I-125

# Simulaciones

Se emiten desde cualquier punto de la semilla cilíndrica fotones con el espectro medido, tantos como sean necesarios para que lleguen a la zona de interés un número determinado. El objetivo es equilibrar la simulación y obtener la misma precisión sea cual sea el tamaño y la posición del voxel, aunque cuanto más lejos está de la semilla o más pequeño sea más fotones se desperdician y mas tarda.

En esta serie de simulaciones esperamos hasta que en la zona de interés ocurran 1000 colisiones de fotones sumando procesos fotoeléctricos, Compton y Rayleigh. Seguimos a los electrones secundarios mientras estén dentro de la zona de interés hasta llegar a 1 eV.

La estadística se mejora corriendo 100 de estas simulaciones para evaluar promedios y errores. En una simulación típica obtenemos un informe tal como este:

No Primaries: 14716140

No Secondarie: 1000

No col inVoxel 1.2937e+08

Voxel Center: (10 10 0)Voxel Radius: 1

Dist Origin: 14.1421

Voxel Volume: 4.18879 mm3

Voxel Mass: 0.00418879 g

Edepo: 1.81131e+07 eV

Edepo/primary: 1.23083 eV

Dose: 6.92809e-07 J/Kg

Dose/primary: 4.70782e-14 J/Kg

Dose/t: 3.4054e-06 J/Kg/sec

act: 1.955 mCi 7.2335e+07 Bq

Time: 0.203444 sec

No Ints Edep Edep/Tot Process

552943 510766 0.0281988 GmUserSpecialCut

129 0 0 Rayl

231 30193.5 0.00166695 compt

70061 509239 0.0281145 e-\_G4LEPTSAttachment

300881 6.05329e+06 0.334195 e-\_G4LEPTSDissocNeutr

5.54404e+07 7335.72 0.000404996 e-\_G4LEPTSElastic

6.40807e+07 717704 0.0396236 e-\_G4LEPTSExcitRotat

8.20273e+06 2.05068e+06 0.113216 e-\_G4LEPTSExcitVibrat

68007 608985 0.0336213 e-\_G4LEPTSExcitation

653290 7.11144e+06 0.392614 e-\_G4LEPTSIonisation

641 513421 0.0283453 phot

En resumidas cuentas, en el informe anterior vemos que hemos necesitado emitir 14.7 millones de fotones primarios para conseguir que dentro de la zona de interés tengan lugar 1000 interacciones de fotones (129 Rayleigh, 231 Compton y 641 fotoeléctricos). Se depositan dentro 18.11 MeV (1.23 eV por primaria) en total, que corresponden a una dosis de 6.928 Grey. La actividad es de 1.955 mCi (milicurios), así que para emitir esos primarios necesitaremos un tiempo de 0.2 segundos, y la tasa de dosis sería 3.4x10⁻⁶ Grey/seg.

Además de las magnitudes relacionadas con la energía se muestra el número de colisiones de cada tipo que han tenido lugar dentro de la zona de interés.

# Voxel

El voxel juega el papel de zona de interés. Tras algunas pruebas he pensado que lo mejor es darle forma esférica. La relación de volúmenes entre la esfera y el cubo que la contiene es

(4/3) pi r³ / (2r)³ = pi/6 = 0.52

así que ganamos casi un 50% respecto al voxel cúbico.

El espectro de emisión tiene su máximo en 70 keV, así que como máximo tendremos fotoelectrones de esa energía, que tienen un alcance menor de 150 micras. Por lo tanto he rodeado el voxel esférico de una capa de espesor 150 micras y habrá que seguir también a los e- secundarios que se generen

en esta zona.

# Tamaño del voxel

He tanteado varios tamaños de voxel para estimar el esfuerzo computacional y el error cometido en las estimaciones de las magnitudes en las simulaciones. Voy a incluir resultados para voxeles de radio 1 mm, 0.5 mm y 0.1 mm, correspondientes a volúmenes de agua de 4.19 mm³, 0.52 mm³ y 0.00419 mm³ respectivamente, o, en peso, a 4.18 mg 0. 52 mg y 4.19 μg.

Las simulaciones para esferas de 1 mm de radio tardan unos 22 min, y procesan 1.5x10⁷ fotones primarios para conseguir 1000 colisiones dentro de la esferita. El coste de correr 100 es de unas 36 horas de cpu.

Para un radio de 0.5 mm tardan 1h20m y procesan 1.2x10⁸ primarios. El coste se cuadruplica, unas 130 horas de cpu.

Utilizando esferitas de 0.1 mm de radio las he dejado 8 horas y procesan 10⁹ primarios para obtener unas 60 colisiones dentro de la esferita, claramente insuficiente.

En la siguiente tabla de resultados están el número de primarias, colisiones dentro de la esfera, energía depositada en la esfera por primaria y dosis por primaria. La segunda columna es el error relativo:

Sphere 1mm

No Primaries: 14674572 +- 2.95E-02

No Secondaries: 1000

eV/primary: 1.24893248 +- 3.30E-02

J/Kg/primary: 4.77705711E-14 +- 3.30E-02

Sphere 0.5mm

No Primaries: 118520512 +- 2.85E-02

No Secondaries: 1000

eV/primary: 0.153943449 +- 4.06E-02

J/Kg/primary: 4.71056604E-14 +- 4.06E-02

Sphere 0.1mm

No Primaries: 1e9

No Secondaries: 68.0800018 +- 0.126

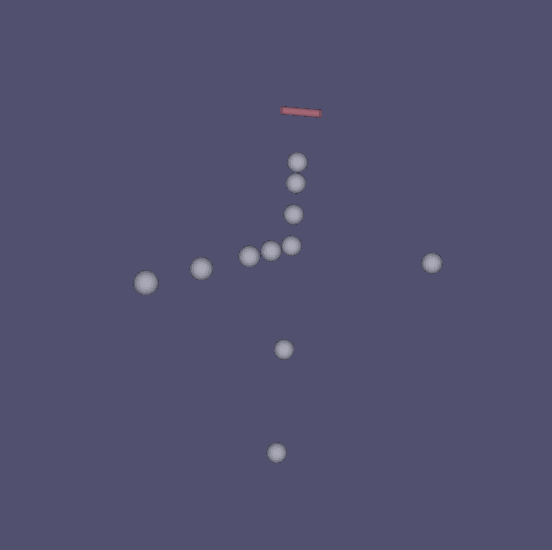
eV/primary: 1.23913703E-03 +- 0.146

J/Kg/primary: 4.73959285E-14 +- 0.146

En realidad la dosis se obtiene bien con cualquier tamaño, pero el error no permite ir más allá de medio milímetro de radio. De hecho es algo mayor en la esfera de 0.5 mm que en la de 1 mm. Este es el error estadístico evaluado por comparación en 100 simulaciones, pero cabe suponer que hay un error sistemático por las dimensiones de la esfera, porque una parte está más cerca de la semilla de yodo que la otra, y debe ser mayor cuanto mayor es la esfera.

# Dosis en puntos de medida

Se han simulado 11 puntos para comparar con medidas. Situando la semilla en el origen de coordenadas y con el eje del cilindro en la dirección del eje x quedarían así:

 “0 0 4.8"

" 0 0 6.8"

" 0 0 9.8"

" 0 0 12.8"

" 0 0 22.8"

" 0 0 32.8"

" 0 5 12.8"

" 0 10 12.8"

" 0 20 12.8"

" 0 30 12.8"

"14 0 12.8”

# Resultados

Para facilitar las comparaciones he ordenado por su distancia a la semilla (origen de coordenadas) y los he numerado:

#Pt X Y Z Dist

P01 0 0 4.8 4.8

P02 0 0 6.8 6.8

P03 0 0 9.8 9.8

P04 0 0 12.8 12.8

P05 0 5 12.8 13.74

P06 0 10 12.8 16.24

P07 14 0 12.8 18.97

P08 0 0 22.8 22.8

P09 0 20 12.8 23.75

P10 0 30 12.8 32.62

P11 0 0 32.8 32.8

P12 0 0 40 40

P13 0 0 50 50

P14 0 0 60 60

Para cada punto se han corrido100 simulaciones esperando a que haya 100 colisiones de fotones de tipo fotoeléctrico dentro del voxel o en su zona de influencia de 2 micras. Juntando todos los ficheros de salida y promediando se obtiene esta tabla:

#pt compt phot Rayl ExcitRotat Ionisation Elastic DissocNeutr ExcitVibrat Excitation Attachment

P01 0.000200532 0.000594698 0.000116026 154.358 0.597169 89.3109 0.288704 2.94581 0.0692926 0.0372965

P02 9.3766e-05 0.000275458 5.19239e-05 71.6181 0.277004 41.4405 0.133943 1.3666 0.0321125 0.0172979

P03 3.90018e-05 0.000114442 2.22818e-05 29.7881 0.115161 17.2369 0.0556419 0.568317 0.0133622 0.00719827

P04 1.98805e-05 5.74914e-05 1.09176e-05 15.0489 0.0582071 8.70763 0.0281513 0.287081 0.00676591 0.00363208

P05 1.62794e-05 4.54224e-05 9.24346e-06 11.8995 0.0460093 6.88529 0.0222213 0.226969 0.00532455 0.00287015

P06 1.03718e-05 2.8455e-05 5.79628e-06 7.5205 0.0290919 4.35152 0.0140502 0.143479 0.00337397 0.00181406

P07 6.71071e-06 1.89997e-05 3.59095e-06 5.02316 0.0194293 2.90641 0.00938075 0.0958497 0.00224814 0.00121331

P08 3.64677e-06 9.86414e-06 2.06358e-06 2.62431 0.010153 1.51847 0.00490186 0.05007 0.00117875 0.000633061

P09 3.30381e-06 8.61041e-06 1.75136e-06 2.31095 0.00893924 1.33719 0.00431257 0.0440743 0.00103835 0.000558774

P10 1.12404e-06 2.7429e-06 5.59552e-07 0.748112 0.00289371 0.432863 0.00139588 0.0142679 0.000335616 0.000180699

P11 1.03731e-06 2.6673e-06 5.7347e-07 0.729343 0.00282144 0.421971 0.00136068 0.0139091 0.000327776 0.000176039

P12 5.02024e-07 1.17022e-06 2.43991e-07 0.325707 0.00126003 0.188463 0.000606531 0.00621303 0.000145892 7.86882e-05

P13 2.04459e-07 4.18631e-07 9.3857e-08 0.120573 0.000466274 0.0697625 0.000224107 0.00229999 5.41284e-05 2.90871e-05

P14 9.18553e-08 1.6768e-07 3.87509e-08 0.0501075 0.000193777 0.0289915 9.30567e-05 0.000955984 2.24612e-05 1.20845e-05

donde cada columna corresponde al número de procesos que han tenido lugar dentro del voxel por partícula primaria emitida desde la fuente.

# Comparación con medidas

A modo de comparación he elaborado la siguiente tabla:

#Pt pC/ug/h cGy/h W(eV/par) pC/ug/h cGy/h W(eV/par)

# medida medida medida simu simu simu

#(1) (2) (3) (4) (5) (6) (7)

P01 10.399 12.02890 11.5674 5.94799 16.5939 27.8983

P02 5.4056 6.25310 11.5678 2.75904 7.6965 27.8956

P03 2.1957 2.54044 11.5701 1.14704 3.19941 27.8928

P04 1.5537 1.79468 11.551 0.579761 1.61708 27.8922

P05 1.3897 0.63231 4.5499 0.458266 1.27786 27.8847

P06 0.99057 0.37972 3.8333 0.289765 0.807686 27.8738

P07 0.58233 1.60764 27.607 0.193522 0.539146 27.8597

P08 0.5434 1.14593 21.0881 0.101127 0.281653 27.8514

P09 0.67227 0.77761 11.5669 0.0890375 0.247911 27.8434

P10 0.23636 0.27342 11.5679 0.0288222 0.0802152 27.831

P11 0.32773 0.67363 20.5544 0.0281025 0.0781987 27.8262

P12 0.0125503 0.0348737 27.7871

P13 0.00464424 0.0128905 27.7559

P14 0.00193008 0.0053497 27.7175

La columna 2 corresponde a la carga por unidad de masa y tiempo expresada en picoculombios por microgramo y hora (valdría microculombios por gramo y hora).

La columna 3 corresponde a la tasa de dosis en centigreys por hora.

La columna 4 es de elaboración propia. La he calculado dividiendo la 3 por la 2 y multiplicando por 10. Según mis cálculos equivale a la energía en eV necesaria para crear una carga (un par), es decir, es el factor W.

Las columnas 4, 5 y 6 corresponden a la carga, dosis y factor W obtenidas en las simulaciones.

El motivo de fabricar la columna 4 a partir de los datos de las medidas es que así me cuadra todo en las simulaciones aunque se magnifica la discrepancia en las medidas entre carga y dosis. Lo mismo he pasado algo por alto.