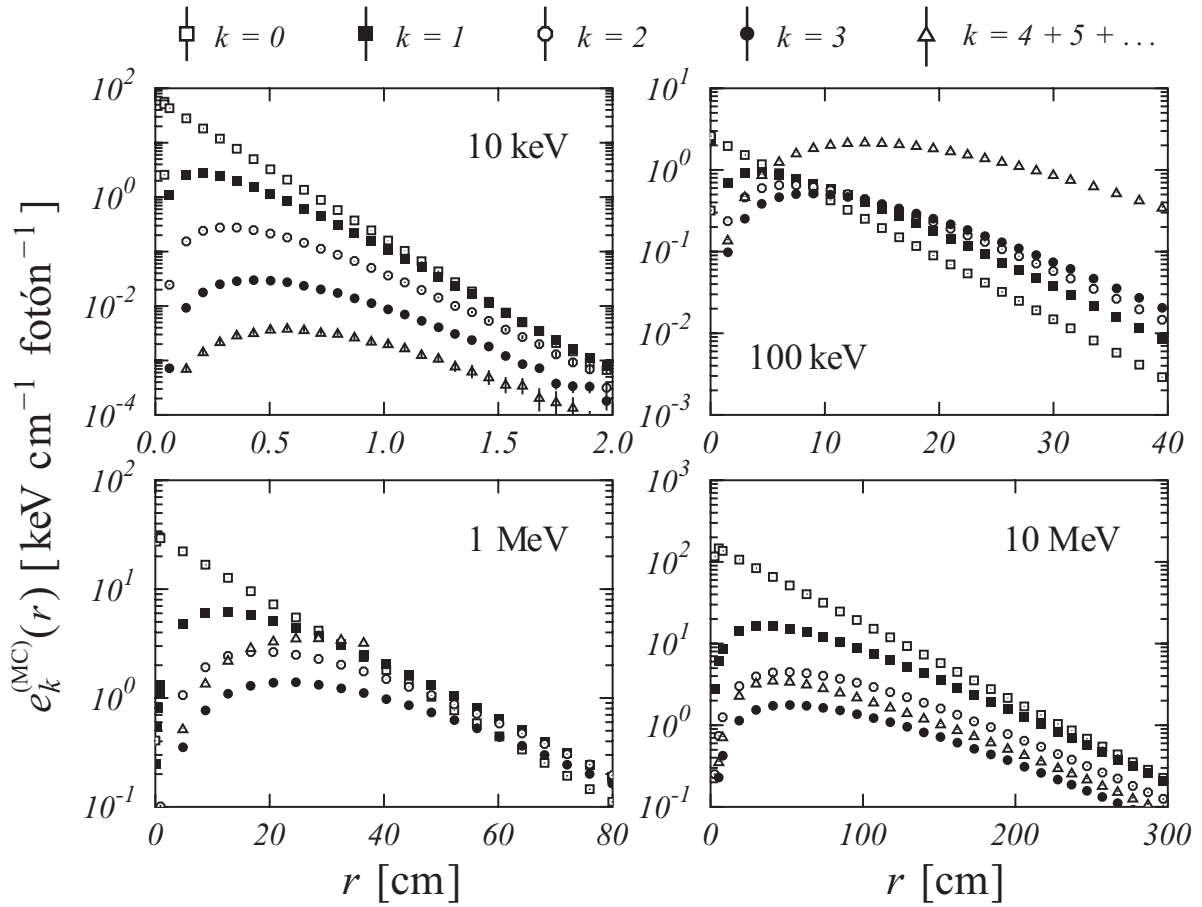


Figura 2.5: Contribución de varias generaciones de fotones a la energía absorbida por unidad de longitud y por fotón inicial $e(r)$, obtenidas de la simulación Monte Carlo con PENELOPE. Se muestran los resultados para 10keV, 100 keV, 1 MeV y 10 MeV. El eje de ordenadas se ha representado en escala logarítmica, para suavizar las diferencias entre las distintas generaciones. Nótese que la generación “ $k = 0$ ” (fotones primarios) aparece como una recta decreciente, que es como se representa en escala logarítmica una exponencial decreciente. Las barras de error son menores que los símbolos utilizados y no se aprecian en las gráficas.

para resaltar la región donde r es pequeña, que es donde existen mayores discrepancias con las ecuaciones que nos ofrece el modelo.

Se ha representado con cuadrados los resultados de la simulación Monte Carlo, con línea continua la ecuación (1.27) con los parámetros ajustados a la simulación y por último, con línea de puntos representamos la aproximación exponencial clásica de Berger (1968) [29]

$$e_0^{(B)}(r) = E_S \mu_{\text{en}} e^{-\mu r}, \quad (2.18)$$

donde los parámetros μ y μ_{en} son los obtenidos por Hubbell y Seltzer (2004) [52] y Berger *et al.* (2005) [55].

Como puede apreciarse en la Figura 2.6, el uso de la ecuación de Berger(2.18) en el tramo de pre-equilibrio electrónico nos lleva a una divergencia al infinito al acercarnos a la fuente, lo que sobrevalora enormemente la dosis depositada en dicho tramo y por

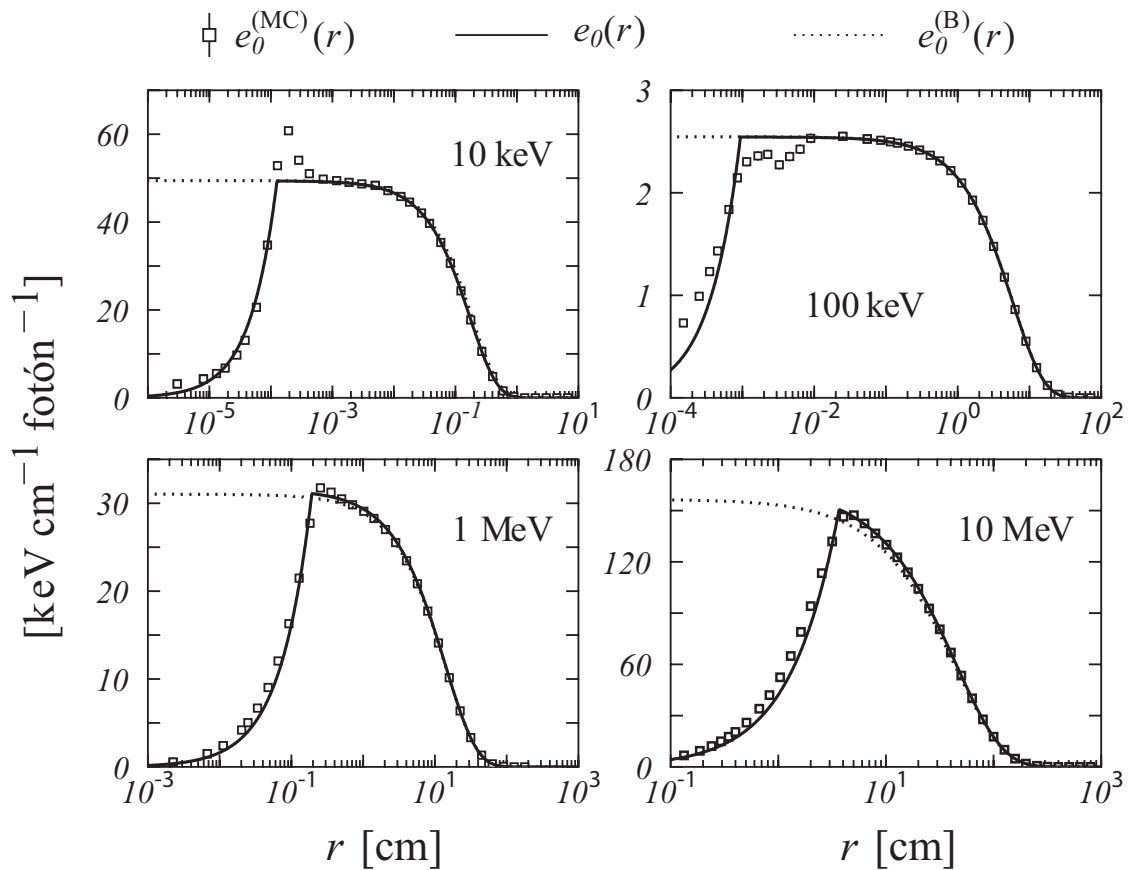


Figura 2.6: Con línea continua se muestra el ajuste de $e_0(r)$ expresado en las Ec.(1.27) de la contribución de los fotones primarios $e_0^{(\text{MC})}(r)$ en agua (dibujada con símbolos cuadrados). Se compara con la fórmula exponencial $e_0^{(\text{B})}(r)$ dada por la Ec.(2.18) (con línea punteada). Se muestran para 10, 100 keV, y 1, 10 MeV, que representan aproximadamente el espectro estudiado. El eje de abscisas está expresado en escala logarítmica, para poder visualizar mejor las diferencias a corta distancia de la fuente. Las incertidumbres estadísticas son menores que el tamaño de los símbolos.

ello, no es conveniente su uso para el cálculo de dosis a estas distancias. Mientras que para r superiores a la zona de pre-equilibrio electrónico, esta ecuación ofrece una precisión aceptable, si bien, subestima ligeramente la dosis depositada al aumentar la energía de la fuente.

Como vemos, cuando usamos las ecuaciones deducidas de nuestro modelo (1.27) se obtiene una razonablemente buena descripción del proceso de acumulación que tiene lugar hasta alcanzar el equilibrio electrónico, el cual mejora al aumentar la energía. Mientras que por encima de este tramo, la concordancia con los valores Monte Carlo, también es más precisa que cuando usamos la ecuación de Berger (2.18).

Se puede apreciar también, que en el entorno de R_0 , es decir, donde acaba el tramo de pre-equilibrio electrónico y cambia la pendiente de la curva, a bajas energías se produce un pico que el modelo no puede ajustar con precisión. Esta diferencia se ve agrandada en la Figura 2.6 al haber expresado el eje de abscisas en escala logarítmica, pero en realidad se trata de una franja pequeñísima respecto a toda la distancia en la que se deposita la energía (en torno a varios órdenes de magnitud menor). Por tanto, cuando queramos hacer un cálculo preciso en este pequeño entorno de R_0 y a bajas energías, deberemos tener presente este hecho.

En la Tabla 2.3 se presentan los valores de los parámetros ajustados a las ecuaciones 1.27, A_0 (normalizado a la energía inicial E_S), R_0 y μ_0 , para diferentes energías en el rango de 10 keV-20 MeV.

En la Tabla 2.4 se muestran los mismos valores que en la anterior (Tabla 2.3), pero para algunas energías de diferentes fuentes radioactivas usadas comúnmente en braquiterapia, en particular, las energías de los fotones más probables y también las energías medias ponderadas de todos los fotones emitidos por el radioisótopo (en *itálica*).

Los valores obtenidos para μ_0 son muy aproximados a los tabulados por Hubbell and Seltzer (2004) [56], o los calculados con el programa XCOM (Berger *et al.* 2005) [55] (quinta columna en la Tabla 2.3). Las mayores diferencias aparecen para las energías más pequeñas. Se observa también, que el modelo ofrece una buena descripción de la fracción de energía depositada por los electrones primarios f_0 (comparar las dos últimas columnas en ambas tablas). Como era de esperar, podemos ver que R_0 aumenta con la energía inicial E_S , mientras que A_0 disminuye.

2.2.4. Ajuste de los fotones dispersados

Comentemos ahora, la aplicación de las ecuaciones deducidas en el modelo a los fotones dispersados. En primer lugar, veamos la magnitud de la aproximación hecha en la sección (1.3.4), al usar la expresión reducida (1.70) en lugar de (1.61), para ello, hemos ajustado para varias generaciones k de fotones dispersados, los resultados de las simulaciones Monte Carlo ($e_k^{(MC)}(r)$) a las ecuaciones (1.61) y (1.70). Como cabía esperar, las diferencias entre estas dos ecuaciones, solamente son apreciables a cortas distancias de la fuente (hasta unas cuantas veces el valor de R_k).

En la Figura 2.7 se puede observar la comparación de estos dos ajustes para la generación $k = 1$ y una energía de la fuente $E_S = 1$ MeV. Se puede apreciar, que ambos producen similares resultados, siendo su diferencia inferior al 0.5% del máximo

| E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) | μ (cm^{-1}) | $f_0^{(\text{MC})}$ | f_0 |
|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|-------------------------------|---------------------|-----------|
| 10 | 6793(31) | 0.00012631(4) | 5.756(2) | 5.329 | 0.8583(5) | 0.858(4) |
| 15 | 2763(22) | 0.00028373(8) | 1.7522(5) | 1.673 | 0.784(2) | 0.784(6) |
| 20 | 1200(11) | 0.0005460(1) | 0.8389(2) | 0.8096 | 0.656(2) | 0.656(6) |
| 25 | 664(6) | 0.0007821(2) | 0.5243(2) | 0.508 | 0.519(2) | 0.519(5) |
| 30 | 379(4) | 0.0010644(4) | 0.3866(1) | 0.3756 | 0.403(2) | 0.403(5) |
| 35 | 235(2) | 0.0013427(4) | 0.3148(1) | 0.307 | 0.316(2) | 0.316(3) |
| 40 | 157(2) | 0.0016188(5) | 0.27392(8) | 0.2683 | 0.2542(9) | 0.254(3) |
| 50 | 83.6(9) | 0.0021951(7) | 0.23013(8) | 0.2269 | 0.1837(8) | 0.183(2) |
| 75 | 95(2) | 0.0014721(6) | 0.18923(8) | 0.188 | 0.1406(5) | 0.141(2) |
| 100 | 166(2) | 0.0008953(1) | 0.17138(3) | 0.1707 | 0.1484(3) | 0.148(2) |
| 125 | 93(1) | 0.0017780(6) | 0.15987(6) | 0.159 | 0.1652(5) | 0.165(2) |
| 150 | 67.5(7) | 0.0027115(7) | 0.15075(4) | 0.1505 | 0.1831(5) | 0.183(2) |
| 175 | 49.5(5) | 0.0040472(9) | 0.14344(3) | 0.143 | 0.2002(5) | 0.200(2) |
| 200 | 37.9(3) | 0.005705(1) | 0.13718(3) | 0.1370 | 0.2161(6) | 0.216(2) |
| 250 | 21.6(1) | 0.011319(3) | 0.12697(3) | 0.127 | 0.2445(7) | 0.244(2) |
| 300 | 15.34(6) | 0.017517(5) | 0.11864(3) | 0.1186 | 0.2689(7) | 0.269(1) |
| 400 | 9.13(2) | 0.033816(9) | 0.10615(3) | 0.1061 | 0.3087(8) | 0.3086(9) |
| 500 | 6.37(1) | 0.05341(2) | 0.09685(3) | 0.09687 | 0.3405(9) | 0.3403(8) |
| 700 | 3.690(4) | 0.10524(2) | 0.08366(2) | 0.0836 | 0.3886(9) | 0.3883(5) |
| 1000 | 2.353(1) | 0.18632(2) | 0.070650(7) | 0.07072 | 0.4388(5) | 0.4384(3) |
| 1500 | 1.400(1) | 0.35134(7) | 0.05750(1) | 0.05754 | 0.4925(9) | 0.4920(5) |
| 2000 | 1.0021(8) | 0.52612(8) | 0.049365(7) | 0.04942 | 0.5278(9) | 0.5273(5) |
| 3000 | 0.6482(3) | 0.88610(1) | 0.039633(6) | 0.03969 | 0.5748(9) | 0.5744(4) |
| 4000 | 0.4803(2) | 1.2632(2) | 0.033981(4) | 0.03403 | 0.6072(8) | 0.6067(3) |
| 5000 | 0.3892(1) | 1.6228(2) | 0.030261(4) | 0.03031 | 0.6320(8) | 0.6316(3) |
| 8000 | 0.25505(6) | 2.6780(3) | 0.024252(2) | 0.02429 | 0.6832(7) | 0.6830(2) |
| 10000 | 0.20998(3) | 3.3650(2) | 0.0221691(9) | 0.02219 | 0.7063(3) | 0.7066(1) |
| 12000 | 0.18024(4) | 4.0189(4) | 0.020760(2) | 0.0208 | 0.7239(7) | 0.7243(2) |
| 14000 | 0.15900(2) | 4.6433(4) | 0.019777(1) | 0.0198 | 0.7376(6) | 0.7382(2) |
| 16000 | 0.14164(2) | 5.2898(4) | 0.019068(1) | 0.0191 | 0.7483(6) | 0.7492(2) |
| 18000 | 0.12906(2) | 5.8681(5) | 0.018523(1) | 0.0183 | 0.7566(6) | 0.7573(2) |
| 20000 | 0.11811(2) | 6.4650(6) | 0.018107(1) | 0.01813 | 0.7629(5) | 0.7635(2) |

Tabla 2.3: Parámetros obtenidos mediante el ajuste de las ecuaciones (1.27) a los valores de la simulación $e_0^{(\text{MC})}$ en agua, para diferentes energías en el rango entre 10 keV y 20 MeV. En particular, se muestra A_0 (normalizada a E_S), R_0 y μ_0 . Los valores de μ_0 son comparados con los obtenidos por Berger *et al.* (2005) (quinta columna) [55]. Adicionalmente, se muestra la fracción de energía depositada por los fotones primarios f_0 , como vimos en la Ec.(1.83), y se compara con los resultados de la simulación Monte Carlo, $f_0^{(\text{MC})}$. Los valores entre paréntesis indican la correspondiente incertidumbre (0.8583(5) significa 0.8583 ± 0.0005).

| Isót. | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) | μ (cm^{-1}) | $f_0^{(\text{MC})}$ | f_0 |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|-------------------------------|---------------------|-----------|
| ^{103}Pd | 20.6 | 1133(8) | 0.0005631(2) | 0.7849(2) | 0.757 | 0.639(2) | 0.638(5) |
| ^{125}I | 27.4 | 498(6) | 0.0009229(2) | 0.4464(1) | 0.433 | 0.460(2) | 0.460(5) |
| ^{125}I | 28.33 | 459(5) | 0.0009554(3) | 0.4224(1) | 0.410 | 0.439(2) | 0.439(5) |
| ^{192}Ir | 316 | 14.63(6) | 0.018851(6) | 0.11638(4) | 0.116 | 0.2759(7) | 0.276(1) |
| ^{192}Ir | 397 | 9.84(3) | 0.031233(7) | 0.10647(2) | 0.106 | 0.3077(8) | 0.308(1) |
| ^{198}Au | 412 | 8.90(2) | 0.035148(9) | 0.10489(3) | 0.105 | 0.3129(9) | 0.3128(9) |
| ^{198}Au | 420 | 8.72(2) | 0.036148(9) | 0.10410(3) | 0.104 | 0.3156(9) | 0.3155(9) |
| ^{137}Cs | 662 | 4.008(6) | 0.09491(2) | 0.08571(2) | 0.0857 | 0.3807(9) | 0.3804(6) |
| ^{60}Co | 1173 | 1.903(2) | 0.24174(5) | 0.06525(1) | 0.0653 | 0.4605(9) | 0.4601(6) |
| ^{60}Co | 1250 | 1.765(2) | 0.26543(5) | 0.06316(1) | 0.06323 | 0.4689(9) | 0.4685(5) |
| ^{60}Co | 1332 | 1.615(1) | 0.29533(7) | 0.06114(1) | 0.0612 | 0.4773(9) | 0.4768(5) |

Tabla 2.4: Se muestran los mismos parámetros de ajuste que en la Tabla 2.3 pero para las energías de los fotones más probables de varias fuentes radioactivas habitualmente utilizadas en braquiterapia y para el valor medio de las energías correspondientes espectro del isótopo (en itálica). Los valores entre paréntesis indican la correspondiente incertidumbre (0.7849(2) significa $0.0.7849 \pm 0.0002$).

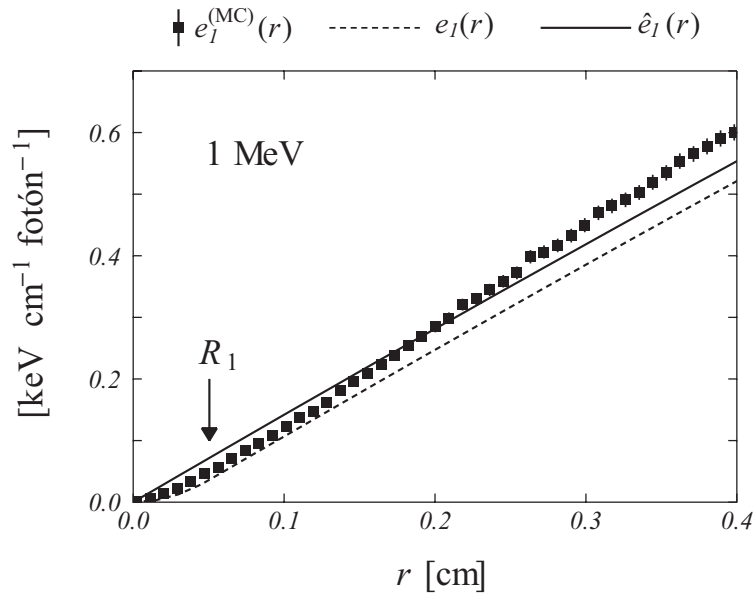


Figura 2.7: Comparación entre los ajustes analíticos de la generación “1” a la simulación Monte Carlo $e_1^{(\text{MC})}(r)$, usando $e_1(r)$ como se expresa en la Ec.(1.61) (curva a trazos) y $\hat{e}_1(r)$ expresada en la Ec.(1.70) (con trazo continuo), para una energía de la fuente de 1 MeV, a cortas distancias de ésta.

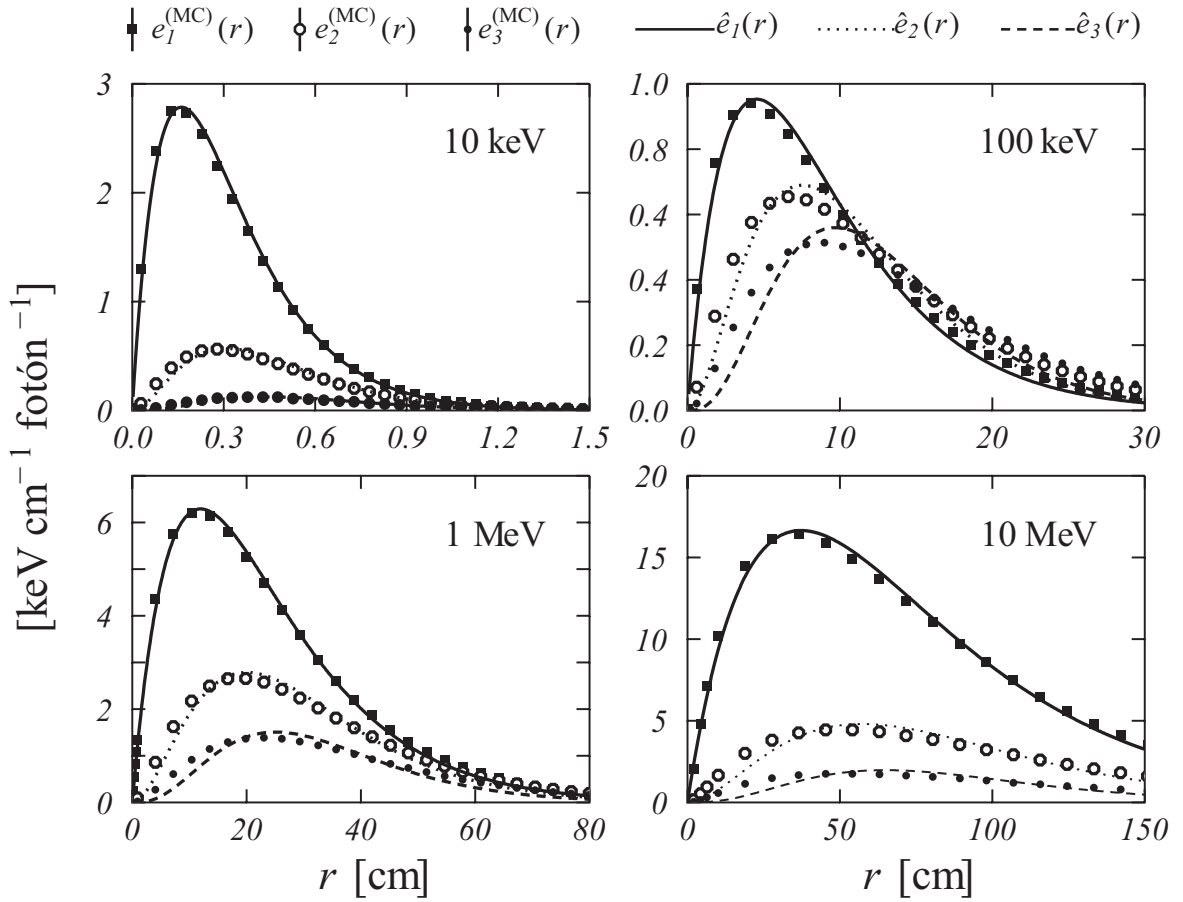


Figura 2.8: Ajustes analíticos a las contribuciones $e_k^{(\text{MC})}$ para $k = 1, 2, 3$, usando \hat{e}_k tal como se expresa en la Ec.(1.70), para 10, 100 keV, y 1 y 10 MeV. Las incertidumbres estadísticas son menores que el tamaño de los símbolos.

valor de $e_1^{(\text{MC})}(r)$. Los valores R_k se reducen según aumenta la generación k , pues E_k disminuye, y como consecuencia, las diferencias entre estas dos expresiones son menores al aumentar dicha generación k . Realmente, en la práctica, el uso de $\hat{e}_k(r)$ en lugar de $e_k(r)$ no empeora la descripción de los resultados Monte Carlo.

Los resultados de los ajustes mediante la ecuación (1.70) a los valores $e_k^{(\text{MC})}$ para $k = 1, 2$ y 3 , se ilustran en la Figura 2.8 para 10 y 100 keV, y para 1 y 10 MeV.

En general, el modelo nos proporciona una razonable buena descripción para las simulaciones Monte Carlo de las distintas generaciones de fotones dispersados.

La concordancia es particularmente buena para la generación $k = 1$, empeorando conforme aumenta k .

Los valores de los coeficientes de atenuación para las tres primeras generaciones de fotones dispersados obtenidos en los ajustes numéricos a la Ec.(1.70) se muestran en la Tabla 2.5, en ella, puede observarse como este modelo proporciona también una buena descripción de la fracción de energía depositada en el medio (f) (compárese f_k con $f_k^{(\text{MC})}$ en la tabla anterior).

| E_S (keV) | 10 | 100 | 1000 | 10000 |
|-------------------------------------|------------|-----------|------------|-----------|
| $\tilde{\mu}_1$ (cm ⁻¹) | 6.20(1) | 0.2201(4) | 0.08369(8) | 0.0268(4) |
| f_1 | 0.1222(3) | 0.1177(2) | 0.2043(2) | 0.1686(2) |
| $f_1^{(MC)}$ | 0.100 | 0.122 | 0.208 | 0.173 |
| $\tilde{\mu}_2$ (cm ⁻¹) | 6.45(1) | 0.2654(8) | 0.0999(2) | 0.0349(1) |
| f_2 | 0.01627(8) | 0.0960(4) | 0.1030(3) | 0.0508(2) |
| $f_2^{(MC)}$ | 0.017 | 0.105 | 0.109 | 0.056 |
| $\tilde{\mu}_3$ (cm ⁻¹) | 6.75(1) | 0.309(1) | 0.1196(4) | 0.0462(3) |
| f_3 | 0.00208(1) | 0.0808(4) | 0.0562(3) | 0.0191(2) |
| $f_3^{(MC)}$ | 0.001 | 0.092 | 0.063 | 0.023 |

Tabla 2.5: Coeficientes de atenuación y fracciones de energía depositada, obtenidos en el ajuste analítico a $e_k^{(MC)}$ para $k = 1, 2, 3$ usando la Ec.(1.70). Los valores entre paréntesis indican la correspondiente incertidumbre (0.2201(4) significa 0.2201 ± 0.0004).

Es apreciable, que para una energía dada, $\tilde{\mu}_k$ aumenta ligeramente con k , manteniéndose en el mismo orden, lo que apoya el uso de la aproximación en la ecuación (1.74), la cual se basa en el uso de los coeficientes efectivos μ'_k .

Fotones dispersados totales

Para contrastar los resultados que ofrecen las ecuaciones del modelo para la contribución total de los fotones dispersados \tilde{e}_{sc} , ajustaremos la ecuación (1.74) a los valores Monte Carlo de la contribución de todas las generaciones de fotones $e_{sc}^{(MC)}(r)$. Los resultados de los parámetros ajustados usando como medio material agua y para energías entre 10keV y 20MeV se ilustran en la Tabla 2.6, representándose en la Tabla 2.7 los mismos parámetros para energías de isótopos habitualmente utilizados en braquiterapia. Resultados de estos ajustes en otros medios materiales pueden consultarse en el apéndice A.

Gráficas de estos resultados para 10keV, 100 keV, y para 1MeV, 10 MeV se muestran en la Figura 2.9.

Como comentamos al final de la sección 1.3.4, hemos usado $K = 2$ en la ecuación (1.74) y como vemos en dicha figura y en la (2.10), es remarcable que con tan sólo dos términos en dicha ecuación se obtiene una excelente descripción de los resultados Monte Carlo.

Con la intención de observar con más fidelidad la exactitud de los ajustes, hemos procedido a calcular las diferencias entre las simulaciones Monte Carlo ($e_{sc}^{(MC)}$) y los valores obtenidos al ajustar éstos (\tilde{e}_{sc}) a la ecuación (1.74). Estas diferencias las hemos normalizado al valor máximo del pico de las curvas Monte Carlo y posteriormente se han expresado en tanto por ciento. En la Figura 2.10 se pueden observar para 10 y 100 keV y para 1 y 10 MeV, mostrando así ejemplos para bajas, medias y altas energías. Los valores medios de estas diferencias a lo largo de toda la curva son: 0.2 % para 10 keV;

| E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|----------------|------------|----------------------------------|------------|----------------------------------|
| 10 | 0.0632(6) | 9.44(4) | 0.0390(3) | 6.72(1) |
| 15 | 0.0940(2) | 3.217(1) | 0.0603(1) | 2.15(4) |
| 20 | 0.1364(2) | 1.6158(4) | 0.1021(1) | 1.06(4) |
| 25 | 0.1702(3) | 1.0089(2) | 0.1504(1) | 0.671(2) |
| 30 | 0.2244(2) | 0.6593(1) | 0.1834(1) | 0.459(2) |
| 35 | 0.2582(2) | 0.48952(7) | 0.2117(1) | 0.356(6) |
| 40 | 0.410(1) | 0.3205(2) | 0.1673(5) | 0.2767(7) |
| 50 | 0.469(1) | 0.2284(2) | 0.1730(7) | 0.2239(5) |
| 75 | 0.286(1) | 0.2008(3) | 0.2862(5) | 0.17671(6) |
| 100 | 0.191(1) | 0.2109(6) | 0.3298(5) | 0.15899(6) |
| 125 | 0.1746(6) | 0.2049(4) | 0.3301(3) | 0.14771(4) |
| 150 | 0.1708(5) | 0.1969(3) | 0.3230(3) | 0.13994(3) |
| 175 | 0.1720(6) | 0.1884(4) | 0.3138(3) | 0.13399(3) |
| 200 | 0.1738(4) | 0.1811(2) | 0.3049(2) | 0.12920(2) |
| 250 | 0.1793(5) | 0.1676(3) | 0.2879(3) | 0.12165(3) |
| 300 | 0.1835(6) | 0.1568(3) | 0.2736(3) | 0.11573(3) |
| 400 | 0.3521(8) | 0.1018(3) | 0.1700(4) | 0.10186(2) |
| 500 | 0.34612(2) | 0.09493(3) | 0.15684(1) | 0.09559(3) |
| 700 | 0.4146(6) | 0.07599(6) | 0.0982(3) | 0.08857(8) |
| 1000 | 0.4392(4) | 0.06300(3) | 0.0611(2) | 0.0840(1) |
| 1500 | 0.4369(3) | 0.05170(2) | 0.0364(1) | 0.0804(1) |
| 2000 | 0.4226(2) | 0.04527(2) | 0.0261(1) | 0.0776(1) |
| 3000 | 0.3970(2) | 0.037579(7) | 0.01564(7) | 0.07586(9) |
| 4000 | 0.3736(2) | 0.033143(7) | 0.01080(8) | 0.07560(9) |
| 5000 | 0.3527(1) | 0.030237(5) | 0.00822(6) | 0.07645(8) |
| 8000 | 0.3042(1) | 0.025232(3) | 0.00588(5) | 0.0800(1) |
| 10000 | 0.28129(8) | 0.023378(3) | 0.00552(4) | 0.08001(9) |
| 12000 | 0.26217(8) | 0.021886(4) | 0.00652(5) | 0.07554(7) |
| 14000 | 0.24842(9) | 0.020927(8) | 0.00660(5) | 0.07260(7) |
| 16000 | 0.2307(4) | 0.01959(3) | 0.0107(2) | 0.0639(3) |
| 18000 | 0.21944(8) | 0.018850(2) | 0.01238(4) | 0.05971(5) |
| 20000 | 0.22449(6) | 0.019322(2) | 0.00610(3) | 0.06729(2) |

Tabla 2.6: Parámetros obtenidos en el ajuste analítico de $e_{sc}^{(MC)}$ usando la Ec.(1.74) en agua, para diversas energías en el rango entre 10 keV y 20 MeV. En particular, se muestra C_1 y C_2 (normalizada a E_S), μ'_1 y μ'_2 . Los valores entre paréntesis indican la correspondiente incertidumbre (0.0390(3) significa 0.0390 ± 0.0003).

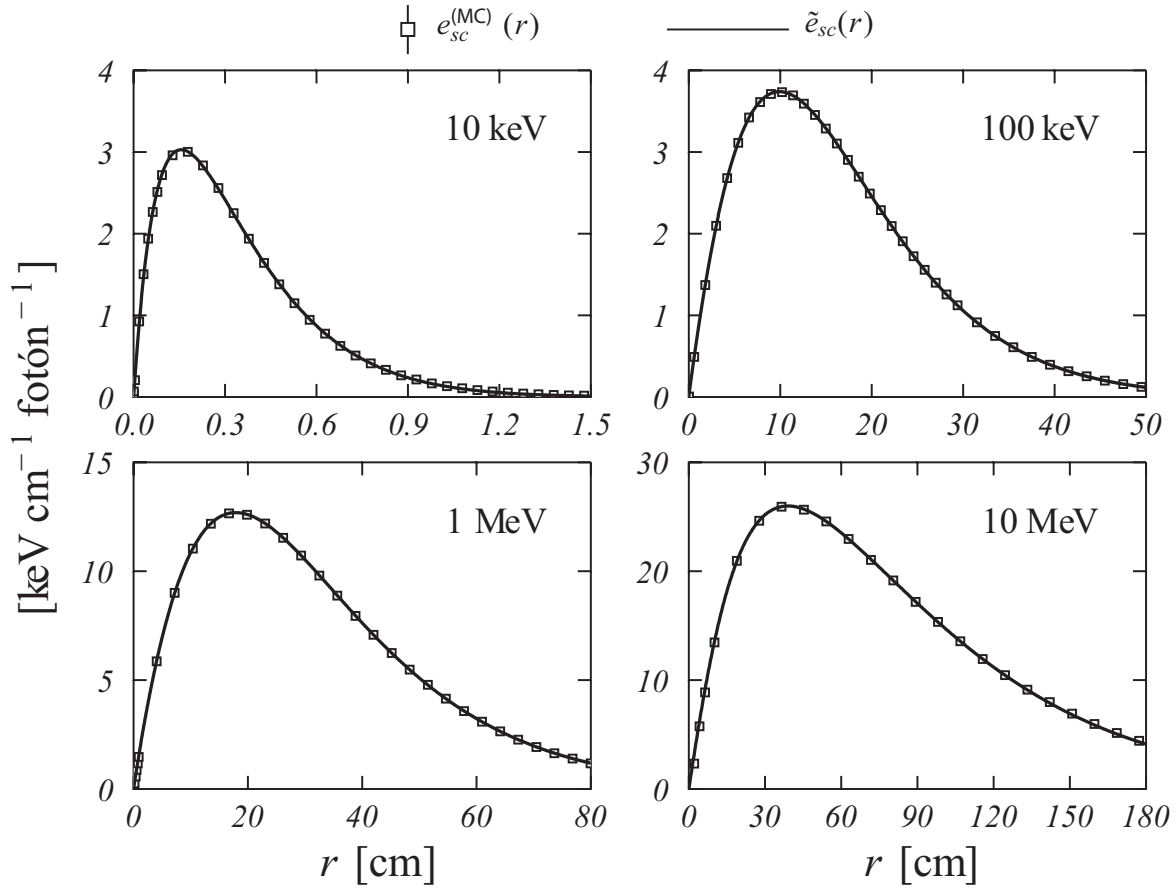


Figura 2.9: Ajustes analíticos a los valores $e_{sc}^{(MC)}$, usando \tilde{e}_{sc} como viene dada en la Ec.(1.74) para 10 y 100 keV, y para 1 y 10 MeV. Las incertidumbres estadísticas son menores que el tamaño de los símbolos.

| Isotope | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|------------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.1403(2) | 1.5117(4) | 0.1075(1) | 1.01(4) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.1985(3) | 0.8060(1) | 0.1665(1) | 0.549(2) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.2086(2) | 0.7462(1) | 0.1727(1) | 0.513(2) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.3589(6) | 0.1088(3) | 0.1834(3) | 0.10869(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.3524(6) | 0.1021(3) | 0.1704(3) | 0.10208(3) |
| ^{198}Au | 412 | 0.35214(8) | 0.1008(3) | 0.1679(4) | 0.10107(2) |
| ^{198}Au | 420 | 0.35169(9) | 0.1002(4) | 0.1668(4) | 0.10048(3) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.390(1) | 0.08017(9) | 0.1141(5) | 0.08866(8) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4452(4) | 0.05795(3) | 0.0479(2) | 0.0832(1) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4392(3) | 0.05656(3) | 0.0465(2) | 0.0815(4) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4396(3) | 0.05471(2) | 0.0423(2) | 0.0815(3) |

Tabla 2.7: Se muestran los mismos parámetros de ajuste que en la Tabla 2.6, pero para las energías más probables de varias fuentes radioactivas habitualmente utilizadas en braquiterapia y para la energía media del espectro del correspondiente isótopo (en itálica). Los valores entre paréntesis indican la incertidumbre asociada (0.4392(3) significa 0.4392 ± 0.0003).

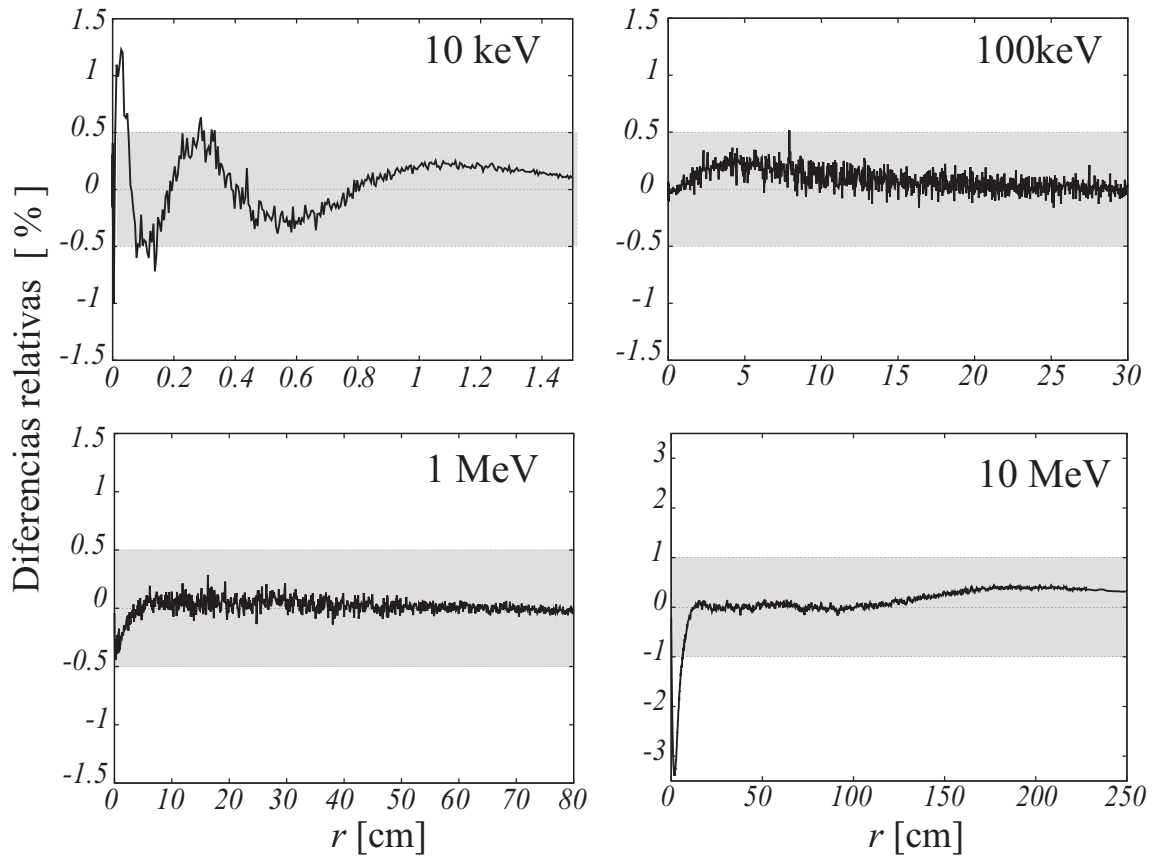


Figura 2.10: Diferencias entre $e_{sc}^{(MC)}$ y \bar{e}_{sc} tal como se expresa en la Ec.(1.74), para 10 y 100 keV, y para 1 y 10 MeV. Estas diferencias están normalizadas al valor máximo en el pico de la curva Monte Carlo, y expresadas en tanto por ciento.

0.1% para 100 keV y 1 MeV; y 0.4% para 10 MeV. En el resto de energías estudiadas no se supera el valor medio de 0.6% en ningún caso.

Como comparación, hemos realizado el mismo cálculo ajustando los valores de la simulación Monte Carlo a la ecuación (2.13), dada por Berger en la referencia [29] y constatando en ellos que la variación con nuestros ajustes, en el porcentaje medio de diferencias, se sitúa en un factor entre 2 y 20 mayor a lo largo de las energías estudiadas y por tanto proporciona una inferior precisión.

Capítulo 3

Aplicación a una fuente lineal

El modelo aquí presentado permite describir la deposición de dosis en una fuente puntual inmersa en un medio homogéneo, lo que nos remite a pensar que una fuente extensa pueda considerarse como un conjunto de fuentes puntuales. En este caso, la dosis depositada a una distancia r del origen de coordenadas será la suma de todas las contribuciones de las fuentes puntuales situadas a una distancia r' , es decir:

$$\dot{D}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{A(\vec{r}')}{4\pi \rho |\vec{r} - \vec{r}'|^2} e^{-\mu(|\vec{r} - \vec{r}'|)}, \quad (3.1)$$

donde $A(\vec{r})$ representa la distribución espacial de las fuentes.

En este capítulo vamos a aplicar las ecuaciones 1.27 y 1.74 deducidas en el modelo estadístico a la dosimetría de una fuente de fotones lineal e ideal, inmersa en un medio homogéneo, cuya parte principal ha sido publicada en la referencia [57]. Una fuente así, consiste en una sucesión de fuentes puntuales uniformemente distribuidas formando una línea unidimensional de longitud L (Fig.3.2), donde cada una de estas fuentes depositará su energía en el medio tal como hemos visto en el capítulo 1.

Una fuente lineal podemos considerarla como la idealización de una fuente o “*semilla*” como las usadas en Braquiterapia, de la que podemos ver un ejemplo en la Figura 3.1 (consultar las referencias [58–64] para obtener una visión general de la Braquiterapia).

Para calcular la dosis que deposita en el medio una fuente de braquiterapia se usan comúnmente formalismos empíricos. En la actualidad, el más habitual es el formado por las recomendaciones del comité de la AAPM (American Association of Physicists in Medicine, Task group n° 43), conocido como protocolo TG-43 (ref. [65–69]).

Este formalismo utiliza dos aproximaciones al cálculo de la dosis depositada. Una aproximación bidimensional en la que la dosis depende de dos variables (r, θ) y otra unidimensional donde la dependencia es solamente de la distancia a la fuente (r) . Respectivamente se expresan como:

$$\dot{D}(r, \theta) = S_K \Lambda \frac{G_L(r, \theta)}{G_L(r_0, \theta_0)} g(r) F(r, \theta) \quad (3.2)$$

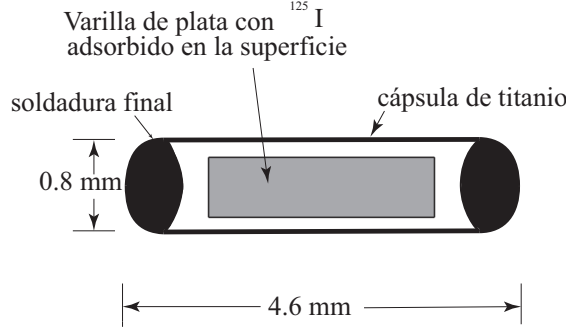


Figura 3.1: Semilla usada en Braquiterapia, modelo 6711 de Amersham Health (ref. [65])

y

$$\dot{D}(r) = S_K \Lambda \frac{G_L(r, \theta_0)}{G_L(r_0, \theta_0)} g(r) \phi_{\text{an}}(r), \quad (3.3)$$

donde S_K es la intensidad de kerma en aire [70,71], Λ la constante de tasa de dosis, $g(r)$ la “Función de dosis radial”, $F(r, \theta)$ la “Función de anisotropía 2D”, ϕ_{an} es el “Función de anisotropía 1D” y $G_L(r, \theta)$ la “función geométrica”, que es el valor medio de $1/r^2$ y expresa la influencia de la ley del cuadrado de la distancia en la dosis depositada por la fuente. Este factor, para el caso de una fuente puntual, es sencillamente $1/r^2$, mientras que para la aproximación de fuente lineal se define de la forma:

$$G_L(r, \theta) = \begin{cases} \frac{\phi_2 - \phi_1}{Lr \sin \theta} & \text{si } \theta \neq 0 \\ (r^2 - L^2/4)^{-1} & \text{si } \theta = 0. \end{cases} \quad (3.4)$$

3.1. Cálculo de la dosis depositada por una fuente lineal

Como hemos mencionado al inicio del capítulo, para calcular la tasa de dosis que depositará una fuente lineal debemos solucionar la ecuación (3.1). Para resolverla, primeramente utilizaremos coordenadas esféricas y consideraremos simetría azimutal a lo largo del eje Z que es donde situaremos la fuente, de esta manera expresaremos nuestro desarrollo en dos coordenadas (r, θ) . Haremos uso también de la simetría polar para restringir el estudio a la región $\theta \in [0, \pi/2]$.

En la ecuación (3.1), renombraremos por conveniencia

$$z = |\vec{r}'|, \quad (3.5)$$

y

$$s = |\vec{r} - \vec{r}'|. \quad (3.6)$$

En la Figura 3.2 podemos ver el esquema de una fuente de este tipo.

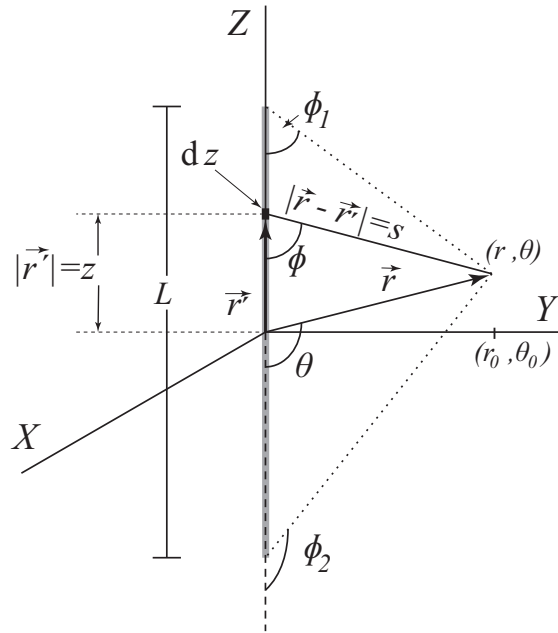


Figura 3.2: Representación de una fuente lineal de longitud L y situada en el eje Z

Cada elemento dz de la fuente tiene una actividad infinitesimal $dA = a dz$, donde a es la actividad por unidad de longitud $a = A/L$ y depositará una tasa de dosis infinitesimal expresada por:

$$\begin{aligned} d\dot{D}(r, \theta) &= \frac{dAn_\gamma}{4\pi \rho |\vec{r} - \vec{r}'|^2} e(|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &= \frac{dAn_\gamma}{4\pi \rho s^2} e(s), \end{aligned} \quad (3.7)$$

y la dosis total en el punto (r, θ) será:

$$\dot{D}(r, \theta) = \int_{\text{fuente}} d\dot{D}(r, \theta) = \frac{An_\gamma}{4\pi L \rho} \int_{-L/2}^{L/2} dz \frac{e(s)}{s^2}, \quad (3.8)$$

donde $s = \sqrt{r^2 + z^2 - 2zr \cos \theta}$ por el teorema del coseno y $e(s)$ es la energía depositada por unidad de longitud y por partícula inicial en función de la distancia s .

Hagamos una simplificación expresando esta ecuación en función de la variable ϕ . Observando la Figura 3.2, se pueden establecer las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned} r \cos \theta &= z + s \cos \phi \\ r \sin \theta &= s \sin \phi, \end{aligned} \quad (3.9)$$

de donde

$$s = r \frac{\text{sen } \theta}{\text{sen } \phi}, \quad (3.10)$$

$$\tan \phi(r, \theta) = \frac{r \text{sen } \theta}{r \cos \theta - z}, \quad (3.11)$$

y

$$\begin{aligned} z &= r \cos \theta - s \cos \phi \\ &= r \cos \theta - r \frac{\text{sen } \theta \cos \phi}{\text{sen } \theta}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} dz &= -r \text{sen } \theta \frac{-\text{sen}^2 \phi - \cos^2 \phi}{\text{sen}^2 \phi} d\phi \\ &= \frac{r \text{sen } \theta}{\text{sen}^2 \phi} d\phi. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Sustituyendo estos valores en la Ec.(3.8), obtenemos:

$$\begin{aligned} \dot{D}(r, \theta) &= \frac{An_\gamma}{4\pi\rho L} \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi \frac{r \text{sen } \theta}{\text{sen}^2 \phi} \frac{\text{sen}^2 \phi}{r^2 \text{sen}^2 \theta} e^{\left(\frac{r \text{sen } \theta}{\text{sen } \phi}\right)} \\ &= \frac{An_\gamma}{4\pi\rho L r \text{sen } \theta} \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi e^{\left(\frac{r \text{sen } \theta}{\text{sen } \phi}\right)}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde, de la Ec.(3.11)

$$\begin{aligned} \phi_1(r, \theta) &= \arctan\left(\frac{r \text{sen } \theta}{r \cos \theta + L/2}\right), \\ \phi_2(r, \theta) &= \arctan\left(\frac{r \text{sen } \theta}{r \cos \theta - L/2}\right), \end{aligned} \quad (3.15)$$

Como vemos, la ecuación (3.14) tiene una singularidad en $\theta = 0$ y sólo será válida para ángulos $\theta \neq 0$. Ahora bien, según la Ec.(3.12) cuando $\theta = 0$, $s = r - z$ y entonces la Ec.(3.8) toma la forma:

$$\dot{D}(r, \theta = 0) = \frac{An_\gamma}{4\pi\rho L} \int_{-L/2}^{L/2} dz \frac{e(r-z)}{(r-z)^2}. \quad (3.16)$$

Como un pequeño corolario a estas dos ecuaciones (Ec.(3.14) y Ec.(3.16)), podemos ver la influencia de la ley del cuadrado de la distancia simplemente considerando $e(s)$ como constante. Calculando las integrales obtenemos:

$$\dot{D}(r, \theta \neq 0) = Cte \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{Lr \text{sen} \theta} = Cte G_L(r, \theta \neq 0) \quad (3.17)$$

y

$$\dot{D}(r, \theta = 0) = Cte \frac{1}{L} \left[\frac{-1}{r-z} \right]_{-L/2}^{L/2} = Cte \frac{1}{r^2 - L^2/4} = Cte G_L(r, \theta = 0), \quad (3.18)$$

que como vemos, aparecen unos términos que coinciden con la definición que hace el TG-43 de la función geométrica en su aproximación de fuente lineal (Ec.(3.4).

En este punto del desarrollo aplicaremos las ecuaciones que proporciona el modelo y sustituiremos $e\left(\frac{r \text{sen} \theta}{\text{sen} \phi}\right)$ en la Ec.(3.14) por las ecuaciones (1.27) y (1.74) obtenidas en el capítulo 1, que para facilitar la lectura las expresamos de nuevo aquí:

$$e(r) = e_0(r) + e_{sc}(r),$$

donde $e_0(r)$ corresponde a la contribución de los fotones primarios, y $e_{sc}(r)$ a la de los dispersados totales, es decir:

$$e_0(r) = \begin{cases} A_0 (1 - e^{-\mu_0 r}) & r \leq R_0 \\ A_0 e^{-\mu_0 r} (e^{\mu_0 R_0} - 1) & r > R_0 \end{cases}$$

y

$$\tilde{e}_{sc}(r) = \sum_{k=1}^2 C_k (\mu'_k)^{k+1} r^k e^{-\mu'_k r}.$$

Obteniendo finalmente

$$\begin{aligned} \dot{D}(r, \theta) = \frac{An_\gamma}{4\pi\rho} \frac{1}{Lr \text{sen} \theta} & \left[J(r, \theta) \right. \\ & + C_1 (\mu'_1)^2 r \text{sen} \theta \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi \frac{1}{\text{sen} \phi} e^{(-\mu'_1 \frac{r \text{sen} \theta}{\text{sen} \phi})} \\ & \left. + C_2 (\mu'_2)^3 r^2 \text{sen}^2 \theta \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi \frac{1}{\text{sen}^2 \phi} e^{(-\mu'_2 \frac{r \text{sen} \theta}{\text{sen} \phi})} \right], \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde hemos llamado

$$J(r \leq R_0, \theta) = A_0 \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi \left(1 - e^{(-\mu_0 \frac{r \text{sen} \theta}{\text{sen} \phi})} \right), \quad (3.20)$$

para $r \leq R_0$, intervalo en el que todavía no se ha alcanzado el equilibrio electrónico y

$$J(r > R_0, \theta) = A_0 (e^{\mu_0 R_0} - 1) \int_{\phi_1(r, \theta)}^{\phi_2(r, \theta)} d\phi e^{(-\mu_0 \frac{r \text{sen} \theta}{\text{sen} \phi})} \quad (3.21)$$

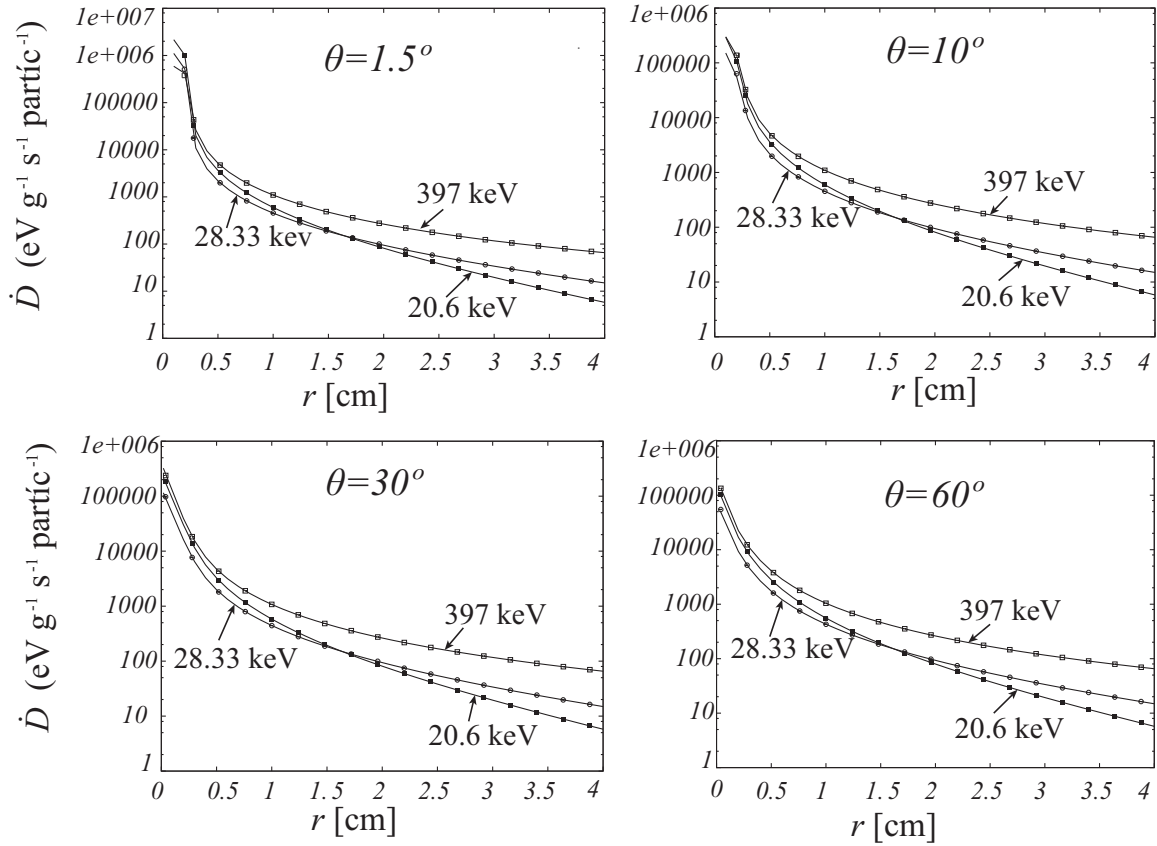


Figura 3.3: Comparación entre los valores Monte Carlo (símbolos) para la dosis total depositada a ángulos θ fijos y en función de r , con los obtenidos mediante la aplicación del modelo (línea continua), para tres energías representativas. Las incertidumbres estadísticas se han expresado a nivel de 1σ y son menores que los símbolos utilizados. Se ha utilizado la escala logarítmica en el eje de ordenadas, para apreciar mejor las diferencias

para el tramo $r > R_0$, una vez establecido dicho equilibrio.

Por comodidad en la notación llamaremos $I(r, \theta)$ a los términos entre corchetes, es decir:

$$\dot{D}(r, \theta) = \frac{An_\gamma}{4\pi\rho} \frac{1}{Lr \sin\theta} I(r, \theta). \quad (3.22)$$

Para realizar el cálculo de esta expresión se ha implementado un programa FORTRAN, el cual evalúa numéricamente las integrales implicadas por el método de Newton-Cotes de cuatro intervalos con, al menos, 1000 puntos de evaluación (Ref. [54]) lo que asegura la convergencia. Pequeñas variaciones a este programa se aplicarán al cálculo de las funciones del TG-43.

En las figuras 3.3 y 3.4 se ilustran los resultados para la dosis total depositada en el medio por fuentes lineales de energías 20.6, 28.33 y 397 keV y de una longitud $L = 4.5$ mm. En la primera (fig.3.3) se muestran los resultados a un ángulo (θ) fijo y en

función de la distancia al centro de la fuente (r), mientras que en la segunda (fig.3.4) se representan a una distancia fija y en función del ángulo. En ambas se aprecia una buena concordancia entre los valores obtenidos en la simulación Monte Carlo (representados con símbolos) y los obtenidos mediante la aplicación del modelo (líneas continuas). En la Figura 3.4 se observa claramente la anisotropía en la distribución de dosis a distancias y ángulos pequeños y a medida que aumenta r la curva se torna plana, es decir, la dosis depositada relaja su dependencia con el ángulo, tal como ocurre con una fuente puntual. Puede verse que a una distancia de 1.5 cm ya es prácticamente plana y a partir de aquí, la fuente lineal podría aproximarse por una fuente puntual.

3.1.1. Cálculo de las funciones del TG-43 para una fuente lineal

Generalidades sobre las simulaciones realizadas

Para validar la aplicación del modelo a una fuente lineal, hemos utilizado la comparación con los valores de las funciones expresadas en el formalismo del TG-43. Para ello hemos implementado un algoritmo Monte Carlo a través del código PENELOPE (ref. [21]), el cual simula una fuente lineal inmersa en un maniquí de agua líquida de tamaño infinito asegurando así que el posible efecto de la retrodispersión no tiene efecto sobre el resultado final de la dosis depositada.

Se han realizado las simulaciones para los radioisótopos comúnmente usados en braquiterapia ^{103}Pd , ^{125}I y ^{192}Ir , cuyas energías medias son: 20.6; 28.33 y 397 keV, respectivamente.

La dosis se contabiliza en intervalos de r desde 0.08 cm a cortas distancias (por debajo de 4 cm) hasta 1 cm a largas distancias, siendo de 0.5 cm a distancias intermedias. El intervalo en θ es de 1° en todos los casos, sin embargo, para poder analizar el comportamiento de ϕ_{an} a cortas distancias, el intervalo en r se escogió de 0.01 cm a baja energía y de 0.02 cm para la energía mayor. El número de partículas simuladas ha sido de 10^{11} en todas las simulaciones, que unido a la elección de los intervalos, nos ha permitido mantener las incertidumbres estadísticas por debajo del 1%. Se ha tenido en cuenta la simetría en el ángulo polar y se han restringido el estudio al intervalo $\theta \in [0 \rightarrow \pi/2]$

De estas simulaciones se extraen dos tipos de histogramas. Uno de ellos, nos indica la dosis depositada a un r fijo (en abscisas) y todos los ángulos θ (en ordenadas) hasta completar todos los r y otro, que refleja dicha dosis a un θ fijo (abscisas) y la distancia r en ordenadas, hasta terminar todos los ángulos θ . Posteriormente se ha construido un programa FORTRAN, que extrae de estos histogramas cortes en los que se representan los datos a un solo r y todos los θ y a un único θ todos los r . Por último, se implementaron nuevos programas FORTRAN que, utilizando estos cortes, concluyen el cálculo Monte Carlo de las funciones $g(r)$, $F(r, \theta)$ y $\phi_{\text{an}}(r)$ del formalismo del TG-43, las cuales compararemos a modo de test, con el cálculo realizado usando las ecuaciones del modelo.

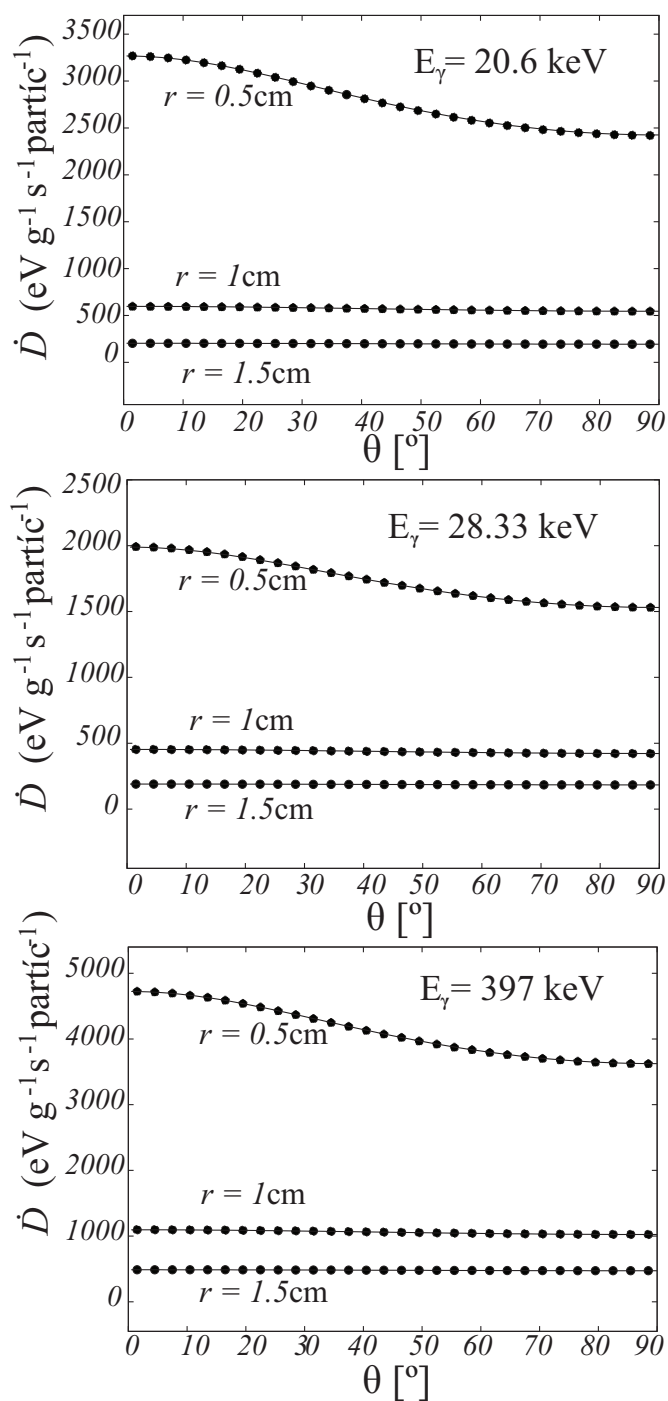


Figura 3.4: Comparación entre los valores Monte Carlo (símbolos) para la dosis total depositada a distancias (r) fijas y en función del ángulo θ , con los obtenidos mediante la aplicación del modelo (línea continua), para tres energías representativas. Las incertidumbres estadísticas se han expresado a nivel de 1σ y son menores que los símbolos utilizados.

Función de dosis radial

Esta función quiere dar cuenta únicamente de la influencia que, en la tasa de dosis total Ec.(3.2), tienen puramente los procesos físicos de interacción radiación-materia, eliminando la que tiene el atravesar diferentes espesores de filtrado en una fuente de braquiterapia a diferentes ángulos de emisión. Por ello $g(r)$ no dependerá del ángulo θ , siendo solamente una función de r . Su estimación se realiza a lo largo del eje donde $\theta = \pi/2$ relacionando la tasa de dosis a cualquier r con la medida en un punto de referencia ($r_0 = 1\text{cm}$ y $\theta_0 = \pi/2$). Como en estas medidas de dosis está incluida la ley del cuadrado de la distancia, habrá que dividir cada una de ellas por su correspondiente función geométrica para eliminar dicha influencia. De esta manera, el formalismo TG-43 define la función de dosis radial como:

$$g(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)} \frac{G_L(r_0, \theta_0)}{G_L(r, \theta_0)}. \quad (3.23)$$

Para calcular esta función a partir del modelo, comenzaremos por expresar el cociente de factores geométricos en la Ec.(3.23). Usando la Ec.(3.4) tenemos:

$$\begin{aligned} G_L(r, \theta_0) &= \frac{\phi_2(r, \theta_0) - \phi_1(r, \theta_0)}{Lr}, \\ G_L(r_0, \theta_0) &= \frac{\phi_2(r_0, \theta_0) - \phi_1(r_0, \theta_0)}{Lr_0}, \\ \frac{G_L(r_0, \theta_0)}{G_L(r, \theta_0)} &= \frac{r}{r_0} \frac{\phi_2(r_0, \theta_0) - \phi_1(r_0, \theta_0)}{\phi_2(r, \theta_0) - \phi_1(r, \theta_0)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Usando la Ec.(3.22), escribiremos el cociente de tasa de dosis de la Ec.(3.23) en la forma:

$$\frac{\dot{D}(r, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)} = \frac{r_0}{r} \frac{I(r, \theta_0)}{I(r_0, \theta_0)}. \quad (3.25)$$

Por tanto

$$g(r) = \frac{I(r, \theta_0)}{I(r_0, \theta_0)} \frac{\phi_2(r_0, \theta_0) - \phi_1(r_0, \theta_0)}{\phi_2(r, \theta_0) - \phi_1(r, \theta_0)}. \quad (3.26)$$

Como se mencionó anteriormente, la evaluación de esta expresión se ha realizado mediante el cálculo numérico, pero hay que advertir que, al calcular el ángulo ϕ_2 usando las expresiones (3.15) se produce una singularidad en la arcotangente cuando $r \cos \theta = L/2$, por ello, se ha evaluado ϕ_2 como $\pi - \phi_1$. De este modo y restringiendo el cálculo como mencionamos anteriormente al intervalo $\theta \in [0 \rightarrow \pi/2]$, aseguramos la convergencia.

En la Figura 3.5 se muestran los valores de $g(r)$ para las energías medias de los espectros de los tres radioisótopos mencionados anteriormente. En ella se puede apreciar muy buena concordancia en todas las energías, entre los valores obtenidos mediante la simulación Monte Carlo y los obtenidos mediante el modelo. Las diferencias entre ambas curvas, en valor absoluto, son menores que $5 \cdot 10^{-3}$ para todo r excepto una pequeña

región muy cercana a la fuente, en donde el equilibrio electrónico de las partículas cargadas todavía no se ha alcanzado y es una zona que permanece dentro del encapsulado de las actuales fuentes de Braquiterapia.

En la aplicación práctica de $g(r)$ en fuentes de Braquiterapia, el formalismo TG-43 ([65, 66]) recomienda el uso de un polinomio (generalmente de grado 5) ajustado a datos experimentales. Algunos autores como Furhang y Anderson (1999) [72], Moss D. (2000) [73], Meigooni *et al.* (2003) [74], Taylor y Rogers (2008) [75], y Juan Senabre *et al.* (2012) [76], han propuesto otras funciones de ajuste más elaboradas y que ofrecen mejores resultados que el citado polinomio. En concreto, la propuesta por Juan Senabre *et al.* (2012) [76] es una función inspirada en los resultados de este modelo.

Función de Anisotropía 2D

Esta función pretende recoger la influencia que sobre la tasa de dosis tiene el filtrado producido por el encapsulamiento en una fuente de Braquiterapia. El espesor de filtro que tendrán que superar los fotones será diferente para cada ángulo de emisión θ , por lo que esta función representa la relación entre la dosis en un punto (r, θ) respecto a la dosis a igual r pero al ángulo de referencia θ_0 . Como en el caso de $g(r)$, se suprime la influencia de la ley del cuadrado de la distancia dividiendo por las funciones geométricas en esos puntos. De esta forma, el formalismo TG-43 define la Función de Anisotropía 2D como:

$$F(r, \theta) = \frac{\dot{D}(r, \theta)}{\dot{D}(r, \theta_0)} \frac{G_L(r, \theta_0)}{G_L(r, \theta)}. \quad (3.27)$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en caso de la función de dosis radial, tenemos:

$$\frac{G_L(r, \theta_0)}{G_L(r, \theta)} = \frac{\text{sen } \theta_0}{\text{sen } \theta} \frac{\phi_2(r, \theta_0) - \phi_1(r, \theta_0)}{\phi_2(r, \theta) - \phi_1(r, \theta)} \quad (3.28)$$

y

$$\frac{\dot{D}(r, \theta)}{\dot{D}(r, \theta_0)} = \frac{\text{sen } \theta}{\text{sen } \theta_0} \frac{I(r, \theta)}{I(r, \theta_0)}, \quad (3.29)$$

por tanto

$$F(r, \theta) = \frac{I(r, \theta)}{I(r, \theta_0)} \frac{\phi_2(r, \theta_0) - \phi_1(r, \theta_0)}{\phi_2(r, \theta) - \phi_1(r, \theta)}, \quad (3.30)$$

Para el cálculo de esta expresión y al igual que para $g(r)$, usaremos $\pi - \phi_1$ en lugar de ϕ_2 , evaluando nuevamente las integrales $I(r, \theta)$ y $I(r, \theta_0)$ numéricamente.

En la Figura 3.6, se comparan los valores de la función $F(r, \theta)$ obtenidos por la simulación Monte Carlo (cuadrados) y los obtenidos por la predicción del modelo a través de la Ec.(3.30) representada por línea continua. En dicha figura $F(r, \theta)$ se representa como una función de θ a un r fijo, concretamente a $r = r_0$. Las incertidumbres en los resultados Monte Carlo son expresadas a nivel de 1σ , las cuales aparecen magnificadas a mayor energía, debido a la menor escala utilizada en ordenadas a la hora de representarla. Las diferencias relativas son menores del 0.05% (véase la línea de puntos

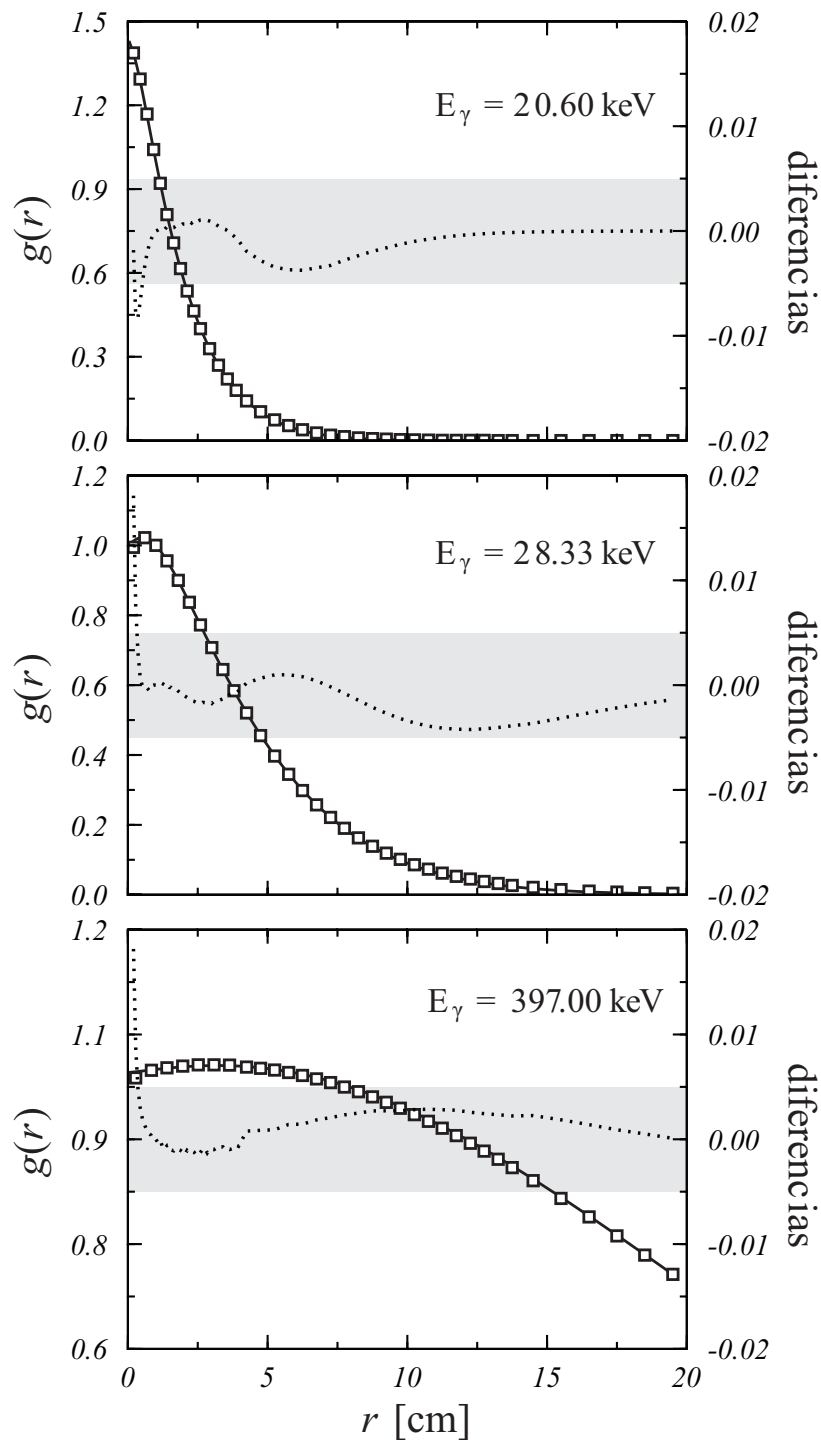


Figura 3.5: Comparación entre los valores Monte Carlo (cuadrados) para la función de dosis radial $g(r)$ y los obtenidos mediante la aplicación del modelo (línea continua) para tres energías representativas. Las incertidumbres estadísticas se han expresado a nivel de 1σ y son menores que los símbolos utilizados. Las líneas de puntos indican las diferencias absolutas entre ambos cálculos y la zona en gris indica la región donde estas diferencias son menores que 0.005.

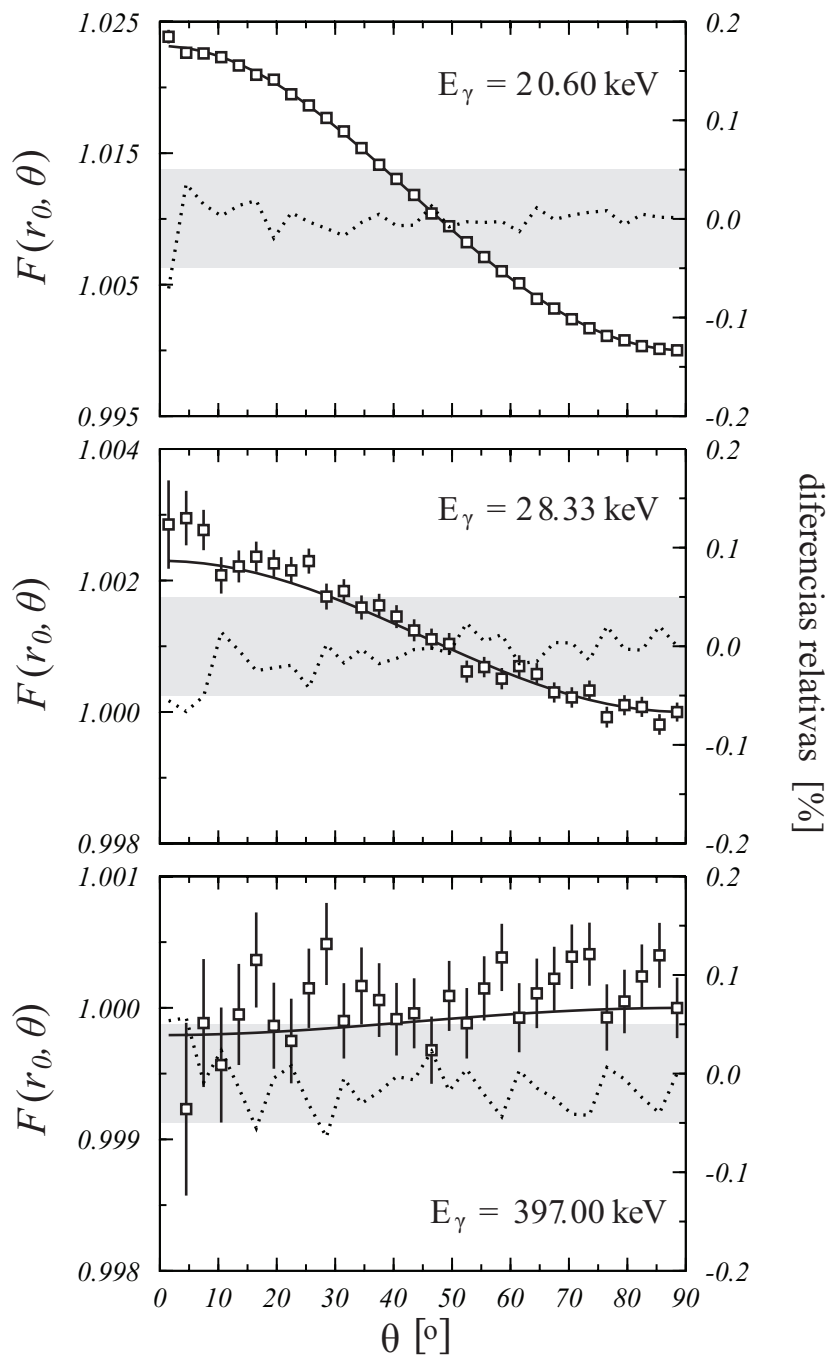


Figura 3.6: Comparación entre los valores Monte Carlo (cuadrados) para la función de anisotropía 2D $F(r)$ y los obtenidos mediante la aplicación del modelo (línea continua) para las mismas energías que en el caso de $g(r)$.

en la zona gris), por lo que podemos afirmar que la concordancia entre ambos cálculos es razonablemente buena.

Función de Anisotropía 1D

La función de anisotropía 2D ($F(r, \theta)$) tiene una dependencia angular con θ , lo que implica conocer la orientación de la fuente dentro del tumor para realizar un cálculo correcto de la dosis depositada. Estimar esta orientación añade una dificultad más y por ello surge la necesidad de buscar otra función alternativa que no tenga dependencia angular. El formalismo TG-43 propone, para este caso, el uso de la función de anisotropía 1D ($\phi_{\text{an}}(r)$), la cual promedia la dosis que se deposita en los puntos de una esfera de radio r centradas en el punto medio de la longitud de la fuente y posteriormente las relaciona con la dosis depositada a la misma r en el eje de referencia ($\theta = \pi/2$). Se define de la forma:

$$\phi_{\text{an}}(r) = \frac{\dot{D}_{\text{prom}}(r)}{\dot{D}(r, \theta_0)}, \quad (3.31)$$

donde

$$\dot{D}_{\text{prom}}(r) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \dot{D}(r, \theta) = \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta \text{sen } \theta \dot{D}(r, \theta). \quad (3.32)$$

El cálculo de la función $\phi_{\text{an}}(r)$ a través del modelo lo realizaremos aplicando la expresión (3.22) en la Ec.(3.31). Esto es:

$$\begin{aligned} \phi_{\text{an}}(r) &= \frac{1}{2} \frac{Lr}{I(r, \theta_0)} \int_0^\pi d\theta \frac{\text{sen } \theta I(r, \theta)}{Lr \text{sen } \theta} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{I(r, \theta_0)} \int_0^\pi d\theta I(r, \theta). \end{aligned} \quad (3.33)$$

La simulación Monte Carlo de $\phi_{\text{an}}(r)$ se ha realizado con PENELOPE [21] y aplicando el procedimiento de Juan-Senabre *et al.* (2012) [76]. Éste consiste en la evaluación directa del promedio esférico, mediante la determinación de la energía absorbida en cortezas esféricas centradas en el punto medio de la fuente, por contra al método usado por Rivard [77], que consiste en la integración sobre el ángulo sólido de las tasas de dosis obtenidas en simulaciones Monte Carlo con MCNP5 [78].

La predicción del modelo para $\phi_{\text{an}}(r)$ se realiza integrando numéricamente la ecuación 3.33 a través de subrutinas FORTRAN programadas al efecto.

En la Figura 3.7 observamos la comparación de ambas estimaciones. Las diferencias relativas en las energías de 20.6 y 28.33 keV son inferiores al 0.5%, excepto a distancias muy cercanas a la fuente, al igual que ocurre con $g(r)$, sin embargo, para la energía de 397keV, el modelo subestima el resultado Monte Carlo en un 2% a una distancia inferior a 3 mm, también se aprecia un pico en ambos cálculos de $\phi_{\text{an}}(r)$ a cortas distancias de la fuente, sobre el que merece la pena hacer consideraciones más detalladas.

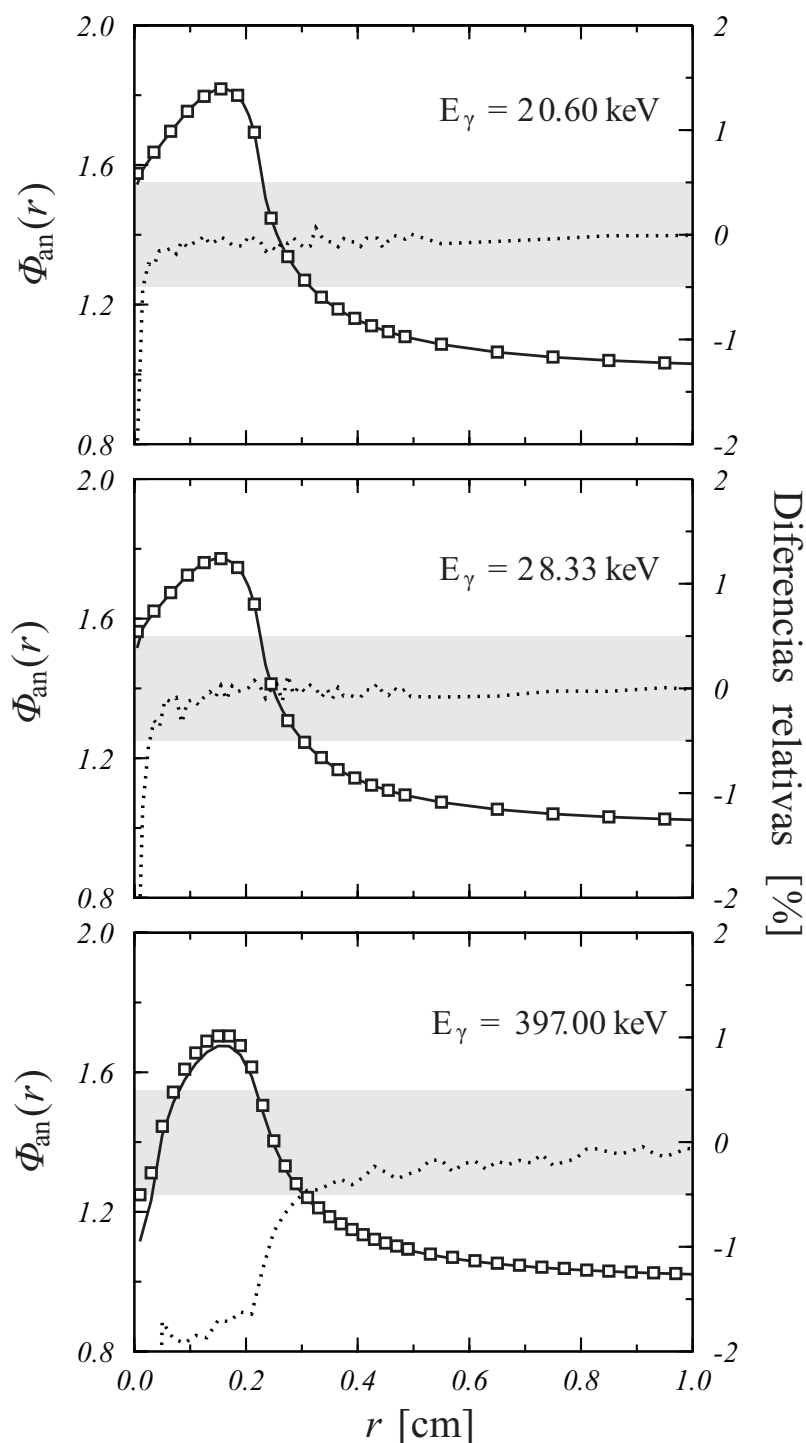


Figura 3.7: Comparación entre los valores Monte Carlo (cuadrados) para la función de anisotropía 1D $\phi_{an}(r)$ y los obtenidos mediante la aplicación del modelo (línea continua). Las incertidumbres estadísticas se han expresado a nivel de 1σ siendo menores que los símbolos utilizados. Las líneas de puntos indican las diferencias relativas entre ambos cálculos y la zona en gris indica la región donde estas diferencias son menores del 0.05%.

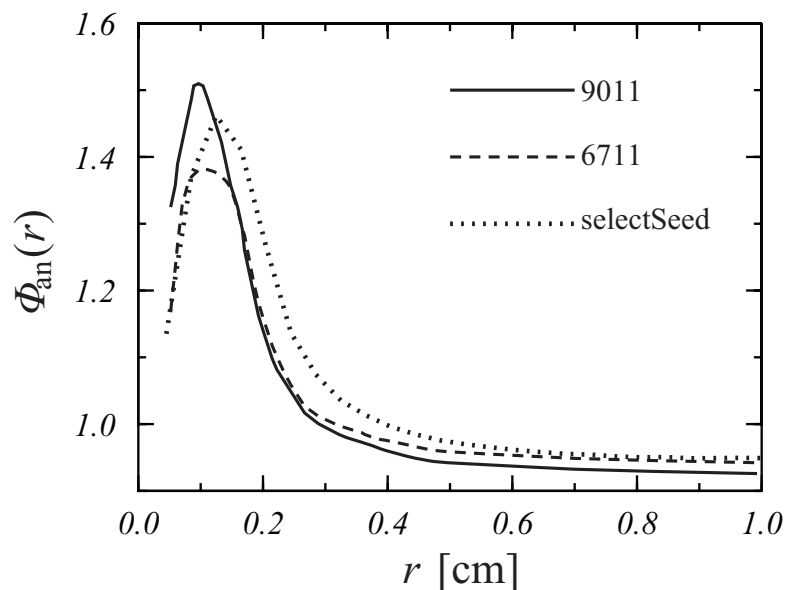


Figura 3.8: Función de anisotropía 1D (ϕ_{an}) correspondiente a las fuentes de ^{125}I , 6711 y 9011, obtenidas por Rivard [77], y selectSeed, calculada por Juan-Senabre *et al.* [76], como una función de la distancia al centro de la fuente r .

Comportamiento a cortas distancias de la Función de Anisotropía 1D

En el comportamiento a cortas distancias de $\phi_{an}(r)$ se observa un aumento con r hasta llegar a un máximo y a partir de éste la función decrece monótonamente. En los trabajos de Rivard (2009) [77] sobre las semillas 6711, 9011 de ^{125}I y de Juan Senabre *et al.* (2012) [76] con la fuente *selectSeed*, también es apreciable dicho comportamiento, tal como podemos observar en la Figura 3.8. Vemos que se trata de un comportamiento que se manifiesta tanto en fuentes lineales ideales (fig.3.7) como en fuentes reales de Braquiterapia, por lo que no es achacable al encapsulado de dichas fuentes. Por otro lado, los datos publicados en la literatura son escasos para las distancias donde se manifiesta este máximo, por lo que habrá que tenerse en cuenta este hecho a la hora de estimar la dosis depositada en el paciente, ya que este pico se produce habitualmente a una distancia exterior a la fuente y por tanto en el tejido circundante.

Rivard [77] da un argumento cualitativo para explicar este comportamiento que se manifiesta a distancias inferiores a la longitud L de la fuente. Explica que, a estas distancias, la simetría en la distribución de tasa de dosis se pierde y entonces al integrar sobre el ángulo sólido, se excluye más y más dosis conforme r se reduce, disminuyendo así la contribución del final de la fuente. Este argumento da cuenta de una disminución de dosis desde un punto (máximo del pico) pero este punto se sitúa a una distancia inferior a $L/2$ y según su argumento esta disminución debería darse desde $L/2$ hasta 0. Si este máximo se sitúa entre $L/2$ y 0, significa que primero tiene que haber una subida hasta dicho punto y luego una bajada, lo cual no puede explicarse en base a dicho razonamiento.

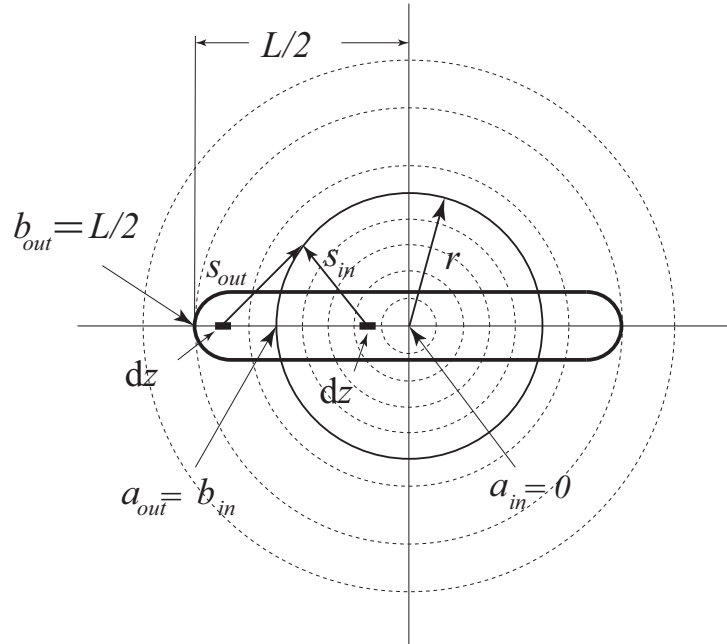


Figura 3.9: Esquema de cálculo de (ϕ_{an}) como suma de las funciones (ϕ_{an}^{in}) y (ϕ_{an}^{out}) . También se representan las cortezas de evaluación Monte Carlo del promedio esférico de tasa de dosis.

La aplicación del modelo permite separar las contribuciones de la parte de la fuente que queda dentro de la esfera de conteo y la que permanece fuera. Basta separar la integración en dos etapas, una entre 0 y un punto intermedio y otra entre este punto y $L/2$. Es decir, separaremos ϕ_{an} en los términos:

$$\phi_{an}(r) = \phi_{an}^{in}(r) + \phi_{an}^{out}(r), \quad (3.34)$$

donde

$$\phi_{an}^{\alpha}(r) = \frac{1}{2\dot{D}(r, \theta_0)} \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta \dot{D}^{\alpha}(r, \theta), \quad \alpha = \text{in, out}, \quad (3.35)$$

siendo \dot{D}^{in} y \dot{D}^{out} las contribuciones a la tasa de dosis de la parte de la fuente dentro y fuera, respectivamente, de la esfera de radio r (ver Figura 3.9). Aplicando la ecuación (3.22) a la (3.35) obtenemos:

$$\phi_{an}^{\alpha}(r) = \frac{A n_{\gamma}}{4 \pi L \rho} \frac{1}{\dot{D}(r, \theta_0)} \int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen} \theta \int_{a_{\alpha}}^{b_{\alpha}} dz \frac{e(s_{\alpha})}{s_{\alpha}^2}, \quad \alpha = \text{in, out}, \quad (3.36)$$

donde $a_{in} = 0$, $b_{in} = a_{out} = r$ y $b_{out} = L/2$ y teniendo en cuenta que nos situamos en $\theta \in [0, \pi/2]$ aprovechando la simetría del problema (ver Figura 3.9).

Calculando numéricamente las expresiones (3.36) para una fuente lineal de $L = 4.5$ mm y $E_{\gamma} = 28.33$ keV obtenemos los valores de ϕ_{an}^{in} , ϕ_{an}^{out} y la suma de ambas ϕ_{an} que se muestran en la Figura 3.10. Para las energías de 20.6 y 397 keV se encuentra un comportamiento similar.

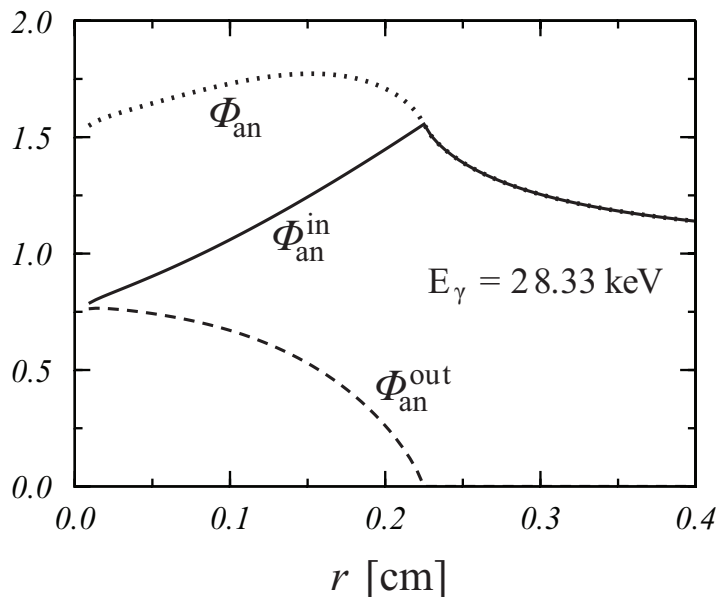


Figura 3.10: Función de anisotropía 1D ϕ_{an} (línea con puntos) y las contribuciones parciales de $\phi_{\text{an}}^{\text{in}}$ (línea continua) y $\phi_{\text{an}}^{\text{out}}$ (línea a trazos), para el caso de una fuente de $L = 4.5$ mm y $E_\gamma = 28.33$ keV.

Se puede apreciar, como era de esperar, que la contribución de la parte exterior de la fuente ($\phi_{\text{an}}^{\text{out}}$) es cero cuando $r = L/2$ y aumenta conforme r disminuye, justo lo contrario de lo que Rivard argumenta. Por otro lado, la parte interior ($\phi_{\text{an}}^{\text{in}}$) va creciendo al aumentar r hasta llegar a su máximo en $r = L/2$. Esta suma de las contribuciones de las dos funciones, una creciente y otra decreciente con r , es la causa de la formación de un pico en un lugar intermedio entre $r = 0$ y $r = L/2$, concretamente en $r \sim 0.15$ cm para este caso en el que $L = 4.5$ mm.

Aunque observando la Figura 3.10 es fácil inferir la dependencia cualitativa de estas funciones con r , vamos a realizar un estudio de esa dependencia un poco más exhaustivo. Usando el cambio de variable $s = \sqrt{r^2 + z^2 - 2zr \cos \theta}$ en las integrales de la ecuación (3.36) tenemos:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{a_\alpha}^{b_\alpha} dz \frac{e(s)}{s^2} &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{a_\alpha}^{b_\alpha} dz \frac{e(\sqrt{r^2 + z^2 - 2zr \cos \theta})}{r^2 + z^2 - 2zr \cos \theta} \\ &= \frac{1}{r} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{a_\alpha/r}^{b_\alpha/r} dt \frac{e(r\sqrt{1 + t^2 - 2t \cos \theta})}{1 + t^2 - 2t \cos \theta}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde se ha sustituido la variable $z = rt$ y haciendo ahora uso del teorema del valor medio

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{a_\alpha}^{b_\alpha} dz \frac{e(s)}{s^2} = \frac{1}{r} \pi \frac{b_\alpha - a_\alpha}{r} \frac{e(r\sqrt{1 + \bar{t}_r^2 - 2\bar{t}_r \cos \bar{\theta}})}{1 + \bar{t}_r^2 - 2\bar{t}_r \cos \bar{\theta}} \sin \bar{\theta}, \quad (3.38)$$

donde \bar{t}_r y $\bar{\theta}$ son los valores intermedios. Por consiguiente, la ecuación (3.36) se puede escribir como:

$$\phi_{\text{an}}^{\alpha}(r) = \frac{A n_{\gamma}}{4 \pi L \rho} \frac{1}{\dot{D}(r, \theta_0)} \frac{\pi(b_{\alpha} - a_{\alpha})}{r^2} \frac{e(r\sqrt{1 + \bar{t}_r^2 - 2\bar{t}_r \cos \bar{\theta}})}{1 + \bar{t}_r^2 - 2\bar{t}_r \cos \bar{\theta}} \sin \bar{\theta}. \quad (3.39)$$

El término $\dot{D}(r, \theta_0)$, como dosis que es, tiene un comportamiento con r expresado por su factor o función geométrica (Ec.(3.17)), que no es más que el promedio de $1/r^2$, por lo que podemos considerar, que globalmente seguirá la dependencia con $1/r^2$. Por otro lado, la función $e(r)$ depende de r mucho más suavemente que una función que depende linealmente de r como es el caso del paréntesis $(b_{\alpha} - a_{\alpha})$ (ver gráficas de fotones primarios y dispersados en el capítulo 2) y en este caso en la ecuación anterior prevalecerá el paréntesis frente a $e(r)$. Por tanto, el comportamiento de $\phi_{\text{an}}^{\alpha}$ puede aproximarse por

$$\phi_{\text{an}}^{\alpha}(r) \propto r^2 \frac{b_{\alpha} - a_{\alpha}}{r^2} = \begin{cases} r^2 \frac{r - 0}{r^2} = r, & \alpha = \text{in}, \\ r^2 \frac{L/2 - r}{r^2} = \frac{L}{2} - r, & \alpha = \text{out}. \end{cases} \quad (3.40)$$

Esto es, la contribución interior de $\phi_{\text{an}}^{\text{in}}$ crece casi linealmente con r , mientras que la contribución exterior de $\phi_{\text{an}}^{\text{out}}$ aumenta hasta un valor constante cuando r disminuye, como veíamos en la Figura 3.10. Deducimos así que la posición del pico en la función ϕ_{an} , depende fundamentalmente de la anchura del intervalo $(b_{\alpha} - a_{\alpha})$, es decir, de la longitud de la fuente. Esta dependencia que hemos calculado para fuentes lineales ideales, podemos extrapolarla a fuentes reales de Braquiterapia, ya que el comportamiento geométrico de ambas con el factor $G_L(r)$ es similar. Esto nos abre la puerta a la utilización del modelo, por ejemplo, para diseñar una fuente de Braquiterapia cuya longitud permita que el pico de ϕ_{an} permanezca dentro del encapsulado.

Por otro lado, la preponderancia de $(b_{\alpha} - a_{\alpha})$ frente a $e(r)$ hace que la dependencia de la posición del pico no varíe prácticamente con la energía, como podemos observar en la Figura 3.7. Como vemos, el uso del modelo proporciona una explicación tanto cualitativa como cuantitativa del comportamiento de ϕ_{an} a cualquier r .

Capítulo 4

Aplicación al cálculo de fracciones específicas de absorción.

En este capítulo vamos a abordar otro ejemplo con fuentes extensas, donde trataremos de describir la energía depositada en una esfera blanco, debida a los fotones emitidos por una fuente esférica, situada a una cierta distancia de ella.

Este es un problema de interés en medicina nuclear, donde ya sea para diagnóstico o terapia, se suministra a un órgano una cierta actividad de un radioisótopo, siendo importante conocer la dosis producida por éste en otros órganos circundantes para la determinación de posibles efectos adversos al procedimiento médico [79].

Las fuentes radiactivas más empleadas en procedimientos de diagnóstico (SPECT, Gammagrafía), son de emisión de fotones de baja energía ($E_S < 1$ MeV).

La utilidad de nuestro modelo reside en que la dosis producida por una fuente puntual en un punto distante se representa por funciones sencillas. Si somos capaces, al menos en una aproximación simplificada de órganos esféricos, de integrarlas para obtener a su vez fórmulas analíticas, podremos analizar la dependencia de esta energía con la distancia y los tamaños de dichos órganos.

4.1. Consideraciones iniciales

En medicina nuclear, se define la *fracción específica de absorción* por un órgano blanco T de la radiación emitida por un órgano fuente S como [79–81]:

$$\Phi(S \rightarrow T) = \frac{1}{M_T} f(S, T, D), \quad (4.1)$$

donde M_T es la masa de T y D la distancia entre los dos órganos (tomada entre los centros de masa) y $f(S, T, D)$ denota la fracción de energía emitida por la fuente S que es absorbida en T .

Vamos a estimar los valores de esta función en el caso de que S y T sean dos esferas de radios R_S y R_T , respectivamente. Asumimos que tanto los materiales de dichas esferas como el medio entre ellas son iguales. En nuestro caso D es la distancia entre los centros de las esferas.

Suponemos que nuestra fuente esférica tiene una actividad A uniformemente distribuida dentro de la esfera y que n_γ es el número de fotones emitidos por desintegración, supuestos monoenergéticos de energía E_S . Entonces la energía total emitida por unidad de tiempo viene dada por:

$$\dot{E} = An_\gamma E_S. \quad (4.2)$$

Si denotamos por \dot{E}' a la energía absorbida en la esfera T por unidad de tiempo (que es la cantidad que queremos determinar con nuestro modelo), la fracción de energía absorbida será:

$$f(S, T, D) \equiv f(R_S, R_T, D) = \frac{\dot{E}'}{\dot{E}}, \quad (4.3)$$

que nos permitiría calcular la magnitud buscada:

$$\Phi(S \rightarrow T) = \Phi(R_S, R_T, D) = \frac{1}{M_T} f(R_S, R_T, D). \quad (4.4)$$

Antes de proceder a la aplicación del modelo, veamos algunas propiedades de esta función que deberían cumplirse en dicha aplicación. Dado que el medio es homogéneo, se debe cumplir el *principio de reciprocidad* [82] según el cual la función Φ debe ser simétrica en sus dos primeros argumentos (simetría $S \leftrightarrow T$):

$$\Phi(R_S, R_T, D) = \Phi(R_T, R_S, D). \quad (4.5)$$

También sabemos que debe cumplirse que, en el límite $R_S, R_T \rightarrow 0$, $\Phi(R_S, R_T, D)$ debe tender al valor de la dosis producida por una fuente puntual en un punto a una distancia D , por unidad de energía emitida:

$$\Phi(0, 0, D) = \lim_{R_S, R_T \rightarrow 0} \Phi(R_S, R_T, D) = \frac{1}{4\pi\rho E_S} \frac{e(D)}{D^2}, \quad (4.6)$$

donde $e(D)$ es la función $e(r)$ con $r = D$ definida en el Capítulo 1.

Como paso previo al cálculo de $\Phi(R_S, R_T, D)$, vamos a determinar el valor de esta función en el supuesto de que la fuente sea puntual ($\Phi(0, R_T, D)$).

4.2. Fracción específica de absorción cuando la fuente es puntual

La situación de partida se ilustra en la Figura 4.1. Suponemos una fuente puntual de fotones monoenergéticos y una esfera de radio R con volumen V a una distancia L . La energía depositada en la esfera viene dada por:

$$\dot{E}' = \rho \int_V \dot{D}(r) dV, \quad (4.7)$$

siendo r la distancia de la fuente al elemento de volumen dV . Como la tasa de dosis producida por una fuente puntual viene dada por la Ec.(1.1), podemos escribir:

$$f(0, R, L) = \frac{\dot{E}'}{\dot{E}} = \frac{1}{4\pi E_S} \int_V \frac{e(r)}{r^2} dV. \quad (4.8)$$

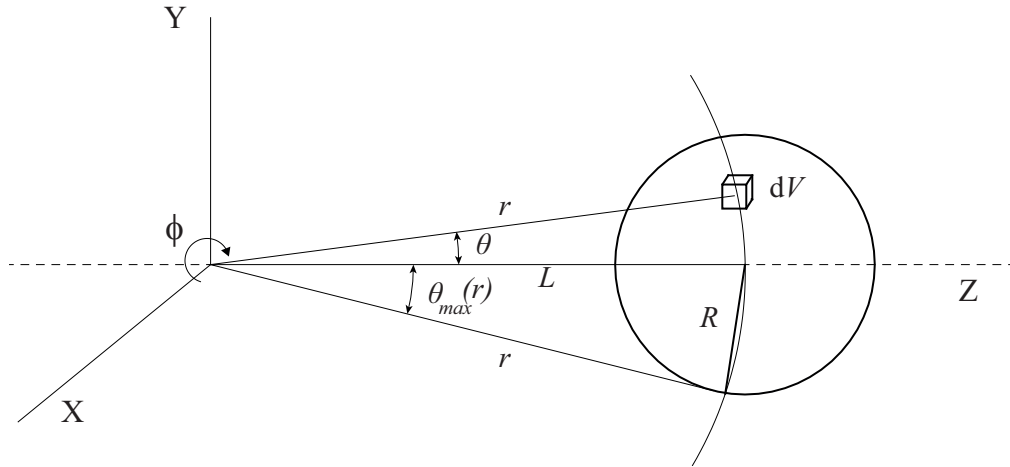


Figura 4.1: Representación de la geometría del problema. Se integrará la energía depositada en cada elemento de volumen dV por la fuente puntual a lo largo del volumen de la esfera de radio R .

La integral la realizaremos en coordenadas esféricas (ver Figura 4.1), tomando como origen la fuente:

$$\begin{aligned} f(0, R, L) &= \frac{1}{4\pi E_S} \int_{L-R}^{L+R} e(r) dr \int_0^{\theta_{\max}(r)} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} e(r) dr [1 - \cos\theta_{\max}(r)] , \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde θ_{\max} es el ángulo que se describe en la figura, que puede obtenerse aplicando el teorema del coseno:

$$\cos\theta_{\max}(r) = \frac{r^2 + L^2 - R^2}{2rL} , \quad (4.10)$$

con lo cual:

$$\begin{aligned} f(0, R, L) &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{r^2 + L^2 - R^2}{2rL} \right] e(r) dr \\ &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{1}{2L} r - \frac{L^2 - R^2}{2L} \frac{1}{r} \right] e(r) dr . \end{aligned} \quad (4.11)$$

A continuación aplicamos las fórmulas (1.27) y (1.74) de nuestro modelo para $e(r)$, suponiendo que la distancia L es suficiente como para que $R_0 < L - R$, por lo que de la Ec.1.27 no utilizaremos la expresión para $r \leq R_0$, es decir:

$$e(r) = e_0(r) + \tilde{e}_{sc}(r) , \quad (4.12)$$

donde

$$e_0(r) = E_S B_0 e^{-\mu_0 r}, \quad (4.13)$$

$$\tilde{e}_{\text{sc}}(r) = e_1(r) + e_2(r), \quad (4.14)$$

y a su vez

$$e_1(r) = E_S B_1 r e^{-\mu_1 r}, \quad (4.15)$$

$$e_2(r) = E_S B_2 r^2 e^{-\mu_2 r}, \quad (4.16)$$

en las que, por conveniencia, hemos definido los parámetros:

$$B_0 = \frac{A_0}{E_S} (e^{\mu_0 R_0} - 1), \quad (4.17)$$

$$B_1 = \frac{C_1}{E_S} \mu_1^2, \quad (4.18)$$

$$B_2 = \frac{C_2}{E_S} \mu_2^3, \quad (4.19)$$

donde hemos renombrado, por simplicidad, $\mu_1 = \mu'_1$ y $\mu_2 = \mu'_2$. Vamos a separar las componentes de $f(0, R, L)$ de la forma:

$$f(0, R, L) = f_0(0, R, L) + f_1(0, R, L) + f_2(0, R, L), \quad (4.20)$$

donde de la EC.(4.11)

$$\begin{aligned} f_0(0, R, L) &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{r^2 + L^2 - R^2}{2rL} \right] e_0(r) dr \\ &= \frac{B_0}{2} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{1}{2L} r - \frac{L^2 - R^2}{2L} \frac{1}{r} \right] e^{-\mu_0 r} dr, \\ f_1(0, R, L) &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{r^2 + L^2 - R^2}{2rL} \right] e_1(r) dr \\ &= \frac{B_1}{2} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{1}{2L} r - \frac{L^2 - R^2}{2L} \frac{1}{r} \right] r e^{-\mu_1 r} dr, \\ f_2(0, R, L) &= \frac{1}{2E_S} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{r^2 + L^2 - R^2}{2rL} \right] e_2(r) dr \\ &= \frac{B_2}{2} \int_{L-R}^{L+R} \left[1 - \frac{1}{2L} r - \frac{L^2 - R^2}{2L} \frac{1}{r} \right] r^2 e^{-\mu_2 r} dr, \end{aligned} \quad (4.21)$$

siendo todas las integrales que aparecen en las expresiones anteriores del tipo:

$$I_n(L, R; \mu) = \int_{L-R}^{L+R} r^n e^{-\mu r} dr, \quad (4.22)$$

donde $n \in \mathbb{Z}$, $n \geq -1$.

Un estudio detallado de estas integrales se muestran en el Apéndice C y cuyos resultados pueden escribirse de la forma:

$$I_n(L, R; \mu) = e^{-\mu L} \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!} \frac{1}{\mu^{n-j+1}} [(L-R)^j e^{\mu R} - (L+R)^j e^{-\mu R}], \quad (4.23)$$

para $n \geq 0$, mientras que para el caso $n = -1$ es:

$$I_{-1}(L, R; \mu) = E_1(\mu L - \mu R) - E_1(\mu L + \mu R), \quad (4.24)$$

donde $E_1(x)$ denota la integral exponencial [83] de orden 1, definida por:

$$E_1(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t} dt = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt. \quad (4.25)$$

Por tanto, escribiremos las expresiones (4.21) de la forma:

$$\begin{aligned} f_0(0, R, L) &= \frac{B_0}{2} \left[I_0(L, R; \mu_0) - \frac{1}{2L} I_1(L, R; \mu_0) - \frac{L^2 - R^2}{2L} I_{-1}(L, R; \mu_0) \right], \\ f_1(0, R, L) &= \frac{B_1}{2} \left[I_1(L, R; \mu_1) - \frac{1}{2L} I_2(L, R; \mu_1) - \frac{L^2 - R^2}{2L} I_0(L, R; \mu_1) \right], \\ f_2(0, R, L) &= \frac{B_2}{2} \left[I_2(L, R; \mu_2) - \frac{1}{2L} I_3(L, R; \mu_2) - \frac{L^2 - R^2}{2L} I_1(L, R; \mu_2) \right], \end{aligned} \quad (4.26)$$

y sustituyendo los valores de $I_n(L, R; \mu)$ dados por las ecuaciones (4.23) y (4.24) obtenemos:

$$\begin{aligned} f_0(0, R, L) &= \frac{B_0}{2} \left\{ \frac{e^{-\mu_0 L}}{\mu_0} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\mu_0 L} \right) (e^{\mu_0 R} - e^{-\mu_0 R}) + \frac{R}{2L} (e^{\mu_0 R} + e^{-\mu_0 R}) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{L^2 - R^2}{2L} [E_1(\mu_0 L - \mu_0 R) - E_1(\mu_0 L + \mu_0 R)] \right\}, \\ f_1(0, R, L) &= \frac{B_1}{2} \frac{e^{-\mu_1 L}}{\mu_1^3 L} [\mu_1 R (e^{\mu_1 R} + e^{-\mu_1 R}) - (e^{\mu_1 R} - e^{-\mu_1 R})], \\ f_2(0, R, L) &= \frac{B_2}{2} \frac{e^{-\mu_2 L}}{\mu_2^4 L} [\mu_2 R (3 + \mu_2 L) (e^{\mu_2 R} + e^{-\mu_2 R}) \\ &\quad - (3 + \mu_2 L + \mu_2^2 R^2) (e^{\mu_2 R} - e^{-\mu_2 R})]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación (4.4), llegamos al resultado:

$$\Phi(0, R, L) = \Phi_0(0, R, L) + \Phi_1(0, R, L) + \Phi_2(0, R, L), \quad (4.28)$$

donde

$$\begin{aligned}\Phi_0(0, R, L) &= \frac{3}{4\pi\rho R^3} f_0(0, R, L) \\ &= \frac{3B_0}{8\pi\rho R^3} \left\{ \frac{e^{-\mu_0 L}}{\mu_0} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\mu_0 L} \right) (e^{\mu_0 R} - e^{-\mu_0 R}) + \frac{R}{2L} (e^{\mu_0 R} + e^{-\mu_0 R}) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{L^2 - R^2}{2L} [E_1(\mu_0 L - \mu_0 R) - E_1(\mu_0 L + \mu_0 R)] \right\}, \quad (4.29)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_1(0, R, L) &= \frac{3}{4\pi\rho R^3} f_1(0, R, L) \\ &= \frac{3B_1}{8\pi\rho R^3} \frac{e^{-\mu_1 L}}{\mu_1^3 L} [\mu_1 R (e^{\mu_1 R} + e^{-\mu_1 R}) - (e^{\mu_1 R} - e^{-\mu_1 R})], \quad (4.30)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_2(0, R, L) &= \frac{3}{4\pi\rho R^3} f_2(0, R, L) \\ &= \frac{3B_2}{8\pi\rho R^3} \frac{e^{-\mu_2 L}}{\mu_2^4 L} [\mu_2 R (3 + \mu_2 L) (e^{\mu_2 R} + e^{-\mu_2 R}) \\ &\quad - (3 + \mu_2 L + \mu_2^2 R^2) (e^{\mu_2 R} - e^{-\mu_2 R})]. \quad (4.31)\end{aligned}$$

Expresiones para R pequeño

A continuación vamos a analizar la dependencia principal con los parámetros L y R y comprobar que se cumple el límite expresado en la Ec.(4.6). A simple vista no puede observarse cómo se comportan las funciones $\Phi_i(0, R, L)$ para valores de R pequeño, apareciendo un factor en el denominador de orden R^3 que debe cancelarse con el resto de la expresión. Procedemos entonces a efectuar un desarrollo en serie de potencias en $\mu_k R$ (ver detalles en apéndice C). Desarrollando tanto las exponenciales como la integral exponencial, obtenemos:

$$\Phi_0(0, R, L) \simeq \frac{1}{4\pi\rho} B_0 \frac{e^{-\mu_0 L}}{L^2} \left[1 + \left(\frac{1}{10} \mu_0^2 + \frac{1}{5} \frac{\mu_0}{L} + \frac{1}{5} \frac{1}{L^2} \right) R^2 + O(\mu_0^4 R^4) \right], \quad (4.32)$$

$$\Phi_1(0, R, L) \simeq \frac{1}{4\pi\rho} B_1 \frac{e^{-\mu_1 L}}{L} \left(1 + \frac{1}{10} \mu_1^2 R^2 + O(\mu_1^4 R^4) \right), \quad (4.33)$$

$$\Phi_2(0, R, L) \simeq \frac{1}{4\pi\rho} B_2 e^{-\mu_2 L} \left[1 + \left(\frac{1}{10} \mu_2^2 - \frac{1}{5} \frac{\mu_2}{L} \right) R^2 + O(\mu_2^4 R^4) \right]. \quad (4.34)$$

Como vemos, se trata de expresiones sencillas que permiten determinar la fracción de energía para R pequeño, y que nos permite verificar que el límite $R \rightarrow 0$ corresponde, como era de esperar, a la que deposita una fuente puntuales a una distancia $r = L$, es

decir:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \Phi(0, R, L) = \frac{1}{4\pi\rho} \left(B_0 \frac{e^{-\mu_0 L}}{L^2} + B_1 \frac{e^{-\mu_1 L}}{L} + B_2 e^{-\mu_2 L} \right) = \frac{1}{4\pi\rho E_S} \frac{e(L)}{L^2}. \quad (4.35)$$

4.3. Fracción específica de absorción entre dos esferas

Ahora procedemos al cálculo de $\Phi(R_S, R_T, D)$ como se ilustra en la Figura 4.2, mediante integración en la esfera fuente de las contribuciones debidas a fuentes puntuales dentro de la misma.

Consideramos el elemento dV_S como una fuente puntual de actividad $dA = AdV_S/V_S$. La tasa de energía emitida por ésta viene dada por:

$$d\dot{E} = dAn_\gamma E_S = An_\gamma E_S \frac{dV_S}{V_S}. \quad (4.36)$$

Por otra parte, la tasa de energía absorbida en la esfera de radio R_T a una distancia L de esta fuente elemental es igual a:

$$d\dot{E}' = f(0, R_T, L) d\dot{E}, \quad (4.37)$$

y por tanto la energía total absorbida se obtiene por integración

$$\dot{E}' = \frac{An_\gamma E_S}{V_S} \int_{V_S} f(0, R_T, L) dV_S = \frac{\dot{E}}{V_S} \int_{V_S} f(0, R_T, L) dV_S, \quad (4.38)$$

donde \dot{E} es la tasa de energía total emitida por la fuente esférica, por lo que podemos determinar la fracción de energía absorbida:

$$f(R_S, R_T, D) = \frac{1}{V_S} \int_{V_S} f(0, R_T, L) dV_S, \quad (4.39)$$

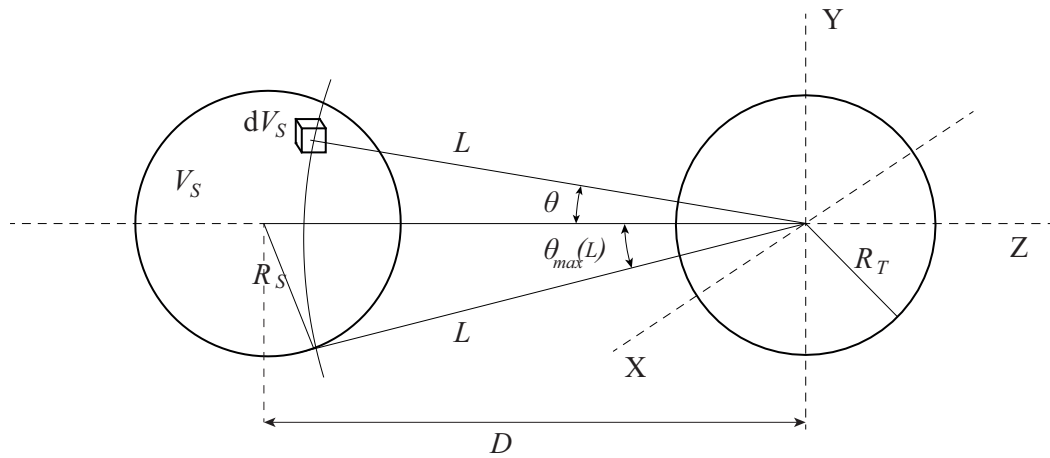


Figura 4.2: Representación del cálculo de la fracción de la energía emitida por la esfera fuente de radio R_S en una esfera de radio R_T a distancia D .

y de aquí se obtiene la fracción específica:

$$\Phi(R_S, R_T, D) = \frac{3}{4\pi\rho R_T^3} f(R_S, R_T, D). \quad (4.40)$$

Vamos a calcular la integral de la ecuación (4.39) empleando nuevamente coordenadas esféricas y el teorema del coseno:

$$\begin{aligned} f(R_S, R_T, D) &= \frac{3}{2R_S^3} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L^2 f(0, R_T, L) (1 - \cos\theta_{\max}) dL \\ &= \frac{3}{2R_S^3} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L^2 f(0, R_T, L) \left(1 - \frac{L}{2D} - \frac{D^2 - R_S^2}{2DL}\right) dL. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Descomponemos de nuevo los valores de esta función en tres contribuciones:

$$f(R_S, R_T, D) = f_0(R_S, R_T, D) + f_1(R_S, R_T, D) + f_2(R_S, R_T, D), \quad (4.42)$$

donde

$$f_k(R_S, R_T, D) = \frac{3}{2R_S^3} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L^2 f_k(0, R_T, L) \left(1 - \frac{L}{2D} - \frac{D^2 - R_S^2}{2DL}\right) dL, \quad (4.43)$$

para $k = 0, 1, 2$. El caso $k = 0$ es el más complejo, por la aparición de la integral exponencial:

$$\begin{aligned} f_0(R_S, R_T, D) &= \frac{3B_0}{4R_S^3} \left\{ \frac{e^{\mu_0 R_T} - e^{-\mu_0 R_T}}{2\mu_0} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L^2 \left(1 - \frac{L}{2D} - \frac{D^2 - R_S^2}{2DL}\right) e^{-\mu_0 L} dL \right. \\ &+ \frac{e^{\mu_0 R_T} + e^{-\mu_0 R_T}}{2\mu_0} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L \left(1 - \frac{L}{2D} - \frac{D^2 - R_S^2}{2DL}\right) e^{-\mu_0 L} dL \\ &- \frac{1}{2} \int_{D-R_S}^{D+R_S} L (L^2 - R^2) \left(1 - \frac{L}{2D} - \frac{D^2 - R_S^2}{2DL}\right) [E_1(\mu_0 L - \mu_0 R) \\ &- E_1(\mu_0 L + \mu_0 R)] dL \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Podemos resolver en términos de las integrales $I_n(x, y; \mu)$ definidas en la Ec.(4.23) y las integrales $J_n(x, y; \mu)$ definidas por:

$$J_n(x, y, z; \mu) = \int_{x-y}^{x+y} r^n [E_1(\mu r - \mu z) - E_1(\mu r + \mu z)] dr, \quad (4.45)$$

que se estudian también en el Apéndice C, resultando:

$$f_0(R_S, R_T, D) = \frac{3B_0}{4R_S^3} \left\{ \left[\frac{e^{\mu_0 R_T} - e^{-\mu_0 R_T}}{2\mu_0} \frac{D^2 - R_S^2}{2D\mu_0} I_0(D, R_S; \mu_0) - \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{D^2 - R_S^2}{2D} \right) \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& \times I_1(D, R_S; \mu_0) + \left(1 + \frac{1}{2D\mu_0}\right) I_2(D, R_S; \mu_0) - \frac{1}{2D} I_3(D, R_S; \mu_0) \Big] \\
& + \frac{R_T (e^{\mu_0 R_T} + e^{-\mu_0 R_T})}{2\mu_0} \left[-\frac{D^2 - R_S^2}{2D} I_0(D, R_S; \mu_0) + I_1(D, R_S; \mu_0) - \frac{1}{2D} I_3(D, R_S; \mu_0) \right] \\
& - \frac{1}{2} J_3(D, R_S, R_T; \mu_0) + \frac{1}{2D} J_4(D, R_S, R_T; \mu_0) + \frac{1}{4D} (D^2 - R_T^2 - R_S^2) J_2(D, R_S, R_T; \mu_0) \\
& + \frac{R_T^2}{2} J_1(D, R_S, R_T; \mu_0) - \frac{R_T^2 (D^2 - R_S^2)}{4D} J_0(D, R_S, R_T; \mu_0) \Big\} ,
\end{aligned} \tag{4.46}$$

donde podemos aplicar las expresiones explícitas:

$$\begin{aligned}
J_n(D, R_S, R_T; \mu_0) &= \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)! \mu_0^{k+1}} \left\{ (D - R_S)^{n-k} [E_{k+2}(\mu_0 D - \mu_0 R_S - \mu_0 R_T) \right. \\
& - E_{k+2}(\mu_0 D - \mu_0 R_S + \mu_0 R_T)] \\
& - (D + R_S)^{n-k} [E_{k+2}(\mu_0 D + \mu_0 R_S - \mu_0 R_T) \\
& \left. - E_{k+2}(\mu_0 D + \mu_0 R_S + \mu_0 R_T)] \right\} ,
\end{aligned} \tag{4.47}$$

en términos de las integrales exponenciales, estudiadas en [83]

$$E_n(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t^n} dt = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t^n} dt. \tag{4.48}$$

A continuación resolvemos la contribución f_1 :

$$\begin{aligned}
f_1(R_S, R_T, D) &= \frac{3B_1}{4R_S^3} \frac{1}{\mu_1^3} [\mu_1 R_T (e^{\mu_1 R_T} + e^{-\mu_1 R_T}) - (e^{\mu_1 R_T} - e^{-\mu_1 R_T})] \\
& \times \left[I_1(D, R_S, \mu_1) - \frac{1}{2D} I_2(D, R_S, \mu_1) - \frac{D^2 - R_S^2}{2D} I_0(D, R_S, \mu_1) \right] ,
\end{aligned} \tag{4.49}$$

que, en este caso al sustituir los valores de las integrales I_n , dadas por (4.22), se reduce a una sencilla expresión:

$$\begin{aligned}
f_1(R_S, R_T, D) &= \frac{3B_1}{4D\mu_1^6 R_S^3} e^{-\mu_1 D} [\mu_1 R_T (e^{\mu_1 R_T} + e^{-\mu_1 R_T}) - (e^{\mu_1 R_T} - e^{-\mu_1 R_T})] \\
& \times [\mu_1 R_S (e^{\mu_1 R_S} + e^{-\mu_1 R_S}) - (e^{\mu_1 R_S} - e^{-\mu_1 R_S})] .
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Por último, llegamos al resultado para la última contribución:

$$\begin{aligned}
f_2(R_S, R_T, D) = & \frac{3B_2}{4\mu_2^4 R_S^3} \left\{ \mu_2 R_T (e^{\mu_2 R_T} + e^{-\mu_2 R_T}) \left[\left(3 - \mu_2 \frac{D^2 - R_S^2}{2D} \right) I_1(D, R_S, \mu_2) \right. \right. \\
& + \left. \left(\mu_2 - \frac{3}{2D} \right) I_2(D, R_S, \mu_2) - 3 \frac{D^2 - R_S^2}{2D} I_0(D, R_S, \mu_2) - 3 \frac{\mu_2}{2D} I_3(D, R_S, \mu_2) \right] \\
& - (e^{\mu_2 R_T} - e^{-\mu_2 R_T}) \left[\left(3 - \mu_2^2 R_T^2 - \mu_2 \frac{D^2 - R_S^2}{2D} \right) I_1(D, R_S, \mu_2) \right. \\
& + \left. \left(\mu_2 - \frac{3 + \mu_2^2 R_T^2}{2D} \right) I_2(D, R_S, \mu_2) - (3 + \mu_2^2 R_T^2) \frac{D^2 - R_S^2}{2D} I_0(D, R_S, \mu_2) \right. \\
& \left. \left. - \frac{\mu_2}{2D} I_3(D, R_S, \mu_2) \right] \right\}. \tag{4.51}
\end{aligned}$$

De estas expresiones puede obtenerse la magnitud buscada:

$$\Phi(R_S, R_T, D) = \Phi_0(R_S, R_T, D) + \Phi_1(R_S, R_T, D) + \Phi_2(R_S, R_T, D), \tag{4.52}$$

donde

$$\Phi_k(R_S, R_T, D) = \frac{3}{4\pi\rho R_T^3} f_k(R_S, R_T, D), \tag{4.53}$$

para $k = 0, 1, 2$. Aunque solo resulta evidente para el término $k = 1$, puede comprobarse que cada uno de los términos por separado cumple el principio de reciprocidad:

$$\Phi_k(R_S, R_T, D) = \Phi_k(R_T, R_S, D), \tag{4.54}$$

para $k = 0, 1, 2$.

Expresiones para R_T, R_S pequeño

Nuevamente realizamos un desarrollo para radios pequeños con el objetivo de encontrar fórmulas alternativas más sencillas en el caso de que las esferas sean pequeñas en comparación con la distancia entre las mismas.

Empleando las expresiones asintóticas descritas en el Apéndice C, junto con los desarrollos de las funciones e integrales exponenciales, encontramos:

$$\begin{aligned}
\Phi(R_S, R_T, D) & \approx \Phi^{(1)}(R_S, R_T, D) \\
& \equiv \Phi_0^{(1)}(R_S, R_T, D) + \Phi_1^{(1)}(R_S, R_T, D) + \Phi_2^{(1)}(R_S, R_T, D), \tag{4.55}
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
\Phi_0^{(1)}(R_S, R_T, D) = & \frac{B_0}{4\pi\rho} \frac{e^{-\mu_0 D}}{D^2} \left[1 + \left(\frac{\mu_0^2}{10} + \frac{\mu_0}{5D} + \frac{1}{5D^2} \right) R_S^2 \right. \\
& \left. + \left(\frac{\mu_0^2}{10} + \frac{\mu_0}{5D} + \frac{1}{5D^2} \right) R_T^2 \right], \tag{4.56}
\end{aligned}$$

$$\Phi_1^{(1)}(R_S, R_T, D) = \frac{B_1}{4\pi\rho} \frac{e^{-\mu_1 D}}{D} \left(1 + \frac{1}{10} \mu_1^2 R_S^2 + \frac{1}{10} \mu_1^2 R_T^2 \right), \quad (4.57)$$

$$\Phi_2^{(1)}(R_S, R_T, D) = \frac{B_2}{4\pi\rho} e^{-\mu_2 D} \left[1 + \left(\frac{\mu_2^2}{10} - \frac{\mu_2}{5D} \right) R_S^2 + \left(\frac{\mu_2^2}{10} - \frac{\mu_2}{5D} \right) R_T^2 \right], \quad (4.58)$$

A partir de estas expresiones, calculando el límite $R_S, R_T \rightarrow 0$ se obtiene la aproximación de fuente puntual:

$$\begin{aligned} \Phi(R_S, R_T, D) &= \lim_{R_S, R_T \rightarrow 0} \Phi(R_S, R_T, D) \\ &= \frac{1}{4\pi\rho} \left(B_0 \frac{e^{-\mu_0 D}}{D^2} + B_1 \frac{e^{-\mu_1 D}}{D} + B_2 e^{-\mu_2 D} \right), \end{aligned} \quad (4.59)$$

coincidiendo nuevamente con la expresión dada por la ecuación 4.6.

4.4. Contraste numérico.

A continuación ilustramos un test para verificar la calidad de esta aproximación mediante comparación con resultados de la simulación Monte Carlo con el conjunto de rutinas PENELOPE.

Hemos simulado para ello, en un medio infinito de agua, una fuente de fotones monoenergéticos (energía E_S) uniformemente distribuida dentro de una esfera de radio R_S variable y acumulado la energía que se deposita en una esfera de radio R_T (asimismo variable) situada a diferentes distancias D entre los centros de las mismas. Con ello podemos evaluar los valores MC de la función $\Phi(R_S, R_T, D)$, que denotaremos por $\Phi_{(MC)}(R_S, R_T, D)$.

En la Tabla 4.1 se muestran, para una energía $E_S = 662$ keV, $D = 10$ cm y medio material agua, los valores obtenidos con la simulación, junto con su incertidumbre estadística relativa d_{MC} (en %), comparados con los obtenidos mediante la aplicación del modelo en los siguientes grados de aproximación: (i) $\Phi^{(0)}(R_S, R_T, D)$ (aproximación de orden cero de esferas puntuales), (ii) $\Phi^{(1)}(R_S, R_T, D)$ (aproximación de orden uno de R_S, R_T pequeños) y (iii) $\Phi(R_S, R_T, D)$ (valores exactos del modelo). Para cada uno de estos valores se presenta asimismo las diferencias relativas con el cálculo Monte Carlo (en %):

$$d = 100 \frac{\Phi(R_S, R_T, D) - \Phi_{(MC)}(R_S, R_T, D)}{\Phi_{(MC)}(R_S, R_T, D)} \quad (4.60)$$

empleando los superíndices mencionados en los casos en los que Φ sea calculada con las aproximaciones mencionadas.

Podemos observar cómo los valores exactos del modelo, Φ difieren menos del 0.3% en todos los casos estudiados, mejorando la aproximación de fuente puntual, especialmente cuando los radios de las esferas aumentan, que pueden ser superiores al 4%. Es interesante la precisión de las fórmulas sencillas de la aproximación de orden uno, inferiores al 0.5%, incluso en casos donde los radios de las esferas no son despreciables frente a la distancia (3 cm frente a 10).

| R_S | R_T | $\Phi^{(MC)}$ | d_{MC} | $\Phi^{(0)}$ | $d^{(0)}$ | $\Phi^{(1)}$ | $d^{(1)}$ | Φ | d |
|-------|-------|----------------------------|----------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|----------------------------|-------|
| (cm) | (cm) | (10^{-5}g^{-1}) | (%) | (10^{-5}g^{-1}) | (%) | (10^{-5}g^{-1}) | (%) | (10^{-5}g^{-1}) | (%) |
| 1 | 1 | 2.2721 | 0.467 | 2.2611 | 0.486 | 2.2734 | 0.056 | 2.2717 | 0.020 |
| 1 | 2 | 2.2832 | 0.167 | 2.2611 | 0.969 | 2.2919 | 0.380 | 2.2879 | 0.206 |
| 1 | 3 | 2.3132 | 0.091 | 2.2611 | 2.255 | 2.3227 | 0.408 | 2.3160 | 0.119 |
| 2 | 2 | 2.3025 | 0.059 | 2.2611 | 1.798 | 2.3104 | 0.343 | 2.3048 | 0.100 |
| 2 | 3 | 2.3322 | 0.032 | 2.2611 | 3.049 | 2.3412 | 0.385 | 2.3340 | 0.078 |
| 3 | 3 | 2.3635 | 0.017 | 2.2611 | 4.333 | 2.3720 | 0.359 | 2.3654 | 0.079 |

Tabla 4.1: Contraste numérico de la aplicación del modelo a la fracción específica de energía absorbida entre dos esferas con valores Monte Carlo ($\Phi^{(MC)}$). Se comparan las predicciones de la aproximación de orden cero, $\Phi^{(0)}$, dada por la Ec.(4.59), la de orden uno, $\Phi^{(1)}$ dada por la Ec.(4.55), y los valores exactos del modelo, Φ Ec.(4.52). Se incluyen los valores de las diferencias relativas (d) de estas aproximaciones respecto a los resultados MC, expresados en porcentajes.

Este grado de aproximación, descrito por la Ec.(4.55), permite analizar la dependencia con los tamaños de órganos y la distancia entre los mismos de la fracción específica de energía absorbida, permitiendo una aplicación directa para una estimación de la dosis producida en un órgano alejado por la acumulación de un radioisótopo en otro, empleando esferas de la misma masa para representar ambos órganos.

Capítulo 5

Aplicación a la terapia por captura de neutrones

En los cálculos de dosis recibidas por pacientes sometidos a tratamientos de radioterapia, es importante aunar precisión con rapidez. Mientras que la simulación Monte Carlo proporciona gran precisión en dichos cálculos, sin embargo, para obtener una varianza aceptable, debe incrementarse el número de partículas a simular y en consecuencia, el tiempo de computación. Si además los procesos a simular son de baja probabilidad, la cantidad de partículas a considerar en la simulación aumenta en mayor medida.

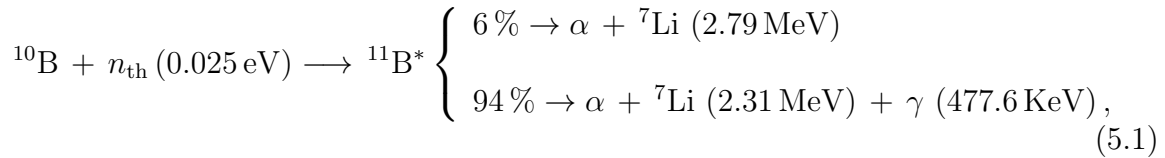
En esta situación, disponer de un método que permita realizar estos cálculos con velocidad y precisión aceptable, sin duda supone una gran ventaja. Es por ello que, en este capítulo vamos a aplicar el modelo a una situación en la que los fotones surgen de procesos secundarios de baja probabilidad, como es el caso de la BNCT (*Boron Neutron Capture Therapy*).

Bajo la idea de esta terapia subyace uno de los objetivos fundamentales de la radioterapia, que es el aumentar al máximo la dosis recibida por las células malignas y disminuir lo más posible la depositada en el tejido sano.

La idea inicial es sencilla en su concepto, si bien su realización práctica implica numerosos problemas, consistiendo básicamente en la introducción dentro de las células malignas de una partícula ionizante de mucha energía y poco recorrido, para que deposite toda su energía en el interior de dicha célula, dejando intactas las sanas. Una partícula α que se origine dentro de la célula posee un gran LET (*linear energy transfer*), es decir, deposita mucha energía y recorre muy poca distancia ($< 10\mu\text{m} \sim$ diámetro celular), lo que la hace un candidato idóneo para dicho propósito.

Algunos isótopos tienen la propiedad de emitir partículas α tras la reacción nuclear de captura de neutrones. El más estudiado y utilizado hasta la fecha es el ^{10}B , dando nombre a la terapia (BNCT) (ver las ref. [84] y [85] para una visión global de la terapia). El isótopo ^{10}B tiene una alta sección eficaz de captura neutrónica (3843 barns [86]) para neutrones de energía en el rango térmico ($E < 0.5$ eV). La reacción nuclear que tiene

lugar es:



donde el alcance de la partícula α y el núcleo de retroceso ${}^7\text{Li}$ es, aproximadamente, de $9 \mu\text{m}$ y $5 \mu\text{m}$ respectivamente.

El haz de neutrones necesario para inducir estas reacciones de captura, no solamente interacciona con el ${}^{10}\text{B}$ cuya dosis nombraremos como D_B (dosis del Boro), sino que también deposita energía a través de diferentes partículas secundarias con muy diferentes coeficientes lineales de transferencia de energía (LET) y por tanto diferente RBE (efectividad biológica relativa), lo que hace necesario la descomposición de la dosis total en componentes individuales de LET similares. Esta descomposición se realiza habitualmente de la forma:

$$D = D_f + D_t + D_\gamma + D_B, \quad (5.2)$$

donde D_f denota la llamada dosis por neutrones rápidos (*fast*), aquellos con energías superiores a 0.5 eV, dominada por los procesos de colisión elástica con los núcleos del medio (la contribución principal es del hidrógeno). El resto de términos son debidos a los neutrones térmicos, considerados éstos por debajo de 0.5 eV. Las reacciones más importantes de los neutrones térmicos con átomos constituyentes del tejido son: la captura de neutrones por el Nitrógeno (${}^{14}\text{N}(n, p){}^{14}\text{C}^*$), que produce protones de energías próximas a 600 keV (contribuye a D_t) y por el Hidrógeno (${}^1\text{H}(n, \gamma){}^2\text{H}$) la cual produce fotones de energía 2.224 MeV, que contribuyen a D_γ y cuyo cálculo será el objetivo principal de este capítulo. En el caso de presencia de ${}^{10}\text{B}$ (especialmente en el tumor), la contribución a la dosis de los productos de la reacción dada por (5.1) se incluyen en D_B .

En la dosis de fotones se desprecia habitualmente la contribución de los fotones de 477.6 keV que provienen de la captura de neutrones por el Boro [87], debido a que el Boro tiene una concentración en el tejido pequeñísima comparada con la del Hidrógeno, que es constituyente del propio tejido. La concentración más habitual en los tratamientos con pacientes es de $30 \mu\text{g/g}$ en Borofenilalanina o BPA, que es el agente portador de Boro más usado.

Los haces de neutrones térmicos tienen el inconveniente de no penetrar mucho en los tejidos debido a su atenuación con el medio (a 2 cm en el interior del tejido se han atenuado a la mitad) y en consecuencia se reduce su capacidad de producir reacciones de captura en tumores profundos. Esta situación llevó, a partir de 1994 [88], a la utilización de haces epitérmicos ($0.5 \text{ eV} < E < 10 \text{ keV}$) en los que la reducción a la mitad ocurre a 5-7 cm de profundidad [89, 90]. Estos neutrones se van termalizando conforme avanzan en el medio, produciendo un campo de neutrones térmicos a la profundidad en la que se encuentra el tumor.

5.1. Cálculo de la dosis de fotones en BNCT

Debido a la complejidad de los procesos de interacción de los neutrones en los tejidos, los cálculos de los componentes de la dosis en BNCT usualmente se llevan a cabo mediante simulaciones Monte Carlo del transporte de neutrones (ref. [91,92]).

Los fotones involucrados tienen una energía considerable y depositan energía a distancias lejanas de donde se generaron, lo que supone que buena parte de la dosis depositada por ellos sea en el tejido sano, así que resulta esencial la evaluación precisa de ella. Estos fotones son producidos en procesos inducidos principalmente por neutrones térmicos, los cuales se distribuyen aleatoriamente en el medio donde interactúan y no todos producirán fotones. Es por esto, que la evaluación Monte Carlo de la dosis de fotones adolecerá de una baja estadística, por lo que la disminución de su varianza requiere la simulación de un gran número de neutrones, apreciablemente más que los necesarios para determinar las otras componentes de la dosis con la misma precisión, lo que supone un incremento considerable del tiempo de computación. En este sentido, suele aproximarse la dosis gamma por el *Kerma* (energía cinética transferida por unidad de masa), mediante el uso de factores *Kerma-fluencia* [93,94], pero esta aproximación puede restar precisión en el cálculo de dosis, como veremos más adelante.

Partimos de un maniquí cilíndrico ([95–97]) de 10 cm de radio y 10 cm de altura relleno de un medio homogéneo e isótropo, el cual hemos escogido como representativo de tejido blando al *Tejido ICRU 4-componentes* [98]. Este maniquí se encuentra en el vacío y es irradiado en la superficie inferior por un haz de neutrones monoenergético de 13.5 keV, el cual está dentro de las energías usadas en BNCT [99], con un flujo de 10^{10} neutrones/(cm²s) que coincide por el considerado por Goorley *et al.* [93].

El transporte de los neutrones dentro del maniquí se ha simulado con el código Monte Carlo MCNPX [20], el cual nos indicará el número de fotones generados en cada celda en las que hemos dividido el maniquí. Dichas celdas son capas cilíndricas de 0.1 cm entre el radio interior y el exterior siendo su anchura en el eje *Z* de 0.1 cm. En los puntos r_i (fig.5.1) del eje central del del maniquí es donde calcularemos la dosis depositada por los fotones.

El cálculo de la dosis de estos fotones a través del modelo, consiste en una convolución del mapa de fotones (los generados en las celdas “*j*” que suponemos centradas en \vec{r}_j y cuyo número es “ n_j ”) con la dosis que deposita el modelo a una distancia $|\vec{r}_j - \vec{r}_i|$, es decir:

$$D(r_i) = \frac{1}{4\pi\rho} \sum_j n_j \frac{e(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2}, \quad (5.3)$$

donde ρ es la densidad del medio y la función $e(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)$ se expresa mediante las ecuaciones (1.27) para la dosis primaria y (1.74) para la dispersada, asumiendo que la emisión es isótropa y el medio es infinito y homogéneo.

Como avanzamos en la sección anterior, el fotón de 477.6 keV habitualmente no se tiene en consideración para el cálculo de la dosis de fotones en BNCT (D_γ), por lo que nos centraremos exclusivamente en la dosis depositada por los fotones de 2.224 MeV generados en la reacción de los neutrones térmicos con el hidrógeno ($^1\text{H}(n, \gamma) ^2\text{H}$).

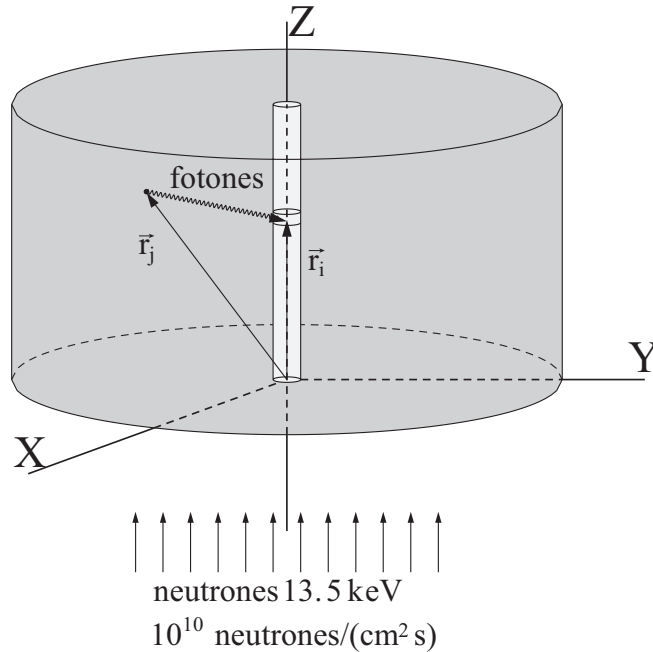


Figura 5.1: Representación del maniquí y el sistema de coordenadas usado en los cálculos y simulaciones

| A_0/E_0 (cm^{-1}) | μ_0 (cm^{-1}) | R_0 (cm) | C_1/E_0 | C_2/E_0 | μ'_1 (cm^{-1}) | μ'_2 (cm^{-1}) |
|--------------------------------|------------------------------|------------|-----------|-----------|-------------------------------|-------------------------------|
| 0.8671(2) | 0.046136(3) | 0.62261(5) | 0.4123(5) | 0.0252(2) | 0.04225(4) | 0.0794(4) |

Tabla 5.1: Coeficientes en las Ec.(1.27) y (1.74) para fotones de una fuente puntual de 2.224 MeV inmersa en Tejido blando ICRU de 4 componentes [98] ($\rho = 1.000\text{g}/\text{cm}^3$)

Para obtener los parámetros a utilizar en las ecuaciones mencionadas más arriba, se ha procedido al ajuste de ellas con los resultados de la simulación de una fuente puntual de fotones, con una energía de 2.224 MeV e inmersa en tejido blando ICRU 4-componentes, realizada con PENELOPE. Los resultados de este ajuste se muestran en la Tabla 5.1 y en la Figura 5.2.

Para comparar, se ha simulado la misma dosis de fotones usando PENELOPE. Específicamente, se han transportado los fotones obtenidos por la simulación con MCNPX, siguiendo todos los electrones secundarios con trazas mayores que el tamaño de las celdas de conteo, de esta manera nos aseguramos que los efectos de acumulación (build-up) son tenidos en cuenta.

Como comprobación de la precisión en el cálculo de la tasa de dosis cuando está basada en la estimación por la tasa de Kerma, se ha calculado ésta con la misma simulación realizada para obtener el mapa de fotones con MCNPX.

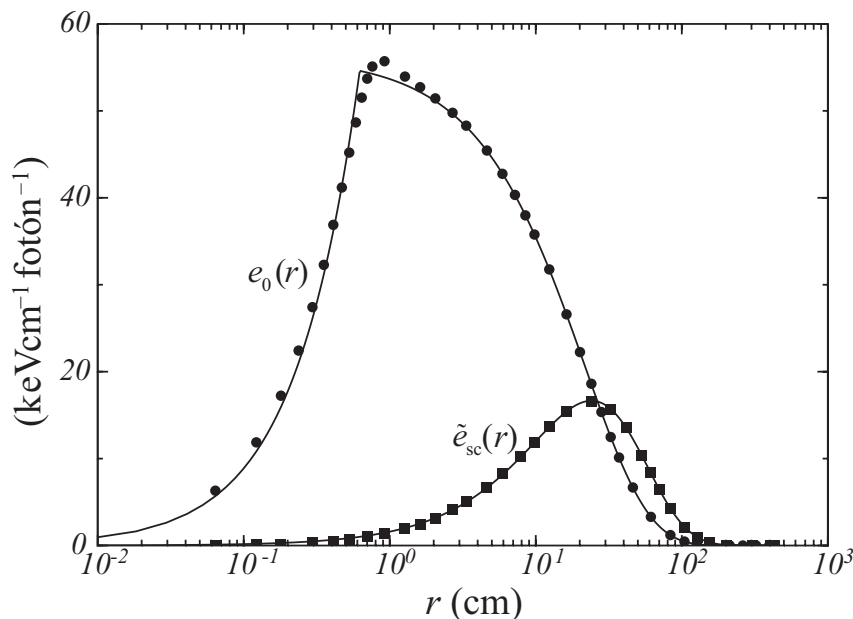


Figura 5.2: Funciones $e_0(r)$ y $\tilde{e}_{sc}(r)$ calculadas con el código Monte Carlo PENELOPE (símbolos) comparadas con las funciones expresadas en las Ec.(1.27) y (1.74) utilizando los coeficientes de la Tabla 5.1 (línea continua). El eje de abscisas se muestra en escala logarítmica

Los resultados de estos tres cálculos se muestran en la Figura 5.3. La tasa de dosis de fotones calculada con el modelo (\dot{D}_{modelo}) se dibuja con línea continua, mientras que los cuadrados sólidos corresponden a los valores obtenidos con PENELOPE ($\dot{D}_{\text{PENELOPE}}$). También se muestran las diferencias relativas entre ambos cálculos (ver panel inferior de la figura), es decir:

$$\Delta_{\text{mod,PEN}} = \frac{\dot{D}_{\text{modelo}} - \dot{D}_{\text{PENELOPE}}}{\dot{D}_{\text{PENELOPE}}}. \quad (5.4)$$

Como se aprecia, la concordancia entre estos dos cálculos es remarkable. Las diferencias relativas entre ambas estimaciones permanecen por debajo del $\pm 2\%$ para todo z , excepto en la zona muy cercana a la tapadera superior del maniquí donde alcanza un 15%. Estas discrepancias pueden ser atribuidas al hecho de que, al establecer el modelo, se consideró que el medio en el que los fotones son transportados es de dimensiones infinitas. Esto se confirma en la pequeña gráfica insertada en la Figura 5.3, donde los resultados de PENELOPE corresponden al caso en el que el maniquí se sitúa en el vacío (cuadrados sólidos), mientras que los cuadrados vacíos ($\dot{D}_{\text{PENELOPE}}^{(\infty)}$) corresponden al cálculo con PENELOPE pero asumiendo un medio infinito. También se compara con los resultados obtenidos con el modelo (línea continua). Como podemos observar, existe una buena coincidencia entre la simulación en el medio infinito y el cálculo del modelo en los valores de z cercanos al borde superior del maniquí. En todos estos cálculos se ha considerado la misma distribución inicial de fotones.

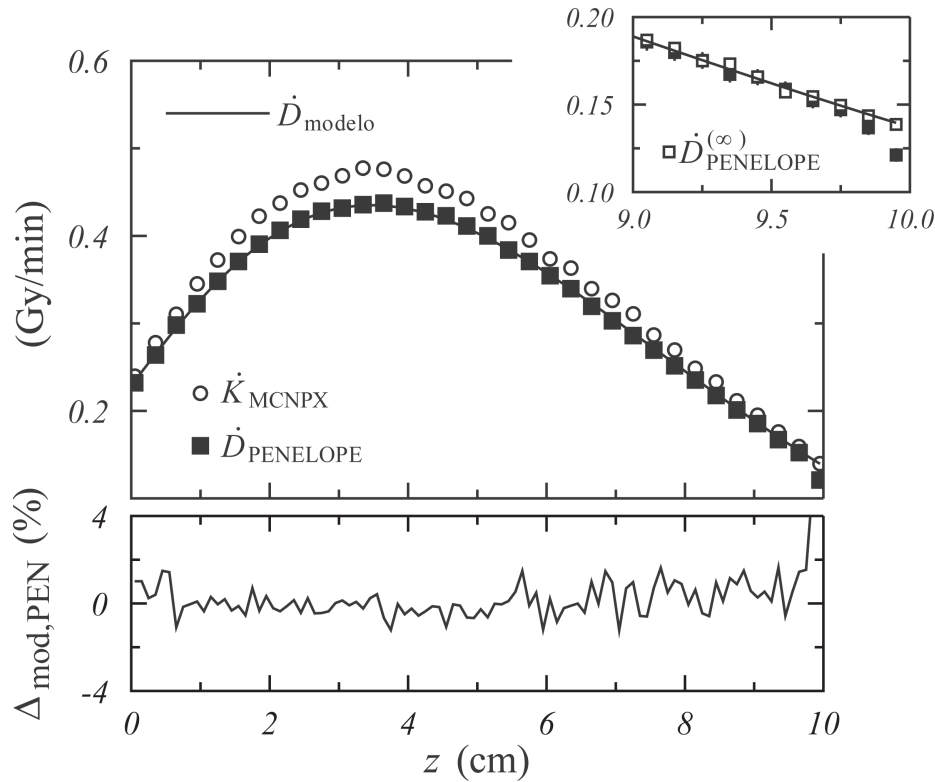


Figura 5.3: Comparación de las estimaciones de la tasa de dosis obtenidas por el modelo semianalítico \dot{D}_{modelo} (línea continua), los cálculos Monte Carlo realizados con PENELOPE $\dot{D}_{\text{PENELOPE}}$ (cuadrados sólidos) y la aproximación a través de la tasa de Kerma evaluado con MCNPX \dot{K}_{MCNPX} (círculos abiertos). En el panel inferior se muestran las diferencias entre los resultados obtenidos con el modelo y los cálculos con PENELOPE, tal como se expresan en la Ec.(5.4). Adicionalmente, en la pequeña gráfica insertada en la figura, se amplía el detalle para distancias cercanas al final del maniquí asumiendo un maniquí infinito $\dot{D}_{\text{PENELOPE}}^{(\infty)}$ (cuadros abiertos).

En la Figura 5.3 también se ha representado con círculos vacíos, los valores de la tasa de Kerma depositada por los fotones obtenidos mediante la simulación con MCNPX (\dot{K}_{MCNPX}). Como se aprecia claramente en este caso, la utilización de la tasa de Kerma para determinar la tasa de dosis, supone una sobreestimación de ésta cuya discrepancia alcanza el 10% en el máximo de la curva. Esta diferencia puede ser debida a los efectos del pre-equilibrio vinculados al *buildup* de los electrones que son tenidos en cuenta en los cálculos de dosis y no lo son en los de Kerma. Con la intención de investigar si esta diferencia puede ser debida también a variaciones en el cálculo que hacen MCNPX y PENELOPE, hemos calculado la tasa de Kerma usando PENELOPE ($\dot{K}_{\text{PENELOPE}}$) y el modelo semi-analítico (\dot{K}_{modelo}). En el primer caso, la energía depositada por los fotones se contabilizaba asumiendo una energía de absorción infinita para los electrones, mientras que en el segundo, la parte correspondiente a $r \leq R_0$ en la ecuación (1.27) ha sido obviada. Los resultados se muestran en la Figura 5.4.

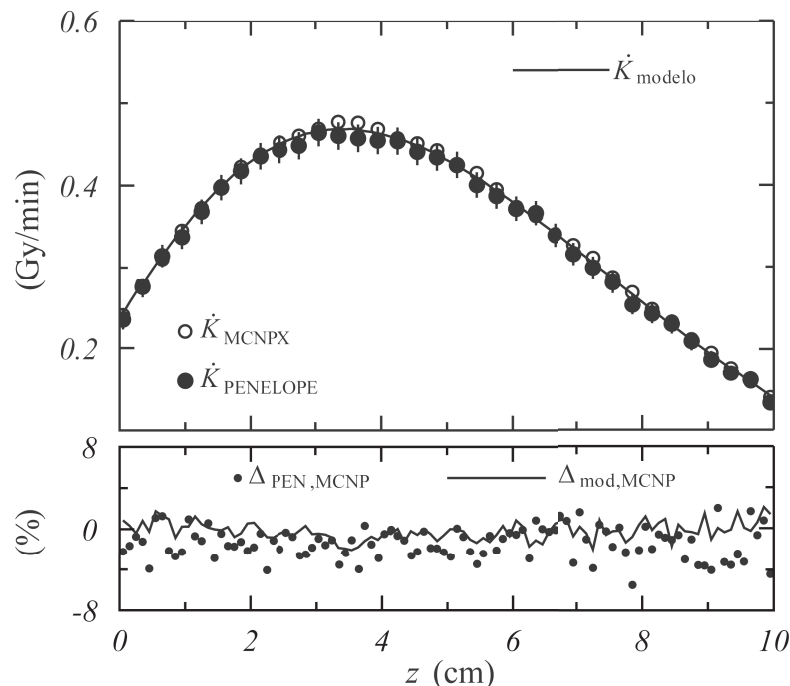


Figura 5.4: Comparación de la tasa de kerma calculada con el modelo semianalítico \dot{K}_{modelo} (línea continua) con MCNPX \dot{K}_{MCNPX} (círculos abiertos) y PENELOPE $\dot{K}_{\text{PENELOPE}}$ (cuadrados sólidos). El panel inferior muestra las diferencias relativas entre los resultados obtenidos con MCNPX y por el modelo (línea continua), mientras que, con círculos sólidos se representan estas diferencias entre PENELOPE y MCNPX, tal como vienen expresadas por las ecuaciones (5.5) y (5.6), respectivamente.

En ella puede observarse una buena concordancia entre los tres cálculos de la tasa de Kerma mencionados en el párrafo anterior. En el panel inferior se muestran las diferencias relativas

$$\Delta_{\text{mod,MCNP}} = \frac{\dot{K}_{\text{modelo}} - \dot{K}_{\text{MCNPX}}}{\dot{K}_{\text{MCNPX}}}, \quad (5.5)$$

dibujada con línea continua, y

$$\Delta_{\text{PEN,MCNP}} = \frac{\dot{K}_{\text{PENELOPE}} - \dot{K}_{\text{MCNPX}}}{\dot{K}_{\text{MCNPX}}}, \quad (5.6)$$

mostrada con círculos opacos. La concordancia del modelo con la simulación MCNPX es bastante buena, permaneciendo $\Delta_{\text{mod,MCNP}}$ dentro del $\pm 2\%$. Por otro lado, $\Delta_{\text{PEN,MCNP}}$ alcanza el 5.5% a lo sumo. Estos resultados confirman que la sobreestimación de la tasa de dosis de fotones, cuando ésta se calcula mediante la tasa de Kerma, es principalmente causada por los efectos de acumulación (build-up) no tomados en cuenta en la evaluación del Kerma.

Es significativo, que el uso del modelo semi-analítico reduce enormemente el tiempo requerido por la CPU para calcular la dosis de fotones D_{γ} : mientras el modelo necesita

apenas unos segundos en completar el cálculo, cualquiera de las simulaciones con PENLOPE, que hemos realizado utilizando un número de fotones iniciales de 10^{10} para obtener suficiente estadística, ha tardado alrededor de 10 días de uso de una CPU Intel Hapertown E5405 2.0 GHz de núcleo simple, por otro lado, no sería muy complicado la implementación del modelo en un código Monte Carlo de transporte de neutrones, del que calcularía la dosis de fotones, una vez conocido el lugar donde se genera el fotón dentro del medio homogéneo.

Conclusiones y perspectivas

A lo largo de esta tesis se ha desarrollado un modelo estadístico para el transporte de fotones en medios homogéneos que, en base a considerar las aportaciones de las diferentes generaciones de fotones, nos ha proporcionado un conjunto de expresiones que dan cuenta de la distribución de fotones y electrones de cada generación producidos en cada capa, debido a la interacción de la radiación con el medio material. Construyendo posteriormente con ellas fórmulas sencillas, podemos reproducir la dosis depositada por una fuente puntual monoenergética y cuyos logros resumimos a continuación:

- Se obtienen ecuaciones que cuantifican la energía por unidad de longitud depositada en el medio por cada generación, así como la depositada por los fotones primarios y la debida a todas las generaciones de dispersados en total.
- En el caso de los primarios también proporciona una expresión para distancias muy cercanas a la fuente, donde tienen lugar los procesos de acumulación debidos a la situación de pre-equilibrio electrónico existente a dichas distancias, lo que posibilita calcular de forma precisa la dosis a distancias muy cercanas a la fuente.
- La precisión alcanzada en la descripción de la dosis total producida por los fotones dispersados es excelente en todo el rango de energías estudiado. En la dosis depositada por los fotones primarios esta precisión también es excelente una vez superado el tramo de pre-equilibrio electrónico, sin embargo en el tramo donde $r \leq R_0$ se pierde exactitud a bajas energías, si bien se trata de una región muy pequeña.
- Permite un cálculo muy preciso de dosis depositada por fuentes extensas mediante la integración volumétrica de fuentes puntuales, como en los casos estudiados en esta tesis de fuentes lineales y esféricas.
- En problemas en los que los fotones surgen de procesos secundarios con muy baja probabilidad, el uso del modelo ofrece un cálculo preciso y muy rápido en cuanto a tiempo de computación frente a la simulación Monte Carlo.
- El uso de las ecuaciones que surgen del modelo permite hacer estudios analíticos, que justifiquen comportamientos no evidentes en la interacción de los fotones con medios materiales, como en el caso estudiado de la fuente lineal, en el que ha permitido explicar el pico de dosis que la función de anisotropía 1D ($\phi_{\text{an}}(r)$) presenta a cortas distancias.

- El modelo también posibilita encontrar relaciones entre diferentes parámetros involucrados en ciertos problemas dosimétricos, como en el caso expuesto en el capítulo 4 al estudiar la fracción específica de energía absorbida.
- Las expresiones deducidas ofrecen una justificación en base a un modelo físico a otras ecuaciones propuestas con la misma finalidad, como las obtenidas para la dosis dispersada por Berger [29] mediante el método estadístico de los momentos [46], la de Carlsson-Ahnesjö [100] y la de Sabariego *et al.* [31], basadas en consideraciones cualitativas, así como la de Nizin [45] para el tramo de pre-equilibrio electrónico en la dosis primaria.

En esta tesis se ha desarrollado, contrastado y aplicado en situaciones sencillas un modelo para el cálculo de dosis absorbida. Cabe esperar que este modelo pueda extenderse en un futuro a problemas más complejos y situaciones más realistas, para lo que esbozamos las vías de trabajo posibles para superar las limitaciones del mismo en potenciales aplicaciones futuras:

- Este modelo se ha desarrollado para fuentes monoenergéticas, por lo que una prolongación natural de su estudio es su aplicación a fuentes polienergéticas con un espectro de energías determinado. El punto de vista con el que se puede abordar es el de considerarlas como un conjunto de fuentes monoenergéticas, cada una de ellas con energía y probabilidad de emisión iguales a las que constituyen el espectro y que caracterizaremos mediante las ecuaciones 1.27 y 1.74, representadas éstas para cada energía por los parámetros de ajuste correspondientes.
- Otra vía de progreso en la aplicación del modelo corresponde a situaciones en las que las fuentes o los blancos se distribuyen en geometrías más complejas, donde frecuentemente nos encontramos con dificultades de tipo matemático a la hora de encontrar soluciones analíticas a la integración de las ecuaciones del modelo, si bien la solución numérica es factible y de fácil implementación en un programa de cálculo. En este sentido, el buen comportamiento de las formas funcionales que surgen del modelo nos hace esperar que las integraciones numéricas puedan realizarse con elevada precisión.
- A lo largo de esta tesis, los medios materiales que hemos estudiado son medios homogéneos e isotropos, lo que supone una aproximación si pretendemos extender estos cálculos a pacientes de radioterapia, ya que los tejidos corporales tienen diferentes composiciones y densidades. No obstante, debido al gran porcentaje de agua que forma parte del cuerpo humano, la utilización de ésta en cálculos dosimétricos, es aceptada como una aproximación razonable. En cualquier caso, la extensión de este modelo a medios inhomogéneos, con regiones de distinta densidad pero de parecida composición atómica puede realizarse mediante aplicación de los teoremas de Fano [101] y O'Connor (1957) [102], que permiten escalar, mediante las densidades relativas, los datos en agua a medios arbitrarios de diferente densidad y que permite la aplicación a medios no homogéneos [103].

Apéndice A

Ajustes en otros medios

En el presente apéndice se muestran los valores de ajuste de los parámetros de las ecuaciones (1.27) y (1.74) para medios y tejidos diferentes al agua. Se ofrecen datos para diversas energías, entre las que se encuentran las más probables de varias fuentes radioactivas usadas en Braquiterapia, así como el valor medio de las energías correspondientes al espectro de dichos isótopos (en *itálica*). Los valores entre paréntesis indican la correspondiente incertidumbre, es decir, 0.5006(2) significa 0.5006 ± 0.0002 .

Tejido adiposo

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------------|---------------------------------|
| | 10 | 5959(35) | 0.00013870(3) | 3.1079(8) |
| ^{103}Pd | <i>20.6</i> | <i>905(9)</i> | <i>0.0005746(2)</i> | <i>0.5006(2)</i> |
| ^{125}I | 27.4 | 365(4) | 0.0009357(3) | 0.3189(1) |
| ^{125}I | <i>28.33</i> | <i>318(4)</i> | <i>0.0010197(4)</i> | <i>0.3049(1)</i> |
| | 100 | 132(2) | 0.0010816(3) | 0.15645(5) |
| ^{192}Ir | 316 | 13.20(5) | 0.020903(6) | 0.10756(3) |
| ^{192}Ir | <i>397</i> | <i>8.44(2)</i> | <i>0.03644(1)</i> | 0.09845(3) |
| ^{198}Au | 412 | 8.14(2) | 0.03845(1) | 0.09701(3) |
| ^{198}Au | <i>420</i> | <i>7.66(2)</i> | <i>0.04121(1)</i> | <i>0.09626(3)</i> |
| ^{137}Cs | 662 | 3.622(5) | 0.10509(3) | 0.07933(2) |
| | 1000 | 2.092(2) | 0.20965(4) | 0.06538(1) |
| ^{60}Co | 1173 | 1.699(2) | 0.27100(5) | 0.06039(1) |
| ^{60}Co | <i>1250</i> | <i>1.570(1)</i> | <i>0.29864(6)</i> | <i>0.05847(1)</i> |
| ^{60}Co | 1332 | 1.433(1) | 0.33304(6) | 0.05658(1) |

Tabla A.1: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en tejido adiposo ICRP [21] ($\rho = 0.92 \text{ g/cm}^3$)

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|------------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.07060(5) | 5.65(2) | 0.0508(2) | 3.778(7) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.209(1) | 0.851(3) | 0.1343(5) | 0.5926(9) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.294(2) | 0.461(1) | 0.1812(8) | 0.3481(5) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.306(2) | 0.429(1) | 0.1837(9) | 0.3294(5) |
| | 100 | 0.373(6) | 0.1289(3) | 0.2440(4) | 0.1314(9) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.1823(5) | 0.1430(2) | 0.2709(2) | 0.1036(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.1881(5) | 0.1304(2) | 0.2519(3) | 0.09744(3) |
| ^{198}Au | 412 | 0.1897(6) | 0.1282(2) | 0.2485(3) | 0.09639(3) |
| ^{198}Au | 420 | 0.1887(6) | 0.1277(2) | 0.2476(3) | 0.09594(3) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.228(2) | 0.0970(5) | 0.195(2) | 0.08208(7) |
| | 1000 | 0.433(1) | 0.05847(8) | 0.0640(5) | 0.0764(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4337(7) | 0.054056(5) | 0.0530(3) | 0.0750(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4330(6) | 0.05236(5) | 0.0492(3) | 0.0748(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4309(6) | 0.05086(4) | 0.0461(3) | 0.0740(2) |

Tabla A.2: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en tejido adiposo ICRP [21] ($\rho = 0.92 \text{ g/cm}^3$)

Músculo estriado

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|
| | 10 | 7392(27) | 0.00011608(3) | 6.055(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 1322(9) | 0.0004854(1) | 0.8363(2) |
| ^{125}I | 27.4 | 547(5) | 0.0008158(3) | 0.4719(1) |
| ^{125}I | 28.33 | 513(4) | 0.0008719(2) | 0.4464(1) |
| | 100 | 148(2) | 0.0010032(3) | 0.17685(5) |
| ^{192}Ir | 316 | 14.55(1) | 0.018961(5) | 0.11992(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 9.99(2) | 0.030797(8) | 0.10973(3) |
| ^{198}Au | 412 | 8.74(2) | 0.03577(1) | 0.10810(3) |
| ^{198}Au | 420 | 8.92(3) | 0.03537(2) | 0.10725(3) |
| ^{137}Cs | 662 | 4.234(6) | 0.08985(2) | 0.08836(2) |
| | 1000 | 2.425(3) | 0.18076(4) | 0.07279(1) |
| ^{60}Co | 1173 | 1.968(2) | 0.23379(5) | 0.06724(1) |
| ^{60}Co | 1250 | 1.797(2) | 0.26070(5) | 0.06510(1) |
| ^{60}Co | 1332 | 1.674(1) | 0.28492(6) | 0.06301(1) |

Tabla A.3: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en tejido muscular estriado ICRU [21] ($\rho = 1.04 \text{ g/cm}^3$)

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.0537(5) | 11.24(6) | 0.0435(2) | 7.39(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.128(1) | 1.691(9) | 0.1114(5) | 1.095(3) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.235(1) | 0.776(2) | 0.1471(6) | 0.5494(8) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.245(1) | 0.721(2) | 0.1523(6) | 0.5152(8) |
| | 100 | 0.1972(9) | 0.2165(6) | 0.3266(5) | 0.16489(7) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.1863(5) | 0.1579(3) | 0.2687(2) | 0.11774(4) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.1977(7) | 0.1418(3) | 0.2471(4) | 0.10987(4) |
| ^{198}Au | 412 | 0.1981(8) | 0.1399(3) | 0.2443(4) | 0.10865(5) |
| ^{198}Au | 420 | 0.2000(8) | 0.1383(3) | 0.2419(4) | 0.10794(4) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.315(2) | 0.092(2) | 0.152(8) | 0.0904(3) |
| | 1000 | 0.4413(7) | 0.06463(6) | 0.0601(3) | 0.0877(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4387(5) | 0.05997(5) | 0.0507(2) | 0.0856(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4367(5) | 0.05818(4) | 0.0475(2) | 0.0852(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4344(5) | 0.05651(4) | 0.0445(2) | 0.0842(2) |

Tabla A.4: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en tejido muscular estriado ICRU [21] ($\rho = 1.04 \text{ g/cm}^3$)

Piel

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|
| | 10 | 7651(40) | 0.00011261(3) | 5.618(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 1319(10) | 0.0004677(3) | 0.8038(2) |
| ^{125}I | 27.4 | 551(5) | 0.0007986(3) | 0.4650(2) |
| ^{125}I | 28.33 | 503(5) | 0.0008328(3) | 0.4413(2) |
| | 100 | 169(4) | 0.0008713(3) | 0.18610(6) |
| ^{192}Ir | 316 | 15.92(6) | 0.017332(6) | 0.12663(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 10.37(3) | 0.029658(9) | 0.11587(3) |
| ^{198}Au | 412 | 9.79(3) | 0.031954(8) | 0.11418(3) |
| ^{198}Au | 420 | 9.34(3) | 0.03379(1) | 0.11326(3) |
| ^{137}Cs | 662 | 4.359(6) | 0.08728(2) | 0.09333(2) |
| | 1000 | 2.512(3) | 0.17455(3) | 0.07691(1) |
| ^{60}Co | 1173 | 1.890(2) | 0.24793(5) | 0.06877(1) |
| ^{60}Co | 1250 | 1.890(2) | 0.24793(5) | 0.06877(1) |
| ^{60}Co | 1332 | 1.740(2) | 0.27412(7) | 0.06654(1) |

Tabla A.5: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en piel ICRP [21] ($\rho = 1.1 \text{ g/cm}^3$)

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.0481(5) | 11.12(7) | 0.0440(2) | 7.15(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.111(1) | 1.81(1) | 0.1274(5) | 1.126(5) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.187(2) | 0.870(5) | 0.1801(8) | 0.584(2) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.261(1) | 0.691(2) | 0.1590(7) | 0.5017(7) |
| | 100 | 0.1843(8) | 0.2321(6) | 0.3341(4) | 0.17166(7) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.1849(5) | 0.1673(2) | 0.2694(2) | 0.12381(4) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.1929(6) | 0.1517(3) | 0.2495(3) | 0.11582(4) |
| ^{198}Au | 412 | 0.1935(6) | 0.1495(3) | 0.2466(3) | 0.11458(4) |
| ^{198}Au | 420 | 0.1966(7) | 0.1472(3) | 0.2437(3) | 0.11377(4) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.323(6) | 0.096(2) | 0.148(4) | 0.0952(6) |
| | 1000 | 0.4392(8) | 0.06842(7) | 0.0611(4) | 0.0918(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4361(5) | 0.06149(5) | 0.0478(2) | 0.0894(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4361(5) | 0.06149(5) | 0.0478(2) | 0.0894(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4337(5) | 0.05971(4) | 0.0448(2) | 0.0885(2) |

Tabla A.6: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en piel ICRP [21] ($\rho = 1.1\text{g}/\text{cm}^3$)

Hueso compacto

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|----------------|---------------------------------|
| | 10 | 19808(50) | 0.000043901(9) | 39.688(9) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 4005(15) | 0.00020217(5) | 5.190(1) |
| ^{125}I | 27.4 | 1985(8) | 0.0003771(1) | 2.3892(6) |
| ^{125}I | 28.33 | 1790(8) | 0.0004113(1) | 2.1963(5) |
| | 100 | 268(5) | 0.0007882(3) | 0.3368(1) |
| ^{192}Ir | 316 | 25.38(9) | 0.010925(3) | 0.20699(5) |
| ^{192}Ir | 397 | 17.38(4) | 0.017731(5) | 0.18891(5) |
| ^{198}Au | 412 | 15.65(4) | 0.020014(6) | 0.18608(5) |
| ^{198}Au | 420 | 16.01(3) | 0.019725(6) | 0.18460(5) |
| ^{137}Cs | 662 | 7.18(1) | 0.05290(1) | 0.15172(4) |
| | 1000 | 4.261(5) | 0.10272(3) | 0.12493(3) |
| ^{60}Co | 1173 | 3.490(4) | 0.13161(3) | 0.11538(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 3.210(3) | 0.14569(3) | 0.11168(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 2.916(2) | 0.16317(3) | 0.10812(2) |

Tabla A.7: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en tejido óseo compacto ICRU [21] ($\rho = 1.85\text{g}/\text{cm}^3$).

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.0372(3) | 131.8(8) | 0.0447(1) | 56.9(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.0552(9) | 13.6(2) | 0.0654(4) | 7.07(4) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.086(1) | 5.53(6) | 0.0807(6) | 3.20(1) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.091(1) | 5.02(5) | 0.0841(6) | 2.93(1) |
| | 100 | 0.7079(5) | 0.2916(1) | 0.0407(2) | 0.447(2) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.5325(6) | 0.1689(1) | 0.0956(3) | 0.2335(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.5173(5) | 0.1562(1) | 0.0877(2) | 0.2155(2) |
| ^{198}Au | 412 | 0.5153(5) | 0.1541(1) | 0.0861(2) | 0.2131(2) |
| ^{198}Au | 420 | 0.5148(5) | 0.1530(1) | 0.0850(3) | 0.2118(2) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.4922(4) | 0.12927(7) | 0.0642(2) | 0.1857(2) |
| | 1000 | 0.4690(3) | 0.10943(5) | 0.0470(1) | 0.1670(3) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4592(3) | 0.10230(5) | 0.0411(1) | 0.1602(3) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4553(3) | 0.09948(5) | 0.0389(1) | 0.1580(3) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4517(3) | 0.09679(5) | 0.0365(1) | 0.1557(3) |

Tabla A.8: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en tejido óseo compacto ICRU [21] ($\rho = 1.85\text{g}/\text{cm}^3$).

Aire seco

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|
| | 10 | 7.98(2) | 0.10728(3) | 0.006658(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 1.411(7) | 0.4491(1) | 0.0009335(3) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.609(5) | 0.7711(2) | 0.0005189(2) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.560(3) | 0.8025(3) | 0.0004898(2) |
| | 100 | 0.159(3) | 0.9423(3) | 0.00018645(6) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.01696(7) | 16.262(5) | 0.00001261(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.01145(3) | 26.848(7) | 0.00011537(3) |
| ^{198}Au | 412 | 0.01046(3) | 29.876(8) | 0.00011368(3) |
| ^{198}Au | 420 | 0.00980(3) | 32.186(9) | 0.00011277(3) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.004934(9) | 77.09(2) | 0.00009287(2) |
| | 1000 | 0.002688(3) | 163.11(3) | 0.00007659(1) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.002096(2) | 219.51(5) | 0.00007075(1) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.001933(2) | 242.35(5) | 0.00006851(1) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.001787(2) | 266.87(5) | 0.00006632(1) |

Tabla A.9: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en aire seco cercano al nivel del mar [21] ($\rho = 1.20479 \cdot 10^{-3}\text{g}/\text{cm}^3$)

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.0504(5) | 0.01316(9) | 0.0454(2) | 0.00826(2) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.156(1) | 0.001672(7) | 0.1040(5) | 0.001120(2) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.223(1) | 0.000866(3) | 0.1514(7) | 0.000604(1) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.245(1) | 0.000782(2) | 0.1513(7) | 0.0005580(9) |
| | 100 | 0.205(1) | 0.0002248(6) | 0.3223(5) | 0.00017417(7) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.1873(6) | 0.0001656(3) | 0.2682(3) | 0.0001239(1) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.1971(7) | 0.0001495(3) | 0.2473(3) | 0.00011571(5) |
| ^{198}Au | 412 | 0.2016(8) | 0.0001457(3) | 0.2425(4) | 0.00011420(5) |
| ^{198}Au | 420 | 0.2001(9) | 0.0001453(3) | 0.2418(3) | 0.00011365(5) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.404(4) | 0.0000855(4) | 0.107(2) | 0.0000969(2) |
| | 1000 | 0.4430(7) | 0.00006784(7) | 0.0594(3) | 0.0000926(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4394(5) | 0.00006305(5) | 0.0504(3) | 0.0000902(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4370(5) | 0.0000613(5) | 0.0474(2) | 0.0000890(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4352(5) | 0.00005947(5) | 0.0442(2) | 0.0000884(2) |

Tabla A.10: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en aire seco cercano al nivel del mar [21] ($\rho = 1.20479 \cdot 10^{-3} \text{g/cm}^3$)

Tejido ICRU de 4 componentes

| Isótopo | E_S (keV) | A_0/E_S (cm^{-1}) | R_0 (cm) | μ_0 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------------------------------|---------------|---------------------------------|
| | 10 | 6436(13) | 0.00013280(3) | 5.334(1) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 1133(7) | 0.0005339(1) | 0.7629(2) |
| ^{125}I | 27.4 | 498(3) | 0.0008756(3) | 0.4342(1) |
| ^{125}I | 28.33 | 436(3) | 0.0009539(3) | 0.4115(1) |
| | 100 | 174(4) | 0.0008491(3) | 0.16943(5) |
| ^{192}Ir | 316 | 14.86(4) | 0.018563(5) | 0.11524(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 9.55(3) | 0.032205(9) | 0.10544(3) |
| ^{198}Au | 412 | 8.95(2) | 0.034932(9) | 0.10386(2) |
| ^{198}Au | 420 | 8.75(2) | 0.03607(1) | 0.10307(3) |
| | 477.6 | 6.384(5) | 0.051892(6) | 0.09776(1) |
| ^{137}Cs | 662 | 4.257(7) | 0.08937(2) | 0.08489(2) |
| | 1000 | 2.342(3) | 0.18723(5) | 0.06996(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 1.863(2) | 0.2469(5) | 0.06463(1) |
| ^{60}Co | 1250 | 1.718(2) | 0.27273(6) | 0.06257(1) |
| ^{60}Co | 1332 | 1.597(2) | 0.29863(5) | 0.06056(1) |
| | 2224.6 | 0.8671(2) | 0.62261(5) | 0.046136(3) |

Tabla A.11: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.27) para los fotones primarios de una fuente puntual inmersa en Tejido blando ICRU de 4 componentes [98] ($\rho = 1.000 \text{g/cm}^3$). Se incluyen datos de las energías involucradas en BNCT (2224.6 y 477.6 Kev)

| Isótopo | E_S (keV) | C_1/E_S | μ'_1 (cm^{-1}) | C_2/E_S | μ'_2 (cm^{-1}) |
|-------------------|----------------|-----------|----------------------------------|-----------|----------------------------------|
| | 10 | 0.0629(4) | 8.92(3) | 0.0407(2) | 6.28(1) |
| ^{103}Pd | 20.6 | 0.0629(4) | 0.691(2) | 0.1575(7) | 0.4948(8) |
| ^{125}I | 27.4 | 0.223(1) | 0.000866(3) | 0.1514(7) | 0.000604(1) |
| ^{125}I | 28.33 | 0.246(1) | 0.691(2) | 0.1575(7) | 0.4948(8) |
| | 100 | 0.1845(8) | 0.2111(5) | 0.3340(4) | 0.15633(6) |
| ^{192}Ir | 316 | 0.1847(5) | 0.1522(2) | 0.2695(2) | 0.11269(3) |
| ^{192}Ir | 397 | 0.1923(7) | 0.1383(3) | 0.2498(3) | 0.10543(4) |
| ^{198}Au | 412 | 0.1940(7) | 0.1357(3) | 0.2463(3) | 0.10424(4) |
| ^{198}Au | 420 | 0.1970(8) | 0.1338(3) | 0.2435(4) | 0.10352(4) |
| | 477.6 | 0.1823(6) | 0.1347(2) | 0.2422(3) | 0.10060(4) |
| ^{137}Cs | 662 | 0.272(7) | 0.095(1) | 0.173(4) | 0.0872(2) |
| | 1000 | 0.4401(8) | 0.06221(5) | 0.0607(3) | 0.084(2) |
| ^{60}Co | 1173 | 0.4385(6) | 0.05761(5) | 0.0508(3) | 0.0822(2) |
| ^{60}Co | 1250 | 0.4355(6) | 0.05602(5) | 0.0481(3) | 0.0810(2) |
| ^{60}Co | 1332 | 0.4333(5) | 0.05438(4) | 0.0450(2) | 0.0803(2) |
| | 2224.6 | 0.4123(5) | 0.04225(4) | 0.0252(2) | 0.0794(4) (3) |

Tabla A.12: Resultados de los ajustes a la Ec.(1.74) para los fotones dispersados de una fuente puntual inmersa en Tejido blando ICRU de 4 componentes [98] ($\rho = 1.000\text{g}/\text{cm}^3$). Se incluyen datos de las energías involucradas en BNCT (2224.6 y 477.6 Kev)

Apéndice B

Transformación de sumas en $S_{n,m}(z)$

El objetivo de este apéndice es transformar la suma en el índice j de la función

$$S_{n,m}(z) = \sum_{j=n}^m \binom{j}{n} z^{j-n} \quad n \leq m \quad (\text{B.1})$$

en una nueva suma cuyo índice no dependa de m . Para ello empleamos la función

$$f_m(z) = \sum_{j=0}^m z^j, \quad (\text{B.2})$$

cuya suma de términos es

$$\sum_{j=0}^m z^j = 1 + \sum_{j=1}^m z^j = 1 + z \frac{1 - z^m}{1 - z} = \frac{1 - z^{m+1}}{1 - z} \quad (\text{B.3})$$

y calculando la derivada n -ésima del primer término de B.3, obtenemos:

$$\frac{d^n}{dz^n} \left[\sum_{j=0}^m z^j \right] = \sum_{j=n}^m \frac{j!}{(j-n)!} z^{j-n} = n! \sum_{j=n}^m \binom{j}{n} z^{j-n} = n! S_{n,m}(z). \quad (\text{B.4})$$

Por otro lado, calcularemos la derivada n -ésima del último término de la expresión B.3, haciendo uso de la fórmula de Leibniz para derivadas de productos de funciones:

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dz^n} \left[\frac{1 - z^{m+1}}{1 - z} \right] &= \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \left[\frac{d^i}{dz^i} (1 - z^{m+1}) \right] \left[\frac{d^{n-i}}{dz^{n-i}} \left(\frac{1}{1 - z} \right) \right] \\ &= (1 - z^{m+1}) \frac{d^n}{dz^n} \left(\frac{1}{1 - z} \right) + \sum_{i=1}^n \binom{n}{i} \left[\frac{d^i}{dz^i} (1 - z^{m+1}) \right] \left[\frac{d^{n-i}}{dz^{n-i}} \left(\frac{1}{1 - z} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

donde hemos separado del sumatorio el término $i = 0$. Calculando las derivadas entre corchetes de la Ec.(B.5), obtenemos:

$$\frac{d^i}{dz^i} (1 - z^{m+1}) = - \frac{(m+1)!}{(m+1-i)!} z^{m+1+i} \quad i \geq 1 \quad (\text{B.6})$$

y

$$\frac{d^{n-i}}{dz^{n-i}} \left(\frac{1}{1-z} \right) = (n-i)! \frac{1}{(1-z)^{n-i+1}}, \quad (\text{B.7})$$

que sustituyéndolos en la ecuación (B.5), conduce a:

$$\begin{aligned} & \frac{d^n}{dz^n} \left[\frac{1 - z^{m+1}}{1 - z} \right] = \\ &= n! \frac{(1 - z^{m+1})}{(1 - z)^{n+1}} + \sum_{i=1}^n \binom{n}{i} (-1)^i \frac{(m+1)!}{(m+1-i)!} (n-i)! \frac{z^{m+1+i}}{(1-z)^{n-i+1}} \\ &= n! \frac{1}{(1-z)^{n+1}} - n! \frac{z^{m+1}}{(1-z)^{n+1}} - \sum_{i=1}^n \binom{m+1}{i} n! \frac{z^{m+1+i}}{(1-z)^{n-i+1}}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

donde el segundo sumando corresponde al término $i = 0$ del sumatorio que aparece al final de la ecuación (B.8). Por tanto, introducimos este sumando dentro del sumatorio simplemente empezando el índice inferior en $i = 0$ en lugar de en $i = 1$, obteniendo finalmente:

$$\frac{d^n}{dz^n} \left[\frac{1 - z^{m+1}}{1 - z} \right] = \frac{n!}{(1-z)^{n+1}} \left[1 - \sum_{i=0}^n \binom{m+1}{i} (1-z)^i z^{m+1+i} \right]. \quad (\text{B.9})$$

Teniendo en cuenta la ecuación (B.3), igualamos la Ec.(B.9) con la Ec.(B.4), de donde extraemos la expresión buscada:

$$S_{n,m}(z) = \frac{1}{(1-z)^{n+1}} \left[1 - \sum_{i=0}^n \binom{m+1}{i} (1-z)^i z^{m+1+i} \right]. \quad (\text{B.10})$$

Apéndice C

Integrales auxiliares $I_n(x, y; \mu)$ y $J_n(x, y, z, \mu)$

C.1. Integrales $I_n(x, y; \mu)$

En el desarrollo del capítulo 4 definimos las integrales $I_n(x, y; \mu)$ (Ec.(4.22)) como:

$$I_n(x, y; \mu) = \int_{x-y}^{x+y} r^n e^{-\mu r} dr \quad n \geq -1 \quad (\text{C.1})$$

Para $n = -1$, la solución es:

$$\begin{aligned} I_{-1}(x, y; \mu) &= \int_{x-y}^{x+y} \frac{1}{r} e^{-\mu r} dr \rightarrow \left| \begin{array}{l} \mu r = t \\ \frac{dr}{r} = \frac{dt}{t} \end{array} \right| \rightarrow \int_{\mu(x-y)}^{\mu(x+y)} \frac{1}{t} e^{-t} dt \\ &= \int_{\mu(x-y)}^{\infty} \frac{1}{t} e^{-t} dt - \int_{\mu(x+y)}^{\infty} \frac{1}{t} e^{-t} dt \\ &= E_1(\mu(x-y)) - E_1(\mu(x+y)), \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

donde E_1 es la función especial *Integral exponencial*, definida de la forma:

$$E_1(z) = \int_1^{\infty} \frac{e^{-zt}}{t} dt = \int_z^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt, \quad (\text{C.3})$$

cuyas propiedades y tablas de valores pueden consultarse en la referencia [83].

Cuando $n \geq 0$ la solución se obtiene a través de una relación de recurrencia. Conociendo el orden 0:

$$\begin{aligned} I_0(x, y; \mu) &= \int_{x-y}^{x+y} e^{-\mu r} dr = \left[-\frac{1}{\mu} e^{-\mu r} \right]_{x-y}^{x+y} \\ &= \frac{e^{-\mu x}}{\mu} (e^{\mu y} - e^{-\mu y}), \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

entonces para n :

$$\begin{aligned}
I_n(x, y; \mu) &= \int_{x-y}^{x+y} r^n e^{-\mu r} dr \rightarrow \left| \begin{array}{l} r^n = u \quad du = nr^{n-1} \\ e^{-\mu r} dr = dv \quad v = -\frac{1}{\mu} e^{-\mu r} \end{array} \right| \rightarrow \\
&= \left[-\frac{r^n}{\mu} e^{-\mu r} \right]_{x-y}^{x+y} + \frac{n}{\mu} \int_{x-y}^{x+y} r^{n-1} e^{-\mu r} dr \\
&= \frac{e^{-\mu x}}{\mu} [(x-y)^n e^{\mu y} - (x+y)^n e^{-\mu y}] + \frac{n}{\mu} I_{n-1}(x, y; \mu). \quad (\text{C.5})
\end{aligned}$$

En general, la solución a estas integrales para $n \geq 0$ podemos expresarla mediante la siguiente relación de recurrencia (Ec.(4.23)) en el capítulo 4):

$$I_n(x, y; \mu) = e^{-\mu x} \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!} \frac{1}{\mu^{n-j+1}} [(x-y)^j e^{\mu y} - (x+y)^j e^{-\mu y}], \quad (\text{C.6})$$

donde, en el caso concreto de nuestro estudio, x corresponde a la distancia L e y al radio R , como puede apreciarse en la figura 4.1.

C.1.1. Aproximaciones de $I_n(L, R; \mu)$ para R pequeño

Con el fin de encontrar expresiones más simplificadas que nos permitan ver mejor la dependencia con R y L , así como comprobar que en el límite $R \rightarrow 0$ debe obtenerse el comportamiento de fuentes puntuales, procederemos a estudiar el caso en el que $L \gg R$ comprobando el comportamiento asintótico de estas integrales cuando $\mu R \ll 1$ mediante el desarrollo en serie de potencias de μR de las mismas.

Aproximación de $I_{-1}(L, R; \mu)$

Partimos de la Ec.(C.2) donde desarrollando en serie las funciones *Integral exponencial* obtenemos:

$$\begin{aligned}
E_1(\mu(L \pm R)) &\simeq E_1(\mu L) \pm E_1'(\mu L) \mu R \\
&+ \frac{1}{2} E_1''(\mu L) [\mu R]^2 \pm \frac{1}{6} E_1'''(\mu L) [\mu R]^3 + O[\mu R]^4, \quad (\text{C.7})
\end{aligned}$$

donde las derivadas son [83]:

$$\begin{aligned}
E_1'(z) &= -E_0(z) = -\frac{1}{z} e^{-z}, \\
E_1''(z) &= \frac{1}{z^2} e^{-z} + \frac{1}{z} e^{-z} = \left(\frac{1}{z^2} + \frac{1}{z} \right) e^{-z}, \\
E_1'''(z) &= -\left(\frac{2}{z^3} + \frac{2}{z^2} + \frac{1}{z} \right) e^{-z}. \quad (\text{C.8})
\end{aligned}$$

Por tanto, despreciando los términos $O[\mu R]^4$ obtenemos:

$$\begin{aligned}
 I_{-1}(L, R; \mu) &= E_1(\mu(L - R)) - E_1(\mu(L + R)) \\
 &= -2 E_1'(\mu L) \mu R - \frac{1}{3} E_1'''(\mu L) [\mu R]^3 \\
 &= \left[2 \frac{R}{L} + \frac{1}{3} \frac{R^3}{L^3} (2 + 2\mu L + \mu^2 L^2) \right] e^{-\mu L} \\
 &= \frac{e^{-\mu L}}{\mu L} \left[2\mu R + \frac{1}{3} \left(1 + \frac{2}{\mu L} + \frac{2}{\mu^2 L^2} \right) \mu^3 R^3 \right]. \quad (\text{C.9})
 \end{aligned}$$

Aproximación de $I_0(L, R; \mu)$

Primeramente desarrollaremos en series de potencias de μR las exponenciales de la Ec.(C.4):

$$\begin{aligned}
 e^{\mu R} &\simeq 1 + \mu R + \frac{1}{2} \mu^2 R^2 + \frac{1}{6} \mu^3 R^3 + \dots \\
 e^{-\mu R} &\simeq 1 - \mu R + \frac{1}{2} \mu^2 R^2 - \frac{1}{6} \mu^3 R^3 + \dots
 \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

por tanto

$$e^{\mu R} - e^{-\mu R} \simeq 2\mu R + \frac{1}{3} \mu^3 R^3 + O(\mu R)^5, \quad (\text{C.11})$$

que desechando los términos $O(\mu R)^5$ finalmente se obtiene:

$$I_0(L, R; \mu) \simeq \frac{e^{-\mu L}}{\mu} \left(2\mu R + \frac{1}{3} \mu^3 R^3 \right). \quad (\text{C.12})$$

Aproximaciones de $I_n(L, R; \mu)$ para $n = 1, 2, 3$

Calculamos inicialmente la relación de recurrencia expresada en la Ec.(4.23) para $n = 1$. Esto es:

$$I_1(L, R; \mu) = \frac{e^{-\mu L}}{\mu} \left[(L - R) e^{\mu R} - (L + R) e^{-\mu R} + \frac{1}{\mu} (e^{\mu R} - e^{-\mu R}) \right], \quad (\text{C.13})$$

y sustituyendo en ella los desarrollos en serie de las Ec.(C.10), donde despreciamos los términos $O(\mu R)^5$, finalmente obtenemos la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned}
 I_1(L, R; \mu) &\simeq e^{-\mu L} \left[2LR + \frac{1}{3} \mu^2 R^3 L - \frac{2}{3} \mu R^3 \right] \\
 &\simeq \frac{2e^{-\mu L}}{\mu^2} \left[\mu^2 LR + \left(\frac{\mu L}{6} - \frac{1}{3} \right) \mu^3 R^3 \right]. \quad (\text{C.14})
 \end{aligned}$$

Siguiendo el mismo procedimiento para $n = 2, 3$ obtenemos:

$$I_2(L, R; \mu) \simeq \frac{2e^{-\mu L}}{\mu^3} \left[\mu^3 L^2 R + \left(\frac{\mu^2 L^2}{6} - \frac{2}{3} \mu L + \frac{1}{3} \right) \mu^3 R^3 \right], \quad (\text{C.15})$$

$$I_3(L, R; \mu) \simeq \frac{2e^{-\mu L}}{\mu^4} \left[\mu^4 L^3 R + \left(\mu L - \mu^2 L^2 + \frac{1}{3} \mu^3 L^3 \right) \mu^3 R^3 \right]. \quad (\text{C.16})$$

C.2. Integrales $J_n(x, y, z; \mu)$

En el desarrollo de la sección 4.3 del capítulo 4 se introdujeron las integrales $J_n(x, y, z; \mu)$, definidas de una forma general como:

$$J_n(x, y, z; \mu) = \int_{x-y}^{x+y} r^n [E_1(\mu r - \mu z) - E_1(\mu r + \mu z)] dr, \quad (\text{C.17})$$

Separamos esta integral en dos contribuciones, es decir:

$$J_n(x, y, z; \mu) = J_n^+(x, y, z; \mu) - J_n^-(x, y, z; \mu), \quad (\text{C.18})$$

donde

$$J_n^+(x, y, z; \mu) = \int_{x-y}^{x+y} r^n E_1(\mu r - \mu z) dr$$

y

$$J_n^-(x, y, z; \mu) = J_n^+(x, y, -z; \mu). \quad (\text{C.19})$$

Desarrollando la *Integral exponencial* podemos expresarla como:

$$\begin{aligned} J_n^+(x, y, z; \mu) &= \int_{x-y}^{x+y} r^n dr \int_1^\infty dt \frac{e^{-(\mu r - \mu z)t}}{t} \\ &= \int_1^\infty \frac{e^{\mu z t}}{t} dt \int_{x-y}^{x+y} r^n e^{-\mu r t} dr \\ &= \int_1^\infty \frac{e^{\mu z t}}{t} dt I_n(x, y; \mu t). \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Como vemos, nos vuelve a aparecer la integral $I_n(x, y; \mu t)$ pero ahora en función de μt . El siguiente paso es usar la relación de recurrencia expresada en la Ec.(4.23) para I_n y sustituirla en la ecuación anterior. Esto es:

$$J_n^+(x, y, z; \mu) = \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!} \frac{1}{\mu^{n-j+1}} \left[(x-y)^j \int_1^\infty \frac{e^{-\mu(x-y-z)t}}{t^{n-j+2}} dt \right]$$

$$\begin{aligned}
& - (x + y)^j \int_1^\infty \frac{e^{-\mu(x+y-z)t}}{t^{n-j+2}} dt \Big] \\
& = \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!} \frac{1}{\mu^{n-j+1}} \left[(x - y)^j E_{n-j+2}(\mu(x - y - z)) \right. \\
& \quad \left. - (x + y)^j E_{n-j+2}(\mu(x + y - z)) \right]. \tag{C.21}
\end{aligned}$$

Calculando J_n^- mediante la Ec.(C.19) y sustituyéndolas en la Ec.(C.18), obtenemos finalmente la expresión general de $J_n(x, y, z; \mu)$:

$$\begin{aligned}
J_n(x, y, z; \mu) & = \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!} \frac{1}{\mu^{n-j+1}} \left\{ (x - y)^j [E_{n-j+2}(\mu(x - y - z)) \right. \\
& \quad \left. - E_{n-j-2}(\mu(x - y + z))] \right. \\
& \quad \left. - (x + y)^j [E_{n-j-2}(\mu(x + y - z)) - E_{n-j-2}(\mu(x + y + z))] \right\}, \tag{C.22}
\end{aligned}$$

donde, para el caso concreto de las dos esferas estudiado en la sección 4.3 (ver figura 4.2), $x = D$, $y = R_S$ y $z = R_T$. Aplicando estos cambios y expresando esta ecuación en el subíndice $k = n - j$ para compactar un poco su escritura, obtenemos finalmente las ecuaciones (4.47), (4.50) y (4.51) de la sección referida.

Bibliografía

- [1] Tervo J. *On coupled Boltzmann transport equation related to radiation therapy*. J. Math. Anal. Appl, 335:819–840, 2007.
- [2] Vassiliev O N, Wareing T A, McGhee J, Failla G, Salehpour M R, and Mourtada F. *Validation of a new grid-based Boltzmann equation solver for dose calculation in radiotherapy with photon beams*. Phys. Med. Biol., 55:581–598, 2010.
- [3] Stathakis S, Esquivel C, Quino L V, Myers P, Calvo O, Mavroidis P, Gutiérrez N, and Papanikolaou N. *Accuracy of the small field dosimetry using the Acuros XB dose calculation algorithm within and beyond heterogeneous media for 6 MV photon beams*. Scientific Research Publishing, 2012.
- [4] Lewis E E and Miller W F. *Computational methods of neutron transport*. John Wiley and Sons, Inc., New York, NY, 1984.
- [5] Youssef M Z, Feder R, and Davis I M. *Neutronics analysis of the international thermonuclear experimental reactor (ITER) MCNP Benchmark CAD Model with the ATTILA discrete ordinance code*. Fusion Eng. Des., 83:1661–1668, 2008.
- [6] Joshi A, Rasmussen J C, Sevick-Muraca E M, Wareing T A, and McGhee J. *Radiative transport-based frequency-domain fluorescence tomography*. Phys. Med. Biol., 53:2069–2088, 2008.
- [7] Gifford K A, Horton J L, Wareing T A, Failla G, and Mourtada F. *Comparison of a finite-element multigroup discrete-ordinates code with Monte Carlo for radiotherapy calculations*. Phys. Med. Biol., 51:2253–2265, 2006.
- [8] Vassiliev O N, Wareing T A, Davis I M, McGhee J, Barnett D, Horton J L, Gifford K, Failla G, Titt U, and Mourtada F. *Feasibility of a multigroup deterministic solution method for three-dimensional radiotherapy dose calculations*. Int. J. Rad. Oncol. Biol. Phys, 72:220–227, 2008.
- [9] Andreo P. *Monte Carlo techniques in medical radiation physics*. Phys. Med. Biol., 36:861–920, 1991.
- [10] Bielajew A F. *Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*. Citeseer, 2001. The University of Michigan.

-
- [11] Seltzer S M. *Monte Carlo modeling for intravascular brachytherapy sources*. US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology, 2002.
- [12] Salvat F, Fernández-Varea J M, and Sempau J. *PENELOPE-2011: A Code System for Monte-Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. NEA-OECD, Paris, 2011.
- [13] García-Pareja S, Vilches M, and Lallena A M. *Ant colony method to control variance reduction techniques in the Monte Carlo simulation of clinical electron linear accelerators*. Nucl. Inst. Meth. in Phys. Res. A, 580:510–513, 2007.
- [14] Díaz-Londoño G, García-Pareja S, Salvat F, and Lallena A M. *Monte Carlo calculation of specific absorbed fractions: variance reduction techniques*. Phys. Med. Biol., 60:2625–2644, 2015.
- [15] Seltzer S M. *Electron-photon Monte Carlo calculations: The ETRAN code*. Int. J. of Rad. Appl. and Inst. Part A. Appl. Rad. Isotop., 42:917–941, 1991.
- [16] Nelson W R, Hirayama H, and Rogers D W O. *EGS4 code system*. Technical report, Stanford Linear Accelerator Center, Menlo Park, (CA, USA), 1985.
- [17] Kawrakow I. *Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version*. Med. Phys., 27:485–498, 2000.
- [18] Giani S et al. *GEANT Detector Description and Simulation Tool, CERN Program Library Long Writeup*. Technical report, CERN, 1994.
- [19] Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, Asai M, Axen D, Banerjee S, Barrand G, et al. *GEANT4 a simulation toolkit*. Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. A, 506:250–303, 2003.
- [20] Pelowitz D B et al. *MCNPX users manual*. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (CA, USA), 2005.
- [21] Salvat F, Fernández-Varea J M, Acosta E, and Sempau J. *PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. NEA-OECD, Paris, 2001.
- [22] Lu L. *Dose calculation algorithms in external beam photon radiation therapy*. Int. J. Cancer Ther. Oncol., 1:1025–1028, 2013.
- [23] Cunningham J R. *Scatter-air ratios*. Phys. Med. Biol., 17:42–51, 1972.
- [24] Khan F M, Levitt S H, Moore V C, and Jones Jr T K. *Computer and Approximation Methods of Calculating Depth Dose in Irregularly Shaped Fields 1*. Radiology, 106:433–436, 1973.

- [25] Clarkson J R. *A note on depth doses in fields of irregular shape*. Brit. J. Radiol., 14:265–268, 1941.
- [26] Johns H E, Whitmore G F, Watson T A, and Umberg F H. *A system of dosimetry for rotation therapy with typical rotation distributions*. J. Can. Assoc. Radiol., 4:1–14, 1953.
- [27] Karzmark C J, Deubert A, and Loevinger R. *TISSUE-PHANTOM RATIOS—AN AID TO TREATMENT PLANNING*. Brit. J. Radiol., 38:158–159, 1965.
- [28] Holt J G, Laughlin J S, and Moroney J P. *The Extension of the Concept of Tissue-Air Ratios (TAR) to High-Energy X-Ray Beams 1*. Radiology, 96:437–446, 1970.
- [29] Berger M J. *Energy deposition in water by photons from point isotropic sources. MIRD Pamphlet No. 2*. J. Nucl. Med, Suppl.1:17–25, 1968.
- [30] Harima Y. *An historical review and current status of buildup factor calculations and applications*. Radiat. Phys. Chem., 41:631–672, 1993.
- [31] Sabariego M P, Porrás I, and Lallena A M. *Calculation of the scatter dose and the buildup factors for monoenergetic photon sources using the Monte Carlo code PENELOPE*. Rev. Fis. Med, 8:349–355, 2007.
- [32] Ahnesjö A and Aspradakis M M. *Dose calculations for external photon beams in radiotherapy*. Phys. Med. Biol., 44:R99–R155, 1999.
- [33] Ahnesjö A. *Collapsed cone convolution of radiant energy for photon dose calculation in heterogeneous media*. Med. Phys., 16:577–592, 1989.
- [34] Mohan R, Chui C, and Lidofsky L. *Differential pencil beam dose computation model for photons*. Med. Phys., 13:64–73, 1986.
- [35] Bortfeld T, Schlegel W, and Rhein B. *Decomposition of pencil beam kernels for fast dose calculations in three-dimensional treatment planning*. Med. Phys., 20:311–318, 1993.
- [36] Ahnesjö A, Saxner M, and Trepp A. *A pencil beam model for photon dose calculation*. Med. Phys., 19:263–273, 1992.
- [37] Bourland J D and Chaney E L. *A finite-size pencil beam model for photon dose calculations in three dimensions*. Med. Phys., 19:1401–1412, 1992.
- [38] Sievinen J, Ulmer W, and Kaissl W. *AAA photon dose calculation model in Eclipse™*. Palo Alto (CA, USA): Varian Medical Systems, 2005. Document ID: D CS71-AAAWP, Version: 0.1.
- [39] Ulmer W and Harder D. *A triple Gaussian pencil beam model for photon beam treatment planning*. Z. Med. Phys., 5:25–30, 1995.

- [40] Mackie T R, Reckwerdt P J, Holmes T W, and Kubsad S S. *Review of convolution/superposition methods for photon beam dose computation*. Proceedings of the Xth ICCR, pages 20–23, 1990.
- [41] Ahnesjö A. *Collapsed cone convolution of radiant energy for photon dose calculation in heterogeneous media*. Med. Phys., 16:577–592, 1989.
- [42] McNutt T. *The ADAC Pinnacle3 collapsed cone convolution superposition dose model*. ADAC Radiation Therapy Products, <http://www.medical.philips.com>, 2004.
- [43] Mackie T R, Bielajew A F, Rogers D W O, and Battista J J. *Generation of photon energy deposition kernels using the EGS Monte Carlo code*. Phys. Med. Biol., 33:1–20, 1988.
- [44] Sabariego M P, Porrás I, and Lallena A M. *Simple analytical expressions for the dose of point photon sources in homogeneous media*. Phys. Med. Biol., 53:6113–6128, 2008.
- [45] Nizín P S. *Phenomenological dose model for therapeutic photon beams: Basic concepts and definitions*. Med. Phys., 26:1893–900, 1999.
- [46] Spencer L V and Fano U. *Penetration and diffusion of X-rays. Calculation of spatial distributions by polynomial expansion*. J. Res. Natl. Bur. Stand., 46:446–456, 1951.
- [47] Loevinger R and Berman M. *A schema for absorbed-dose calculations for biologically distributed radionuclides. MIRD Pamphlet No. 1*. J. Nucl. Med, Suppl.1:9–14, 1968.
- [48] Li Z, Williamson J F, and Perera H. *Monte Carlo calculation of kerma to a point in the vicinity of media interfaces*. Phys. Med. Biol., 38:1825–1840, 1993.
- [49] Rivard M J, Granero D, Perez-Calatayud J, and Ballester F. *Influence of photon energy spectra from brachytherapy sources on Monte Carlo simulations of kerma and dose rates in water and air*. Med. Phys., 37:869–876, 2010.
- [50] Berger M J, Coursey J S, Zucker M A, and Chang J. *ESTAR: Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions*. NIST Internal Report 4999, Gaithersburg Online at <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star>, 2005.
- [51] Hubbell J H and Berger M J. *Photon Attenuation and Energy Absorption Coefficients. NBS Report 8681*. (publicado como Secciones 4.1 y 4.2 en el IAEA Engineering Compendium of Radiation Shielding, Vol.1:167. Springer; obtenidos de la Ref. [29]), 1966.
- [52] Hubbell J H and Seltzer S M. *Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass-Energy Absorption Coefficients*. NIST Internal Report 5632, Gaithersburg, 1996.

- [53] Luxton G and Jozsef G. *Radial dose distribution, dose to water and dose rate constant for monoenergetic photon point sources from 10 keV to 2 MeV: EGS4 Monte Carlo model calculation*. Med. Phys, 26:2531–2538, 1988.
- [54] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, and Flannery B P. *Numerical Recipes in FORTRAN. The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [55] Berger M J, Seltzer S M, Chang J, Coursey J S, Sukumar R, and Zucker D S. *XCOM: Photon Cross Section Database version 1.3*. (Gaithersburg:NIST) Online at <http://physics.nist.gov/xcom>, 2005.
- [56] Hubbell J H and Seltzer S M. *Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass-Energy Absorption Coefficients version 1.4*. (Gaithersburg:NIST) Online at <http://physics.nist.gov/xaamdi>, 2004.
- [57] Sabariego M P, Porrás I, and Lallena A M. *On the shape of the Task Group 43 anisotropy factor for linear brachytherapy sources at short distances*. Brachytherapy, 13:424–429, 2014.
- [58] Williamson J F. *Brachytherapy technology and physics practice since 1950: a half-century of progress*. Phys. Med. Biol., 51:R303–R325, 2006.
- [59] Perez-Calatayud J, Ballester F, Das R K, DeWerd L A, Ibbott G S, Meigooni A S, Ouhib Z, Rivard M J, Sloboda R S, and Williamson J F. *Dose calculation for photon-emitting brachytherapy sources with average energy higher than 50 keV: Report of the AAPM and ESTRO*. Med. Phys., 39:2904–2929, 2012.
- [60] Awan S B, Hussain M, Dini S A, and Meigooni A S. *Historical review of interstitial prostate brachytherapy*. Iran. J. of Radiat. Res., 5:153–168, 2008.
- [61] Williamson J F. *History of dose specification in Brachytherapy: From Threshold Erythema Dose to Computational Dosimetry*. In Med. Phys.: Ninth Mexican Symposium on Medical Physics, volume 854, pages 3–12. AIP Publishing, 2006.
- [62] Thomadsen B R, Williamson J F, Rivard M J, and Meigooni A S. *Anniversary paper: past and current issues, and trends in brachytherapy physics*. Med. Phys., 35:4708–4723, 2008.
- [63] Beaulieu L, Tedgren Å C, Carrier J F, Davis S D, Mourtada F, Rivard M J, Thomson R M, Verhaegen F, Wareing T A, and Williamson J F. *Report of the Task Group 186 on model-based dose calculation methods in brachytherapy beyond the TG-43 formalism: Current status and recommendations for clinical implementation*. Med. Phys., 39:6208–6236, 2012.
- [64] Rivard M J, Venselaar J L M, and Beaulieu L. *The evolution of brachytherapy treatment planning*. Med. Phys., 36:2136–2153, 2009.

- [65] Rivard M J, Coursey B M, DeWerd L A, Hanson W F, Huq M S, Ibbott G S, Mitch M G, Nath R, and Williamson J F. *Update of AAPM Task Group Nr. 43 Report: A revised protocol for brachytherapy dose calculations*. Med. Phys, 31:633–674, 2004.
- [66] Nath R, Anderson L L, Luxton G, Weaver K A, Williamson J F, and Meigooni A S. *Dosimetry of interstitial brachytherapy sources: Recommendations of the AAPM Radiation Therapy Committee Task Group 43*. Med. Phys, 22:209–234, 1995.
- [67] Rivard M J, Butler W M, DeWerd L A, Huq M S, Ibbott G S, Meigooni A S, Melhus C S, Mitch M G, Nath R, and Williamson J F. *Supplement to the 2004 Update of AAPM Task Group Nr. 43 Report*. Med. Phys, 36:2187–2205, 2007.
- [68] Williamson J F, Butler W M, DeWerd L A, Huq M S, Ibbott G S, Zuofeng L, Mitch M G, Nath R, Rivard M J, and Todor D. *Recommendations of the American Association of Physicist in Medicine regarding the impact of implementing the 2004 Task Group 43 Report on Dose Specification for ^{103}Pd and ^{125}I interstitial Brachytherapy*. Med. Phys, 32:1424–1439, 2005.
- [69] Chiu-Tsao S T, Schaart D R, Soares C G, and Nath R. *Dose Calculation Formalisms and consensus dosimetry parameters for intravascular brachytherapy dosimetry: Recommendations of the AAPM Therapy Physics Committee Task Group N $^{\circ}$ 149*. Med. Phys, 11:4126–4157, 2007.
- [70] Toossi M T B, Ghorbani M, Mowlavi A A, Taheri M, Layegh M, Makhdoumi Y, and Meigooni A S. *Air kerma strength characterization of a GZP6 Cobalt-60 brachytherapy source*. Rep. Pract. Oncol. & Radiot., 15:190–194, 2010.
- [71] Williamson J F and Nath R. *Clinical implementation of AAPM Task Group 32 recommendations on brachytherapy source strength specification*. Med. Phys., 18:439–448, 1991.
- [72] Furhang E E and Anderson L L. *Functional fitting of interstitial brachytherapy dosimetry data recommended by the AAPM Radiation Therapy Committee Task Group 43*. Med. Phys., 26:153–160, 1999.
- [73] Moss D C. *Technical note: improved analytical fit to the TG-43 radial dose function, $g(r)$* . Med. Phys., 27:659–661, 2000.
- [74] Meigooni A S, Zhang H, Perry C, Dini S A, and Koona R A. *Theoretical and experimental determination of dosimetric characteristics for brachyseed Pd-103, model Pd-1, source*. Appl. Radiat. Isot, 58:533–541, 2003.
- [75] Taylor R E and Rogers D W. *More accurate fitting of I125 and Pd103 radial dose functions*. Med. Phys., 35:4242–4250, 2008.

- [76] Juan-Senabre X J, Porrás I, and Lallena A M. *A simple modification of TG-43 based brachytherapy dosimetry with improved fitting functions: Application to the selected Seed source*. Phys. Medica, 29:403–411, 2013.
- [77] Rivard M J. *Monte Carlo radiation dose simulations and dosimetric comparison of the model 6711 and 9011 ^{125}I Brachytherapy sources*. Med. Phys, 36:486–491, 2009.
- [78] Monte Carlo Team. *MCNP—A General Purpose Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*. Technical report, LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory (NM, USA), 2003.
- [79] Hänscheid H and Lassmann M and Luster M and Thomas S R and Pacini F and Ceccarelli C and Ladenson P W and Wahl R L and Schlumberger M and Ricard M and others. *Iodine biokinetics and dosimetry in radioiodine therapy of thyroid cancer: procedures and results of a prospective international controlled study of ablation after rhTSH or hormone withdrawal*. J. Nucl. Med., 47:648–654, 2006.
- [80] Siegel J A, Thomas S R, Stubbs J B, Stabin M G, Hays M T, Koral K F, Robertson J S, Howell R W, Wessels B W, Fisher D R, et al. *MIRD pamphlet no. 16: Techniques for quantitative radiopharmaceutical biodistribution data acquisition and analysis for use in human radiation dose estimates*. J. Nucl. Med., 40:37S–61S, 1999.
- [81] Snyder W S, Fisher Jr H L, Ford M R, and Warner G G. *Estimates of absorbed fractions for monoenergetic photon sources uniformly distributed in various organs of a heterogeneous phantom*. J. Nucl. Med., Suppl.3:7–52, 1969.
- [82] King L V. *Absorption problems in radioactivity*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 23:242–250, 1912.
- [83] Abramovich M and Stegun I. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, graphs and mathematical Tables, National Bureau of Standards*. Dover, New York, 1964.
- [84] Barth R F, Coderre J A, Vicente M G, and Blue T E. *Boron neutron capture therapy of cancer: current status and future prospects*. Clin. Cancer Res., 11:3987–4002, 2005.
- [85] Barth R F, Vicente M G, Harling O K, Kiger W S, Riley K J, Binns P J, Wagner F M, Suzuki M, Aihara T, Kato I, et al. *Current status of boron neutron capture therapy of high grade gliomas and recurrent head and neck cancer*. Radiat. Oncol, 7:1–21, 2012.
- [86] Chadwick M B, Obložinský P, Herman M, Greene N M, McKnight R D, Smith D L, Young P G, MacFarlane R E, Hale G M, Frankle S C, et al. *ENDF/B-VII. 0: Next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology*. Nucl. Data Sheets, 107:2931–3060, 2006.

- [87] Seppala T. *FIR 1 Epithermal neutron beam model and dose calculation for treatment planning in neutron capture therapy*. Technical report, Report series in physics, University of Helsinki HU-P-D103, 2002.
- [88] Moss R L, Aizawa O, Beynon D, Brugger R, Constantine G, Harling O, Liu H B, and Watkins P. *The requirements and development of neutron beams for neutron capture therapy of brain cancer*. J. Neuro-oncol., 33:27–40, 1997.
- [89] Nigg D W, Blaumann H, Larrieu O C, Longhino J, Wemple C A, and Ribeiro S. *Collaborative Neutronic Performance Characterization of the CNEA Epithermal-Neutron Beam Facility for BNCT*. INEEL BNCT Research Program Annual Report, CY-2000, page 70, 2001.
- [90] Raaijmakers C P J, Konijnenberg M W, and Mijnheer B J. *Clinical dosimetry of an epithermal neutron beam for neutron capture therapy: dose distributions under reference conditions*. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys, 37:941–951, 1997.
- [91] Zamenhof R, Redmond E, Solares G, Katz D, Riley K, Kiger S, and Harling O. *Monte Carlo-based treatment planning for boron neutron capture therapy using custom designed models automatically generated from CT data*. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys, 35:383–397, 1996.
- [92] Venhuizen J R, Wessol D E, Wemple C A, Wheeler F J, Harkin G J, Frandsen M W, Albright C L, Cohen M T, Rossmeyer M, and Cogliati J J. *SERA: Simulation Environment for Radiotherapy Applications-Users Manual Version 1CO*. Technical report, Idaho National Laboratory (INL), 2002.
- [93] Goorley J T, Kiger W S, and Zamenhof R G. *Reference dosimetry calculations for neutron capture therapy with comparison of analytical and voxel models*. Med. Phys., 29:145–156, 2002.
- [94] American Association of Physicists in Medicine et al. *Protocol for neutron beam dosimetry*. AAPM Report, 7, 1980.
- [95] Koivunoro H, Seppälä T, Uusi-Simola J, Merimaa K, Kotiluoto P, Serén T, Kor-tesniemi M, Auterinen I, and Savolainen S. *Validation of dose planning calculations for boron neutron capture therapy using cylindrical and anthropomorphic phantoms*. Phys. Med. Biol., 55:3515–3533, 2010.
- [96] Koivunoro H, Auterinen I, Kosunen A, Kotiluoto P, Savolainen S, et al. *Computational study of the required dimensions for standard sized phantoms in boron neutron capture therapy dosimetry*. Phys. Med. Biol., 48:N291–N300, 2003.
- [97] Burian J, Flibor S, Marek M, Rejchrt J, Viererbl L, and Tomandl I. *Physics for BNCT*. J. Phys: Conf. Series, 41:174–186, 2006.
- [98] II ICRU. *Tissue Substitutes in Radiation Dosimetry and Measurement*. International Commission on Radiation Units and Measurements, 1989.

-
- [99] Porras I. *Sulfur-33 nanoparticles: A Monte Carlo study of their potential as neutron capturers for enhancing boron neutron capture therapy of cancer*. Appl. Radiat. and Isot, 69:1838–1841, 2011.
- [100] Carlsson A K and Ahnesjö A. *Point Kernels and superposition methods for scatter dose calculations in brachytherapy*. Phys. Med. Biol, 45:357–382, 2000.
- [101] Fano U. *Note on the Bragg-Gray cavity principle for measuring energy dissipation*. Radiat. Res., 1:237–240, 1954.
- [102] O'Connor J E. *The variation of scattered x-rays with density in an irradiated body*. Phys. Med. Biol., 1:352–369, 1957.
- [103] Nilsson M and Knoos T. *Application of the Fano theorem in inhomogeneous media using a convolution algorithm*. Phys. Med. Biol., 37:69–83, 1992.