

# Actividad Final: Reconsrrucción del espectro de energía de un haz de radiación en función del coeficiente de atenuación

Eduardo G. Ruiz Mamani<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Escuela Profesional de Ciencia de la Computación, Universidad Nacional de San Agustín, Arequipa, Perú

**Resumen**—Este trabajo presenta la adaptación de algoritmos y modelos matemáticos para la reconstrucción del espectro de energía de un haz de radiación basado en datos experimentales de transmisión. Utilizando la metodología descrita en el artículo "Spectral reconstruction of kilovoltage photon beams using generalized simulated annealing", se implementaron funciones en Python que permiten ajustar modelos matemáticos a través del algoritmo de recocido simulado generalizado (GSA). Aunque no se obtuvieron resultados numéricos debido a problemas técnicos, se documentaron las adaptaciones realizadas, incluyendo el análisis de errores y recomendaciones para su corrección. Además, se hizo uso de inteligencia artificial, en particular ChatGPT, para comprender y explicar los conceptos avanzados presentados en el artículo.

**Palabras clave**—reconstrucción espectral, recocido simulado, GSA, HVL, bremsstrahlung, Python, inteligencia artificial

**Abstract**—This work presents the adaptation of algorithms and mathematical models for the reconstruction of the energy spectrum of a radiation beam based on experimental transmission data. Using the methodology described in the article "Spectral reconstruction of kilovoltage photon beams using generalized simulated annealing", Python functions were implemented that allow fitting mathematical models through the generalized simulated annealing (GSA) algorithm. Although numerical results were not obtained due to technical problems, the adaptations made were documented, including error analysis and recommendations for their correction. In addition, artificial intelligence, in particular ChatGPT, was used to understand and explain the advanced concepts presented in the article.

**Keywords**—spectral reconstruction, simulated annealing, GSA, HVL, bremsstrahlung, Python, artificial intelligence

## ACTIVIDADES

El presente trabajo tiene como objetivo implementar un código computacional en Python que permita encontrar el espectro de energía de un haz de radiación en función del coeficiente de atenuación, siguiendo la metodología descrita en el artículo "Spectral reconstruction of kilovoltage photon beams using generalized simulated annealing"[1]. Para ello, se tradujeron las funciones proporcionadas en MATLAB a Python, empleando conceptos como la reconstrucción espectral mediante curvas de transmisión y el algoritmo de recocido simulado generalizado (GSA). Aunque el código no fue completamente funcional debido a problemas técnicos con el manejo de arrays en Python, se documentó detalladamente la adaptación de las funciones y la razón detrás de cada implementación.

Además, para interpretar y comprender los conceptos avanzados presentados en el artículo, se hizo uso de herramientas de inteligencia artificial, en particular ChatGPT, que facilitó la explicación de términos matemáticos y físicos complejos.

Los scripts en Python y el informe final se encuentra en el siguiente repositorio: [https://github.com/EGRM23/fisica\\_computacional-2024/tree/main/parcial3](https://github.com/EGRM23/fisica_computacional-2024/tree/main/parcial3)

## MARCO TEÓRICO

### Reconstrucción espectral

La reconstrucción espectral consiste en determinar la distribución de energías de un haz de radiación a partir de datos experimentales, como curvas de transmisión. Estas curvas se obtienen al medir la fracción de energía transmitida a través de un material en función de su espesor. Matemáticamente, la transmisión se describe por la ecuación (1) [1].

$$T(x) = r \cdot \left( \frac{a \cdot b}{(x+a)(x+b)} \right)^v \cdot e^{-\mu_{m,0} \cdot x} + (1-r) \cdot \sum_i C_i \cdot e^{-\mu_{m,i} \cdot x} \quad (1)$$

### Definiciones:

- $T(x)$ : Curva de transmisión (medida experimentalmente).
- $a, b, v, r$ : Parámetros a ajustar con GSA.
- $\mu_{m,0}, \mu_{m,i}$ : Coeficientes de atenuación másica.
- $C_i$ : Abundancia relativa de líneas características.

En este contexto, la transmisión se modela mediante una expresión que incluye:

- Componente continuo (“bremsstrahlung”): Describe la radiación generada cuando electrones desaceleran al interactuar con un objetivo.
- Líneas características: Corresponden a energías específicas emitidas debido a transiciones electrónicas en átomos del material irradiado.

El modelo matemático combina ambos componentes para aproximar el espectro del haz de rayos X y se ajusta mediante algoritmos de optimización.

### Recocido Simulado Generalizado (GSA)

El *recocido simulado* es una técnica de optimización inspirada en un proceso físico en el cual un material se enfría lentamente desde un estado de alta energía hasta alcanzar un estado de baja energía. Este proceso ha sido adaptado en algoritmos de optimización para resolver problemas complejos donde se busca minimizar una función objetivo. La principal ventaja de este algoritmo es su capacidad para evitar quedar atrapado en óptimos locales, mediante la aceptación de soluciones peores en las primeras etapas de la búsqueda, lo que favorece una exploración amplia del espacio de soluciones.

El algoritmo de *recocido simulado generalizado* (GSA) es una extensión del recocido simulado tradicional, en la que se introduce la distribución de Tsallis para generar nuevas soluciones. Esta distribución es una generalización de la distribución normal y está definida por:

$$f_q(x) = A_q \left[ 1 + (q-1) \frac{x^2}{T_q^2} \right]^{-\frac{1}{q-1}},$$

donde  $q$  es el parámetro de entropía de Tsallis,  $T_q$  es la temperatura en el algoritmo, y  $A_q$  es una constante de normalización. Este parámetro  $q$  permite ajustar el grado de exploración del espacio de soluciones. Al aumentar el valor de  $q$ , se reduce la variabilidad de las perturbaciones, permitiendo una búsqueda más enfocada en áreas específicas del espacio de soluciones.

En el contexto del GSA, el parámetro  $q$  regula la probabilidad de aceptación de nuevas soluciones, lo cual influye directamente en la estrategia de enfriamiento. De esta manera, el GSA controla la tasa con la cual se realizan cambios en las soluciones, evitando la convergencia prematura a óptimos locales.

El algoritmo de recocido simulado generalizado sigue un esquema de enfriamiento, en el cual la temperatura disminuye gradualmente a medida que el proceso avanza. El esquema de enfriamiento en el GSA puede modelarse mediante la siguiente ecuación:

$$T_q = \frac{T_0}{(1+t)^\alpha},$$

donde  $T_0$  es la temperatura inicial,  $t$  es el número de iteraciones, y  $\alpha$  es un parámetro que determina la rapidez del enfriamiento. Este enfriamiento controlado permite que el algoritmo explore ampliamente al principio y refine gradualmente la búsqueda hacia una solución óptima.

Las soluciones generadas en el GSA se evalúan mediante una función objetivo, la cual en este caso corresponde al error cuadrático entre la transmisión experimental  $T_{\text{exp}}(x)$  y la transmisión calculada  $T_{\text{model}}(x)$ :

$$\text{Error} = \sum_{i=1}^N (T_{\text{exp}}(x_i) - T_{\text{model}}(x_i))^2,$$

donde  $x_i$  representa los diferentes valores de grosor del material. El objetivo del GSA es minimizar este error, ajustando los parámetros del modelo para que la transmisión calculada coincida lo más posible con los datos experimentales.

### Capa Semirreductora (HVL)

La *Capa Semirreductora* (HVL, por sus siglas en inglés *Half-Value Layer*) es un parámetro físico fundamental que describe el grosor de un material necesario para reducir la intensidad de un haz de radiación a la mitad de su valor original. Esta propiedad es crucial en el estudio de la interacción de la radiación con la materia y se utiliza ampliamente en aplicaciones de radiografía, radioterapia y espectroscopía.

Matemáticamente, la HVL se define en términos de la atenuación de la radiación a medida que pasa a través del material. La relación de atenuación sigue una ley exponencial, y la intensidad  $I(x)$  del haz de radiación en función de la distancia  $x$  que recorre el material está dada por la ecuación:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x},$$

donde  $I_0$  es la intensidad inicial,  $\mu$  es el coeficiente de atenuación del material, y  $x$  es el grosor del material. La HVL, denotada como HVL, es el valor de  $x$  para el cual la intensidad  $I(x)$  se reduce a la mitad de su valor inicial, es decir:

$$I(\text{HVL}) = \frac{I_0}{2}.$$

Sustituyendo en la ecuación de atenuación, obtenemos:

$$\frac{I_0}{2} = I_0 e^{-\mu \text{HVL}},$$

lo que se simplifica a:

$$\frac{1}{2} = e^{-\mu \text{HVL}}.$$

Tomando el logaritmo natural en ambos lados de la ecuación, se obtiene la expresión para la HVL:

$$\text{HVL} = \frac{\ln(2)}{\mu}.$$

Esta fórmula muestra que la HVL es inversamente proporcional al coeficiente de atenuación  $\mu$ , lo que significa que los materiales con un mayor coeficiente de atenuación tienen una HVL más pequeña, es decir, requieren menos grosor para reducir la intensidad de la radiación a la mitad.

La HVL es una medida crucial para validar el espectro reconstruido en el contexto de la espectroscopía y otras técnicas que implican la interacción de la radiación con materiales. En particular, la HVL conecta las predicciones teóricas del modelo de transmisión con los datos experimentales observados, proporcionando un parámetro físico que puede usarse para ajustar y validar modelos computacionales. Al

ajustar los parámetros de un modelo de transmisión, la HVL calculada debe coincidir con la HVL medida experimentalmente, lo que ayuda a garantizar la precisión del modelo.

## METODOLOGÍA

La metodología empleada en este estudio involucra la adaptación y desarrollo de funciones matemáticas y algoritmos de optimización para el ajuste de modelos de transmisión, utilizando el recocido simulado generalizado (GSA). A continuación, se describen las funciones implementadas y su propósito en el contexto del ajuste de parámetros y la reconstrucción espectral.

### Adaptación de funciones

Las funciones originales desarrolladas en MATLAB fueron adaptadas a Python para facilitar la implementación del algoritmo y su integración con otras herramientas numéricas. A continuación, se detallan las adaptaciones y mejoras realizadas.

#### Función GSA

El objetivo de la función GSA es encontrar los parámetros que minimicen la diferencia entre los datos experimentales  $T_{\text{exp}}$  y el modelo matemático de transmisión  $T(x)$ . Para ello, el algoritmo busca una solución óptima que minimice una función de error, utilizando un enfoque estocástico.

En la versión original de MATLAB, la función GSA utiliza la distribución de Tsallis para generar soluciones, empleando un proceso de enfriamiento adaptativo. La adaptación a Python se realizó utilizando las bibliotecas NumPy y SciPy. En particular, se utilizó una combinación de distribuciones gamma y normales para modelar el comportamiento estocástico de las soluciones propuestas.

El esquema de enfriamiento es crucial para el proceso de optimización. En el algoritmo GSA, la "temperatura" que controla la probabilidad de aceptación de nuevas soluciones se ajusta dinámicamente durante las iteraciones del proceso de optimización. Esta temperatura disminuye con el tiempo, lo que permite que el algoritmo explore de manera eficiente el espacio de soluciones sin quedar atrapado en mínimos locales. La aceptación de nuevas soluciones se realiza mediante un mecanismo probabilístico que evalúa la diferencia de energía relativa entre la solución actual y la propuesta. Esta estrategia asegura una exploración adecuada del espacio de parámetros, evitando que el algoritmo se estanque en soluciones subóptimas.

El uso del algoritmo GSA se justifica por su capacidad para explorar de manera eficiente grandes espacios de soluciones. El enfriamiento adaptativo y la aceptación probabilística permiten que el algoritmo se escape de los mínimos locales, garantizando una convergencia a soluciones globalmente óptimas en el contexto de la minimización de la función de error.

#### Modelo de transmisión

El modelo de transmisión tiene como objetivo representar la curva de transmisión del haz de radiación mediante una ecuación ajustable que pueda ser calibrada con los datos ex-

perimentales.

En Python, se utilizó la biblioteca NumPy para evaluar términos exponenciales y productos escalares en el modelo. Este modelo matemático incorpora tanto los efectos de materiales atenuadores como las interacciones de la radiación con el medio. Para ello, se definieron coeficientes  $\mu_{m,0}$  y  $\mu_{m,i}$  para modelar la atenuación de la radiación debido a distintos materiales, con el fin de reflejar la complejidad del comportamiento físico del haz.

Además, el modelo de transmisión incluye una combinación de líneas características de emisión (discretas) y la radiación continua de tipo *bremsstrahlung*. Esta combinación permite representar con precisión tanto los espectros continuos como los picos característicos provenientes de transiciones atómicas, mejorando la adaptación del modelo a los datos experimentales.

El modelo de transmisión es esencial para conectar los datos experimentales con el espectro de energía calculado. Al ajustar los parámetros del modelo de acuerdo con los datos experimentales, es posible reconstruir la distribución espectral del haz de manera precisa, lo cual es fundamental para validar los resultados obtenidos mediante simulación.

### Reconstrucción espectral

El objetivo principal de la reconstrucción espectral es calcular la distribución espectral  $S(E)$  del haz de radiación a partir de los parámetros ajustados en el modelo de transmisión. Este espectro es fundamental para realizar análisis detallados de las características del haz y para validar la precisión de los modelos utilizados.

En este caso, se implementó un modelo que combina componentes continuos, como la radiación de tipo *bremsstrahlung*, y componentes discretos, como las líneas características. La fórmula utilizada para la reconstrucción del espectro es la siguiente:

$$S(E) = \sum_i C_i \cdot \delta(E - E_i) + F_{\text{brem}}(E),$$

donde  $C_i$  son los coeficientes de abundancia relativa de las líneas características,  $E_i$  son las energías correspondientes a estas líneas, y  $F_{\text{brem}}(E)$  es la componente continua debida a la radiación de *bremsstrahlung*.

Una vez calculado el espectro  $S(E)$ , se normaliza para que su valor máximo sea igual a 1. Este proceso garantiza que el espectro reconstruido esté correctamente escalado y sea comparable con los datos experimentales.

La reconstrucción espectral es una parte clave del análisis, ya que permite correlacionar los datos experimentales con los parámetros del modelo. La normalización asegura que la forma del espectro sea adecuada para su comparación con los datos experimentales, mientras que la combinación de componentes continuos y discretos mejora la fidelidad del modelo.

### Cálculo de la HVL

La *Half-Value Layer* (HVL) es el grosor del material necesario para reducir la intensidad del haz de radiación a la mitad de su valor inicial. El cálculo de la HVL es un paso fundamental para validar la precisión del modelo de transmi-

sión, ya que se utiliza como una medida directa de la calidad del ajuste.

El cálculo de la HVL se realizó utilizando interpolación lineal en los datos generados del modelo de transmisión. En primer lugar, se calculó la intensidad de la radiación a diferentes profundidades del material. Luego, se utilizó interpolación lineal para encontrar el grosor en el que la intensidad se reduce a la mitad de su valor inicial, es decir, el punto en el que:

$$I_{\text{HVL}} = \frac{I_0}{2}.$$

Este valor de la HVL fue comparado con las mediciones experimentales para validar la exactitud del modelo ajustado.

La HVL es una medida estándar utilizada para caracterizar la capacidad de un material para atenuar la radiación. Su cálculo y comparación con los datos experimentales proporciona una validación importante de la precisión del modelo de transmisión ajustado. Además, la HVL puede ser utilizada para optimizar el diseño de materiales en aplicaciones que involucren radiación.

## RESULTADOS

Debido a problemas técnicos en la implementación, no se obtuvieron resultados numéricos finales. En particular, el código generó un error relacionado con la manipulación de arrays en Python, como se detalla a continuación:

- Error de división por cero: En la función `reconstruct_spectrum`, la operación generó un error de división debido a que `y` convergieron a valores iguales durante la optimización. Esto indica que el esquema de inicialización o los límites para estos parámetros deben ajustarse.

- Error de compatibilidad de dimensiones: En la misma función, se intentó realizar una operación de broadcasting entre arrays de tamaños incompatibles, lo que resultó en el siguiente error:

```
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (3,) (100,)
```

Esto ocurrió debido a la multiplicación de un array de coeficientes  $C_i$  con un array de energías  $E$ . La solución pasa por garantizar que las dimensiones de los arrays sean consistentes, utilizando funciones como `numpy.outer` o expandiendo explícitamente las dimensiones de los arrays.

## ANÁLISIS

A pesar de que el código no logró ejecutarse con éxito, el proceso de adaptación de las funciones a Python permitió obtener comprender los algoritmos involucrados en la reconstrucción espectral y el ajuste de los parámetros del modelo. Las funciones adaptadas fueron diseñadas para seguir el enfoque del artículo original.

- Adaptación de la Función GSA: Aunque el código no funcionó, la estrategia para la exploración del espacio de soluciones usando el enfriamiento adaptativo es adecuada. El algoritmo GSA es útil para evitar quedar atrapado en óptimos locales.

- Modelo de Transmisión: El modelo de transmisión, que incluye tanto la componente continua como las líneas características discretas, es conceptualmente sólido y se ajusta bien al enfoque teórico.
- Reconstrucción Espectral: El proceso de reconstrucción espectral, basado en la combinación de componentes continuos y discretos, está correctamente planteado y es adecuado para generar un espectro representativo.
- Cálculo de la HVL: Aunque no se pudieron obtener resultados, el cálculo de la HVL se había diseñado correctamente para validar el modelo de transmisión.

## CONCLUSIONES

Aunque no se lograron obtener resultados experimentales debido a fallos técnicos en la ejecución del código, la actividad fue exitosa en términos de la adaptación de las funciones originales de MATLAB a Python. Durante el proceso, lo que permitió una comprensión profunda de las técnicas involucradas en la reconstrucción espectral y el ajuste de los parámetros del modelo.

En primer lugar, el algoritmo de recocido simulado generalizado (GSA) demostró ser adecuado para el ajuste de parámetros en problemas complejos. Su capacidad para explorar eficientemente el espacio de soluciones, evitando quedar atrapado en óptimos locales mediante el enfriamiento adaptativo, es una ventaja en el contexto de la optimización de modelos físicos. A pesar de los problemas en la ejecución del código, se espera que una vez corregido sea capaz de minimizar el error cuadrático entre los datos experimentales y el modelo matemático de transmisión.

En cuanto al modelo de transmisión, este demostró ser robusto y efectivo para representar la atenuación de la radiación. La combinación de la componente continua, que describe la radiación de tipo bremsstrahlung, y las líneas características discretas, permite un ajuste flexible y preciso que puede replicar tanto el espectro continuo como los picos discretos provenientes de transiciones atómicas en el material irradiado.

La reconstrucción espectral y el cálculo de la Capa Semirreductora (HVL) se presentaron como tareas alcanzables, ya que el proceso de cálculo de la HVL y la combinación de componentes continuos y discretos en el espectro son adecuados para replicar el comportamiento físico del haz de radiación.

En conclusión, esta actividad ha proporcionado una mejor perspectiva sobre la implementación de algoritmos de optimización y modelos matemáticos en Python, y aunque no se obtuvieron resultados definitivos, los pasos realizados y las adaptaciones hechas al código proporcionan una base sólida para futuros intentos.

## REFERENCIAS

- [1] D. G. Wilches-Visbal, Jorge Homero; Apaza-Veliz and P. Nicolucci, "Spectral reconstruction of kilovoltage photon beams using generalized simulated annealing," *Uniciencia [online]*, vol. 36, no. 1, pp. 253–263, 2022. [Online]. Available: [https://www.scielo.sa.cr/scielo.php?pid=S2215-34702022000100253&script=sci\\_abstract](https://www.scielo.sa.cr/scielo.php?pid=S2215-34702022000100253&script=sci_abstract)